



HAL
open science

Construction et analyse de conditions aux limites artificielles pour des équations de Schrödinger avec potentiels et non linéarités

Pauline Klein

► **To cite this version:**

Pauline Klein. Construction et analyse de conditions aux limites artificielles pour des équations de Schrödinger avec potentiels et non linéarités. Mathématiques [math]. Université Henri Poincaré - Nancy 1, 2010. Français. NNT : 2010NAN10098 . tel-01746335v2

HAL Id: tel-01746335

<https://theses.hal.science/tel-01746335v2>

Submitted on 29 Jan 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.

Construction et analyse de conditions aux limites
artificielles pour des équations de Schrödinger
avec potentiels et non linéarités

THÈSE

présentée pour l'obtention du grade de

Docteur de l'Université Henri Poincaré, Nancy I

Spécialité : Mathématiques Appliquées

par

Pauline KLEIN

Soutenue publiquement le 3 novembre 2010

après avis des rapporteurs et devant le jury

Xavier ANTOINE	Professeur, Institut National Polytechnique de Lorraine	<i>Directeur de thèse</i>
Christophe BESSE	Professeur, Université Lille I	<i>Directeur de thèse</i>
Eric CANCÈS	Professeur, École des Ponts-ParisTech	<i>Rapporteur</i>
Rémi CARLES	Chargé de recherche CNRS, Université Montpellier II	<i>Rapporteur</i>
Patrick GÉRARD	Professeur, Université Paris-Sud XI	<i>Président du jury</i>
Jérémie SZEFTTEL	Chargé de recherche CNRS, Ecole Normale Supérieure	<i>Examineur</i>
Marius TUCSNAK	Professeur, Université Henri Poincaré Nancy I	<i>Examineur</i>

Remerciements

Je tiens en premier lieu à remercier mes deux directeurs de thèse, Xavier Antoine et Christophe Besse, pour les précieux conseils scientifiques et méthodologiques qu'ils m'ont prodigués, chacun à leur manière, me faisant bénéficier de leurs qualités non seulement de scientifiques mais également d'encadrants. Malgré leurs nombreuses responsabilités, ils ont toujours su se montrer disponibles pour moi, et je leur suis reconnaissante pour leur implication, leur patience et leur exigence envers mon travail. Ils n'ont jamais manqué une occasion de m'initier de manière éclairée au métier d'enseignant-chercheur, me guidant dans mes démarches tout en me permettant d'acquérir progressivement l'autonomie nécessaire. J'ai également pu apprécier leur humour et leur bonne humeur lors des séances de travail à trois, intenses et stimulantes.

Je suis très reconnaissante à Rémi Carles et à Eric Cancès d'avoir accepté la lourde charge de rapporter ma thèse. Tous deux ont effectué un travail remarquable, et leur relecture minutieuse a permis à plusieurs passages de ce manuscrit de gagner en clarté et en rigueur grâce à de nombreuses remarques pertinentes.

Patrick Gérard m'a fait l'honneur d'accepter de présider mon jury de thèse, et je l'en remercie très chaleureusement. Mes remerciements vont également à Jérémie Szeftel et à Marius Tucsaak, qui ont accepté de faire partie de ce jury.

Dans un cadre plus informel, je tiens à remercier Karim Ramdani qui m'a beaucoup aidée de ses conseils et de ses encouragements tout au long de ma thèse, ma tutrice Aurélie Muller-Gueudin pour la confiance qu'elle m'a accordée dans mes enseignements et le plaisir que j'ai eu à travailler avec elle, et Thierry Goudon pour l'encadrement du Master de Lille 1 qui m'a donné l'envie de poursuivre en thèse, ainsi que pour l'idée fructueuse de cette co-direction.

J'ai également une pensée pour tous ceux de mes professeurs qui, aux différentes étapes de ma scolarité, m'ont transmis le goût de mes mathématiques, de leur rigueur, et l'envie d'avancer un peu plus dans cet entonnoir inversé de la connaissance.

Je souhaite remercier ici tous ceux qui ont contribué à faire de mon passage à l'IECN un moment convivial et amical, notamment les doctorants ou post-doctorants Yannick, Bertrand, Christophe, Nicu, María, Erica, Yuning, Jérôme, Julien, Li, Falk, Julie (même si maintenant tu es titulaire) et bien d'autres, avec qui nous avons partagé d'agréables moments à l'IECN ou autour d'un verre à la brasserie Monplaisir. Je pense également à tous ceux qui ont consacré de leur temps à me faire part de leur expérience, à m'écouter et à m'aider à prendre du recul, notamment Anne, Karim, Takéo, Thomas et Bruno, ainsi que Laurence pour sa gentillesse. Un grand merci également à toutes les petites mains dévouées qui m'ont offert une aide efficace lors de la préparation du pot de thèse.

Une mention spéciale va à Julie pour son oreille féminine et compréhensive. Ses encouragements et son point de vue m'ont aidée à reprendre confiance dans mon travail et à mettre de côté mes interrogations sans fin. Autre mention spéciale à Bertrand, mon frère de thèse, avec qui j'ai à peu près tout partagé, des galères de l'inscription en thèse à nos premières conférences. Merci pour ton écoute stoïque et patiente lors de mes nombreux moments de doute, de déprime ou d'euphorie, et pour les multiples services administratifs rendus ces dernières semaines. Bonne chance à toi pour la suite!

Je remercie également l'ensemble des membres du laboratoire Paul Painlevé et de l'INRIA de Lille, qui m'ont toujours bien accueillie lors de mes séjours à Lille. Merci particulièrement à Alexis et Benoît pour leurs précieux conseils, et à Benjamin pour son amitié.

Cette thèse n'aurait peut-être pas pu être menée à bien si elle n'avait trouvé un cadre aussi propice à l'évasion que *le jardin*, si concret et si complémentaire de l'abstraction de l'étude des mathématiques. Tous ceux qui aiment travailler la terre et qui aiment ce jardin-là comprendront la force que j'ai pu puiser dans ces week-ends à Château-Salins. Ce n'est pas une passion, c'est un mode de vie, une méthode de respiration. A tous ceux qui m'ont permis d'en profiter et d'y passer mes vacances, merci.

Durant toutes mes études, et ma thèse en particulier, j'ai bénéficié du soutien sans faille de ma famille, et je les en remercie chaleureusement. Dans les moments de lassitude, j'ai retrouvé ma motivation dans l'exemple de leurs vies courageuses. Je pense à François pour sa curiosité scientifique, à Mam' dont la présence le jour de ma soutenance fut une grande joie, à Thérèse et à Jean-Jacques dont le courage dans l'épreuve m'a fait relativiser les contrariétés du quotidien, ainsi qu'à Line et à Bernard avec qui j'aurais aimé partager ces années. Merci à toute ma famille au sens large, qui n'a pas manqué de suivre l'évolution de mes travaux, et va maintenant enfin entendre parler d'autre chose que de ma thèse. Une pensée particulière pour Annelise (« *Quoi ? - Je t'aime bien !* »), tu as toujours su trouver les mots qu'il fallait. Merci pour ta présence.

Il est des amis si proches qu'ils semblent n'être que le prolongement de la famille. J'ai la chance de pouvoir compter sur l'amitié d'Amandine, de Mathilde et d'Yves-Laurent, qui chacun à leur manière, enrichissent ma vie par leurs qualités et leur personnalité. Leur présence, à tous les trois, en ce jour si spécial, me touche beaucoup.

Enfin, et surtout, j'exprime toute ma gratitude à mes parents pour l'éducation qu'ils m'ont donnée et les valeurs qu'ils m'ont transmises, dont notamment le sens du travail et de l'effort. S'il m'est arrivé, enfant, de les trouver parfois trop stricts, j'ai compris par la suite combien leurs exigences étaient une chance, destinée à me donner toutes les armes pour me construire en tant qu'adulte. Ce sont eux aussi qui, depuis un certain mois d'avril, m'ont supportée, entourée, soutenue, sur le plan moral, logistique, et matériel. Pendant ces années de changements, d'incertitudes et de mobilité, ils m'ont apporté une stabilité salutaire. Pour cela, et pour tout le reste, qu'ils en soient sincèrement remerciés. A plus forte raison en ce jour particulier du 3 novembre, je suis heureuse de leur dédier cette thèse.

Cela est bien dit, répondit Candide, mais il faut cultiver notre jardin.

Table des matières

Introduction	11
I Conditions aux limites artificielles en dimension une	15
1 L'équation de Schrödinger avec potentiel variable	17
1.1 Ce qui est connu	19
1.1.1 Cas sans potentiel	19
1.1.2 Cas d'un potentiel constant en dehors du domaine calcul	20
1.1.3 Cas d'un potentiel ne dépendant que du temps	23
1.1.4 Cas de potentiels particuliers dépendant de la variable d'espace x	24
1.2 Les classes de potentiels admissibles	25
1.3 Introduction au calcul pseudodifférentiel	27
1.3.1 Opérateurs pseudodifférentiels au sens de Fourier	28
1.3.2 Exemples	29
1.3.3 Calcul symbolique	30
1.4 Construction des CLA sur le plan symbolique	32
1.4.1 Deux stratégies	32
1.4.2 Développement asymptotique en symboles homogènes de l'opérateur de DtN	33
1.4.3 Détermination du symbole principal en fonction de la stratégie	34
1.4.4 Calcul de l'asymptotique en fonction du symbole principal	37
1.4.5 L'exemple du potentiel linéaire : comparaison des symboles	40
1.5 Etude du choix ABC_1^M	45
1.5.1 Interprétation des symboles et choix de la condition	45
1.5.2 Retour aux conditions artificielles	48
1.5.3 Un résultat de stabilité pour ABC_1^M	49
1.6 Conditions de type ABC_2^M , lien entre les CLA, exemple	51
1.6.1 L'autre choix : ABC_2^M	51
1.6.2 Le cas $V = V(x)$: relations entre les CLA	52
1.6.3 L'exemple du potentiel linéaire : comparaison des opérateurs	52
1.7 Schémas semi-discrets et propriétés	53
1.7.1 Discrétisation de l'équation intérieure et formulation variationnelle	53
1.7.2 Discrétisation des opérateurs de convolution	55
1.7.3 Discrétisation des CLA basée sur les convolutions discrètes	61

1.7.4	Discrétisation des CLA basée sur les fonctions auxiliaires	67
1.8	Résultats numériques	75
1.8.1	Formulation variationnelle	75
1.8.2	Solutions de référence	76
1.8.3	Influence de différents paramètres	78
1.8.4	Etude de potentiels au cas par cas	94
1.9	Conclusion	103
2	L'équation de Schrödinger avec potentiel et non linéarité	105
2.1	Adaptation des CLA pour une non linéarité	107
2.2	Etude du problème aux limites dans le cas $NLABC_1^2$	108
2.3	Semi-discrétisation des conditions aux limites	110
2.3.1	Discrétisation des conditions $NLABC_1^M$ basée sur les convolutions discrètes	111
2.3.2	Etude de la stabilité du système discrétisé	113
2.3.3	Discrétisation des conditions $NLABC_2^M$ basée sur une approximation rationnelle de la racine carrée : $NLABC_{2,m}^M$	114
2.4	Implémentation des CLA dans un environnement éléments finis	115
2.5	Simulations numériques	119
2.5.1	Le potentiel cubique	119
2.5.2	D'autres potentiels non linéaires	127
2.6	Conclusion	138
3	Applications à l'équation de Schrödinger stationnaire : scattering et calcul d'états stationnaires	139
3.1	Introduction	139
3.2	Conditions aux Limites Artificielles : du temporel au stationnaire	140
3.3	Application au problème de scattering linéaire	141
3.3.1	Formulation du problème et approximation par éléments finis	141
3.3.2	Résultats numériques	142
3.4	Application au calcul d'états stationnaires : le cas linéaire	154
3.4.1	CLA : conditions de type racine carrée	154
3.4.2	CLA : linéarisation de la racine carrée par un développement de Taylor	156
3.4.3	Exemples numériques	157
3.5	Application au calcul d'états stationnaires : le cas non linéaire	173
3.5.1	Problème et schéma numérique	173
3.5.2	Résultats numériques	176
3.6	Conclusion	179
II	Conditions aux limites artificielles en dimension deux	181
4	L'équation de Schrödinger en dimension deux avec potentiel variable	183
4.1	Ce que l'on sait faire ou ce qui reste vrai par rapport au cas unidimensionnel	184
4.1.1	Cas du demi-espace et d'un potentiel identiquement nul	184

4.1.2	Cas d'un potentiel ne dépendant que du temps	185
4.2	Les spécificités de la dimension deux	185
4.2.1	Choix de la frontière et paramétrisation locale	185
4.2.2	Discussion sur l'équivalence des stratégies	187
4.2.3	Calcul pseudodifférentiel utile en dimension deux	188
4.3	Les deux stratégies	190
4.3.1	Stratégie une ou méthode par changement de jauge	190
4.3.2	Stratégie deux ou méthode directe	190
4.3.3	Unification des stratégies	191
4.3.4	Obtention du système symbolique	191
4.3.5	Ajout de termes dans le symbole principal	194
4.4	La stratégie une : changement de jauge	195
4.4.1	Choix du symbole principal	195
4.4.2	Calcul des symboles	196
4.4.3	Interprétation des CLA et approche par développement de Taylor	198
4.4.4	Interprétation des CLA et approche par approximants de Padé	201
4.5	La stratégie deux : méthode directe	202
4.5.1	Calcul des symboles	202
4.5.2	Interprétation des CLA et approche par développement de Taylor	204
4.5.3	Interprétation des CLA et approche par approximants de Padé	205
4.6	Les conditions aux limites sans potentiel	208
4.7	Obtention d'estimations <i>a priori</i>	209
4.7.1	Principe	209
4.7.2	Estimations <i>a priori</i> pour les conditions $ABC_{2,T}^M$	211
4.7.3	Estimations <i>a priori</i> pour les conditions $ABC_{1,T}^M$	215
4.8	Semi-discrétisation des conditions aux limites	216
4.8.1	Schéma intérieur et formulation variationnelle	217
4.8.2	Discrétisation des conditions $ABC_{1,T}^M$ et $ABC_{2,T}^M$	217
4.8.3	Résultats de stabilité pour les conditions discrétisées $ABC_{1,T}^M$ et $ABC_{2,T}^M$	220
4.8.4	Discrétisation des conditions $ABC_{1,P}^M$ et $ABC_{2,P}^M$	228
4.9	Implémentation des CLA discrétisées dans un environnement éléments finis 2D	231
4.9.1	Implémentation des conditions $ABC_{2,T}^M$	232
4.9.2	Implémentation des conditions $ABC_{1,T}^M$	234
4.9.3	Implémentation des conditions $ABC_{1,P}^M$ et $ABC_{2,P}^M$	238
4.9.4	Calcul de la courbure	246
4.10	Résultats numériques	248
4.10.1	Etude préalable	248
4.10.2	Etude de potentiel radiaux	257
4.10.3	Etude de potentiels non radiaux	271
4.10.4	Calcul sur un domaine non circulaire : le médiateur	276
4.10.5	Un potentiel dépendant du temps : $V(r, t) = 5r^2(1 + \cos(4\pi t))$	278
4.11	Conclusion	282

5	L'équation de Schrödinger en dimension deux avec potentiel et non linéarité	285
5.1	Adaptation des CLA pour une non linéarité	286
5.1.1	Conditions aux limites de l'approche Taylor	286
5.1.2	Conditions aux limites de l'approche Padé	286
5.2	Etude du problème aux limites dans les cas $\text{NLABC}_{1,T}^2$ et $\text{NLABC}_{2,T}^M$	287
5.3	Semi-discrétisation des conditions aux limites et implémentation du point fixe	290
5.3.1	Formulation variationnelle et algorithme de point fixe	290
5.3.2	Traitement numérique des conditions aux limites $\text{NLABC}_{1,T}^M$ et $\text{NLABC}_{2,T}^M$	291
5.3.3	Stabilité du problème semi-discret pour $\text{NLABC}_{1,T}^2$ et $\text{NLABC}_{2,T}^M$	294
5.3.4	Traitement numérique de la condition aux limites $\text{NLABC}_{2,P}^2$	295
5.4	Semi-discrétisation et implémentation de la méthode de relaxation	297
5.4.1	Principe de la méthode de relaxation	297
5.4.2	Application de la méthode de relaxation à la condition $\text{NLABC}_{2,P}^2$	298
5.4.3	Application de la méthode de relaxation à la condition $\text{NLABC}_{2,T}^3$	300
5.4.4	Application de la méthode de relaxation à la condition $\text{NLABC}_{1,T}^2$	301
5.5	Résultats numériques	302
5.5.1	Construction numérique du soliton	302
5.5.2	Choix de la méthode de résolution	304
5.5.3	Le potentiel cubique $\mathcal{V} = q u ^2$ avec donnée initiale solitonique	305
5.5.4	Le cas d'une donnée initiale gaussienne	309
5.5.5	Des potentiels mixtes $\mathcal{V} = V(r) + f(u)$	312
5.6	Conclusion	315
	Conclusion générale	317

Introduction

L'objectif de cette thèse est de résoudre numériquement l'équation de Schrödinger, en présence d'un potentiel \mathcal{V} linéaire ou non linéaire, grâce à l'utilisation de conditions aux limites artificielles (CLA). En dimension d , ce problème s'écrit

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \mathcal{V}u = 0, & (\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^+, \\ u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \end{cases} \quad (1)$$

où la donnée initiale u_0 est supposée à support compact. Le potentiel \mathcal{V} est soit une fonction $V(\mathbf{x}, t)$ de l'espace et du temps, soit une non linéarité $f(u)$ dépendant de la solution, soit une combinaison des deux. L'équation de Schrödinger est une équation fondamentale de la mécanique quantique, et intervient également dans de nombreux autres domaines physiques et technologiques [83], comme les semi-conducteurs quantiques [34], la propagation d'ondes électromagnétiques [65] ou encore dans les problèmes de migrations sismiques [43]. L'équation de Schrödinger est également l'approximation paraxiale d'ordre le plus bas de l'équation de Helmholtz, et est appelée équation de Fresnel en optique [81], ou équation parabolique standard en acoustique sous-marine [88].

La solution de (1) est définie sur le domaine non borné $\{(\mathbf{x}, t) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}\}$. Pour résoudre numériquement ce genre de problème posé dans l'espace entier, il faut se restreindre à un domaine borné en espace, de la forme $\Omega \times \mathbb{R}^+$, où Ω est borné. La difficulté de la résolution numérique de l'équation de Schrödinger vient alors de l'apparition d'effets de bord non physiques à la traversée de la frontière fictive $\Sigma = \partial\Omega$ de Ω . Une manière de traiter l'introduction de cette frontière fictive est l'utilisation de conditions aux limites artificielles (CLA) sur la frontière Σ . Les conditions aux limites artificielles ont été initialement introduites proprement dans les années 70 par Engquist et Majda pour l'équation des ondes [52, 53]. Depuis, elles ont été généralisées à d'autres équations, comme l'équation de Helmholtz [4], les équations de Maxwell [3] ou l'équation de Schrödinger [6, 8], pour certaines situations. D'autres possibilités existent pour résoudre numériquement de tels problèmes posés en domaine non bornés. Parmi elles, les méthodes de couches parfaitement adaptées (ou *Perfectly Matched Layer*, dites PML) consistent à introduire une zone de décroissance exponentielle artificielle de l'onde bordant le domaine. Les PML ont été introduites par Bérenger en 1994 [28] et sont actuellement très utilisées pour les équations linéaires à coefficients constants du fait de la simplicité de leur implémentation [80, 61]. Leur inconvénient principal est l'augmentation de la taille du domaine de calcul, qui devient récurrent lorsque la dimension augmente. D'autres difficultés sont liées à l'effet de la discrétisation qui vient pénaliser le caractère « parfaitement absorbant » de ces couches, et éventuellement générer des instabilités numériques. Par ailleurs, il n'y a aucune direction actuellement sur la façon d'étendre ces méthodes proprement à des cas d'équations à coefficients variables ou avec des termes non linéaires comme l'équation (1) considérée dans cette thèse. Une autre voie consiste à utiliser des méthodes

d'éléments infinis [50] mais nécessite encore une fois l'homogénéité du domaine extérieur, ce qui n'est pas le cas dans notre situation.

L'approche que nous proposons, dans la lignée fondamentalement des travaux d'Engquist et Majda [52, 53], est basée sur la construction de conditions aux limites artificielles, et vise à prendre en compte les effets du potentiel décrit par la fonction \mathcal{V} . Pour résoudre l'équation (1), nous cherchons de manière générale à obtenir des conditions aux limites sous la forme d'une condition de type Dirichlet-to-Neumann sur le bord Σ

$$\partial_{\mathbf{n}}u + \Lambda^+u = 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Sigma \times [0; T]. \quad (2)$$

L'opérateur Λ^+ est déterminé sur le plan symbolique en utilisant le calcul pseudodifférentiel au sens de Fourier [62, 89]. Plus précisément, l'opérateur Λ^+ est associé à un symbole λ^+ dans l'espace de Fourier, et ce symbole est développable en une asymptotique de symboles d'ordres décroissants

$$\lambda^+ \sim \sum_{j \geq 0} \lambda_{1-j}^+ = \lambda_1^+ + \lambda_0^+ + \lambda_{-1}^+ + \lambda_{-2}^+ + \dots,$$

dont le premier terme λ_1^+ est appelé symbole principal. Ces symboles, et particulièrement le symbole principal, décrivent l'opérateur Λ^+ , à un opérateur régularisant près. De plus, une approximation de Λ^+ est obtenue en tronquant le développement asymptotique de son symbole λ^+ .

A potentiel nul, l'équation en dimension une admet une condition aux limites exacte

$$\partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} u = 0, \quad (\mathbf{x}, t) \in \Sigma \times [0; T], \quad (3)$$

où l'opérateur $\partial_t^{1/2}$ de dérivation d'ordre 1/2 est défini par l'équation (1.7). En présence d'un potentiel non nul, cette condition aux limites reste une condition approchée qu'il est possible d'utiliser, mais qui s'avère peu précise. Le travail présenté dans cette thèse permet d'inclure le potentiel dans l'opérateur Λ^+ , afin d'obtenir des conditions aux limites artificielles adaptées et précises, ainsi que les schémas associés. En toute généralité, il n'est pas possible de déterminer des conditions aux limites qui soient exactes pour toutes les formes de potentiels. Certains auteurs [54, 95] se sont intéressés à obtenir des conditions aux limites exactes en se restreignant à certains types très précis de potentiels. Ceci débouche, pour un petit nombre de potentiels particuliers, sur des conditions aux limites transparentes mais qui ne se prêtent pas toujours à une exploitation numérique ni physique où les potentiels sont souvent fixés relativement arbitrairement par l'utilisateur (physicien par exemple) et contiennent des termes d'incertitude. Notre méthode se voulant générale et effective, ce n'est pas le point de vue qui nous intéresse. Notre objectif est plutôt de rechercher des conditions approchées, mais numériquement efficaces et précises, valables pour toute une classe de potentiels sans connaître leur forme *a priori*. Notre approche s'appuiera sur le calcul pseudodifférentiel. Notons que, dans le cas non linéaire, une approche avec le même objectif consiste à utiliser le calcul paradifférentiel de Bony [31]. Cela a notamment été introduit dans le cas de l'équation de Burger par Dubach [49]. Un approfondissement de la méthode est dû, en particulier dans le cas de l'équation de Schrödinger, à Szeftel [87, 86, 85]. Une comparaison, dans des cas relativement simples des approches pseudo et paradifférentielle est en outre développée dans [16]. En particulier, le cas de non linéarités cubiques, important en pratique, ne peut pas être traité par l'approche paradifférentielle.

On développe d'abord différentes méthodes permettant de prendre en compte un potentiel $V(\mathbf{x}, t)$ dans l'opérateur Λ^+ , et on compare les stratégies obtenues, qui peuvent présenter des liens entre

elles. Les conditions artificielles obtenues sont ensuite adaptées au cas d'un potentiel non linéaire d'une part, et à la résolution de l'équation stationnaire d'autre part. L'étude est effectuée pour les dimensions une et deux, et chaque situation se conclut par une étude numérique sur des exemples variés de potentiels issus de la physique.

La structure du document est la suivante :

Le **chapitre 1** traite du cas d'un potentiel $V(x, t)$ en dimension une. Dans ce cadre, la condition aux limites de référence est la condition sans potentiel, exacte pour $V = 0$,

$$\partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4}\partial_t^{1/2}u = 0, \quad \text{sur } \Sigma \times [0; T]. \quad (4)$$

Dans ce chapitre, on cherche à améliorer cette condition pour prendre en compte le potentiel. Deux améliorations sont envisagées : l'une, étudiée dans [11] pour l'étude du potentiel non linéaire cubique, basée sur le changement de jauge, en définissant une nouvelle inconnue par déphasage

$$v = e^{-i \int_0^t V(x, \sigma) d\sigma} u,$$

l'autre, qualifiée de directe, consistant à inclure le potentiel au sein du symbole principal de l'opérateur de Dirichlet-to-Neumann approché $\widetilde{\Lambda}^+$. Ceci conduit à deux familles de conditions aux limites artificielles. Pour la famille de CLA issue du changement de jauge, on prouve des estimations *a priori* démontrant l'unicité de la solution du problème continu avec condition aux limites. Chaque famille de CLA est ensuite discrétisée avec des outils adaptés : convolutions discrètes pour la méthode de changement de jauge, approximants de Padé de la racine carrée et introduction de fonctions auxiliaires pour la méthode directe. On démontre que le système semi-discret associé aux CLA issues du changement de jauge est inconditionnellement stable. Les conditions aux limites des différents ordres et des différentes stratégies sont testées numériquement sur des exemples de potentiels $V(x)$ et $V(x, t)$.

Le **chapitre 2** traite de la transcription des CLA au cas d'un potentiel non linéaire. Avec quelques aménagements, les estimations *a priori* et les résultats de stabilité démontrés dans le premier chapitre pour le changement de jauge restent valables. Les exemples traitent du potentiel cubique $f(u) = q|u|^2$ appliqué à une donnée initiale solitonique, ainsi que d'autres non linéarités et de potentiels mixtes de la forme $\mathcal{V} = V(x) + f(u)$.

Le **chapitre 3** s'intéresse à l'équation de Schrödinger stationnaire en dimension une

$$-\alpha\Delta\varphi + \mathcal{V}\varphi = E\varphi, \quad x \in \mathbb{R}, \quad (5)$$

pour laquelle on distingue deux types de problèmes : les problèmes de scattering, où l'énergie E est donnée et où on cherche à calculer φ , et les problèmes de calcul d'états stationnaires, où on cherche simultanément la valeur propre E et le vecteur propre φ . Le potentiel \mathcal{V} peut être linéaire ou non linéaire. Dans le cas unidimensionnel, de nombreuses simulations numériques permettent de valider la précision des résultats obtenus pour des potentiels linéaires de différentes formes, aussi bien que pour des potentiels non linéaires. L'usage des CLA permet de diminuer notablement le domaine de calcul par rapport à l'emploi d'une condition aux limites de Dirichlet homogène et/ou d'augmenter la précision des solutions calculées.

Les chapitres 4 et 5 étudient le passage en dimension deux. Dans le **chapitre 4**, on considère le cas d'un potentiel $V(x, y, t)$ sur un domaine convexe de frontière régulière. On peut reproduire

l'approche symbolique menée dans le cas unidimensionnel en tenant compte de la géométrie de la frontière. Les deux stratégies conduisent cette fois à prendre pour symbole principal

$$\lambda_1^+ = -\sqrt{-\tau - \xi^2} \quad (6)$$

pour le changement de jauge, ou

$$\lambda_1^+ = -\sqrt{-\tau - \xi^2 + V} \quad (7)$$

pour la méthode directe. Pour chacune des deux stratégies, deux approches se présentent. La première consiste à effectuer un développement asymptotique du symbole pour $\tau \gg |\xi|$, de manière à obtenir une asymptotique en puissances fractionnaires de τ , tandis que dans la seconde, le symbole est gardé intact et l'opérateur associé est approché formellement en utilisant des approximants de Padé. Ces deux sous-stratégies conduisent donc à quatre familles de conditions aux limites ayant des propriétés différentes. Comme en 1D, des estimations *a priori* et des résultats de stabilité sont prouvés pour les CLA issues du changement de jauge. Les CLA sont testées numériquement sur différentes formes de potentiels, sur un domaine circulaire ainsi que sur un domaine convexe régulier de forme quelconque, le médiateur. Selon les particularités du potentiel et du domaine de calcul, l'une ou l'autre famille de CLA sera la plus adaptée pour combiner précision et temps de calcul optimal.

Enfin, le **chapitre 5** traite de la généralisation à un potentiel non linéaire en dimension deux, pour une partie des conditions aux limites déterminées dans le chapitre précédent.

Première partie

Conditions aux limites artificielles
en dimension une

Chapitre 1

L'équation de Schrödinger avec potentiel variable

Ce chapitre est une version approfondie de l'article [13] paru dans *Journal of Computational Physics*.

Sommaire

1.1	Ce qui est connu	19
1.1.1	Cas sans potentiel	19
1.1.2	Cas d'un potentiel constant en dehors du domaine calcul	20
1.1.3	Cas d'un potentiel ne dépendant que du temps	23
1.1.4	Cas de potentiels particuliers dépendant de la variable d'espace x	24
1.2	Les classes de potentiels admissibles	25
1.3	Introduction au calcul pseudodifférentiel	27
1.3.1	Opérateurs pseudodifférentiels au sens de Fourier	28
1.3.2	Exemples	29
1.3.3	Calcul symbolique	30
1.4	Construction des CLA sur le plan symbolique	32
1.4.1	Deux stratégies	32
1.4.2	Développement asymptotique en symboles homogènes de l'opérateur de DtN	33
1.4.3	Détermination du symbole principal en fonction de la stratégie	34
1.4.4	Calcul de l'asymptotique en fonction du symbole principal	37
1.4.5	L'exemple du potentiel linéaire : comparaison des symboles	40
1.5	Etude du choix ABC_1^M	45
1.5.1	Interprétation des symboles et choix de la condition	45
1.5.2	Retour aux conditions artificielles	48
1.5.3	Un résultat de stabilité pour ABC_1^M	49
1.6	Conditions de type ABC_2^M, lien entre les CLA, exemple	51
1.6.1	L'autre choix : ABC_2^M	51
1.6.2	Le cas $V = V(x)$: relations entre les CLA	52
1.6.3	L'exemple du potentiel linéaire : comparaison des opérateurs	52
1.7	Schémas semi-discrets et propriétés	53
1.7.1	Discrétisation de l'équation intérieure et formulation variationnelle	53
1.7.2	Discrétisation des opérateurs de convolution	55
1.7.3	Discrétisation des CLA basée sur les convolutions discrètes	61
1.7.4	Discrétisation des CLA basée sur les fonctions auxiliaires	67
1.8	Résultats numériques	75

1.8.1	Formulation variationnelle	75
1.8.2	Solutions de référence	76
1.8.3	Influence de différents paramètres	78
1.8.4	Etude de potentiels au cas par cas	94
1.9	Conclusion	103

Nous nous intéressons, dans ce premier chapitre, à la construction et l'approximation de conditions aux limites dites *artificielles*, sur une frontière fictive $\Sigma = \{x_\ell, x_r\}$, pour une équation de Schrödinger de la forme

$$\begin{cases} i\partial_t u + \partial_x^2 u + V u = 0, & (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+, \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (1.1)$$

où u_0 est une donnée initiale à support compact dans le domaine de calcul $\Omega :=]x_\ell, x_r[$ et V un potentiel dépendant de l'espace et du temps. Ici, \mathbb{R}^+ désigne l'intervalle positif strict $\mathbb{R}^+ :=]0, +\infty[$. Plusieurs propriétés sont connues sur ce système posé en domaine infini comme, par exemple, le résultat suivant d'existence, unicité de la solution, et de conservation de sa masse [38].

Théorème 1.1. *Soit $u_0 \in L^2(\mathbb{R})$ une condition initiale et $V \in C(\mathbb{R}^+, L_{loc}^\infty(\mathbb{R}))$ un potentiel. Alors, le système (1.1) admet une unique solution $u \in C(\mathbb{R}^+, L^2(\mathbb{R}))$. De plus, la masse est préservée au cours du temps, c'est-à-dire :*

$$\forall t > 0, \quad \|u(t)\|_{L^2(\mathbb{R})}^2 = \int_{\mathbb{R}} |u(x, t)|^2 dx = \|u_0\|_{L^2(\mathbb{R})}^2, \quad (1.2)$$

où $\|\cdot\|_{L^2(\mathbb{R})}$ désigne la norme $L^2(\mathbb{R})$ en espace.

On souhaite calculer ici une solution du problème (1.1) sur le domaine spatial Ω et ceci jusqu'à un temps final $T > 0$. Par conséquent, on souhaite résoudre le problème en domaine borné

$$\begin{cases} i\partial_t u + \partial_x^2 u + V u = 0, & (x, t) \in \Omega_T, \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \Omega, \end{cases} \quad (1.3)$$

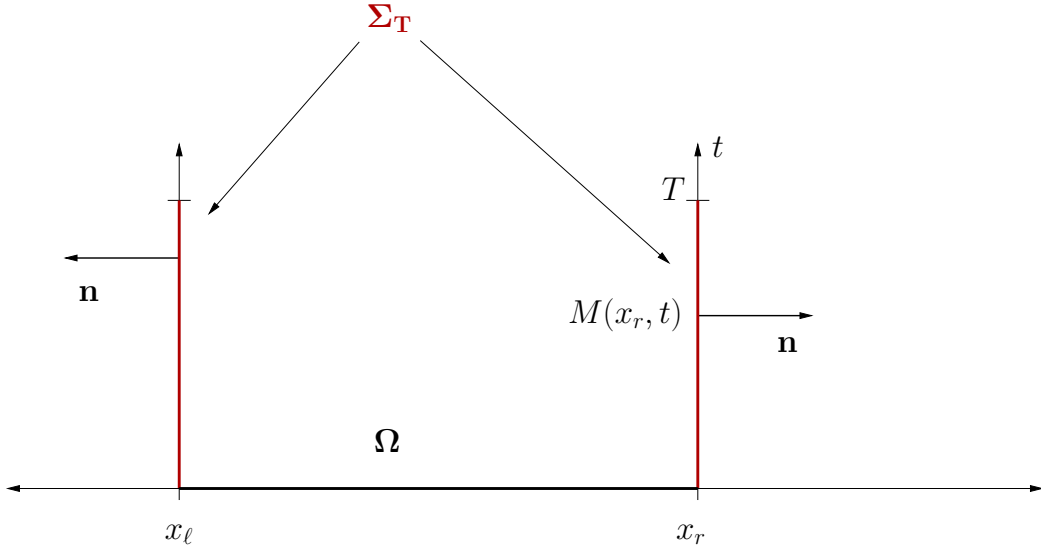
avec $\Omega_T := \Omega \times]0; T[$. Comme nous l'avons souligné dans l'introduction, afin d'obtenir un système complet, une condition aux limites additionnelle doit être ajoutée sur le bord $\Sigma_T := \Sigma \times]0; T[$, où $\Sigma = \partial\Omega = \{x_\ell, x_r\}$. Cette condition, qui s'écrit sous la forme d'une condition aux limites exacte ou approchée, conduit par conséquent à la résolution d'un problème aux limites associé exact ou approché. Afin de ne pas alourdir les notations dans le document, nous notons u la solution exacte ou approchée de (1.3) avec condition aux limites associée s'il n'y a pas d'ambiguïté. Dans le cas contraire, la notation est précisée au moment opportun. Comme nous le verrons par la suite, cette condition aux limites s'écrit comme un opérateur Dirichlet-to-Neumann (DtN)

$$\partial_{\mathbf{n}} u = \text{DtN}(u), \text{ sur } \Sigma_T, \quad (1.4)$$

ou une approximation de celui-ci ($\widetilde{\text{DtN}}$)

$$\partial_{\mathbf{n}} u = \widetilde{\text{DtN}}(u), \text{ sur } \Sigma_T, \quad (1.5)$$

\mathbf{n} désignant le vecteur unitaire sortant au domaine de calcul Ω (voir figure 1.1). Le système résultant est alors donné par (1.3)–(1.4) ou (1.3)–(1.5) selon le type de condition. Une condition aux limites

FIGURE 1.1 – Le domaine de calcul en espace Ω et la frontière artificielle $\Sigma_T = \Sigma \times]0; T[$.

exacte comme celle suggérée par (1.4) est appelée Condition aux Limites Transparente (CLT). Dans le cas où celle-ci est approchée comme dans (1.5), nous parlons de Condition aux Limites Artificielle (CLA).

Toute la difficulté réside maintenant dans la construction effective de cette condition aux limites et dans son approximation numérique. Le but de ce premier chapitre est de proposer des directions possibles pour construire, dans le cas d'un potentiel variable V , plusieurs familles de conditions aux limites artificielles en utilisant le calcul pseudodifférentiel (sections 1.1–1.4). Ensuite, nous proposons pour chacune de ces conditions des schémas d'approximation, si possible inconditionnellement stables (section 1.7). Enfin, nous clôturons ce premier chapitre par des simulations numériques qui permettent de valider notre approche (section 1.8).

1.1 Ce qui est connu

Avant de commencer à développer le cas d'un potentiel général V , nous passons en revue ici ce qui est déjà connu de façon à positionner l'originalité de notre contribution dans un environnement global.

1.1.1 Cas sans potentiel

Un premier cas, étudié depuis deux décennies [2], est celui où le potentiel est identiquement nul sur \mathbb{R} : $V = 0$. Cette situation a été traitée par plusieurs auteurs pour divers types d'applications (cf. par exemple [10, 65, 78, 91]). Plutôt que de détailler l'obtention de cette condition, nous renvoyons à la section 1.1.2 en prenant $V = 0$. Un des aspects importants de cette situation est que l'on est capable d'explicitier la condition aux limites exacte, soit la CLT. Notamment, elle s'exprime à partir d'un opérateur DtN $-i\Lambda^+$ lié à l'opérateur de dérivation fractionnaire $\partial_t^{1/2}$ d'ordre 1/2 par la relation

$$\partial_{\mathbf{n}}u + i\Lambda^+u = \partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4}\partial_t^{1/2}u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T, \quad (1.6)$$

où \mathbf{n} est la normale unitaire sortante à Σ . L'opérateur $\partial_t^{1/2}$ est l'opérateur de dérivation d'ordre 1/2 que l'on définit par l'intégrale de Liouville

$$\partial_t^{1/2}\psi(t) := \partial_t \int_0^t \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\psi(\varrho)}{\sqrt{t-\varrho}} d\varrho \quad (1.7)$$

pour une fonction ψ donnée. Son caractère non local lié à sa structure de convolution a conduit à plusieurs développements au sujet de son évaluation précise et efficace dans le cadre des CLT [2]. Nous y reviendrons par la suite dans la section numérique 1.7. Enfin, le problème tronqué équivalent au problème initial (1.1) s'écrit

$$\begin{cases} i\partial_t u + \partial_x^2 u = 0, & \text{dans } \Omega_T, \\ u(x, 0) = u_0(x), & \text{dans } \Omega, \\ \partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} u = 0, & \text{sur } \Sigma_T. \end{cases} \quad (1.8)$$

Il est possible, par inversion de l'opérateur DtN, d'obtenir une version Neumann-to-Dirichlet (NtD), dite condition d'impédance, équivalente d'un point de vue continu et donnée par

$$u + e^{i\pi/4} I_t^{1/2} \partial_{\mathbf{n}} u = 0, \text{ sur } \Sigma_T. \quad (1.9)$$

L'opérateur fractionnaire d'ordre 1/2 est défini par l'expression

$$I_t^{1/2}\psi(t) := \int_0^t \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\psi(\varrho)}{\sqrt{t-\varrho}} d\varrho. \quad (1.10)$$

Cet opérateur, également de convolution, peut être discrétisé de façon inconditionnellement stable pour un schéma de Crank-Nicolson par exemple. Toutefois, la CLT NtD associée s'avère être moins précise numériquement que sa version discrète DtN (cf. [10]). Pour cette raison, nous nous attachons par la suite à développer essentiellement des versions DtN de CLT ou CLA, même si des versions NtD continues et discrètes pourraient aussi être construites.

1.1.2 Cas d'un potentiel constant en dehors du domaine calcul

Une seconde situation où l'on est capable d'écrire également la condition exacte est la suivante. Afin de mieux cerner les difficultés techniques inhérentes à la construction, nous détaillons ici l'ensemble des calculs, relativement classiques, qui permettent d'arriver à l'opérateur DtN final par la transformée de Laplace dans le cas d'un potentiel constant à l'extérieur du domaine de calcul Ω_T , soit

$$V(x, t) = V_{\ell, r}, \text{ pour } (x, t) \in \Omega_{\ell, r} \times \mathbb{R}^+. \quad (1.11)$$

Nous avons noté Ω_ℓ (respectivement Ω_r) le domaine gauche infini $]-\infty, x_\ell[$ (respectivement droit infini $]x_r, +\infty[$). La construction s'effectue ensuite par une décomposition de domaine avec condition de transmission. Plus précisément, le problème est découpé en un problème intérieur de Neumann

$$\begin{cases} i\partial_t v + \partial_x^2 v + V(x, t)v = 0, & (x, t) \in \Omega \times \mathbb{R}^+, \\ \partial_{\mathbf{n}} v(x, t) = \partial_{\mathbf{n}} w(x, t), & (x, t) \in \Sigma \times \mathbb{R}^+, \\ v(x, 0) = u_0(x), & x \in \Omega, \end{cases} \quad (1.12)$$

et deux problèmes extérieurs de Dirichlet

$$\begin{cases} i\partial_t w + \partial_x^2 w + V_{\ell, r} w = 0, & (x, t) \in (\Omega_\ell \cup \Omega_r) \times \mathbb{R}^+, \\ w(x, t) = v(x, t), & (x, t) \in \Sigma \times \mathbb{R}^+, \\ \lim_{|x| \rightarrow +\infty} w(x, t) = 0, & t > 0, \\ w(x, 0) = 0, & x \in \Omega_\ell \cup \Omega_r. \end{cases} \quad (1.13)$$

où l'on note la continuité des traces et des traces normales. Considérons dorénavant le domaine droit, le cas du domaine gauche n'étant qu'une adaptation de cette situation. L'outil utilisé est la transformée de Laplace en temps

$$\tilde{w}(s) = \mathcal{L}(w)(s) = \int_{\mathbb{R}^+} w(t)e^{-ts} dt, \quad \operatorname{Re}(s) > 0,$$

que l'on applique à la solution w du problème extérieur droit, c'est-à-dire sur $\Omega_r =]x_r; +\infty[$. Dans ce domaine, nous avons $w(x, 0) = u_0(x) = 0$ puisque u_0 est à support compact dans Ω . On a, par conséquent,

$$\mathcal{L}(\partial_t w)(x, s) = s\mathcal{L}(w)(x, s) - w(x, 0) = s\mathcal{L}(w)(x, s).$$

Sur l'équation de Schrödinger, ceci se traduit par

$$is\mathcal{L}(w)(x, s) + \partial_x^2 \mathcal{L}(w)(x, s) + V_r \mathcal{L}(w)(x, s) = 0.$$

Ainsi, $\mathcal{L}(w)$ vérifie l'équation différentielle du second ordre selon x

$$\partial_x^2 \mathcal{L}(w)(x, s) + (is + V_r)\mathcal{L}(w)(x, s) = 0, \quad (1.14)$$

dont les solutions sont données par

$$\mathcal{L}(w)(x, s) = A^+(s) e^{\sqrt{-is - V_r}x} + A^-(s) e^{-\sqrt{-is - V_r}x}.$$

La notation \sqrt{z} désigne la détermination principale de la racine carrée d'un nombre complexe $z \in \mathbb{C}$, avec coupure de branche le long de l'axe négatif des abscisses. Puisque s est à partie réelle positive, il s'ensuit que $\sqrt{-is - V_r}$ se trouve dans le quatrième quadrant (inférieur droit). Par ailleurs, la solution u doit être de carré intégrable sur Ω_r , et donc, v et w également. Ceci implique que $A^+(s) = 0$. En particulier en $x = x_r$, nous avons

$$\mathcal{L}(w)(x_r, s) = A^-(s) e^{-\sqrt{-is - V_r}x_r}.$$

De plus, $\mathcal{L}(w)(x_r, s) = \mathcal{L}(v)(x_r, s)$ puisque v et w sont égales en (x_r, t) pour tout $t > 0$. Finalement, nous obtenons la valeur de $A^-(s)$

$$A^-(s) = \mathcal{L}(v)(x_r, s) e^{\sqrt{-is - V_r}x_r}.$$

Ainsi, nous avons

$$\mathcal{L}(w)(x, s) = e^{-\sqrt{-is - V_r}(x - x_r)} \mathcal{L}(v)(x_r, s).$$

Afin d'écrire l'opérateur DtN, nous dérivons cette dernière expression par rapport à x puis l'évaluons en $x = x_r$ pour obtenir

$$\partial_x \mathcal{L}(w)(x_r, s) = -\sqrt{-is - V_r} \mathcal{L}(v)(x_r, s), \quad (1.15)$$

en se rappelant que $v(x_r, t) = w(x_r, t)$.

Introduisons maintenant le noyau de Green g défini par

$$g(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi t}}. \quad (1.16)$$

Calculons la dérivée temporelle de la convolution $(g \star w)(x_r, t)$. Nous avons alors

$$\partial_t(g \star w)(x_r, t) = \partial_t \int_0^t \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{w(x_r, \varrho)}{\sqrt{t-\varrho}} d\varrho := \partial_t^{1/2} w(x_r, t). \quad (1.17)$$

Une transformée de Laplace de cette dernière quantité donne

$$\mathcal{L}(\partial_t^{1/2} w)(x_r, s) = \frac{s}{\sqrt{\pi}} G(s) \mathcal{L}(w)(x_r, s), \quad (1.18)$$

avec

$$G(s) = \mathcal{L}(t^{-1/2})(s) = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{s}}. \quad (1.19)$$

Ainsi, nous avons

$$\mathcal{L}(\partial_t^{1/2} w)(x_r, s) = \sqrt{s} \mathcal{L}(w)(x_r, s) = e^{i\pi/4} \sqrt{-is} \mathcal{L}(w)(x_r, s). \quad (1.20)$$

De plus, la formule de translation pour les transformées de Laplace pour une fonction f donnée s'écrit

$$\mathcal{L}(e^{at} f(t))(s) = \mathcal{L}(f(t))(s - a), \quad (1.21)$$

pour $s > a$. En combinant ainsi les équations (1.20) et (1.21), on a la suite d'égalités

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(e^{iV_r t} \partial_t^{1/2}(v(x_r, t) e^{-iV_r t}))(s) &= \mathcal{L}(\partial_t^{1/2}(w(x_r, t) e^{-iV_r t}))(s - iV_r) \\ &= e^{i\pi/4} \sqrt{-i(s - iV_r)} \mathcal{L}(w(x_r, t) e^{-iV_r t})(s - iV_r) \\ &= e^{i\pi/4} \sqrt{-is - V_r} \mathcal{L}(w)(x_r, s - iV_r + iV_r) \\ &= e^{i\pi/4} \sqrt{-is - V_r} \mathcal{L}(v)(x_r, s). \end{aligned} \quad (1.22)$$

Ceci prouve qu'une autre écriture de (1.15) est

$$\partial_x \mathcal{L}(w)(x_r, s) = -e^{-i\pi/4} \mathcal{L}\left(e^{iV_r t} \partial_t^{1/2}(v(x_r, t) e^{-iV_r t})\right)(s). \quad (1.23)$$

Une transformée de Laplace inverse donne finalement la relation exacte

$$\partial_x v(x_r, t) + e^{-i\pi/4} e^{iV_r t} \partial_t^{1/2}(v(x_r, t) e^{-iV_r t}) = 0, \quad (1.24)$$

grâce à la continuité des traces normales de w et v à la frontière Σ pour $t > 0$. Le même travail peut être fait pour le point gauche. Au final, nous trouvons la CLT

$$\partial_{\mathbf{n}} v(x, t) + e^{-i\pi/4} e^{iV_{\ell, r} t} \partial_t^{1/2}(v(x, t) e^{-iV_{\ell, r} t}) = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T, \quad (1.25)$$

et le système complet en domaine borné à résoudre est

$$\begin{cases} i\partial_t v(x, t) + \partial_x^2 v(x, t) + V(x, t)v(x, t) = 0, & (x, t) \in \Omega_T, \\ \partial_{\mathbf{n}} v(x, t) + e^{-i\pi/4} e^{iV_{\ell, r} t} \partial_t^{1/2}(v(x, t) e^{-iV_{\ell, r} t}) = 0, & (x, t) \in \Sigma_T, \\ v(x, 0) = u_0(x), & x \in \Omega. \end{cases} \quad (1.26)$$

La condition étant exacte dans notre procédé, il s'avère que la fonction v est égale à u , solution de (1.1), sur le domaine Ω_T . Dans le cas $V = 0$, nous retrouvons bien la CLT (1.6).

Une des hypothèses utilisée dans la dérivation de la CLT concerne la donnée initiale. Il est possible d'étendre la construction au cas d'une donnée initiale possédant une partie de son support en dehors

de Ω . Si nous considérons par exemple que u_0 est continue et $\partial_{\mathbf{n}}u_0$ est intégrable pour $x > x_r$, alors la CLT à droite s'écrit

$$\partial_x u(x_r, t) + e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} u(x_r, t) - \frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{\pi t}} \int_{x_r}^{+\infty} \partial_x u_0 e^{i \frac{(x-x_r)^2}{t}} dx = 0, \quad (1.27)$$

dans le cas d'un potentiel nul à l'extérieur du domaine de calcul. Ce type d'extension est utile par exemple lors de problèmes de propagation en électromagnétisme où l'on utilise l'équation parabolique petit angle, qui n'est ni plus ni moins qu'une équation de Schrödinger [64, 65]. Dans certains cas, la source électromagnétique n'est pas incluse dans le domaine de calcul, ce qui nécessite alors l'extension ci-dessus. Il est clair que ceci n'est possible que si le noyau de Green de l'espace extérieur est connu, incluant par exemple le cas d'espaces infinis homogènes.

Une seconde extension allant dans ce sens est le cas où un champ incident u^{inc} (onde plane) vient par exemple de la droite pour entrer dans le domaine Ω . On peut alors simplement appliquer la CLT (1.25) au champ diffracté $u - u^{\text{inc}}$. Nous reviendrons sur cette situation dans le cas de problèmes de scattering (section 3) en stationnaire.

1.1.3 Cas d'un potentiel ne dépendant que du temps

Un autre cas particulier (qui découle du cas $V = 0$) est le cas du potentiel ne dépendant que du temps dans les domaines extérieurs Ω_ℓ et Ω_r . Par un changement d'inconnue judicieusement choisi, on peut se ramener au cas de l'équation sans potentiel, et utiliser la condition transparente associée. Nous détaillons ici la démarche qui sera à la base de la proposition de CLA dans le cas où le potentiel dépend aussi de l'espace. Dans le cas où le potentiel n'est que fonction du temps, nous avons la proposition suivante [11].

Proposition 1.2. *Soit V un potentiel admissible, ne dépendant que du temps dans $\Omega_\ell \cup \Omega_r$: $V(x, t) = V_{\ell, r}(t)$ pour tout $(x, t) \in \Omega_{\ell, r} \times \mathbb{R}^+$. On se permet ici d'avoir un potentiel dépendant du temps et de l'espace dans le domaine de calcul $\Omega \times \mathbb{R}^+$. Soit u la solution de l'équation de Schrödinger associée à un tel potentiel*

$$\begin{cases} i\partial_t u + \partial_x^2 u + V(x, t)u = 0, & (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+, \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (1.28)$$

Alors, en posant

$$\mathcal{V}_{\ell, r}(t) = \int_0^t V_{\ell, r}(\varrho) d\varrho, \quad (1.29)$$

la condition aux limites et initiale transparente associée au problème (1.28) est donnée par :

$$\partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\pi/4} e^{i\mathcal{V}_{\ell, r}} \partial_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}_{\ell, r}} u) = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T. \quad (1.30)$$

Démonstration. On introduit la fonction de phase $\mathcal{V}_{\ell, r}(t)$ définie par (1.29), qui est une primitive en temps du potentiel. Considérons une décomposition de domaine comme dans le cas précédent mais sous la forme extérieure

$$\begin{cases} i\partial_t w + \partial_x^2 w + V_{\ell, r}(t)w = 0, & (x, t) \in (\Omega_\ell \cup \Omega_r) \times \mathbb{R}^+, \\ w(x, t) = v(x, t), & (x, t) \in \Sigma \times \mathbb{R}^+, \\ \lim_{|x| \rightarrow +\infty} w(x, t) = 0, & t > 0, \\ w(x, 0) = 0, & x \in \Omega_\ell \cup \Omega_r. \end{cases} \quad (1.31)$$

Introduisons les nouvelles fonctions inconnues $\varpi_{\ell,r}$ définies par le changement de jauge

$$\varpi_{\ell,r}(x, t) = e^{-i\mathcal{V}_{\ell,r}(t)} w(x, t). \quad (1.32)$$

Pour fixer les idées, choisissons le domaine droit Ω_r . Des relations

$$\begin{aligned} i\partial_t w &= i(\partial_t \varpi_r + i\partial_t \mathcal{V}_r \varpi_r) e^{i\mathcal{V}_r} = (i\partial_t \varpi_r - V_r \varpi_r) e^{i\mathcal{V}_r}, \\ \partial_x w &= (\partial_x \varpi_r) e^{i\mathcal{V}_r}, \\ \partial_x^2 w &= (\partial_x^2 \varpi_r) e^{i\mathcal{V}_r}, \end{aligned}$$

on déduit que

$$i\partial_t w + \partial_x^2 w + V_r w = (i\partial_t \varpi_r - V_r \varpi_r + \partial_x^2 \varpi_r + V_r \varpi_r) e^{i\mathcal{V}_r} = (i\partial_t \varpi_r + \partial_x^2 \varpi_r) e^{i\mathcal{V}_r}.$$

Par conséquent, w est la solution de l'équation de Schrödinger sans potentiel

$$i\partial_t \varpi_r + \partial_x^2 \varpi_r = 0, \quad (x, t) \in \Omega_r \times \mathbb{R}^+.$$

Les conditions aux limites du système (1.31) deviennent

$$\begin{aligned} \varpi_r(x_r, t) &= e^{-i\mathcal{V}_r(t)} v(x_r, t), \quad t \in \mathbb{R}^+, \\ \lim_{|x| \rightarrow +\infty} \varpi_r(x, t) &= 0, \quad t > 0, \\ \varpi_r(x, 0) &= 0, \quad x \in \Omega_r. \end{aligned} \quad (1.33)$$

Il est alors possible de refaire tous les calculs de la section précédente avec ϖ_r et avec un potentiel identiquement nul. La condition aux limites pour ϖ_r est donc la CLT (1.6)

$$\partial_{\mathbf{n}} \varpi_r + e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} \varpi_r = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T.$$

Le retour au champ u se fait par le changement d'inconnue (1.32) et conduit à la CLT sur u par continuité des deux premières traces de w et v et par la propriété que v coïncide avec la restriction de u sur le domaine de calcul Ω

$$\partial_{\mathbf{n}} w + e^{-i\pi/4} e^{i\mathcal{V}_{\ell,r}} \partial_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}_{\ell,r}} w) = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T,$$

qui est bien l'équation annoncée (1.30). □

Il est évident que si le potentiel ne dépend pas du temps, la résultat de la proposition 1.2 redonne celui de la section 1.1.2.

1.1.4 Cas de potentiels particuliers dépendant de la variable d'espace x

Dans les trois situations précédentes, le potentiel ne dépend pas de la variable spatiale x . Un des éléments essentiel qui nous a permis de construire la condition exacte est que, fondamentalement, on est capable de résoudre explicitement une équation différentielle du second ordre, comme c'est le cas par exemple pour (1.14), quitte à avoir fait une transformée de Laplace temporelle sur l'équation de Schrödinger.

Récemment, des conditions aux limites transparentes ont été obtenues pour des potentiels particuliers lorsque l'on est capable, par exemple, d'expliciter la solution de l'équation du second ordre

à coefficients variables en termes de fonctions spéciales. Dans [65], le cas d'un potentiel linéaire est considéré dans le contexte des équations paraboliques en électromagnétisme. En utilisant les fonctions d'Airy, la CLT peut encore être écrite et sa précision est testée. Dans [96], Zheng établit une CLT pour le cas particulier d'un potentiel sinusoïdal en utilisant la théorie de Floquet. Dans [54], Galicher détermine explicitement des CLT pour des potentiels en x particuliers : potentiel parabolique $V = x^2$, potentiels semi-périodiques, potentiel affine en espace et dépendant du temps, et potentiel fonction de la variable $x + t$ notamment. Toutes ces approches tiennent compte de la forme très particulière du potentiel. Remarquons que d'autres solutions basées sur des techniques de PML ont aussi été récemment proposées, par exemple dans [95].

Nous proposons dans la suite de développer des constructions de CLT et CLA dans le cas d'un potentiel général. Il faut préciser ici qu'on ne peut espérer obtenir une CLT de façon générale. En effet, cela reviendrait à pouvoir calculer la fonction de Green d'un opérateur différentiel du second ordre en x et à coefficients variables, ce qui est impossible à part dans certaines situations particulières. Un but plus réaliste et modeste consiste à construire une approximation précise de la CLT, c'est-à-dire une Condition aux Limites Artificielle (CLA). Toutefois, avant de commencer notre analyse, nous proposons d'expliquer pour quels types de potentiels nous espérons pouvoir obtenir des CLA effectives.

1.2 Les classes de potentiels admissibles

Si nous revenons au théorème 1.1, nous avons supposé que le potentiel V vérifie

$$V \in C(\mathbb{R}^+, L^\infty(\mathbb{R})).$$

En ce qui nous concerne, il est clair que le potentiel $V|_\Omega$ dans le domaine de calcul n'influence pas le comportement asymptotique de la solution. Nous pouvons alors considérer que $V|_\Omega \in C(\mathbb{R}^+, L^\infty(\Omega))$. Pour les domaines extérieurs $\Omega_{\ell,r}$, il est par contre nécessaire de considérer que l'effet du potentiel implique bien que la solution est sortante au domaine. Nous considérons ici plusieurs possibilités. Une première classe est la classe des potentiels dits *répulsifs* (sous-entendu à l'extérieur de Ω). Il n'est pas aisé de trouver une définition générale de ces potentiels mais nous prendrons la définition suivante¹ dans notre contexte.

Définition 1.1. *Nous dirons qu'un potentiel $V : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$ est répulsif si, dans le domaine de calcul Ω , il vérifie $V|_\Omega \in C(\mathbb{R}^+, L^\infty(\Omega))$ et si, dans les domaines extérieurs $\Omega_{\ell,r}$, il satisfait la condition d'être $C^\infty(\Omega_{\ell,r} \times \mathbb{R}^+)$ et tel que*

$$x\partial_x V(x, t) > 0, \quad \forall (x, t) \in \Omega_{\ell,r} \times \mathbb{R}^+. \quad (1.34)$$

Ce type de potentiel a pour propriété notamment d'envoyer les trajectoires classiques, i.e. les rayons de l'optique géométrique, à l'infini plus vite que dans le cas d'un potentiel nul, la solution étant alors sortante au domaine. Un exemple de potentiel répulsif de ce type est le potentiel harmonique ou quadratique : $V(x, t) = \beta^2 x^2$, avec $\beta \in \mathbb{R}$. On peut montrer, plus généralement, qu'un potentiel tel que $V(x, t) = \beta^2 |x|^a$, avec $0 < a \leq 2$, est répulsif. Nous considérons ce type de potentiels par la suite dans le cadre des conditions aux limites artificielles, car c'est dans ce cadre qu'il est nécessaire de borner le domaine, et qu'on peut espérer un apport conséquent des conditions aux limites artificielles.

1. Issue d'une communication avec R. Carles

Par opposition, nous définissons les potentiels *attractifs*.

Définition 1.2. *Un potentiel $V : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$ est dit attractif si, dans Ω , il satisfait $V|_{\Omega} \in C(\mathbb{R}^+, L^\infty(\Omega))$ et si, dans les domaines non bornés $\Omega_{\ell,r}$, il est dans $C^\infty(\Omega_{\ell,r} \times \mathbb{R}^+)$ et tel que*

$$x\partial_x V(x, t) < 0, \forall (x, t) \in \Omega_{\ell,r} \times \mathbb{R}^+. \quad (1.35)$$

Un exemple de potentiel attractif est le potentiel harmonique précédent avec un signe opposé : $V(x, t) = -\beta^2 x^2$, avec $\beta^2 \in \mathbb{R}$, et sa généralisation $V(x, t) = -\beta^2 |x|^a$, avec $0 < a \leq 2$. Ce genre de potentiel intervient classiquement dans les problèmes de Schrödinger non linéaires de type Bose-Einstein. On les appelle aussi potentiels de confinement ou piégeant. Ces potentiels ont pour effet de localiser la solution à l'intérieur d'un domaine, par exemple Ω . En cela, une condition de Dirichlet homogène est souvent utilisée en pratique. Nous reviendrons sur cette question plus tard dans le cadre des CLA. Que ce soit pour les potentiels répulsifs ou attractifs, nous pouvons aussi considérer une dépendance additionnelle en temps en considérant dans le cas harmonique que β est une fonction C^∞ du temps.

Une autre classe de potentiels que nous considérons est celle des potentiels que nous appelons *d'accélération ou de décélération*. Ces potentiels ont pour effet d'accélérer ou décélérer l'onde se déplaçant vers l'infini. Un exemple est le potentiel linéaire dit de Stark qui s'écrit $V(x) = \alpha x$, $\alpha \in \mathbb{R}$. Ici, α peut représenter un champ électrique ou un terme de pesanteur. S'il est négatif, alors il y a accélération, sinon décélération. Un exemple est notamment donné dans [68, 69] pour la modélisation de l'interaction laser-molécule. L'effet du laser est modélisé par un champ électrique extérieur α qui dépend du temps

$$\alpha(t) = -E_0 \sin(\omega t) e^{-a \frac{(t-T_f)^2}{4}}, \quad (1.36)$$

où E_0 est un champ électrique initial, ω est la pulsation du laser, a est une constante positive et T_f un temps final. Dans ce type de problème, l'effet du laser apporte une contribution additionnelle locale au potentiel initial coulombien $V_c = |x|^{-1}$. Ceci permet alors de délocaliser le noyau des électrons présents dans la molécule. Mathématiquement, on sépare au cours du temps ces deux composantes de la fonction d'onde modélisant une molécule et donnée par l'état stationnaire u_0 . D'autres exemples sont donnés dans le cadre des équations paraboliques en acoustique ou électromagnétisme dans [65] pour divers types de profils d'indices de réfraction du milieu.

Afin de mieux saisir ce qui peut arriver dans chacune de ces situations, énonçons la proposition suivante, qui découle de [36].

Proposition 1.3. *Considérons que la donnée initiale soit une gaussienne fixée par*

$$u_0(x) = e^{ik_0 x - x^2}, \quad (1.37)$$

où k_0 désigne le nombre d'onde. Alors, la solution u^* de l'équation de Schrödinger sans potentiel (1.1) ($V = 0$) est donnée par

$$u^*(x, t) = \sqrt{\frac{i}{-4t+i}} \exp\left(\frac{-ix^2 - k_0 x + k_0^2 t}{-4t+i}\right). \quad (1.38)$$

Maintenant, notons u la solution de l'équation avec potentiel (1.1). Alors,

(a) *Si V est un potentiel linéaire $V = \alpha x$ où $\alpha \in \mathbb{R}$ est une constante, u est donnée par l'expression*

$$u(x, t) = e^{-i(-\alpha t x + \frac{t^3}{3} |\alpha|^2)} u^*(x - t^2 \alpha, t). \quad (1.39)$$

(b) Si V est un potentiel harmonique répulsif $V = \beta^2|x|^2$, alors u est égale à

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\cosh(2\beta t)}} e^{i\frac{\beta}{2}|x|^2 \tanh(2\beta t)} u^* \left(\frac{x}{\cosh(2\beta t)}, \frac{\tanh(2\beta t)}{2\beta} \right). \quad (1.40)$$

(c) Si V est un potentiel harmonique attractif $V = -\beta^2|x|^2$, alors pour $2\beta t \in]-\frac{\pi}{2}; \frac{\pi}{2}[$, la solution u a pour expression

$$u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\cos(2\beta t)}} e^{-i\frac{\beta}{2}x^2 \tan(2\beta t)} u^* \left(\frac{x}{\cos(2\beta t)}, \frac{\tan(2\beta t)}{2\beta} \right). \quad (1.41)$$

Afin d'illustrer la forme de ces solutions, nous considérons le cas de la gaussienne avec $k_0 = 10$. Sur les figures 1.2 et 1.3, nous représentons les profils des solutions exactes données dans la proposition précédente. Plus précisément, on représente dans le plan espace temps (x, t) les contours de niveau, en échelle logarithmique, de l'amplitude des solutions exactes. On voit alors, dans le cas du potentiel linéaire, les effets d'accélération (ou de décélération) entre la solution exacte avec potentiel reportée figure 1.2(b) et celle sans potentiel (figure 1.2(a)). La solution étant sortante et se propageant à l'infini, on peut espérer obtenir une CLT ou CLA dans ce cas. Il en est de même pour le potentiel harmonique répulsif. On voit également la courbure des rayons sur cette courbe. C'est aussi le cas pour le potentiel harmonique attractif. Par contre, la solution étant confinée au domaine de représentation, une condition de Dirichlet est alors souhaitable. Nous verrons plus loin la difficulté en ce qui concerne la possibilité d'obtenir une condition aux limites artificielle dans ce genre de situation.

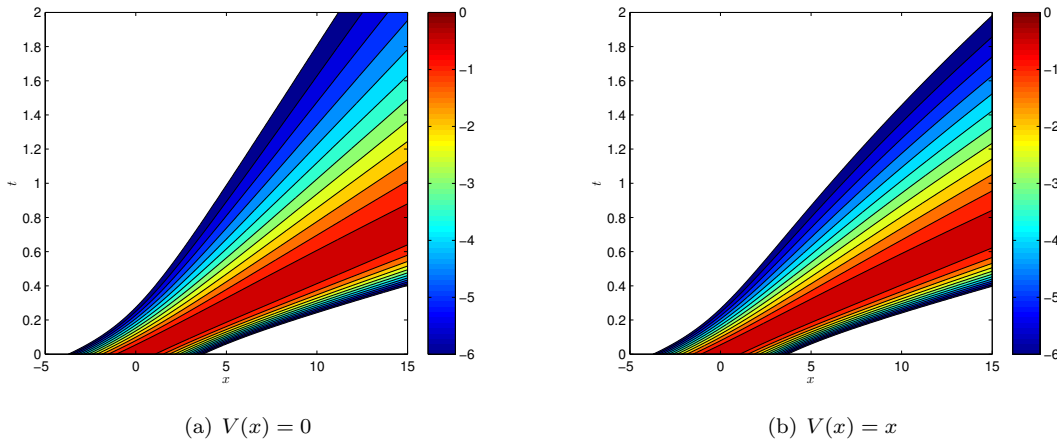


FIGURE 1.2 – Solutions exactes pour $V(x) = 0$ et $V(x) = x$ en échelle logarithmique.

1.3 Introduction au calcul pseudodifférentiel

Comme l'équation de Schrödinger a un potentiel dépendant du temps et de l'espace, il est bien connu qu'une approche purement basée sur la transformée de Laplace est inappropriée. De plus, si on voulait construire une CLT pour un potentiel spatial $V(x, t) = V(x)$, il faudrait résoudre, après transformée de Laplace, une équation différentielle de type Helmholtz du second ordre. Ceci est en général impossible pour un potentiel donné. Pour cette raison, il est plus réaliste d'essayer de construire une condition aux limites approchée. Dans ce but, nous proposons une approche basée sur

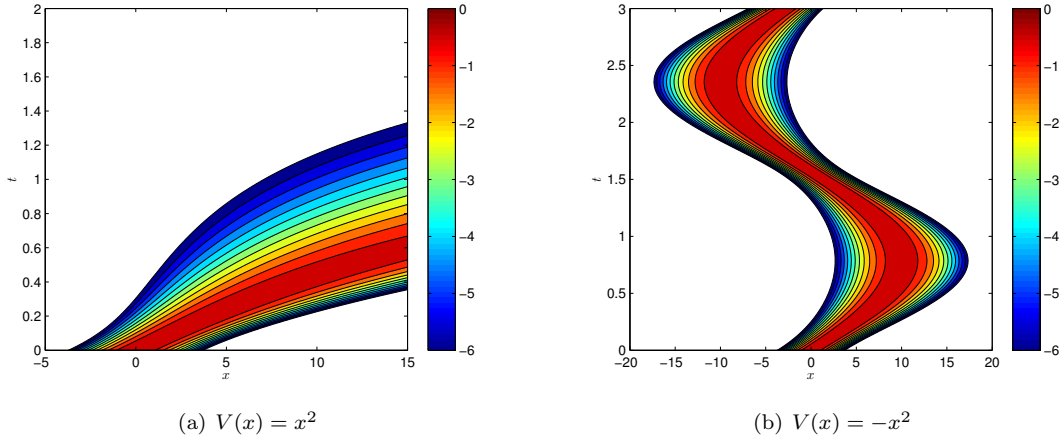


FIGURE 1.3 – Solutions exactes pour $V(x) = x^2$ et $V(x) = -x^2$ en échelle logarithmique.

la théorie des opérateurs pseudodifférentiels qui généralise naturellement la transformée de Laplace, et sur l'utilisation d'un théorème de factorisation qui donne une solution approchée de l'équation différentielle en x du second ordre.

1.3.1 Opérateurs pseudodifférentiels au sens de Fourier

Nous considérons ici le calcul pseudodifférentiel basé sur la transformée de Fourier. Pour une fonction g de $L^1(\mathbb{R})$, on note $\mathcal{F}(g)$ ou \hat{g} sa transformée de Fourier :

$$\hat{g}(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} g(t) e^{-it\tau} dt, \quad \text{pour } \tau \in \mathbb{R}.$$

On note τ la covariable de Fourier de la variable t , et ξ la covariable de x . Lorsqu'elle est bien définie, la transformée de Fourier inverse de g est donnée par

$$\mathcal{F}^{-1}(g)(t) = \int_{\mathbb{R}} g(\tau) e^{it\tau} d\tau \quad \text{pour } t \in \mathbb{R},$$

et si g et \hat{g} sont intégrables, on a la relation $g = \mathcal{F}^{-1}(\hat{g})$.

Un opérateur pseudodifférentiel en temps $P(x, t, \partial_t)$ est défini par son symbole total $p(x, t, \tau)$ dans l'espace de Fourier

$$P(x, t, \partial_t)u(x, t) = \mathcal{F}_t^{-1} \left(p(x, t, \tau) \hat{u}(x, \tau) \right) = \int_{\mathbb{R}} p(x, t, \tau) \hat{u}(x, \tau) e^{it\tau} d\tau, \quad (1.42)$$

où \mathcal{F}_t désigne la transformée de Fourier partielle en temps. Le calcul pseudodifférentiel inhomogène utilisé ici a été introduit dans [62]. Dans un souci de concision, nous ne détaillerons que les propriétés dont nous aurons besoin. Soit α un nombre réel et Ξ un ouvert de \mathbb{R} . Alors [75], la classe de symboles $S^\alpha(\Xi \times \Xi)$ désigne l'espace vectoriel des fonctions $C^\infty a(x, t, \tau)$ dans $\Xi \times \Xi \times \mathbb{R}$ telles que pour tout $K \subseteq \Xi \times \Xi$ et pour tous les indices β, δ, γ , il existe une constante $C_{\beta, \delta, \gamma}(K)$ telle que

$$|\partial_\tau^\beta \partial_t^\delta \partial_x^\gamma a(x, t, \tau)| \leq C_{\beta, \delta, \gamma}(K) (1 + |\tau|)^{\alpha - \beta}, \quad (1.43)$$

pour tout $(x, t) \in K$ et $\tau \in \mathbb{R}$. Dans le cadre de ce travail sur l'équation de Schrödinger, nous noterons les classes de symboles S_g^α au lieu de S^α . A un opérateur pseudodifférentiel, on associe la notion d'ordre de dérivation, comme l'indique la définition suivante.

Définition 1.3. Une fonction $f(x, t, \tau)$ est dite homogène d'ordre m si et seulement si, pour tout $\mu > 0$, on a

$$f(x, t, \mu\tau) = \mu^m f(x, t, \tau). \quad (1.44)$$

Alors, on dit qu'un opérateur pseudodifférentiel $P = P(x, t, \partial_t)$ est classique, inhomogène d'ordre M , $M \in \mathbb{Z}/2$, si son symbole total, noté $p = \sigma(P)$, admet un développement asymptotique en symboles homogènes $\{p_{M-j/2}\}_{j=0}^{+\infty}$ qui s'écrit

$$p(x, t, \tau) \sim \sum_{j=0}^{+\infty} p_{M-j/2}(x, t, \tau), \quad (1.45)$$

où chaque fonction $p_{M-j/2}$ est homogène d'ordre $2M - j$, pour $j \in \mathbb{N}$. Compte tenu du caractère asymptotique en τ de la définition (1.43) des classes de symboles, le développement (1.45) correspond également à une asymptotique haute-fréquence en τ . La signification du symbole \sim est ici la suivante :

$$\forall \tilde{m} \in \mathbb{N}, \quad p - \sum_{j=0}^{\tilde{m}} p_{M-j/2} \in S_S^{M-(\tilde{m}+1)/2}. \quad (1.46)$$

Un symbole p satisfaisant la propriété ci-dessus est noté $p \in S_S^M$ et l'opérateur associé $P = Op(p)$ défini par transformée de Fourier inverse, $P \in OPS_S^M$. La classe $OPS_S^{-\infty}$ correspond à l'intersection de toutes les classes OPS_S^M pour $M \in \mathbb{Z}$. Enfin, pour P et Q deux opérateurs pseudodifférentiels de symboles respectifs p et q , et $M \in \mathbb{Z}/2$, on notera

$$P = Q \quad \text{mod } OPS_S^M \quad (1.47)$$

ou de manière équivalente

$$p = q \quad \text{mod } S_S^M \quad (1.48)$$

si la différence des symboles vérifie

$$p - q \in S_S^M.$$

Un des points-clés du calcul pseudodifférentiel est qu'il permet de manipuler des symboles d'opérateurs au niveau algébrique, plutôt que les opérateurs eux-mêmes au niveau fonctionnel, ce qui donne des règles pratiques de calcul, par exemple pour la composition de deux opérateurs intégral-différentiels à coefficients variables (c'est-à-dire dont les symboles ne sont pas polynomiaux en τ).

1.3.2 Exemples

Considérons à présent quelques exemples d'opérateurs pseudodifférentiels. Nous utiliserons de manière récurrente l'expression de u en fonction de sa transformée de Fourier en temps $\hat{u}(x, \tau)$ grâce à la réciprocity de la transformée de Fourier :

$$u(x, t) = \mathcal{F}_t^{-1}(\hat{u}(x, \tau)) = \int_{\mathbb{R}} \hat{u}(x, \tau) e^{it\tau} d\tau. \quad (1.49)$$

Considérons tout d'abord le cas de l'opérateur $A(x, t)$, qui consiste en la multiplication par une fonction régulière $a(x, t)$. Pour déterminer le symbole de A , on écrit, en utilisant la propriété (1.49)

$$Au(x, t) = a(x, t)u(x, t) = a(x, t) \int_{\mathbb{R}} \hat{u}(x, \tau) e^{it\tau} d\tau = \int_{\mathbb{R}} a(x, t) \hat{u}(x, \tau) e^{it\tau} d\tau,$$

car la fonction $a(x, t)$ est indépendante de la variable de Fourier τ . En vertu de la définition (1.42), ceci signifie que l'opérateur A a pour symbole $\sigma(A) = a(x, t)$.

Pour l'opérateur de dérivation en temps ∂_t , on a

$$\partial_t u(x, t) = \partial_t \int_{\mathbb{R}} \hat{u}(x, \tau) e^{it\tau} d\tau = \int_{\mathbb{R}} \hat{u}(x, \tau) \partial_t (e^{it\tau}) d\tau = \int_{\mathbb{R}} \hat{u}(x, \tau) i\tau e^{it\tau} d\tau.$$

Le symbole de ∂_t est donc $\sigma(\partial_t) = i\tau$. Concernant l'opérateur d'intégration en temps, noté I_t , on a

$$I_t u(x, t) = I_t \int_{\mathbb{R}} \hat{u}(x, \tau) e^{it\tau} d\tau = \int_{\mathbb{R}} \hat{u}(x, \tau) I_t (e^{it\tau}) d\tau = \int_{\mathbb{R}} \hat{u}(x, \tau) \frac{1}{i\tau} e^{it\tau} d\tau,$$

d'où $\sigma(I_t) = \frac{1}{i\tau}$.

Dans les exemples précédents, nous avons vu des opérateurs qui étaient des opérateurs différentiels ou intégraux d'ordre entier. Considérons à présent d'autres exemples d'opérateurs pseudodifférentiels, qui cette fois sont des opérateurs intégral-différentiels fractionnaires. Parmi ceux-ci, on compte l'opérateur d'intégration fractionnaire d'ordre $\alpha/2$, $I_t^{\alpha/2}$ défini pour $\alpha \in \mathbb{N}$ par la relation

$$I_t^{\alpha/2} f(x, t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha/2)} \int_0^t (t-s)^{\alpha/2-1} f(x, s) ds \quad (1.50)$$

où Γ désigne la fonction spéciale Gamma usuelle, et en particulier l'opérateur d'intégration d'ordre un demi

$$I_t^{1/2} f(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{f(x, s)}{\sqrt{t-s}} ds. \quad (1.51)$$

L'opérateur I_t^α a pour symbole $\left(\frac{1}{i\tau}\right)^{\alpha/2}$. Par ailleurs, l'opérateur de dérivée fractionnaire $\partial_t^{1/2}$ est donné par

$$\partial_t^{1/2} f(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \partial_t \int_0^t \frac{f(s)}{\sqrt{t-s}} ds, \quad (1.52)$$

et son symbole est $\sqrt{i\tau}$. En accord avec nos notations, nous avons la correspondance

$$Op(-i\sqrt{-\tau}) = e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} \quad \text{et} \quad Op\left(\frac{1}{\tau}\right) = iI_t, \quad (1.53)$$

qui sera souvent utilisée dans la suite. Ces opérateurs ont une structure de convolution, ils sont locaux en espace mais non locaux en temps, ce qui les rend délicats à approcher efficacement d'un point de vue numérique. Il sera donc nécessaire de trouver des algorithmes astucieux et performants pour simuler ou localiser ces opérateurs. Tout le long du manuscrit, nous considérons que pour un nombre complexe z , \sqrt{z} est la détermination principale de la racine carrée, qui exclut la demi-droite des réels négatifs. Pour x réel négatif, on utilise la convention $\sqrt{x} = i\sqrt{-x}$. Le tableau 1.1 présente les symboles de quelques opérateurs différentiels et pseudodifférentiels utiles.

1.3.3 Calcul symbolique

L'intérêt des opérateurs pseudodifférentiels est de permettre de manipuler uniquement les symboles associés plutôt que les opérateurs eux-mêmes. En effet, toute opération sur l'opérateur : composition, dérivation, multiplication, se traduit de manière relativement simple au niveau de son symbole.

Opérateur	Symbole	Ordre
∂_t	$i\tau$	1
$\partial_t^{1/2}$	$\sqrt{i\tau} = e^{-i\pi/4}\sqrt{-\tau}$	1/2
$\partial_t^{\alpha/2}$	$(i)^{\alpha/2}\sqrt{\tau}^\alpha$	$\alpha/2$

Opérateur	Symbole	Ordre
I_t	$\frac{1}{i\tau}$	1
$I_t^{1/2}$	$\frac{1}{\sqrt{i\tau}} = \frac{e^{i\pi/4}}{\sqrt{-\tau}}$	-1/2
$I_t^{\alpha/2}$	$\frac{1}{(i\tau)^{\alpha/2}}$	$-\alpha/2$

TABLE 1.1 – Table de quelques opérateurs pseudodifférentiels et de leur symbole.

Proposition 1.4. (Composée) Soient A et B sont deux opérateurs pseudodifférentiels de symboles totaux respectifs $\sigma(A)$ et $\sigma(B)$. Alors, l'opérateur composé, noté AB , a pour symbole [89, 41] :

$$\sigma(AB) \sim \sum_{\alpha=0}^{+\infty} \frac{(-i)^\alpha}{\alpha!} \partial_\tau^\alpha \sigma(A) \partial_t^\alpha \sigma(B). \quad (1.54)$$

De plus, si A est d'ordre m et B est d'ordre n , leur composée AB est d'ordre $m+n$.

En conséquence, lorsqu'on multiplie un opérateur pseudodifférentiel par une fonction régulière $a(x, t)$, le symbole de l'opérateur résultant est lui-même multiplié par cette fonction $a(x, t)$:

$$\sigma(a(x, t)P(x, t, \tau)) = a(x, t)\sigma(P). \quad (1.55)$$

En effet, la multiplication par une fonction peut être vue comme la composition par un opérateur d'ordre zéro, de symbole $a(x, t)$. L'ordre de l'opérateur résultant est préservé.

L'effet d'une dérivation d'un opérateur pseudodifférentiel sur son symbole est résumé dans la proposition suivante.

Proposition 1.5. (Dérivée) Soit $P(x, t, \partial_t)$ un opérateur pseudodifférentiel de symbole $p(x, t, \tau)$ et d'ordre m . Alors on a les relations

$$\begin{aligned} \partial_x P &= Op(\partial_x p) + P\partial_x, \\ \sigma(\partial_x P) &= \partial_x p + \sigma(P\partial_x). \end{aligned} \quad (1.56)$$

De plus, pour $\alpha \in \mathbb{N}$ et tant que les dérivées mentionnées ne sont pas nulles, $\partial_x^\alpha P$ et $\partial_t^\alpha P$ sont d'ordre m , et $\partial_\tau^\alpha P$ est d'ordre $m - \alpha$.

Démonstration. Par définition du symbole de $P(x, t, \partial_t)$, on a

$$P(x, t, \partial_t) u(x, t) = \int_{\mathbb{R}} p(x, t, \tau) \hat{u}(x, \tau) e^{it\tau} d\tau.$$

En dérivant cette expression par rapport à x , on obtient

$$\begin{aligned} (\partial_x P)(x, t, \partial_t) u(x, t) &= \partial_x \int_{\mathbb{R}} p(x, t, \tau) \hat{u}(x, \tau) e^{it\tau} d\tau \\ &= \int_{\mathbb{R}} \left(\partial_x p(x, t, \tau) \hat{u}(x, \tau) + p(x, t, \tau) \partial_x \hat{u}(x, \tau) \right) e^{it\tau} d\tau \\ &= \int_{\mathbb{R}} \partial_x p(x, t, \tau) \hat{u}(x, \tau) e^{it\tau} d\tau + \int_{\mathbb{R}} p(x, t, \tau) \widehat{\partial_x u}(x, \tau) e^{it\tau} d\tau \\ &= Op(\partial_x p) u(x, t) + P(\partial_x u)(x, t). \end{aligned}$$

Au niveau symbolique, cette identité s'écrit

$$\sigma(\partial_x P) = \partial_x p + \sigma(P \partial_x),$$

d'où le résultat (1.56) annoncé, au niveau des opérateurs et au niveau des symboles. \square

Enfin, remarquons qu'un minimum de régularité du potentiel est exigé pour appliquer la théorie des opérateurs pseudodifférentiels. Cependant, cela est crucial dans le domaine complémentaire de Ω , mais une hypothèse de régularité bien plus faible peut être attendue pour le problème intérieur posé dans Ω , ce qui autorise une plus grande classe de potentiels.

1.4 Construction des CLA sur le plan symbolique

Comme nous l'avons indiqué précédemment, la condition aux limites transparente pour le problème (1.1) fait intervenir l'opérateur de Dirichlet-Neumann. Pour approcher cet opérateur, nous allons utiliser le calcul symbolique comme outil pour calculer son développement asymptotique en symboles homogènes.

1.4.1 Deux stratégies

Deux approches sont possibles pour déterminer une condition aux limites artificielle adaptée au problème (1.1). La méthode la plus directe consiste à construire une condition aux limites artificielle directement pour l'équation (1.1) d'inconnue u . Une autre méthode s'inspire de l'approche utilisée dans le cas $V = V(t)$ au paragraphe 1.1.3. En effet pour un potentiel ne dépendant que du temps, le changement d'inconnue $v = e^{-i\mathcal{V}}u$ avec $\mathcal{V}(t) = \int_0^t V(s) ds$ permet de réduire le problème initial au problème sans potentiel, pour lequel la condition transparente est connue. On transpose cette démarche dans le cas d'un potentiel quelconque $V(x, t)$ en définissant de manière similaire la fonction de phase

$$\mathcal{V}(x, t) = \int_0^t V(x, s) ds, \quad (1.57)$$

puis la nouvelle inconnue

$$v(x, t) = e^{-i\mathcal{V}(x, t)} u(x, t), \quad (1.58)$$

où u est la solution exacte de (1.1). En écrivant, $u = e^{i\mathcal{V}}v$, on en déduit les relations

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

La nouvelle inconnue v est donc solution de l'équation de Schrödinger à coefficients variables

$$i\partial_t v + \partial_x^2 v + f \partial_x v + g v = 0, \quad x \in \mathbb{R}, t > 0, \quad (1.59)$$

dont les coefficients sont des fonctions de x et t données par

$$f = 2i\partial_x \mathcal{V} \quad \text{et} \quad g = i\partial_x^2 \mathcal{V} - (\partial_x \mathcal{V})^2. \quad (1.60)$$

Il s'agit alors de chercher une condition aux limites, exacte ou approchée, pour cette inconnue v et l'équation (1.59). On reviendra ensuite à u en effectuant le changement de variable inverse $v = e^{-i\mathcal{V}}u$.

On peut unifier la présentation de ces deux stratégies en considérant la recherche d'une condition aux limites artificielle pour le problème suivant

$$\begin{cases} i\partial_t w + \partial_x^2 w + A\partial_x w + Bw = 0, & (x, t) \in \Omega_T, \\ w(x, 0) = w_0(x), & x \in \Omega, \end{cases} \quad (1.61)$$

avec, dans le cas du changement de jauge : $w = v = e^{-i\mathcal{V}}u$, $A = f = 2i\partial_x \mathcal{V}$, $B = g = i\partial_x^2 \mathcal{V} - (\partial_x \mathcal{V})^2$, et la fonction de phase \mathcal{V} définie par (1.57), et dans le cas de la méthode directe : $w = u$, $A = 0$ et $B = V$. Dans la suite, nous étudierons la construction d'une CLA pour le problème (1.61), sans distinguer la stratégie considérée tant que la démarche est commune aux deux stratégies.

1.4.2 Développement asymptotique en symboles homogènes de l'opérateur de Dirichlet-to-Neumann

On note $L = L(x, t, \partial_x, \partial_t)$ l'opérateur de Schrödinger associé au système (1.61)

$$L(x, t, \partial_x, \partial_t)w = i\partial_t w + \partial_x^2 w + A\partial_x w + Bw = 0. \quad (1.62)$$

Comme nous cherchons à construire une approximation de l'opérateur DtN sur la frontière, il faut exprimer l'opérateur de trace normale ∂_x (en se plaçant au point x_r) comme une fonction de l'opérateur de trace, au travers d'un opérateur Λ^+ qui fait intervenir des dérivées (fractionnaires) en temps de w , ainsi que l'effet du potentiel et de ses variations en (x, t) . Ceci peut être réalisé de manière approchée grâce à une factorisation de type Nirenberg de l'opérateur L [11]

Théorème 1.6. *Soit L l'opérateur de Schrödinger à coefficients variables défini par la relation (1.62). Il existe deux opérateurs pseudodifférentiels classiques inhomogènes $\Lambda^\pm = \Lambda^\pm(x, t, \partial_t) \in OPS_S^{1/2}$, réguliers par rapport à la variable d'espace x , et tels que*

$$L(x, t, \partial_x, \partial_t) = (\partial_x + i\Lambda^-)(\partial_x + i\Lambda^+) + R, \quad (1.63)$$

où R est un opérateur régularisant de $OPS_S^{-\infty}$. De plus, le symbole total $\lambda^\pm = \sigma(\Lambda^\pm)$ de Λ^\pm admet un développement asymptotique en symboles homogènes

$$\sigma(\Lambda^\pm) = \lambda^\pm \sim \sum_{j=0}^{+\infty} \lambda_{1/2-j/2}^\pm. \quad (1.64)$$

En l'absence de condition aux limites sur Σ_T , une partie de la solution de $Lw = 0$ est réfléchiée à l'intérieur du domaine à la traversée de la frontière Σ . Les opérateurs Λ^\pm traduisent cette séparation de l'onde solution entre partie réfléchiée et partie transmise. L'opérateur Λ^+ est associé à la partie sortante de la solution. Lorsque R est nul, écrire la relation

$$(\partial_x + i\Lambda^+)w = 0 \quad (1.65)$$

revient ainsi à écrire la condition pour que la solution soit uniquement sortante, qui est donc la condition transparente de ce problème. En toute généralité, on identifie les opérateurs à R près, et la condition (1.65) est la première condition aux limites approchée associée au problème.

Afin d'écrire la condition approchée associée au problème (1.62), il faut identifier l'opérateur pseudodifférentiel Λ^+ . Celui-ci est entièrement décrit par son symbole total λ^+ , lui-même développable

en symboles homogènes $\lambda_{1/2-j/2}^+$, $j \in \mathbb{N}$. En explicitant ce développement asymptotique, on sera capable d'approcher Λ^+ et d'écrire la condition aux limites associée. Pour cela, on développe le membre de droite de (1.63) en vue d'identifier ces termes avec ceux de (1.62), en fonction de leur ordre de dérivation en espace. On a, d'une part, d'après (1.63)

$$L = (\partial_x + i\Lambda^-)(\partial_x + i\Lambda^+) + R = \partial_x^2 + i\partial_x\Lambda^+ + i\Lambda^-\partial_x - \Lambda^-\Lambda^+ + R,$$

où R est un opérateur régularisant de $OPS_S^{-\infty}$. On utilise la propriété (1.56) pour exprimer $\partial_x\Lambda^+ = Op(\partial_x\lambda^+) + \Lambda^+\partial_x$. D'où l'équation

$$L = \partial_x^2 + i(Op(\partial_x\lambda^+) + \Lambda^+\partial_x) + i\Lambda^-\partial_x - \Lambda^-\Lambda^+ + R.$$

Finalement, en ordonnant les termes selon ∂_x , nous obtenons

$$L = \partial_x^2 + i(\Lambda^- + \Lambda^+)\partial_x + iOp(\partial_x\lambda^+) - \Lambda^-\Lambda^+ + R. \quad (1.66)$$

Par ailleurs, d'après (1.62), l'opérateur L est égal à

$$L = \partial_x^2 + A\partial_x + i\partial_t + B. \quad (1.67)$$

L'identification, à un opérateur de $OPS_S^{-\infty}$ près, et sous la condition haute-fréquence en τ , des opérateurs mis en jeu dans (1.66) et dans (1.67) conduit au système d'opérateurs

$$\begin{cases} i(\Lambda^- + \Lambda^+) = A, \\ iOp(\partial_x\lambda^+) - \Lambda^-\Lambda^+ = i\partial_t + B. \end{cases} \quad (1.68)$$

Ce système d'équations sur des opérateurs pseudodifférentiels est transcrit en un système d'équations sur les symboles associés. On note $a = \sigma(A)$ et $b = \sigma(B)$ les symboles de A et B respectivement. Comme les opérateurs A et B sont d'ordre 0 en temps, ils coïncident avec leur symbole, donc on peut identifier a et A , b et B . L'opérateur $iOp(\partial_x\lambda^+)$ a pour symbole $i\partial_x\lambda^+$, l'opérateur $i\partial_t$ a pour symbole $-\tau$. Quant au symbole de la composée $\Lambda^-\Lambda^+$, il est donné par la formule (1.54). On obtient finalement le système suivant

$$i(\lambda^- + \lambda^+) = a, \quad (1.69a)$$

$$i\partial_x\lambda^+ - \sum_{\alpha=0}^{\infty} \frac{(-i)^\alpha}{\alpha!} \partial_\tau^\alpha \lambda^- \partial_t^\alpha \lambda^+ \sim -\tau + b. \quad (1.69b)$$

L'utilisation du développement asymptotique (1.64) de λ^+ permettra de résoudre le système (1.69) en déterminant les symboles successifs $\lambda_{1/2-j/2}^+$.

1.4.3 Détermination du symbole principal en fonction de la stratégie

On commence par transformer le système (1.69) de manière à se ramener à une unique équation portant sur λ^+ , qui est le symbole que l'on cherche à déterminer. La première équation (1.69a) permet d'exprimer λ^- en fonction de a et λ^+

$$\lambda^- = -\lambda^+ - ia$$

en vue de réinjecter cette expression dans la deuxième équation. Or on a, pour $\alpha \in \mathbb{N}$

$$-\partial_\tau^\alpha \lambda^- \partial_t^\alpha \lambda^+ = \partial_\tau^\alpha (ia) \partial_t^\alpha \lambda^+ + \partial_\tau^\alpha \lambda^+ \partial_t^\alpha \lambda^+ = \begin{cases} ia\lambda^+ + \lambda^+\lambda^+ & \text{si } \alpha = 0, \\ \partial_\tau^\alpha \lambda^+ \partial_t^\alpha \lambda^+ & \text{si } \alpha \neq 0, \end{cases}$$

la dernière égalité venant du fait que a ne dépend pas de τ . On a donc

$$-\sum_{\alpha=0}^{+\infty} \frac{(-i)^\alpha}{\alpha!} \partial_\tau^\alpha \lambda^- \partial_t^\alpha \lambda^+ \sim ia\lambda^+ + \sum_{\alpha=0}^{+\infty} \frac{(-i)^\alpha}{\alpha!} \partial_\tau^\alpha \lambda^+ \partial_t^\alpha \lambda^+.$$

Finalement, l'équation portant sur λ^+ est la suivante

$$i\partial_x \lambda^+ + ia\lambda^+ + \sum_{\alpha=0}^{+\infty} \frac{(-i)^\alpha}{\alpha!} \partial_\tau^\alpha \lambda^+ \partial_t^\alpha \lambda^+ \sim -\tau + b. \quad (1.70)$$

On utilise les règles du calcul symbolique pour résoudre l'équation (1.70). Comme le symbole total λ^+ admet un développement asymptotique en symboles homogènes $(\lambda_{1/2-j/2}^+)_{j \in \mathbb{N}}$, cette équation sur le symbole total se traduit par un ensemble dénombrable d'équations portant sur des symboles homogènes d'ordre $1-j/2$, $j \in \mathbb{N}$. Ces nouvelles équations sont issues de la lecture des termes de même ordre d'homogénéité en la variable τ . En résolvant l'équation d'ordre le plus élevé, on déterminera le symbole principal $\lambda_{1/2}^+$, premier terme du développement asymptotique de λ^+ . Dans l'équation (1.70), les termes d'ordre le plus élevé sont d'ordre 1. Dans le membre de gauche, l'unique terme d'ordre 1 est obtenu pour $\alpha = 0$ et vient du produit du symbole principal par lui-même $\lambda_{1/2}^+(x, t, \tau)\lambda_{1/2}^+(x, t, \tau)$. Dans le membre de droite, le terme d'ordre 1 est *a priori* $-\tau$. Cependant, on peut interpréter de deux manières la somme $-\tau + b$. On peut en effet le voir soit comme la somme d'un symbole homogène d'ordre 1 et d'un symbole homogène d'ordre 0 (choix (1.71)), soit comme un symbole non homogène, mais néanmoins asymptotiquement d'ordre 1, ce qui correspond au choix (1.72). Selon la stratégie choisie, l'identification des termes d'ordre 1 conduit donc à

$$\left(\lambda_{1/2}^+(\tau)\right)^2 = -\tau \quad (1.71)$$

ou à

$$\left(\lambda_{1/2}^+(x, t, \tau)\right)^2 = -\tau + b(x, t). \quad (1.72)$$

Ces deux interprétations conduisent elles-mêmes chacune à deux expressions du symbole principal, en fonction du signe retenu pour la racine carrée

$$\lambda_{1/2}^+(\tau) = \mp \sqrt{-\tau} \quad (1.73)$$

ou

$$\lambda_{1/2}^+(x, t, \tau) = \mp \sqrt{-\tau + b(x, t)}. \quad (1.74)$$

Une première difficulté consiste à choisir le signe correct du symbole principal pour caractériser la partie sortante de l'onde. Plusieurs arguments, plus ou moins formels, peuvent être avancés. Dans le cas d'un potentiel nul $V = 0$, le choix du signe négatif pour (1.73) peut être fait. L'extension au cas d'un potentiel constant est alors immédiate par changement de jauge. Dans le cas d'un potentiel V ne dépendant que de x , puisque nous avons le lemme 1.15, nous pouvons étendre ce choix de signe à (1.74). Enfin, quand le potentiel V est dépendant du temps et de l'espace, une façon rigoureuse de justifier le choix du signe négatif consiste à développer des arguments d'analyse microlocale liés à l'étude des rayons bicaractéristiques sortants par le biais de la négativité du symbole principal dans la zone hyperbolique (τ négatifs). Des considérations du même type ont été développées dans [8] et peuvent s'adapter ici. Ceci fixe de manière claire donc le choix du signe négatif dans (1.73), soit

$$\lambda_{1/2}^+(\tau) = -\sqrt{-\tau}. \quad (1.75)$$

Pour (1.74) et $b = V$, le signe négatif est encore correct car V est supposé être réel. Nous avons donc

$$\lambda_{1/2}^+ = -\sqrt{-\tau + V}. \quad (1.76)$$

Dans le dernier cas où $b(x, t) = i\partial_x^2 \mathcal{V} - (\partial_x \mathcal{V})^2$, avec \mathcal{V} la fonction de phase définie en (1.57), la conclusion n'est plus possible car le potentiel b est une fonction complexe. La démarche ne s'adapte donc pas. La possibilité de faire le choix (1.74) dans le cadre de la première stratégie sera donc abandonnée.

Finalement, nous avons envisagé quatre stratégies différentes, selon qu'on effectue ou non le changement de jauge $v = e^{-i\mathcal{V}}u$, et qu'on inclut ou non le potentiel dans le symbole principal (choix (1.73) et (1.74)). Parmi ces quatre possibilités, une a déjà été écartée, c'est celle qui consisterait à effectuer le changement de jauge et à inclure le nouveau potentiel $b(x, t)$ dans le symbole principal. Il ne reste que trois stratégies différentes. Pour résumer, les quatre approches possibles sont les suivantes

- (a) Méthode directe, et symbole principal $\lambda_{1/2}^+ = -\sqrt{-\tau}$
- (b) Méthode directe, et symbole principal $\lambda_{1/2}^+ = -\sqrt{-\tau + V}$
- (c) Changement de jauge $v = e^{-i\mathcal{V}}u$, et symbole principal $\lambda_{1/2}^+ = -\sqrt{-\tau}$
- (d) Changement de jauge $v = e^{-i\mathcal{V}}u$, et symbole principal $\lambda_{1/2}^+ = \pm\sqrt{-\tau + b(x, t)}$: solution abandonnée dorénavant.

Cependant, la stratégie (a) ci-dessus correspond en fait à un sous-cas de la stratégie (b). En effet, la recherche d'une condition aux limites se fait sous la condition haute-fréquence, puisque l'asymptotique (1.64) écrite pour Λ^+ est une asymptotique pour $|\tau|$ grand. Or, si on effectue un développement de Taylor à $|\tau|$ grand du symbole principal de la stratégie (b), on retrouve les symboles issus de la stratégie (a), mais à des ordres inférieurs. Notons $\lambda_{1/2-j/2}^{+,a}$ les symboles obtenus avec la stratégie (a), et $\lambda_{1/2-j/2}^{+,b}$ les symboles obtenus avec la stratégie (b). On a, d'une part

$$\begin{aligned} \lambda_{1/2}^{+,a} &= -\sqrt{-\tau}, & \lambda_0^{+,a} &= 0, & \lambda_{-1/2}^{+,a} &= \frac{-V}{2\sqrt{-\tau}}, & \lambda_{-1}^{+,a} &= \frac{i\partial_x V}{4\tau}, \\ \lambda_{-3/2}^{+,a} &= \frac{V^2}{8\sqrt{-\tau}^3} + \frac{\partial_x^2 V}{8\sqrt{-\tau}^3} + \frac{i\partial_t V}{8\sqrt{-\tau}^3}, \end{aligned} \quad (1.77)$$

et d'autre part, en effectuant un développement de Taylor pour $|\tau|$ grand des symboles obtenus par la stratégie (b)

$$\lambda_{1/2}^{+,b} = -\sqrt{-\tau + V} = -\sqrt{-\tau} - \frac{V}{2\sqrt{-\tau}} + \frac{V^2}{8\sqrt{-\tau}^3} + O\left(\frac{1}{\sqrt{-\tau}^5}\right), \quad (1.78)$$

$$\lambda_0^{+,b} = 0, \quad (1.79)$$

$$\lambda_{-1/2}^{+,b} = 0, \quad (1.80)$$

$$\lambda_{-1}^{+,b} = \frac{-i\partial_x V}{4(-\tau + V)} = \frac{i\partial_x V}{4\tau} - \frac{iV\partial_x V}{4\tau^2} + O\left(\frac{1}{\tau^3}\right), \quad (1.81)$$

$$\lambda_{-3/2}^{+,b} = \frac{\partial_x^2 V}{8\sqrt{-\tau + V}^3} + \frac{i\partial_t V}{8\sqrt{-\tau + V}^3} = \frac{\partial_x^2 V}{8\sqrt{-\tau}^3} + \frac{i\partial_t V}{8\sqrt{-\tau}^3} + O\left(\frac{1}{\sqrt{-\tau}^5}\right). \quad (1.82)$$

Ainsi, l'asymptotique donnée par les symboles de la stratégie (a) est une approximation haute-fréquence de l'asymptotique obtenue dans la stratégie (b). Pour cette raison, on ne considérera par la suite que les stratégies (b) et (c).

1.4.4 Calcul de l'asymptotique en fonction du symbole principal

Considérons tout d'abord la première stratégie, aussi appelée changement de jauge. On a vu que dans ce cas, le symbole principal est donné par $\lambda_{1/2}^+ = -\sqrt{-\tau}$, et les coefficients a et b valent $a = 2i\partial_x \mathcal{V}$, $b = i\partial_x^2 \mathcal{V} - (\partial_x \mathcal{V})^2$. Pour déterminer le deuxième symbole λ_0^+ , on résout l'équation (1.70) dans laquelle on identifie les termes d'ordre $1/2$. On obtient

$$i\partial_x \lambda_{1/2}^+ + ia\lambda_{1/2}^+ + 2\lambda_{1/2}^+ \lambda_0^+ = 0,$$

d'où

$$\lambda_0^+ = -\frac{i}{2}a - \frac{i\partial_x \lambda_{1/2}^+}{2\lambda_{1/2}^+} = \partial_x \mathcal{V}.$$

On poursuit en identifiant les termes d'ordre 0 afin d'accéder à $\lambda_{-1/2}^+$

$$\begin{aligned} 2\lambda_{1/2}^+ \lambda_{-1/2}^+ &= b - i\partial_x \lambda_0^+ - ia\lambda_0^+ - \lambda_0^+ \lambda_0^+ + i\partial_\tau \lambda_{1/2}^+ \partial_t \lambda_{1/2}^+ \\ &= i\partial_x^2 \mathcal{V} - (\partial_x \mathcal{V})^2 - i\partial_x^2 \mathcal{V} + 2(\partial_x \mathcal{V})^2 - (\partial_x \mathcal{V})^2, \end{aligned}$$

et donc $\lambda_{-1/2}^+ = 0$. Pour finir, les termes d'ordre $-1/2$ donnent accès à λ_{-1}^+ .

$$i\partial_x \lambda_{-1/2}^+ + ia\lambda_{-1/2}^+ + 2\lambda_{1/2}^+ \lambda_{-1}^+ + 2\lambda_0^+ \lambda_{-1/2}^+ - i\partial_\tau \lambda_{1/2}^+ \partial_t \lambda_0^+ - i\partial_\tau \lambda_0^+ \partial_t \lambda_{1/2}^+ = 0,$$

d'où

$$\lambda_{-1}^+ = \frac{i\partial_\tau \lambda_{1/2}^+ \partial_t \lambda_0^+}{2\lambda_{1/2}^+} = \frac{i\partial_x V}{4\tau}.$$

La proposition suivante résume ces résultats.

Proposition 1.7. *Si le symbole principal est déterminé par le choix $\lambda_{1/2}^+ = -\sqrt{-\tau}$ pour $a = 2i\partial_x \mathcal{V}$ et $b = i\partial_x^2 \mathcal{V} - (\partial_x \mathcal{V})^2$, alors les trois termes suivants dans le développement asymptotique symbolique de λ^+ sont donnés par*

$$\lambda_0^+ = \partial_x \mathcal{V}, \quad \lambda_{-1/2}^+ = 0 \quad \text{et} \quad \lambda_{-1}^+ = \frac{i\partial_x V}{4\tau}. \quad (1.83)$$

Cette situation sera appelée stratégie 1, ou changement de jauge.

La suite des symboles $(\lambda_{1/2-j/2}^+)_{j \in \mathbb{N}^*}$ étant entièrement déterminée une fois $\lambda_{1/2}^+$ fixé, on peut calculer de manière explicite et unifiée tous les coefficients, comme l'indique la proposition suivante.

Proposition 1.8. *Fixons $\lambda_{1/2}^+$ par $\lambda_{1/2}^+(\tau) = -\sqrt{-\tau}$. Alors, la solution du système (1.69) est donnée par*

$$\lambda_0^+ = \frac{1}{2\lambda_{1/2}^+} \left(-i\partial_x \lambda_{1/2}^+ - ia\lambda_{1/2}^+ \right), \quad (1.84)$$

et, pour $j \in \mathbb{N}$, $j \geq 1$, par

$$\begin{aligned} \lambda_{-j/2}^+ &= \frac{1}{2\lambda_{1/2}^+} \left(b\delta_{j,1} - i\partial_x \lambda_{-j/2+1/2}^+ - ia\lambda_{-j/2+1/2}^+ - \sum_{k=1}^j \lambda_{-j/2+k/2}^+ \lambda_{1/2-k/2}^+ \right. \\ &\quad \left. - \sum_{\alpha=1}^{[(j+1)/2]} \frac{(-i)^\alpha}{\alpha!} \sum_{k=0}^{j+1-2\alpha} \partial_\tau^\alpha \lambda_{-j/2+k/2+\alpha}^+ \partial_t^\alpha \lambda_{1/2-k/2}^+ \right), \quad (1.85) \end{aligned}$$

où $\delta_{k,l}$ vaut 1 si $k = l$ et 0 sinon.

Démonstration. Le point de départ est constitué de l'équation (1.70). Pour déterminer $\lambda_{-j/2}^+$, $j \in \llbracket -1, +\infty \rrbracket$, il faut écrire l'équation d'ordre $-j/2+1/2$, et donc identifier les termes d'ordre $-j/2+1/2$. Etudions, pour α fixé, l'ordre du produit $\partial_\tau^\alpha \lambda^+ \partial_t^\alpha \lambda^+$. Le symbole total λ^+ admet un développement asymptotique en symboles homogènes

$$\lambda^+ \sim \sum_{p=1/2}^{-\infty} \lambda_p^+.$$

Le produit $\partial_\tau^\alpha \lambda^+ \partial_t^\alpha \lambda^+$ s'exprime donc sous la forme d'une double somme

$$\partial_\tau^\alpha \lambda^+ \partial_t^\alpha \lambda^+ \sim \sum_{u=1/2}^{-\infty} \sum_{v=1/2}^{-\infty} \partial_\tau^\alpha \lambda_u^+ \partial_t^\alpha \lambda_v^+.$$

D'autre part, à u et v fixés, $\partial_\tau^\alpha \lambda_u^+$ est d'ordre $u - \alpha$, et $\partial_t^\alpha \lambda_v^+$ est d'ordre v , donc le produit des deux est d'ordre $u - \alpha + v$. Un terme de la forme $\partial_\tau^\alpha \lambda_u^+ \partial_t^\alpha \lambda_v^+$ sera d'ordre $-j/2 + 1/2$ si et seulement si u, v et α vérifient la relation $u - \alpha + v = -j/2 + 1/2$. Pour un exposant α fixé, les termes d'ordre $-j/2 + 1/2$ dans $\partial_\tau^\alpha \lambda^+ \partial_t^\alpha \lambda^+$ sont donc donnés par

$$\sum_{\substack{u,v \\ u-\alpha+v=-j/2+1/2}} \partial_\tau^\alpha \lambda_u^+ \partial_t^\alpha \lambda_v^+.$$

En écrivant $v = 1/2 - k/2$ avec $k \in \mathbb{N}$ et en exprimant u en fonction de α, j et v , cette somme se réécrit

$$\sum_{k=0}^{+\infty} \partial_\tau^\alpha \lambda_{-j/2+k/2+\alpha}^+ \partial_t^\alpha \lambda_{1/2-k/2}^+.$$

Toutefois cette somme est une somme finie, puisque le premier indice $-j/2 + k/2 + \alpha$ doit rester plus petit que $1/2$, ce qui impose $k \leq j - 2\alpha + 1$. Finalement, l'équation (1.70) devient, en lisant les termes d'ordre $-j/2 + 1/2$,

$$i\partial_x \lambda_{1/2-j/2}^+ + ia\lambda_{1/2-j/2}^+ + \sum_{\alpha=0}^{+\infty} \frac{(-i)^\alpha}{\alpha!} \sum_{k=0}^{j-2\alpha+1} \partial_\tau^\alpha \lambda_{k/2-j/2+\alpha}^+ \partial_t^\alpha \lambda_{1/2-k/2}^+ \sim -\tau\delta_{j,-1} + b\delta_{j,1}$$

et en remarquant que $\delta_{1,-j/2+1/2} = \delta_{j,-1}$ et $\delta_{0,-j/2+1/2} = \delta_{j,1}$. On isole ensuite les termes sans dérivation ($\alpha = 0$) dans la somme, puis on met en évidence ($k = 0$ et $k = j + 1$) parmi ces termes ceux qui contiennent $\lambda_{-j/2}^+$

$$\begin{aligned} i\partial_x \lambda_{1/2-j/2}^+ + ia\lambda_{1/2-j/2}^+ + \lambda_{-j/2}^+ \lambda_{1/2}^+ + \sum_{k=1}^j \lambda_{k/2-j/2}^+ \lambda_{1/2-k/2}^+ + \lambda_{1/2}^+ \lambda_{-j/2}^+ \\ + \sum_{\alpha=1}^{+\infty} \frac{(-i)^\alpha}{\alpha!} \sum_{k=0}^{j-2\alpha+1} \partial_\tau^\alpha \lambda_{k/2-j/2+\alpha}^+ \partial_t^\alpha \lambda_{1/2-k/2}^+ \sim -\tau\delta_{j,-1} + b\delta_{j,1}. \end{aligned}$$

Finalement, $\lambda_{-j/2}^+$ s'exprime en fonction des termes d'ordre supérieur

$$\begin{aligned} \lambda_{-j/2}^+ = \frac{1}{2\lambda_{1/2}^+} \left(-\tau\delta_{j,-1} + b\delta_{j,1} - i\partial_x \lambda_{1/2-j/2}^+ - ia\lambda_{1/2-j/2}^+ - \sum_{k=1}^j \lambda_{k/2-j/2}^+ \lambda_{1/2-k/2}^+ \right. \\ \left. - \sum_{\alpha=1}^{+\infty} \frac{(-i)^\alpha}{\alpha!} \sum_{k=0}^{j-2\alpha+1} \partial_\tau^\alpha \lambda_{k/2-j/2+\alpha}^+ \partial_t^\alpha \lambda_{1/2-k/2}^+ \right). \end{aligned}$$

La somme indiquée par α doit enfin être limitée à $\alpha \leq \frac{j+1}{2}$ pour que l'indice $k/2 - j/2 + \alpha$ (maximal pour $k = j + 1 - 2\alpha$) ne dépasse pas $1/2$. \square

On peut vérifier qu'on retrouve les résultats de la proposition 1.7 pour $j = 0, 1, 2$.

On étudie ensuite la deuxième stratégie, appelée méthode directe, dans laquelle le symbole principal est fixé par (1.76) et où on a $a = 0$, $b = V$. Le principe est le même que dans la stratégie de changement de jauge, mais on travaille désormais avec des symboles inhomogènes, ce qui rend plus délicate l'identification des termes d'un ordre fixé. En effet, lorsqu'un symbole est homogène, ses dérivées par rapport à chacune des variables sont homogènes également, et on peut prévoir leur ordre (qui est conservé pour des dérivées par rapport à x ou t , et diminué d'un pour une dérivée par rapport à τ). En revanche, pour un symbole $p(x, t, \tau)$ qui n'est pas homogène, comme c'est le cas pour $\lambda_{1/2}^+$ dans le choix (1.76), les dérivées obtenues peuvent être composées de plusieurs termes d'homogénéités différentes. Si p est d'ordre j , on peut affirmer que $\partial_x p$ et $\partial_t p$ seront *au plus* d'ordre j , mais ces symboles peuvent être d'ordre inférieur, ou contenir un terme d'ordre inférieur. Similairement, $\partial_\tau p$ est *au plus* d'ordre $j - 1$, sans qu'on ne puisse en dire davantage en toute généralité. A titre d'exemple, l'étude des dérivées de $\lambda_{1/2}^+$ montre que

$$\partial_x \lambda_{1/2}^+ = \frac{-\partial_x V}{2\sqrt{-\tau + V}}, \quad \partial_t \lambda_{1/2}^+ = \frac{-\partial_t V}{2\sqrt{-\tau + V}}, \quad \partial_\tau \lambda_{1/2}^+ = \frac{1}{2\sqrt{-\tau + V}}. \quad (1.86)$$

On voit ici que les trois dérivées sont d'ordre $-1/2$, alors que dans la stratégie précédente les dérivées par rapport à x et à t étaient d'ordre $1/2$. La sélection dans (1.70) des termes d'un ordre fixé demandera plus de soin, l'ordre de chaque terme devant être étudié en fonction de son expression.

Calculons le terme λ_0^+ . Pour l'obtenir, il faut extraire de (1.70) l'équation liant les termes d'ordre $1/2$. Compte tenu des expressions données par (1.86), aucun terme $i\partial_x \lambda_{j/2}^+$ n'est d'ordre $1/2$, donc aucun de ces termes n'entre en compte pour le calcul de λ_0^+ . Pour obtenir des termes d'ordre $1/2$ dans la somme, il faut prendre $\alpha = 0$ (car pour $\alpha = 1$, le terme d'ordre le plus élevé est $\partial_\tau \lambda_{1/2}^+ \partial_t \lambda_{1/2}^+$ qui est déjà d'ordre -1). L'équation concernant les termes d'ordre $1/2$ se réduit donc à

$$2\lambda_{1/2}^+ \lambda_0^+ = 0,$$

qui conduit à $\lambda_0^+ = 0$. Pour déterminer $\lambda_{-1/2}^+$, on recherche les termes d'ordre 0 dans (1.70)

$$2\lambda_{1/2}^+ \lambda_{-1/2}^+ + \lambda_0^+ \lambda_0^+ = 0,$$

d'où $\lambda_{-1/2}^+ = 0$. Identifions les termes d'ordre $-1/2$ pour accéder à λ_{-1}^+ . Le terme dérivé $i\partial_x \lambda_{1/2}^+$, mis de côté lors du calcul de λ_0^+ , est d'ordre $-1/2$. On l'incorpore donc à cette équation. Ensuite, il ne reste à prendre en compte que des termes de la forme $\lambda_j^+ \lambda_k^+$ puisque les suivants $\partial_\tau \lambda_j^+ \partial_t \lambda_k^+$ sont d'ordre -1 et moins, et seront pris en compte plus tard. Il vient

$$i\partial_x \lambda_{1/2}^+ + 2\lambda_{1/2}^+ \lambda_{-1}^+ + 2\lambda_0^+ \lambda_{-1/2}^+ = 0,$$

d'où

$$\lambda_{-1}^+ = \frac{-i\partial_x \lambda_{1/2}^+}{2\lambda_{1/2}^+} = -\frac{i}{4} \frac{\partial_x V}{-\tau + V}.$$

A titre d'exemple, poursuivons avec le calcul de $\lambda_{-3/2}^+$, afin de mettre en évidence les passages délicats de cette procédure. On recherche les termes d'ordre -1 . Pour le terme $i\partial_x \lambda_{1/2}^+$, les termes d'ordre -1 pourraient venir de $\partial_x \lambda_{1/2}^+$, $\partial_x \lambda_0^+$, $\partial_x \lambda_{-1/2}^+$ ou $\partial_x \lambda_{-1}^+$. Les deux termes centraux sont nuls, $\partial_x \lambda_{1/2}^+$ était d'ordre $-1/2$ et a déjà été utilisé pour le calcul de λ_{-1}^+ ; quant à λ_{-1}^+ , on a

$$\partial_x \lambda_{-1}^+ = -\frac{i}{4} \frac{\partial_x^2 V}{-\tau + V} + \frac{i}{4} \frac{(\partial_x V)^2}{(-\tau + V)^2}.$$

Ainsi, $\partial_x \lambda_{-1}^+$ est somme de deux termes d'ordres différents, l'un d'ordre -1 , et l'autre d'ordre -2 . Ces deux termes seront donc utilisés chacun à des étapes différentes du calcul. En l'occurrence, le terme d'ordre -1 , noté $(\partial_x \lambda_{-1}^+)_{-1}$ intervient dans le calcul de $\lambda_{-3/2}^+$. Le terme d'ordre -2 , noté $(\partial_x \lambda_{-1}^+)_{-2}$ serait utilisé ultérieurement dans le calcul de $\lambda_{-5/2}^+$ (nous ne détaillerons pas ces calculs). Concernant les termes de composition, on y trouve aussi des termes d'ordre -1 , mais seulement avec $\partial_\tau \lambda_{1/2}^+ \partial_t \lambda_{1/2}^+$ (les deux dérivées étant toutes les deux d'ordre $-1/2$, leur produit est bien d'ordre -1). On obtient finalement pour équation

$$(i\partial_x \lambda_{-1}^+)_{-1} + 2\lambda_{1/2}^+ \lambda_{-3/2}^+ + 2\lambda_0^+ \lambda_{-1}^+ + (\lambda_{-1/2}^+)^2 - i\partial_\tau \lambda_{1/2}^+ \partial_t \lambda_{1/2}^+ = 0.$$

On en déduit $\lambda_{-3/2}^+$

$$\lambda_{-3/2}^+ = \frac{1}{2\lambda_{1/2}^+} \left(-i(\partial_x \lambda_{-1}^+)_{-1} + i\partial_\tau \lambda_{1/2}^+ \partial_t \lambda_{1/2}^+ \right),$$

c'est-à-dire

$$\lambda_{-3/2}^+ = \frac{1}{8} \frac{\partial_x^2 V}{\sqrt{-\tau + V}^3} + \frac{i}{8} \frac{\partial_t V}{\sqrt{-\tau + V}^3}.$$

La proposition suivante résume les symboles qui seront utilisés par la suite (les quatre premiers).

Proposition 1.9. *Si le symbole principal est déterminé par $\lambda_{1/2}^+ = -\sqrt{-\tau + V}$ pour $a = 0$ et $b = V$, alors les trois termes suivants dans le développement asymptotique de λ^+ sont*

$$\lambda_0^+ = 0, \quad \lambda_{-1/2}^+ = 0, \quad \text{et} \quad \lambda_{-1}^+ = \frac{-i}{4} \frac{\partial_x V}{-\tau + V}. \quad (1.87)$$

Cette situation sera appelée stratégie 2, ou méthode directe.

Remarque 1.1. Dans le cadre de la deuxième stratégie, on ne peut pas espérer obtenir une expression générale similaire à (1.85) de tous les symboles jusqu'à un ordre donné. Cela provient de l'inhomogénéité de $\lambda_{1/2}^+$ et des symboles suivants, car il n'existe alors plus de règle déterminant les ordres des dérivées des symboles, certaines de ces dérivées pouvant être la somme de plusieurs termes d'ordres différents, qui seront utilisés à des étapes différentes du calcul.

1.4.5 L'exemple du potentiel linéaire : comparaison des symboles

On a vu que la condition aux limites transparente faisait intervenir l'opérateur Λ^+ . Or le symbole total de Λ^+ représente l'opérateur de manière exacte; donc, en théorie, accéder au symbole total permet d'écrire la condition aux limites transparente. Cependant, le symbole total est généralement impossible à expliciter dans sa globalité. On accède seulement à son développement en symboles homogènes (dont l'intérêt est précisément d'être facilement calculables dès lors que le potentiel est connu). Pour être utilisable, ce développement est tronqué en ne gardant que les premiers termes. L'idée de cette section est d'étudier numériquement, dans un cas particulier où le symbole total λ^+ est connu, la qualité de l'approximation faite lorsqu'on remplace λ^+ par les premiers termes de son développement asymptotique.

Considérons le potentiel linéaire $V(x) = x$. Par application de la transformée de Fourier en temps sur l'équation (1.1), on obtient

$$\partial_x^2 \hat{u} + (x - \tau) \hat{u} = 0. \quad (1.88)$$

Ainsi, à τ fixé, $x \mapsto \hat{u}(x, \tau)$ vérifie l'équation différentielle scalaire d'ordre deux en espace $y'' + (x - \tau)y = 0$. D'après [65], la solution sortante est proportionnelle à la fonction d'Airy de première espèce Ai

$$\hat{u}(x, \tau) = \alpha \text{Ai} \left((x - \tau)e^{-i\pi/3} \right), \quad (1.89)$$

où α est une constante complexe. On va mettre à profit la connaissance de \hat{u} pour expliciter le symbole total de Λ^+ . Plaçons-nous dans la stratégie deux. La condition aux limites étant écrite directement pour u sans effectuer le changement d'inconnue, l'opérateur Λ^+ est tel que

$$\partial_{\mathbf{n}}u + i\Lambda^+u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T.$$

Par définition du symbole d'un opérateur, on a $\mathcal{F}_t(\Lambda^+u) = \lambda^+ \mathcal{F}_t(u)$, donc son symbole total λ^+ vérifie l'équation dans l'espace de Fourier

$$\partial_{\mathbf{n}}\hat{u} + i\lambda^+\hat{u} = 0. \quad (1.90)$$

Pour exprimer $\partial_{\mathbf{n}}\hat{u}$ en fonction de \hat{u} , on dérive l'expression de \hat{u} donnée par (1.89). En $x = x_r$, on a

$$\partial_x \hat{u}(x, \tau) = \alpha e^{-i\pi/3} \text{Ai}' \left((x - \tau)e^{-i\pi/3} \right),$$

et, en introduisant artificiellement $\hat{u}(x, \tau)$,

$$\partial_x \hat{u}(x, \tau) = e^{-i\pi/3} \frac{\text{Ai}' \left((x - \tau)e^{-i\pi/3} \right)}{\text{Ai} \left((x - \tau)e^{-i\pi/3} \right)} \hat{u}(x, \tau).$$

En comparant à (1.90), on peut ainsi identifier le symbole total exact

$$\lambda^+(x, \tau) = e^{i\pi/6} \frac{\text{Ai}' \left((x - \tau)e^{-i\pi/3} \right)}{\text{Ai} \left((x - \tau)e^{-i\pi/3} \right)}. \quad (1.91)$$

Or, dans la stratégie deux, les premiers symboles du développement asymptotique de λ^+ sont donnés par (1.87), ce qui donne pour $V = x$ les symboles suivants

$$\lambda_{1/2}^+ = -\sqrt{-\tau + x}, \quad \lambda_0^+ = 0, \quad \lambda_{-1/2}^+ = 0, \quad \lambda_{-1}^+ = \frac{-i}{4} \frac{1}{-\tau + x}.$$

On définit alors les nouveaux symboles

$$\sigma(x, \tau) = i\lambda^+(x, \tau) = e^{2i\pi/3} \frac{\text{Ai}' \left((x - \tau)e^{-i\pi/3} \right)}{\text{Ai} \left((x - \tau)e^{-i\pi/3} \right)}, \quad (1.92a)$$

$$\sigma_1(x, \tau) = i\lambda_{1/2}^+(x, \tau) = -i\sqrt{-\tau + x}, \quad (1.92b)$$

$$\sigma_4(x, \tau) = i \left(\lambda_{1/2}^+ + \lambda_0^+ + \lambda_{-1/2}^+ + \lambda_{-1}^+ \right) (x, \tau) = \sigma_1(x, \tau) + \frac{1}{4} \frac{1}{-\tau + x}. \quad (1.92c)$$

Le nouveau symbole σ est directement relié au symbole total de Λ^+ , alors que σ_1 et σ_4 sont liés aux approximations de λ^+ d'ordre 1 et 4 respectivement. Nous allons comparer σ à ses approximations σ_1 et σ_4 , d'abord de manière théorique, puis de manière numérique.

Les développements asymptotiques de la fonction d'Airy sont connus, on peut les trouver dans [65] et [1]. D'après [65], on a pour $|\tau|$ grand l'approximation

$$\frac{\text{Ai}' \left((-\tau + x)e^{-i\pi/3} \right)}{\text{Ai} \left((-\tau + x)e^{-i\pi/3} \right)} \simeq -e^{-i\pi/6} \sqrt{-\tau + x}. \quad (1.93)$$

Ici, on note \simeq le symbole correspondant à l'équivalence classique entre deux fonctions, afin d'éviter les confusions par rapport à l'équivalence en termes de symboles, qui elle est notée \sim . On obtient donc un équivalent du symbole σ

$$\sigma \simeq -i\sqrt{-\tau + x},$$

qui est exactement σ_1 . Pour aller plus loin et obtenir le terme suivant du développement de σ , on se réfère à [1] (en particulier le chapitre 10, propriétés 10.4.58, 10.4.59 et 10.4.61 p.448), qui fournit les développements asymptotiques de la fonction d'Airy et de sa dérivée, dès lors que $|\arg(z)| < \pi$

$$\text{Ai}(z) \simeq \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} z^{-1/4} e^{-\zeta} \sum_{k=0}^{+\infty} (-1)^k c_k \zeta^{-k}, \quad (1.94)$$

et

$$\text{Ai}'(z) \simeq -\frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} z^{1/4} e^{-\zeta} \sum_{k=0}^{+\infty} (-1)^k d_k \zeta^{-k}, \quad (1.95)$$

avec $\zeta = \frac{2}{3}z^{3/2}$, et les coefficients c_k et d_k donnés par

$$c_0 = 1, \quad c_k = \frac{\Gamma(3k + 1/2)}{54^k k! \Gamma(k + 1/2)} = \frac{(2k + 1)(2k + 3) \dots (6k - 1)}{216^k k!} \quad \text{pour } k \geq 1, \quad (1.96)$$

$$d_0 = 1, \quad d_k = -\frac{6k + 1}{6k - 1} c_k, \quad \text{pour } k \geq 1. \quad (1.97)$$

On peut alors déterminer l'asymptotique du quotient Ai' / Ai pour $|\zeta|$ grand, puis remplacer ζ par $\frac{2}{3}z^{3/2}$ et on obtient pour $|z|$ grand

$$e^{2i\pi/3} \frac{\text{Ai}'(z)}{\text{Ai}(z)} \simeq -e^{2i\pi/3} z^{1/2} - e^{2i\pi/3} \frac{1}{4} z^{-1}.$$

En substituant $z = (-\tau + x)e^{-i\pi/3}$ dans ce qui précède, on obtient un équivalent à deux termes de σ , pour $|\tau|$ grand

$$\sigma \simeq i\sqrt{-\tau + x} + \frac{1}{4} \frac{1}{-\tau + x}.$$

On constate ainsi que l'approximation de λ^+ à deux termes correspond exactement à σ_4 . Ces résultats confortent l'intuition : les symboles du développement asymptotique de λ^+ au sens du calcul pseudodifférentiel, obtenus par des techniques de calcul symbolique, coïncident avec les premiers termes du développement de ce symbole, au sens de l'analyse classique pour $|\tau|$ grand.

Passons maintenant à l'étude numérique. Nous allons analyser la qualité de l'approximation de σ par σ_1 et σ_4 en fonction de τ , qui s'assimile à une fréquence. Pour comparer ces trois symboles donnés par (1.92), on trace, à x_r fixé, les courbes de σ , σ_1 et σ_4 en fonction de τ , lorsque τ décrit une gamme de fréquences, par exemple $[-50; 50]$. Commençons par considérer le cas $-\tau + x_r > 0$. Le point de frontière x_r décrit l'intervalle $[-10; 10]$ avec un pas uniforme 0.5. Comme $-\tau + x_r$ est un réel positif, le symbole σ_1 est un imaginaire pur à partie imaginaire négative. En revanche, σ_4 est un complexe de partie réelle non nulle. Puisque σ n'est pas un imaginaire pur, on peut supposer que σ_4 constitue une meilleure approximation de σ que σ_1 . C'est ce que confirme la figure 1.4(a). Le symbole σ_4 semble très bien approcher σ sur l'ensemble de la plage de fréquences considérée, alors que σ_1 , qui reste imaginaire pur, n'en est qu'une approximation grossière, qui ne devient acceptable qu'en très haute fréquence.

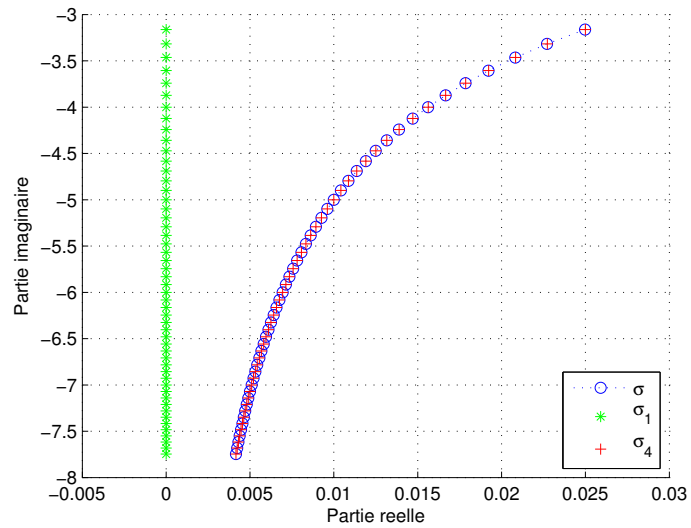
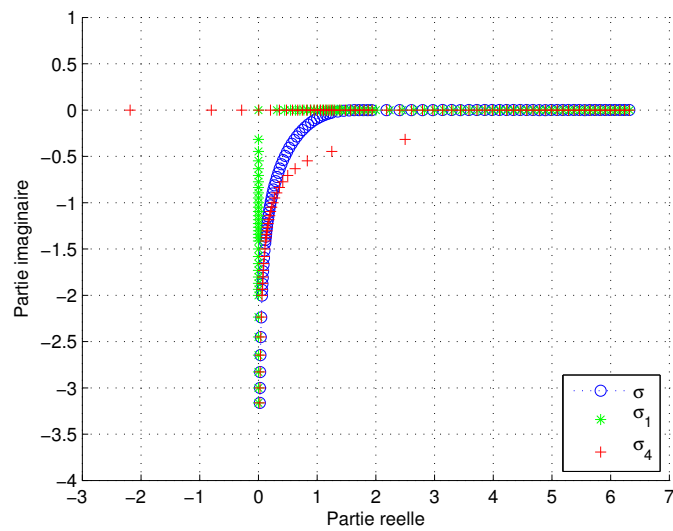
(a) Comparaison pour τ négatif, $\tau \in (-50; 0)$.(b) Comparaison pour τ positif, $\tau \in (0; 50)$.

FIGURE 1.4 – Comparaison des symboles exact σ et approchés σ_1 et σ_4 dans le plan complexe. Le potentiel est $V(x) = x$ et le point frontière est $x_r = 10$.

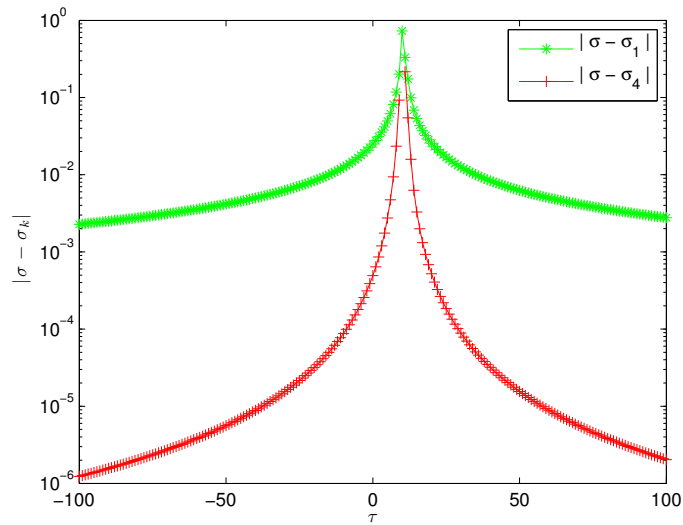


FIGURE 1.5 – Représentation logarithmique de l'erreur en fonction de τ , pour $x_r = 10$.

Le même travail est effectué pour $-\tau + x_r$ négatif. Le point frontière x_r décrit toujours l'intervalle $[-10; 10]$. Le terme $\sqrt{-\tau + x_r}$ est un imaginaire pur à partie réelle positive, donc σ_1 est réel positif. Par ailleurs, le terme correctif $\frac{1}{4-\tau+x_r}$ est un réel positif dès que $\tau > x_r$. Finalement, pour τ positif les symboles approchés σ_1 et σ_4 sont des réels positifs. Cependant, la condition $-\tau + x_r < 0$ n'est vérifiée que lorsque τ n'est pas trop petit par rapport à x_r . En effet, lorsque $x_r > 0$ et $0 < \tau < x_r$ (on est donc en basse fréquence), on a $\sigma_1 \in i\mathbb{R}^+$ et $\sigma_4 \in i\mathbb{R}^- + \mathbb{R}^+$. C'est ce qu'on observe sur la figure 1.4(b) pour $x_r = 10$ et τ variant de 0 à 50. Dans cette zone de fréquences, les approximations σ_1 et σ_4 ne sont pas très bonnes. En haute fréquence en revanche, tous les symboles comparés sont réels, et les symboles approchés σ_1 et σ_4 constituent une bonne approximation de σ . Il en ressort que le symbole σ_4 constitue une amélioration significative du premier équivalent σ_1 . De plus, l'approximation est d'autant meilleure qu'on se place en haute fréquence. *A contrario*, au voisinage de $\tau = x_r$ l'approximation réalisée n'est pas de bonne qualité, que ce soit pour σ_1 ou pour σ_4 .

Finalement, on représente sur la figure 1.5 les courbes d'erreur en fonction de τ , en échelle logarithmique. Pour les deux symboles σ_1 et σ_4 , l'erreur décroît quand $|\tau|$ est grand, ce qui est cohérent avec l'hypothèse haute-fréquence sous laquelle le développement asymptotique de Λ^+ est effectué. Cette hypothèse haute-fréquence explique aussi que l'approximation soit mauvaise lorsque τ est proche du point critique x_r . En haute-fréquence, σ_4 est une meilleure approximation asymptotique de σ que σ_1 . Ainsi, en $|\tau| = 100$ on atteint une précision de l'ordre de 5×10^{-3} avec σ_1 , contre une précision de l'ordre de 10^{-6} pour σ_4 . Cela laisse augurer que les conditions aux limites construites en prenant les quatre premiers termes du développement asymptotique de λ^+ devraient se révéler plus précises que celles construites en n'en retenant qu'un seul.

1.5 Etude du choix ABC_1^M

1.5.1 Interprétation des symboles et choix de la condition

Dans la section précédente deux stratégies ont été mises en évidence, et pour chacune de ces deux stratégies les symboles asymptotiques ont été calculés (propositions 1.7 et 1.9). Ces symboles doivent ensuite être traduits en termes d'opérateurs afin d'explicitier la condition aux limites qu'ils décrivent.

Lorsque V est un potentiel réel régulier, la norme L^2 en espace de la solution u du problème non borné (1.1) est conservée (théorème 1.1). Pour la solution u_Ω du problème borné (1.3) sur le domaine borné Ω , avec condition aux limites artificielle, on s'attend à ce que la norme L^2 de u_Ω à tout instant t soit bornée par la norme L^2 de u_0 (et non égale, puisqu'une partie de l'onde sort du domaine). Cela est notamment vérifié [10] dans le cas sans potentiel avec la condition transparente (1.6). Le cœur de la preuve tient aux propriétés de symétrie de la condition aux limites artificielle et des opérateurs mis en jeu.

Les propriétés de stabilité que nous pouvons espérer obtenir avec les conditions aux limites adaptées à un potentiel sont basées sur le lemme suivant. Dans ce lemme, on constate que la symétrie des opérateurs joue un rôle crucial, comme en témoigne la preuve.

Lemme 1.10. *Soient $\varphi \in H^{1/4}(0, T)$ et $\psi \in L^2(0, T)$ deux fonctions prolongées par zéro pour les temps $s > T$. On a les propriétés suivantes*

$$\operatorname{Re} \left(e^{i\pi/4} \int_0^{+\infty} \overline{\varphi} \partial_t^{1/2} \varphi dt \right) \geq 0, \quad (1.98)$$

et

$$\operatorname{Re} \left(\int_0^{+\infty} \overline{\psi} I_t \psi dt \right) = 0. \quad (1.99)$$

Démonstration. La preuve de ce lemme est inspirée de [18] et [25]. On applique l'identité de Plancherel pour la transformée de Laplace à φ et $\partial_t^{1/2} \varphi$ en utilisant $\mathcal{L}(\partial_t^{1/2} u)(s) = \sqrt{s} \mathcal{L}(u)(s)$. On a

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} \overline{\varphi(s)} \partial_s^{1/2} \varphi(s) ds &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\mathcal{L}(\varphi)(iv)} \mathcal{L}(\partial_s^{1/2} \varphi)(iv) dv \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\mathcal{L}(\varphi)(iv)} \sqrt{iv} \mathcal{L}(\varphi)(iv) dv \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{+\infty} |\mathcal{L}(\varphi)(iv)|^2 e^{i\pi/4} \sqrt{v} dv + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^0 |\mathcal{L}(\varphi)(iv)|^2 e^{-i\pi/4} \sqrt{-v} dv. \end{aligned}$$

Ainsi, nous obtenons

$$e^{i\pi/4} \int_0^{+\infty} \overline{\varphi(s)} \partial_s^{1/2} \varphi(s) ds = \frac{i}{2\pi} \int_0^{+\infty} |\mathcal{L}(\varphi)(iv)|^2 \sqrt{v} dv + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^0 |\mathcal{L}(\varphi)(iv)|^2 \sqrt{-v} dv.$$

Or, les deux intégrales apparaissant dans le membre de droite sont des réels positifs. Le membre de gauche est donc somme d'un élément de $i\mathbb{R}^+$ et d'un élément de \mathbb{R}^+ ; en particulier, il est de partie réelle positive, ce qui assure (1.98).

D'autre part, nous avons

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} \overline{\psi(s)} I_s \psi(s) ds &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\mathcal{L}(\psi(iv))} \mathcal{L}(I_s \psi)(iv) dv \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\mathcal{L}(\psi(iv))} \frac{\mathcal{L}(\psi)(iv)}{iv} dv \\ &= \frac{-i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} |\mathcal{L}(\psi)(iv)|^2 \frac{1}{v} dv. \end{aligned}$$

Ce deuxième terme étant imaginaire pur, l'égalité (1.99) est prouvée, ce qui achève la démonstration du lemme 1.10. \square

Dans l'interprétation en termes d'opérateurs des symboles calculés précédemment, on veillera donc, lorsque cela sera possible, à privilégier des opérateurs présentant le même genre de symétries.

Le développement asymptotique de λ^+ nous donne accès au symbole principal de l'opérateur de Dirichlet-to-Neumann, puis à ses symboles secondaires. Chacun de ces symboles est en fait le symbole principal d'un opérateur qui reste à déterminer. Or pour un symbole $p(x, t, \tau)$ donné, il n'y a pas unicité de l'opérateur $P(x, t, \partial_t)$ dont p est le symbole principal. Il y aura donc plusieurs possibilités pour interpréter l'opérateur associé à chacun des symboles du développement de λ^+ .

Considérons pour commencer la première stratégie, décrite par (1.75). Le symbole principal $\lambda_{1/2}^+ = -\sqrt{-\tau}$ est naturellement interprété comme $-e^{i\pi/4} \partial_t^{1/2}$. Le symbole $\lambda_0^+ = \partial_x \mathcal{V}$ est celui de l'opérateur de multiplication $\partial_x \mathcal{V}$. Le troisième symbole, $\lambda_{-1/2}^+$, est nul. Enfin, le dernier symbole étudié est

$$\lambda_{-1}^+ = \frac{i \partial_x V}{4\tau}.$$

Le symbole $\frac{1}{i\tau}$ est associé à I_t , on peut donc voir λ_{-1}^+ comme le symbole principal de l'opérateur A_{-1} défini par

$$A_{-1}v = -\frac{\partial_x V}{4} I_t v.$$

Dans ce cas, λ_{-1}^+ est à la fois le symbole principal et le symbole total de A_{-1} . Cependant, avec ce choix, la condition aux limites sur $u = v e^{i\mathcal{V}}$ comporterait un terme de la forme

$$-i \frac{\partial_x V}{4} e^{i\mathcal{V}} I_t (e^{-i\mathcal{V}} u),$$

qui ne correspond pas à un opérateur symétrique car, sauf cas trivial, $\partial_x V$ n'est pas constant. Il faut donc s'arranger pour symétriser le terme $\partial_x V$. Cela n'est possible que si $\partial_x V$, et donc le potentiel V , est un potentiel réel (on verra plus loin que pour la preuve de stabilité, il faudra de plus supposer que le signe de $\partial_x V$ ne dépend pas du temps). Dans ce cas, on sépare $\partial_x V$ en son signe et sa valeur absolue, et on symétrise cette dernière, ce qui s'écrit

$$\partial_x V = \text{sg}(\partial_x V) |\partial_x V| = \text{sg}(\partial_x V) \sqrt{|\partial_x V|} \sqrt{|\partial_x V|}, \quad (1.100)$$

où sg désigne la fonction signe

$$\text{pour } x \in \mathbb{R}, \quad \text{sg}(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0, \\ 0 & \text{si } x = 0, \\ -1 & \text{si } x < 0. \end{cases}$$

On note que l'écriture (1.100) n'est complètement symétrique que si le terme $\text{sg}(\partial_x V)$ est une constante, du moins par rapport au temps (puisque la condition aux limites est écrite en un point $x_{\ell,r}$ fixé). C'est néanmoins une hypothèse qui reste facilement vérifiable pour un potentiel donné, et qui en pratique sera très souvent vérifiée. Finalement, l'écriture symétrique de λ_{-1}^+ est

$$\lambda_{-1}^+ = \frac{1}{4} \text{sg}(\partial_x V) \sqrt{|\partial_x V|} \frac{i}{\tau} \sqrt{|\partial_x V|},$$

qu'on interprète alors naturellement comme le symbole principal de B_{-1} défini par

$$B_{-1}v = -\frac{1}{4} \text{sg}(\partial_x V) \sqrt{|\partial_x V|} I_t \left(\sqrt{|\partial_x V|} v \right).$$

En effet, l'opérateur B_{-1} , tout comme A_{-1} a pour symbole principal λ_{-1}^+ , comme l'indique la proposition qui suit.

Proposition 1.11. *Soit $V = V(x, t)$ un potentiel réel. Soient A_{-1} et B_{-1} les opérateurs définis par*

$$A_{-1}w = -\frac{\partial_x V}{4} I_t w, \quad (1.101)$$

$$B_{-1}w = -\text{sg}(\partial_x V) \frac{\sqrt{|\partial_x V|}}{2} I_t \left(\frac{\sqrt{|\partial_x V|}}{2} w \right). \quad (1.102)$$

Alors, les deux opérateurs A_{-1} et B_{-1} ont pour symbole principal λ_{-1}^+ . De plus, on a l'approximation

$$A_{-1} = B_{-1} \quad \text{mod } OPS_S^{-2}. \quad (1.103)$$

Démonstration. Par application du théorème de composition (proposition 1.4) dans le cas multiplication d'un opérateur par une fonction (1.55), on a

$$\sigma(A_{-1}) = \sigma \left(-\frac{\partial_x V}{4} I_t \right) = -\frac{\partial_x V}{4} \sigma(I_t) = \frac{\partial_x V}{4} \frac{i}{\tau}.$$

Donc le symbole principal de A_{-1} est égal à son symbole total et vaut λ_{-1}^+ .

Calculons à présent le symbole principal de B_{-1} . L'opérateur B_{-1} est la composée de la fonction $-\text{sg}(\partial_x V) \frac{\sqrt{|\partial_x V|}}{2}$ par l'opérateur $C = I_t \left(\frac{\sqrt{|\partial_x V|}}{2} \cdot \right)$. Son symbole total vérifie donc

$$\sigma(B_{-1}) = -\text{sg}(\partial_x V) \frac{\sqrt{|\partial_x V|}}{2} \sigma(C),$$

et son symbole principal est directement relié au symbole principal de C

$$\sigma_P(B_{-1}) = -\text{sg}(\partial_x V) \frac{\sqrt{|\partial_x V|}}{2} \sigma_P(C).$$

Pour calculer le symbole principal de C , qui est à son tour la composée de deux opérateurs, on fait de nouveau appel au théorème de composition mais dans le cas général (1.54). On en déduit que le symbole total de C est

$$\sigma(C) \sim \sum_{\alpha=0}^{+\infty} \frac{(-i)^\alpha}{\alpha!} \partial_\tau^\alpha \left(\frac{1}{i\tau} \right) \partial_t^\alpha \left(\frac{\sqrt{|\partial_x V|}}{2} \right). \quad (1.104)$$

Le symbole principal de C est alors obtenu en considérant le premier terme de cette somme

$$\sigma_P(C) = -\frac{i}{\tau} \frac{\sqrt{|\partial_x V|}}{2}.$$

On revient à B_{-1}

$$\sigma_P(B_{-1}) = -\text{sg}(\partial_x V) \frac{\sqrt{|\partial_x V|}}{2} \left(\frac{-i}{\tau} \right) \frac{\sqrt{|\partial_x V|}}{2} = \frac{i}{4} \frac{\partial_x V}{\tau}.$$

Les deux opérateurs A_{-1} et B_{-1} ont donc bien le même symbole principal λ_{-1}^+ , ce qui termine la première partie de la preuve.

Il reste à montrer l'égalité (1.103) qui exprime que l'opérateur $A_{-1} - B_{-1}$ est au plus d'ordre -2 en temps. L'opérateur A_{-1} admet λ_{-1}^+ pour symbole total, tandis que λ_{-1}^+ n'est que le symbole principal de B_{-1} . Le terme suivant dans le développement asymptotique en symboles homogènes de B_{-1} , noté $\sigma_{-2}(B)$, est obtenu à partir du deuxième terme de la somme (1.104)

$$\sigma_{-2}(B_{-1}) = -\text{sg}(\partial_x V) \frac{\sqrt{|\partial_x V|}}{2} \partial_\tau \left(\frac{1}{i\tau} \right) \partial_t \left(\frac{\sqrt{|\partial_x V|}}{2} \right) = -i \text{sg}(\partial_x V) \frac{\sqrt{|\partial_x V|}}{4} \partial_t \left(\sqrt{|\partial_x V|} \right) \frac{1}{\tau^2}.$$

Le terme suivant est donc un terme d'ordre -2 en τ , d'où

$$\sigma(A_{-1}) = \sigma(B_{-1}) \quad \text{mod } S_S^{-2},$$

et les opérateurs associés d'un opérateur pseudodifférentiel d'ordre -2

$$A_{-1} = B_{-1} \quad \text{mod } OPS_S^{-2},$$

ce qui achève la preuve. \square

On peut donc considérer que $Op(\lambda_{-1}^+) = A_{-1}$, ou que $Op(\lambda_{-1}^+) = B_{-1} \text{ mod } OPS_S^{-2}$. Parmi ces deux opérateurs, B_{-1} est symétrique et A_{-1} ne l'est pas. C'est donc B_{-1} qu'on choisira par la suite. L'interprétation de λ_{-1}^+ en tant que symbole principal d'un opérateur est finalement

$$Op(\lambda_{-1}^+) v = -\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V) \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}}{2} I_t \left(\frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}}{2} v \right), \quad (1.105)$$

bien que cette égalité ne soit vraie qu'à un opérateur d'ordre -2 près. Cet abus d'interprétation est justifié par la proposition 1.11 et la recherche de symétrie, dans l'optique du lemme 1.10.

1.5.2 Retour aux conditions artificielles

Comme on l'a vu à la suite du théorème 1.6, la condition exacte traduisant le fait que la solution est sortante s'écrit, sur la nouvelle inconnue v

$$\partial_{\mathbf{n}} v + i\Lambda^+ v = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T, \quad (1.106)$$

où le symbole de l'opérateur Λ^+ est développable en symboles homogènes

$$\sigma(\Lambda^+) = \lambda^+ \sim \sum_{j=0}^{+\infty} \lambda_{1/2-j/2}^+.$$

On approche Λ^+ en tronquant le développement asymptotique de λ^+ . Si on ne garde que les M premiers termes $(\lambda_{1/2-j/2}^+)_{0 \leq j \leq M-1}$, la condition approchée d'ordre M s'écrit

$$\partial_{\mathbf{n}} v_M + i \sum_{j=0}^{M-1} Op(\lambda_{1/2-j/2}^+) v_M = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T,$$

où v_M est alors solution approchée du problème (1.61). On effectue le changement de variable inverse $v = e^{-i\mathcal{V}}u$ pour exprimer la condition approchée sur u_M

$$\partial_{\mathbf{n}}u_M - i(\partial_x\mathcal{V})u_M + ie^{i\mathcal{V}}\sum_{j=0}^{M-1} Op\left(\lambda_{1/2-j/2}^+\right)(e^{-i\mathcal{V}}u_M) = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T. \quad (1.107)$$

On adoptera les notations compactes

$$\partial_{\mathbf{n}}u + \Lambda_p^M(x, t, \partial_t)u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T, \quad (1.108)$$

où l'indice $p = 1$ (respectivement $p = 2$) fait référence à la stratégie du changement de jauge (1.75) (respectivement à la stratégie de la méthode directe décrite par (1.76)), et où l'entier M est le nombre de symboles homogènes retenus dans le développement asymptotique de λ^+ .

En accord avec l'interprétation des symboles que nous venons de voir pour le changement de jauge, nous avons la proposition suivante

Proposition 1.12. *La méthode du changement de jauge ($p = 1$) conduit aux conditions artificielles d'ordre M suivantes*

$$\partial_{\mathbf{n}}u + \Lambda_1^M u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T, \quad (1.109)$$

où les opérateurs Λ_1^M sont donnés par

$$\Lambda_1^2(x, t, \partial_t)u = e^{-i\pi/4}e^{i\mathcal{V}(x,t)}\partial_t^{1/2}\left(e^{-i\mathcal{V}(x,t)}u\right), \quad (1.110)$$

et

$$\Lambda_1^4(x, t, \partial_t)u = \Lambda_1^2(x, t, \partial_t)u - i\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}}V)\frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}}{2}e^{i\mathcal{V}(x,t)}I_t\left(\frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}}{2}e^{-i\mathcal{V}(x,t)}u\right). \quad (1.111)$$

Dans la suite, on désigne par ABC_1^M la condition aux limites (1.109).

1.5.3 Un résultat de stabilité pour ABC_1^M

L'utilisation des conditions (1.109) de la proposition 1.12 conduit à l'unicité de la solution du problème avec conditions aux limites artificielles. Nous ne considérons pas ici les questions de régularité de la solution par rapport à la donnée initiale, qui constituent une problématique à part entière.

Théorème 1.13. *Soit $u_0 \in L^2(\Omega)$ une donnée initiale à support compact dans Ω . Soit $V \in C^\infty(\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+, \mathbb{R})$ un potentiel à valeurs réelles. On note u une solution du problème avec donnée initiale et condition aux limites*

$$\begin{cases} i\partial_t u + \partial_x^2 u + Vu = 0, & \text{dans } \Omega_T, \\ \partial_{\mathbf{n}}u + \Lambda_1^M u = 0, & \text{sur } \Sigma_T, \\ u(x, 0) = u_0(x), & \text{sur } \Omega, \end{cases} \quad (1.112)$$

où les opérateurs Λ_1^M , $M = 2, 4$, sont définis dans la proposition 1.12. Alors, u satisfait l'inégalité de masse suivante

$$\forall t > 0, \quad \|u(t)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u_0\|_{L^2(\Omega)}, \quad (1.113)$$

pour $M = 2$. De plus, si en chacun des points de Σ le signe de $\partial_{\mathbf{n}}V$ est constant au cours du temps, alors l'inégalité (1.113) reste vraie pour $M = 4$. En particulier, ceci implique l'unicité de la solution u du problème avec donnée initiale et condition aux limites (1.112).

Démonstration. Montrons ce résultat pour la condition d'ordre quatre, sous l'hypothèse que $\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}}V)$ ne dépend pas du temps sur Σ_T . Le résultat pour la condition d'ordre deux s'en déduira immédiatement. On multiplie par $-i\bar{u}$ la première équation de (1.112) puis on intègre sur le domaine en espace Ω

$$\int_{x_\ell}^{x_r} \bar{u} \partial_t u \, dx - i \int_{x_\ell}^{x_r} \bar{u} \partial_x^2 u \, dx - i \int_{x_\ell}^{x_r} V(x, t) |u|^2 \, dx = 0,$$

et on intègre par parties le terme avec dérivée seconde

$$\int_{x_\ell}^{x_r} \bar{u} \partial_t u \, dx - i [\bar{u} \partial_x u]_{x_\ell}^{x_r} + i \int_{x_\ell}^{x_r} |\partial_x u|^2 \, dx - i \int_{x_\ell}^{x_r} V(x, t) |u|^2 \, dx = 0.$$

On intègre ensuite entre le temps initial 0 et le temps final T

$$\int_0^T \int_{x_\ell}^{x_r} \bar{u} \partial_t u \, dx \, dt - i \int_0^T [\bar{u} \partial_x u]_{x_\ell}^{x_r} \, dt + i \int_0^T \int_{x_\ell}^{x_r} |\partial_x u|^2 \, dx \, dt - i \int_0^T \int_{x_\ell}^{x_r} V(x, t) |u|^2 \, dx \, dt = 0,$$

puis on prend la partie réelle de cette expression. Le troisième et le quatrième termes sont nuls, étant donné que le potentiel est réel. Dans le premier terme, on reconnaît $\text{Re}(\bar{u} \partial_t u) = \frac{1}{2} \partial_t (|u|^2)$. Ce terme s'écrit donc

$$\int_0^T \int_{x_\ell}^{x_r} \bar{u} \partial_t u \, dx \, dt = \int_0^T \int_{x_\ell}^{x_r} \partial_t \frac{|u|^2}{2} \, dx \, dt$$

Mais $\int_{x_\ell}^{x_r} |u|^2 \, dx$ n'est rien d'autre que le carré de la norme $L^2([x_\ell; x_r])$ de u , au temps t . Ce terme est donc réel. Il reste alors

$$\int_0^T \partial_t \frac{\|u\|_{L^2(\Omega)}^2}{2} \, dt = \text{Re} \left(\int_0^T [i \bar{u} \partial_{\mathbf{n}} u]_{x_\ell}^{x_r} \, dt \right),$$

c'est-à-dire encore

$$\frac{1}{2} \left(\|u(T)\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|u_0\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) = \text{Re} \left(\int_0^T (i \bar{u}(x_\ell) \partial_{\mathbf{n}} u(x_\ell) + i \bar{u}(x_r) \partial_{\mathbf{n}} u(x_r)) \, dt \right). \quad (1.114)$$

Pour déterminer le signe du second membre de (1.114), on explicite la condition aux limites d'ordre quatre

$$\partial_{\mathbf{n}} u = -e^{-i\pi/4} e^{i\mathcal{V}} \partial_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u) + i \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V) \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}}{2} e^{i\mathcal{V}} I_t \left(\frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}}{2} e^{-i\mathcal{V}} u \right),$$

d'où

$$i \bar{u} \partial_{\mathbf{n}} u = -i e^{-i\pi/4} \overline{e^{-i\mathcal{V}} u} \partial_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u) - \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V) \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}}{2} e^{-i\mathcal{V}} u I_t \left(\frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}}{2} e^{-i\mathcal{V}} u \right). \quad (1.115)$$

On pose alors

$$\varphi_{\ell,r}(t) = e^{-i\mathcal{V}_{\ell,r}(t)} u_{\ell,r}(t)$$

et

$$\psi_{\ell,r}(t) = \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V_{\ell,r}(t)|}}{2} e^{-i\mathcal{V}_{\ell,r}(t)} u_{\ell,r}(t),$$

où $u_{\ell,r}(t) = u(x_{\ell,r}, t)$, $V_{\ell,r}(t) = V(x_{\ell,r}, t)$, et $\mathcal{V}_{\ell,r}(t) = \mathcal{V}(x_{\ell,r}, t)$. Le terme (1.115) s'écrit maintenant

$$i \overline{u_{\ell,r}} \partial_{\mathbf{n}} u_{\ell,r} = -i e^{-i\pi/4} \overline{\varphi_{\ell,r}} \partial_t^{1/2} \varphi_{\ell,r} - \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V_{\ell,r}) \overline{\psi_{\ell,r}} I_t \psi_{\ell,r},$$

et (1.114) devient

$$\frac{1}{2} \left(\|u(T)\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|u_0\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) = \sum_{\gamma=\ell,r} \operatorname{Re} \left(\int_0^T \left(-ie^{-i\pi/4} \overline{\varphi_\gamma} \partial_t^{1/2} \varphi_\gamma - \operatorname{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V_\gamma) \overline{\psi_\gamma} I_t \psi_\gamma \right) dt \right).$$

Il s'agit donc d'étudier le signe des termes

$$\operatorname{Re} \left(-ie^{-i\pi/4} \int_0^T \overline{\varphi_\gamma(t)} \partial_t^{1/2} \varphi_\gamma(t) dt \right) \quad (1.116)$$

et

$$\operatorname{Re} \left(\operatorname{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V_\gamma) \int_0^T \overline{\psi_\gamma(t)} I_t \psi_\gamma(t) dt \right), \quad (1.117)$$

en utilisant l'hypothèse que $\operatorname{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V)$ ne dépend pas du temps. Or le lemme 1.10 assure directement que le premier terme est négatif, et que le second est nul, l'intégrale considérée étant imaginaire pure. Finalement, pour tout temps final T

$$\frac{1}{2} \left(\|u(T)\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|u_0\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) \leq 0,$$

c'est-à-dire

$$\|u(T)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u_0\|_{L^2(\Omega)},$$

ce qui prouve (1.113). \square

Remarque 1.2. L'inégalité de masse (1.113) a été prouvée pour la condition d'ordre quatre lorsque le signe de $\partial_{\mathbf{n}} V$ aux points x_ℓ et x_r est constant au cours du temps. En pratique, lorsque cette condition est mise en défaut, par exemple pour le potentiel $V(x, t) = x \cos(2t)$, la résolution du problème avec condition d'ordre quatre ne présente pas de difficulté particulière par rapport à la condition d'ordre deux, et la propriété (1.113) semble numériquement vérifiée, bien que la preuve présentée ici ne permette pas de le démontrer dans ce cas.

1.6 Conditions de type ABC_2^M , lien entre les CLA, exemple

1.6.1 L'autre choix : ABC_2^M

Considérons maintenant l'autre choix pour la condition artificielle, reposant sur la méthode directe (1.76). Dans ce cas, les symboles sont donnés par la proposition 1.9, et on obtient les conditions artificielles décrites ci-après.

Proposition 1.14. *La méthode directe $p = 2$ conduit aux conditions artificielles d'ordre M suivantes*

$$\partial_{\mathbf{n}} u + \Lambda_2^M u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T, \quad (1.118)$$

avec

$$\Lambda_2^2(x, t, \partial_t) u = \operatorname{Op} \left(-i\sqrt{-\tau + V} \right) u, \quad (1.119)$$

et

$$\Lambda_2^4(x, t, \partial_t) u = \Lambda_2^2(x, t, \partial_t) u + \frac{1}{4} \operatorname{Op} \left(\frac{\partial_x V}{-\tau + V} \right) u. \quad (1.120)$$

La condition aux limites (1.118) sera désignée par ABC_2^M dans la suite.

Remarque 1.3. L'étude de la stabilité du problème relatif à la condition aux limites ABC_2^M est plus délicate que pour ABC_1^M . En effet, l'expression des opérateurs pseudodifférentiels intervenant dans (1.119)–(1.120) est basée sur la représentation inverse de Fourier. Dans ce cadre et pour un potentiel général dépendant de x et de t , il n'est pas possible de prouver un résultat équivalent au lemme 1.10 en utilisant un argument comme l'identité de Plancherel pour la transformée de Laplace. Cependant, lorsque $V(x, t) = V(x)$, le résultat de stabilité est immédiat puisqu'alors les stratégies 1 et 2 coïncident et ABC_2^M est rigoureusement équivalente à ABC_1^M , comme nous le voyons ci-dessous.

1.6.2 Le cas $V = V(x)$: relations entre les CLA

Le cas $V = V(x)$ est particulier, dans le sens où les deux stratégies étudiées précédemment se rejoignent. Ce résultat repose sur le lemme suivant

Lemme 1.15. *Si a est un symbole de S^m indépendant de t , et $V(x, t) = V(x)$, alors on a l'égalité*

$$Op(a(\tau - V(x)))u = e^{itV}Op(a(\tau))(e^{-itV}u(x, t)). \quad (1.121)$$

Démonstration. Par définition, l'opérateur pseudodifférentiel associé au symbole $a(\tau - V(x))$ est donné par transformée de Fourier inverse

$$Op(a(\tau - V(x)))u = \mathcal{F}_t^{-1}(a(\tau - V(x))\mathcal{F}_t(u)) = \int_{\mathbb{R}} a(\tau - V(x))\mathcal{F}_t(u)(x, \tau)e^{it\tau}d\tau.$$

On effectue dans l'intégrale le changement de variable $\rho = \tau - V(x)$ pour obtenir

$$Op(a(\tau - V(x)))u = \int_{\mathbb{R}} a(\rho)\mathcal{F}_t(u)(x, \rho + V(x))e^{it\rho}e^{itV(x)}d\rho.$$

En utilisant les propriétés de translation de la transformée de Fourier, on simplifie cette expression

$$Op(a(\tau - V(x)))u = e^{itV(x)} \int_{\mathbb{R}} a(\rho)\mathcal{F}_t(t \mapsto e^{-itV(x)}u(x, t))(x, \rho)e^{it\rho}d\rho.$$

On reconnaît l'opérateur associé au symbole $a(\rho)$ et appliqué à la fonction $e^{-itV(x)}u(x, t)$

$$Op(a(\tau - V(x)))u = e^{itV(x)}Op(a(\tau))(e^{-itV(x)}u(x, t)).$$

On a bien montré l'égalité (1.121). □

Corollaire 1.16. *Si le potentiel V est indépendant du temps, alors les conditions aux limites artificielles ABC_1^M et ABC_2^M sont équivalentes, pour $M = 2, 4$, avec \mathcal{V} qui est défini par $\mathcal{V}(x, t) = tV(x)$. En particulier, le caractère bien posé du problème avec condition initiale et condition aux limites associé est immédiat, d'après le théorème 1.13.*

1.6.3 L'exemple du potentiel linéaire : comparaison des opérateurs

Nous nous plaçons dans un cas de potentiel particulier pour lequel on connaît une solution de référence analytique. C'est le cas du potentiel nul pour lequel on a la solution (1.38), et grâce à la proposition 1.3, c'est aussi le cas de quelques potentiels $V(x)$. La solution de référence exacte étant connue, on peut calculer $\partial_{\mathbf{n}}u$ sur la frontière du domaine et le comparer avec $-\Lambda_1^M u$ pour tester la précision des opérateurs approchés Λ_1^M . On choisit le potentiel linéaire $V(x) = x$. On a la solution

exacte associée (1.39) notée u . Cette solution dépend du nombre d'onde k_0 de la donnée initiale (1.37). La première condition aux limites considérée est la condition

$$\partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4}\partial_t^{1/2}u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T, \quad (1.122)$$

que nous notons ABC_0 . Cette condition est la condition aux limites qui est transparente en l'absence de potentiel. Pour l'équation avec potentiel, ABC_0 constitue une condition aux limites approchée valable, mais *a priori* moins précise que les conditions ABC_1^M et ABC_2^M construites précédemment, puisqu'elle ne tient pas compte du potentiel. Cette CLA est comparée aux deux conditions ABC_1^2 et ABC_1^4 . On teste la précision des conditions aux limites en comparant à zéro les quantités $\partial_{\mathbf{n}}u + \Lambda_0^1u$ et $\partial_{\mathbf{n}}u + \Lambda_1^M u$, $M = 2, 4$. Ces tests sont réalisés à l'aide d'un logiciel de calcul formel pour différentes valeurs de k_0 , et présentés figure 1.6.

La précision obtenue avec la condition sans potentiel ABC_0 est très faible : entre 1 et 10^{-1} . L'intérêt de tenir compte du potentiel dans la condition aux limites est indéniable. La condition ABC_1^2 d'ordre deux conduit à une erreur absolue dont le maximum est d'un peu moins de 10^{-2} (pour $k_0 = 5$), ce qui est 50 fois meilleur que ABC_0 . Cette erreur est partiellement réduite lorsque k_0 augmente : elle perd environ un facteur 5 entre $k_0 = 5$ et $k_0 = 12$. Un comportement similaire est observé pour la condition approchée ABC_1^4 d'ordre quatre : l'erreur maximale passe de $5 \cdot 10^{-5}$ pour $k_0 = 5$ à $8 \cdot 10^{-7}$ pour $k_0 = 12$. Ces observations confortent le fait que les méthodes développées précédemment sont d'autant plus efficaces que l'on travaille en hautes fréquences, puisque l'approximation de l'opérateur de Dirichlet-to-Neumann est basée sur son développement asymptotique. Or, les hautes fréquences correspondent à un nombre d'onde grand. En effet, à première vue, le nombre d'onde k_0 agit sur la donnée initiale comme un facteur d'échelle en espace. Cependant, si on observe l'expression de la solution de l'équation sans potentiel (1.38), on constate qu'il agit également comme un facteur d'échelle en temps. Un grand nombre d'onde k_0 correspondra donc à une asymptotique haute-fréquence en τ . Par ailleurs, on note de manière très claire l'amélioration que représente la condition d'ordre quatre par rapport à la condition d'ordre deux. En effet, la condition d'ordre quatre améliore la condition d'ordre deux d'un facteur 10^2 à 10^3 , ce qui double la précision qu'on obtenait avec la condition d'ordre deux. Ainsi, retenir plus de termes dans le développement asymptotique de Λ^+ conduit bien à une précision plus grande, du moins au niveau des opérateurs continus associés.

1.7 Schémas semi-discrets et propriétés

Le but de cette section est de procéder à la semi-discretisation en temps des conditions aux limites artificielles précédemment construites. On commence par discrétiser l'équation intérieure et détailler la formulation variationnelle employée, pour identifier le milieu dans lequel s'intégrera la condition aux limites discrétisée. Nous verrons ensuite, stratégie par stratégie, comment discrétiser la condition aux limites de manière adéquate.

1.7.1 Discrétisation de l'équation intérieure et formulation variationnelle

Le problème avec donnée initiale et condition aux limites est :

$$\begin{cases} i\partial_t u + \partial_x^2 u + V u = 0, & \text{dans } \Omega_T, \\ \partial_{\mathbf{n}}u + \Lambda_p^M u = 0, & \text{sur } \Sigma_T, \\ u(\cdot, 0) = u_0, & \text{dans } \Omega, \end{cases} \quad (1.123)$$

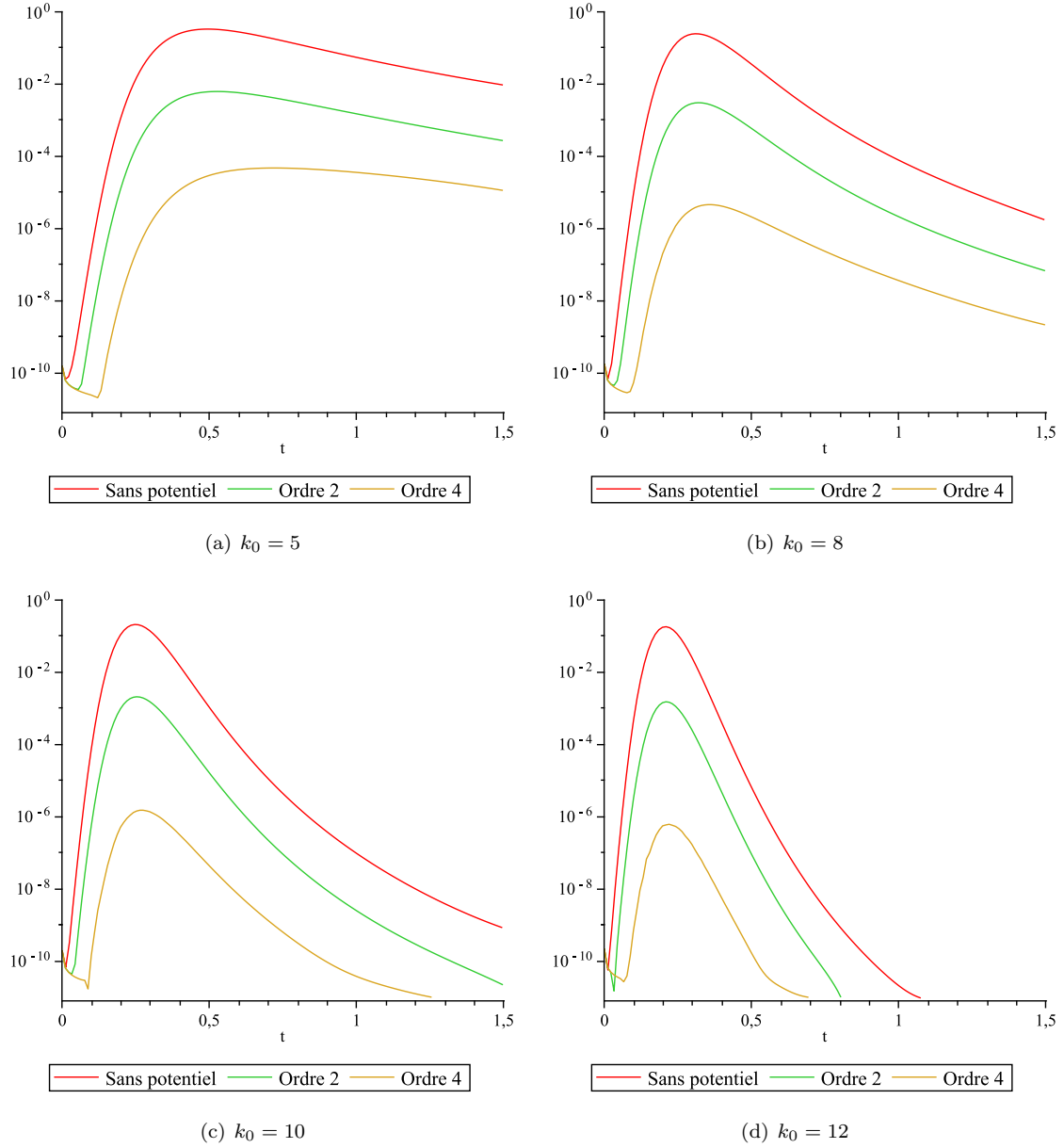


FIGURE 1.6 – Erreur absolue $|\partial_n u + \Lambda u|$ en fonction du temps dans le cas du potentiel $V(x) = x$, au point $x_r = 5$, pour différentes valeurs de k_0 et pour les conditions aux limites ABC_0 (sans potentiel), ABC_1^2 et ABC_1^4 .

pour $p = 1, 2$, $M = 2, 4$ et pour un temps final de calcul T . On discrétise le système (1.123) par un schéma de Crank-Nicolson. L'intervalle de temps $[0; T]$ est discrétisé uniformément en N intervalles de longueur $\Delta t = T/N$. On note $t_n = n\Delta t$, $0 \leq n \leq N$. Enfin, u^n représente une approximation de $u(t_n)$ et $V^n = V(x, t_n)$. Lorsque $V = V(x)$ est un potentiel indépendant du temps, la discrétisation de Crank-Nicolson pour l'équation de Schrödinger est donnée par

$$i \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \partial_x^2 \left(\frac{u^{n+1} + u^n}{2} \right) + V \frac{u^{n+1} + u^n}{2} = 0, \quad \text{pour } n = 0, \dots, N-1. \quad (1.124)$$

Lorsque $V = V(x, t)$, la généralisation est la suivante

$$i \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \partial_x^2 \frac{u^{n+1} + u^n}{2} + \frac{V^{n+1} + V^n}{2} \frac{u^{n+1} + u^n}{2} = 0. \quad (1.125)$$

Pour faciliter l'implémentation, il est d'usage de poser $v^{n+1} = \frac{u^{n+1} + u^n}{2} = u^{n+1/2}$, avec $u^{-1} = 0$ et $u^0 = u_0$. De manière analogue, on pose $W^{n+1} = \frac{V^{n+1} + V^n}{2} = V^{n+1/2}$. Le schéma (1.125) s'écrit maintenant :

$$2i \frac{v^{n+1}}{\Delta t} + \partial_x^2 v^{n+1} + W^{n+1} v^{n+1} = 2i \frac{u^n}{\Delta t}. \quad (1.126)$$

La formulation faible de cette équation est, pour une fonction test $\psi \in H^1(\Omega)$:

$$\frac{2i}{\Delta t} \int_{x_\ell}^{x_r} v^{n+1} \psi dx + \int_{x_\ell}^{x_r} \partial_x^2 v^{n+1} \psi dx + \int_{x_\ell}^{x_r} W^{n+1} v^{n+1} \psi dx = \frac{2i}{\Delta t} \int_{x_\ell}^{x_r} u^n \psi dx$$

puis, en intégrant le deuxième terme par parties

$$\begin{aligned} \frac{2i}{\Delta t} \int_{x_\ell}^{x_r} v^{n+1} \psi dx + [\partial_x v^{n+1} \psi]_{x_\ell}^{x_r} - \int_{x_\ell}^{x_r} \partial_x v^{n+1} \partial_x \psi dx + \int_{x_\ell}^{x_r} W^{n+1} v^{n+1} \psi dx \\ = \frac{2i}{\Delta t} \int_{x_\ell}^{x_r} u^n \psi dx. \end{aligned} \quad (1.127)$$

Nous verrons un peu plus loin que les termes issus de la condition aux limites peuvent se mettre sous la forme

$$\partial_n v^{n+1} = B_p^{M, n+1} v^{n+1} - b_p^{M, n}(v^0, v^1, \dots, v^n), \quad (1.128)$$

où M fait référence à l'ordre de la condition aux limites et p à la stratégie utilisée.

Pour l'équation de Schrödinger sans potentiel, il est bien connu que discrétiser la condition aux limites transparente (1.6) d'une manière qui préserve la stabilité inconditionnelle du schéma de Crank-Nicolson est une opération délicate. Nous proposons ici deux solutions pour la discrétisation des CLA qui ont été construites. La première est basée sur des convolutions semi-discrètes associées aux opérateurs fractionnaires apparaissant dans (1.110)–(1.111). On peut alors montrer que le schéma semi-discret en résultant est inconditionnellement stable. Cependant, une solution basée sur des opérateurs de convolution peut nécessiter des temps de calcul longs. La deuxième solution que nous étudions est basée sur une approximation des opérateurs fractionnaires (1.119)–(1.120) à travers la solution d'équations différentielles auxiliaires qui peuvent être résolues explicitement. L'évaluation de la solution est alors particulièrement efficace, mais il semble numériquement qu'on ne puisse pas obtenir la stabilité du système associé.

Avant de passer à la discrétisation des conditions aux limites ABC_1^M à proprement parler, commençons par quelques rappels sur la discrétisation par convolutions discrètes des opérateurs de convolution.

1.7.2 Discrétisation des opérateurs de convolution

L'outil fondamental de la discrétisation d'opérateurs de convolution préservant leur structure, est la transformée en \mathcal{Z} , qui est l'analogie discret de la transformée de Laplace. Nous rappelons ici sa définition et quelques propriétés qui nous seront utiles.

Transformée en \mathcal{Z}

Commençons par rappeler la définition de la transformée en \mathcal{Z} d'un signal discret.

Définition 1.4. Soit $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ un signal discret. On appelle transformée en \mathcal{Z} de (f_n) , et on note $\mathcal{Z}(f_n)$ ou \hat{f} , la fonction de la variable z définie par

$$\hat{f}(z) = \mathcal{Z}(f_n)(z) = \sum_{n=0}^{+\infty} f_n z^{-n}, \quad \text{pour } |z| > \hat{R}_f, \quad (1.129)$$

où \hat{R}_f désigne le rayon de convergence de la série \hat{f} , et est défini de la façon suivante :

$$\hat{R}_f = \min \left\{ R > 0 ; \sum_n f_n R^{-n} < +\infty \right\}. \quad (1.130)$$

Ainsi, \hat{R}_f est l'inverse du rayon de convergence de la série entière $\sum f_n z^n$.

On désigne par \star le produit de convolution usuel : $a_n \star b^n = (a \star b)_n = \sum_{k=0}^n a_k b^{n-k}$. Rappelons quelques propriétés de la transformée en \mathcal{Z} .

Proposition 1.17. Soient $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ et $(g_n)_{n \in \mathbb{N}}$ deux signaux discrets de rayons de convergence respectifs \hat{R}_f et \hat{R}_g . On a les résultats suivants :

- (a) $\mathcal{Z}(f_{n+1}) = z\hat{f} - zf(0)$
- (b) $\mathcal{Z}(f_{n+1} \pm f_n) = (z \pm 1)\hat{f}(z) - zf(0)$
- (c) $\mathcal{Z}(f_n \star g_n) = \hat{f}(z)\hat{g}(z)$, pour $|z| > \max(\hat{R}_f, \hat{R}_g)$.

On a également un théorème de Plancherel.

Lemme 1.18. Soient $(f_p)_{p \in \mathbb{N}}$ et $(g_p)_{p \in \mathbb{N}}$ deux suites (réelles). Si $\hat{R}_f \hat{R}_g < 1$, alors $\mathcal{Z}(\overline{f_p} g_p)$ est défini pour $|z| > \hat{R}_f \hat{R}_g$ et on a

$$\sum_{p=0}^{+\infty} \overline{f_p} g_p = \mathcal{Z}(\overline{f_p} g_p)(z=1) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \overline{\hat{f}(re^{i\theta})} \hat{g}\left(\frac{e^{i\theta}}{r}\right) d\theta, \quad (1.131)$$

où le chemin d'intégration est un cercle de rayon r tel que $\hat{R}_f < r < 1/\hat{R}_g$. De plus, si les deux rayons de convergence vérifient $\hat{R}_f < 1$ et $\hat{R}_g < 1$, alors on peut choisir $r = 1$ dans (1.131).

Identifications des coefficients des opérateurs de convolution semi-discrétisés

Ce paragraphe reprend une démarche explicitée dans [2]. L'objectif est de discrétiser les opérateurs fractionnaires $\partial_t^{1/2}$, $I_t^{1/2}$, ... sous forme de convolutions discrètes :

$$\partial_t^{1/2} u(t_n) \approx (\tilde{\beta}_k) \star (u^k), \quad I_t^{1/2} u(t_n) \approx (\tilde{\alpha}_k) \star (u^k),$$

avec des coefficients $\tilde{\beta}_n$ et $\tilde{\alpha}_n$ à déterminer. Commençons par chercher les coefficients de convolution associés à $\partial_t^{1/2}$. Pour cela, on considère l'équation sans potentiel, dont on sait que la condition transparente associée est

$$\partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T. \quad (1.132)$$

L'équation intérieure est discrétisée uniformément en temps, avec un pas de temps Δt , à l'aide d'une méthode multi-pas A-stable :

$$\frac{i}{\Delta t} \sum_{j=0}^K \alpha_j u^{n-j}(x) + \sum_{j=0}^K \beta_j \partial_x^2 u^{n-j}(x) = 0, \quad \text{pour } n \geq K.$$

On applique alors une transformée en \mathcal{Z} à cette équation. En utilisant les propriétés de cette transformation, on obtient :

$$\left(\partial_x^2 + i \frac{\delta(z)}{\Delta t} \right) \hat{u}(x, z) = 0 \quad \text{pour } x > x_r, \quad (1.133)$$

où la fonction $\delta(z)$

$$\delta(z) = \frac{\sum_{j=0}^K \alpha_j z^{K-j}}{\sum_{j=0}^K \beta_j z^{K-j}} \quad (1.134)$$

est appelée fonction génératrice du schéma. A titre d'exemple, pour le schéma d'Euler explicite

$$\frac{i}{\Delta t} (u^n - u^{n-1}) + \partial_x^2 u^{n-1} = 0$$

on a $\alpha_0 = 1$, $\alpha_1 = -1$, $\beta_0 = 0$, $\beta_1 = 1$ et tous les autres coefficients sont nuls. La fonction génératrice du schéma d'Euler explicite est donc

$$\delta(z) = \frac{z-1}{z}.$$

Pour le schéma de Crank-Nicolson que nous considérons ici, la discrétisation de l'équation est

$$\frac{i}{\Delta t} (u^n - u^{n-1}) + \partial_x^2 \frac{u^n + u^{n-1}}{2} = 0.$$

On a donc $\alpha_0 = 1$, $\alpha_1 = -1$, et $\alpha_k = 0$ pour $k \geq 2$; et $\beta_0 = 1/2$, $\beta_1 = 1/2$, $\beta_k = 0$ pour $k \geq 2$. D'où la fonction génératrice

$$\delta(z) = 2 \frac{z-1}{z+1}. \quad (1.135)$$

L'équation (1.133) est une équation différentielle d'ordre deux en temps, qu'on résout

$$\hat{u}(x, z) = A^+(z) e^{i \sqrt{i \frac{\delta(z)}{\Delta t}} x} + A^-(z) e^{-i \sqrt{i \frac{\delta(z)}{\Delta t}} x}, \quad x > x_r.$$

Or, compte tenu de la A-stabilité, δ envoie $\{|z| > 1\}$ dans le demi-plan $\{\text{Re}(z) > 0\}$. On a donc

$$\text{Re} \left(-i \sqrt{i \frac{\delta(z)}{\Delta t}} \right) > 0, \quad \forall |z| > 1.$$

Pour garantir que $\hat{u}(x, z)$ n'explose pas quand $x \rightarrow +\infty$, le coefficient $A^-(z)$ est nécessairement nul, et il reste

$$\hat{u}(x, z) = A^+(z) e^{i \sqrt{i \frac{\delta(z)}{\Delta t}} x}, \quad x > x_r.$$

On retrouve une expression de type Dirichlet-Neumann sur $\hat{u}(x, z)$ en dérivant par rapport à x

$$\partial_x \hat{u}(x, z) = i \sqrt{i \frac{\delta(z)}{\Delta t}} \hat{u}(x, z), \quad x > x_r. \quad (1.136)$$

Or, comme la transformée en \mathcal{Z} et la dérivation en x commutent, on peut réécrire cette équation

$$\mathcal{Z}(\partial_x u^n(x))(z) = B(z)\mathcal{Z}(u^n(x))(z), \quad x > x_r,$$

avec

$$B(z) = i \sqrt[4]{i \frac{\delta(z)}{\Delta t}}.$$

On introduit la suite $(b_n)_{n \in \mathbb{N}}$ telle que $B(z) = \mathcal{Z}(b_n)(z)$. L'équation (1.136) se réécrit finalement comme la transformée en \mathcal{Z} d'un produit de convolution

$$\mathcal{Z}(\partial_x u^n(x))(z) = \mathcal{Z}(b_n)(z) \mathcal{Z}(u^n(x))(z) = \mathcal{Z}(b_n \star u^n(x))(z), \quad x > x_r.$$

Par transformée en \mathcal{Z} inverse, on obtient $\partial_x u^n$ sur le domaine extérieur droit

$$\partial_x u^n(x) = b_n \star u^n(x), \quad x > x_r,$$

et de manière générale

$$\partial_{\mathbf{n}} u^n(x) = b_n \star u^n(x), \quad \text{sur } \Sigma_T. \quad (1.137)$$

Or, en vertu de la condition transparente (1.132), on a également

$$\partial_{\mathbf{n}} u = -e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} u, \quad \text{sur } \Sigma_T.$$

On en déduit que l'opérateur fractionnaire $\partial_t^{1/2}$ se discrétise sous forme de convolution discrète, avec des coefficients de convolution égaux à

$$e^{-3i\pi/4} b_n. \quad (1.138)$$

Il reste à calculer les coefficients b_n , qui dépendent du schéma choisi à travers sa fonction génératrice $\delta(z)$

$$b_n = \mathcal{Z}^{-1}(B(z)) = \mathcal{Z}^{-1} \left(i \sqrt[4]{i \frac{\delta(z)}{\Delta t}} \right), \quad n \in \mathbb{N}. \quad (1.139)$$

On se place désormais dans le cadre du schéma de Crank-Nicolson, dont la fonction génératrice est donnée par (1.135). Pour $|z| > 1$, on a :

$$B(z) = i \sqrt[4]{i \frac{\delta(z)}{\Delta t}} = e^{3i\pi/4} \sqrt[4]{\frac{2}{\Delta t}} \sqrt[4]{\frac{z-1}{z+1}}.$$

Comme $|z| > 1$, on écrit

$$B(z) = e^{3i\pi/4} \sqrt[4]{\frac{2}{\Delta t}} \sqrt[4]{\frac{1-1/z}{1+1/z}} = e^{3i\pi/4} \sqrt[4]{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{n=0}^{+\infty} \beta_n z^{-n},$$

où les β_n sont les coefficients du développement de Taylor de $\sqrt[4]{\frac{1-X}{1+X}}$. On reconnaît une transformée en \mathcal{Z} :

$$B(z) = e^{3i\pi/4} \sqrt[4]{\frac{2}{\Delta t}} \mathcal{Z}(\beta_n)(z),$$

d'où l'expression de b_n :

$$b_n = e^{3i\pi/4} \sqrt[4]{\frac{2}{\Delta t}} \beta_n. \quad (1.140)$$

En revenant à (1.138), on obtient finalement les coefficients associés à la discrétisation de $\partial_t^{1/2}$

$$\partial_t^{1/2} u^n = \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} (\beta_k \star u^k) = \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{k=0}^n \beta_{n-k} u^k, \quad (1.141)$$

avec

$$\sqrt{\frac{1-X}{1+X}} = \sum_{k=0}^{+\infty} \beta_k X^k. \quad (1.142)$$

Pour obtenir de la même manière les coefficients de convolution associés à l'opérateur $I_t^{1/2}$, on reprend la même démarche en exprimant la condition transparente à l'aide de l'opérateur de Neumann-Dirichlet au lieu de celui de Dirichlet-Neumann. La condition de Neumann-Dirichlet s'écrit :

$$u + e^{i\pi/4} I_t^{1/2} (\partial_{\mathbf{n}} u) = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T.$$

L'équation intérieure conduit à la même relation (1.136) sur les transformées en \mathcal{Z} , qu'on exprime cette fois par inversion

$$\mathcal{Z}(w^n(x))(z) = -i \sqrt{\frac{\Delta t}{i\delta(z)}} \mathcal{Z}(\partial_x w^n(x))(z) = \mathcal{Z}(a_n \star \partial_x w^n(x))(z), \quad x > x_r,$$

où, pour la méthode de Crank-Nicolson, les coefficients (a_n) sont définis par

$$A(z) = \mathcal{Z}(a_n)(z) = e^{-3i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \sqrt{\frac{z+1}{z-1}}, \quad \text{pour } |z| > 1.$$

On obtient donc de la même manière

$$a_n = e^{-3i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \alpha_n \quad \text{avec} \quad \sum_{k=0}^{+\infty} \alpha_k X^k = \sqrt{\frac{1+X}{1-X}}.$$

Finalement,

$$u^n = -e^{i\pi/4} I_t^{1/2} (\partial_{\mathbf{n}} u^n) = a_n \star (\partial_{\mathbf{n}} u^n), \quad \text{sur } \Sigma_T.$$

Ainsi, la discrétisation de $I_t^{1/2}$ en accord avec le schéma de Crank-Nicolson est donnée par

$$I_t^{1/2} u^n = \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} (\alpha_n \star u^n) = \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \sum_{k=0}^n \alpha_{n-k} u^k,$$

avec

$$\sqrt{\frac{1+X}{1-X}} = \sum_{k=0}^{+\infty} \alpha_k X^k. \quad (1.143)$$

Finalement, on obtient les coefficients de convolution associés à I_t en exploitant le fait que I_t est la composée de l'opérateur $I_t^{1/2}$ avec lui-même. Par transformée en \mathcal{Z} , les coefficients de la convolution sont donc les produits des coefficients pour I_t [15]

$$I_t u^n = \frac{\Delta t}{2} (\gamma_k \star u^k) = \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=0}^n \gamma_{n-k} u^k, \quad (1.144)$$

avec

$$\frac{1+X}{1-X} = \sum_{k=0}^{+\infty} \gamma_k X^k. \quad (1.145)$$

Calcul effectif des coefficients de convolution

Concernant le calcul explicite des coefficients de convolution α_k , β_k et γ_k , on rappelle la proposition suivante [11, 15] :

Proposition 1.19. *Si $\{f^n\}_{n \in \mathbb{N}}$ est une suite de nombres complexes approchant $\{f(t_n)\}_{n \in \mathbb{N}}$, alors les approximations de $\partial_t^{1/2} f(t_n)$, $I_t^{1/2} f(t_n)$ et $I_t f(t_n)$ cohérentes avec le schéma de Crank-Nicolson pour un pas de temps Δt , sont données par les formules de quadratures numériques :*

$$\partial_t^{1/2} f(t_n) \approx \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{k=0}^n \beta_{n-k} f^k, \quad (1.146)$$

$$I_t^{1/2} f(t_n) \approx \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \sum_{k=0}^n \alpha_{n-k} f^k, \quad (1.147)$$

$$I_t f(t_n) \approx \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=0}^n \gamma_{n-k} f^k, \quad (1.148)$$

où les suites $(\alpha_n)_{n \in \mathbb{N}}$, $(\beta_n)_{n \in \mathbb{N}}$ et $(\gamma_n)_{n \in \mathbb{N}}$ sont telles que

$$\begin{cases} (\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5, \dots) = (1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{8}, \frac{3}{8}, \frac{3 \cdot 5}{2 \cdot 4 \cdot 6}, \dots), \\ \beta_k = (-1)^k \alpha_k, \quad \forall k \geq 0, \\ (\gamma_0, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \dots) = (1, 2, 2, 2, 2, 2, \dots). \end{cases} \quad (1.149)$$

De plus, leurs transformées en \mathcal{Z} respectives sont données par :

$$\mathcal{Z}(\alpha_n)(z) = \sqrt{\frac{z+1}{z-1}}, \quad \mathcal{Z}(\beta_n)(z) = \sqrt{\frac{z-1}{z+1}}, \quad \mathcal{Z}(\gamma_n)(z) = \frac{z+1}{z-1}, \quad (1.150)$$

pour $|z| > 1$.

Comme nous l'avons vu au paragraphe précédent, les coefficients α_k , β_k , γ_k sont respectivement les coefficients du développement de Taylor de $\sqrt{\frac{1-X}{1+X}}$, $\sqrt{\frac{1+X}{1-X}}$ et $\frac{1+X}{1-X}$. Plus généralement, on peut montrer que la discrétisation de l'opérateur I_t^α est la suivante

$$I_t^\alpha(f^n) \approx \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^\alpha \sum_{k=0}^n d_k^{(\alpha)} f^{n-k}, \quad (1.151)$$

où les $d_k^{(\alpha)}$ sont les coefficients du développement de Taylor de $\left(\frac{1+X}{1-X}\right)^\alpha$. Afin que la discrétisation soit totalement explicite, il reste à exprimer les coefficients $d_k^{(\alpha)}$. Or

$$\sum_n d_n^{(\alpha)} X^n = \left(\frac{1+X}{1-X}\right)^\alpha = (1+X)^\alpha \frac{1}{(1-X)^\alpha}.$$

Introduisons les suites (p_n) et (q_n) telles que

$$(1+X)^\alpha = \sum_n p_n X^n \quad \text{et} \quad \frac{1}{(1-X)^\alpha} = \sum_n q_n X^n.$$

On a alors

$$\sum_n d_n^{(\alpha)} X^n = \left(\sum_n p_n X^n\right) \left(\sum_n q_n X^n\right) = \sum_n \left(\sum_{k=0}^n p_k q_{n-k}\right) X^n$$

en effectuant le produit de Cauchy des deux séries entières. Les coefficients $d_k^{(\alpha)}$ s'expriment donc comme un produit de convolution :

$$(d_k^{(\alpha)}) = (p_k) \star (q_k).$$

On utilise la transformée de Fourier rapide pour ramener le calcul des coefficients à un produit

$$\mathcal{F}(d_k^{(\alpha)}) = \mathcal{F}((p_k) \star (q_k)) = \mathcal{F}(p_k) \mathcal{F}(q_k).$$

On a donc

$$d_k^{(\alpha)} = \mathcal{F}^{-1}(\mathcal{F}(p_k) \mathcal{F}(q_k)).$$

Quant aux coefficients p_k et q_k , ils sont calculés en utilisant l'expression du développement de Taylor de $(1 + X)^\alpha$:

$$(1 + X)^\alpha = 1 + \sum_{n=1}^{+\infty} \left(\prod_{k=0}^{n-1} (\alpha - k) \right) \frac{X^n}{n!}.$$

Les (p_k) sont alors définis par la relation de récurrence

$$\begin{cases} p_0 = 1, \\ p_{k+1} = \frac{\alpha - k}{k + 1} p_k \quad \text{pour } k \geq 0. \end{cases}$$

De même, nous avons

$$(1 - X)^{-\alpha} = 1 + \sum_{n=1}^{+\infty} \left(\prod_{k=0}^{n-1} (-\alpha - k) \right) \frac{(-X)^n}{n!},$$

et on obtient les (q_k) sous la forme

$$\begin{cases} q_0 = 1, \\ q_{k+1} = -\frac{-\alpha - k}{k + 1} q_k \quad \text{pour } k \geq 0. \end{cases}$$

1.7.3 Discrétisation des CLA basée sur les convolutions discrètes

Nous pouvons maintenant passer à l'étude de la discrétisation des conditions aux limites. Considérons pour commencer les conditions ABC_1^M . D'après la proposition 1.12, on a :

$$ABC_1^2 : \quad \partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\pi/4} e^{i\mathcal{V}} \partial_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u) = 0, \quad (1.152)$$

$$ABC_1^4 : \quad \partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\pi/4} e^{i\mathcal{V}} \partial_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u) - i \operatorname{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V) \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}}{2} e^{i\mathcal{V}} I_t \left(\frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}}{2} e^{-i\mathcal{V}} u \right) = 0. \quad (1.153)$$

On considère également les opérateurs associés Λ_1^2 et Λ_1^4

$$\Lambda_1^2(x, t, \partial_t) u = e^{-i\pi/4} e^{i\mathcal{V}(x,t)} \partial_t^{1/2} \left(e^{-i\mathcal{V}(x,t)} u \right),$$

$$\Lambda_1^4(x, t, \partial_t) u = \Lambda_1^2(x, t, \partial_t) u - i \operatorname{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V) \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}}{2} e^{i\mathcal{V}(x,t)} I_t \left(\frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}}{2} e^{-i\mathcal{V}(x,t)} u \right).$$

On utilise la forme symétrique de la condition ABC_1^4 , ce qui est crucial dans le cas $V = V(x, t)$.

Compte tenu de la discrétisation par quadratures (1.146) de l'opérateur $\partial_t^{1/2}$ et de la discrétisation (1.125) retenue pour l'équation intérieure, les semi-discrétisations des conditions ABC_1^M sont données dans la proposition suivante.

Proposition 1.20. *Le schéma semi-discret de Crank-Nicolson pour le problème initial avec condition aux limites de type ABC_1^M est donné par*

$$\begin{cases} \frac{2i}{\Delta t} v^{n+1} + \partial_x^2 v^{n+1} + W^{n+1} v^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t} u^n, & \text{dans } \Omega, \\ \partial_n v^{n+1} + \Lambda_{1,n+1}^M v^{n+1} = 0, & \text{sur } \Sigma, \quad \text{pour } M = 2 \text{ ou } 4, \\ u^0 = u_0, & \text{dans } \Omega, \end{cases} \quad (1.154)$$

pour $n = 0, \dots, N-1$, où $v^{n+1} = \frac{u^{n+1} + u^n}{2}$, $W^{n+1} = \frac{V^{n+1} + V^n}{2}$, et les opérateurs semi-discrets $\Lambda_{1,n+1}^2$, $\Lambda_{1,n+1}^4$ sont définis par

$$\Lambda_{1,n+1}^2 v^{n+1} = e^{-i\pi/4} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{k=0}^{n+1} \beta_{n+1-k} e^{-i\mathcal{W}^k} v^k, \quad (1.155)$$

$$\Lambda_{1,n+1}^4 v^{n+1} = \Lambda_{1,n+1}^2 v^{n+1} - i \operatorname{sg}(\partial_n W^{n+1}) \frac{\sqrt{|\partial_n W^{n+1}|}}{2} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=0}^{n+1} \gamma_{n+1-k} \frac{\sqrt{|\partial_n W^k|}}{2} e^{-i\mathcal{W}^k} v^k. \quad (1.156)$$

Ici, \mathcal{W} est défini par $\mathcal{W}^{n+1} = \frac{\mathcal{V}^{n+1} + \mathcal{V}^n}{2}$ et \mathcal{V} est donné par (1.57).

Le schéma de Crank-Nicolson est un schéma d'ordre deux en temps qui a la propriété d'être inconditionnellement stable. La discrétisation présentée ici pour les conditions ABC_1^M , basée sur les convolutions discrètes, est celle qui permet de préserver cette stabilité inconditionnelle pour le problème (1.154). En effet, nous avons le théorème suivant.

Théorème 1.21. *Soit u une solution du système (1.154) muni de la condition aux limites ABC_1^M . Pour $M = 2$, on a l'inégalité de masse suivante :*

$$\forall n \in \{0, \dots, N\}, \quad \|u^n\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u^0\|_{L^2(\Omega)}, \quad (1.157)$$

et si $\operatorname{sg}(\partial_n W_\ell^k)$ et $\operatorname{sg}(\partial_n W_r^k)$ sont des constantes positives, alors (1.157) reste vérifiée pour $M = 4$.

Ce théorème est la version semi-discrète du théorème 1.13, sous les hypothèses semi-discrètes équivalentes, auxquelles on a ajouté l'hypothèse que $\partial_n W^k$ est positif sur Σ .

Démonstration. Soit $n \in \{0, \dots, N\}$ et soit p un entier compris entre 0 et $n-1$. On écrit l'équation intérieure de (1.154) au temps t_{p+1}

$$i \frac{u^{p+1} - u^p}{\Delta t} + \partial_x^2 v^{p+1} + W^{p+1} v^{p+1} = 0$$

puis on la multiplie par $-i \overline{v^{p+1}}$. En tenant compte de la définition de v^{p+1} , le premier terme est arrangé de la manière suivante :

$$\begin{aligned} (u^{p+1} - u^p) \overline{v^{p+1}} &= \frac{1}{2} (u^{p+1} - u^p) (\overline{u^{p+1} + u^p}) = \frac{1}{2} (|u^{p+1}|^2 - |u^p|^2 + u^{p+1} \overline{u^p} - u^p \overline{u^{p+1}}) \\ &= \frac{1}{2} (|u^{p+1}|^2 - |u^p|^2 + 2i \operatorname{Im}(u^{p+1} \overline{u^p})). \end{aligned}$$

En intégrant le résultat sur le domaine Ω , il vient

$$\int_{x_\ell}^{x_r} \frac{|u^{p+1}|^2 - |u^p|^2 + 2i \operatorname{Im}(u^{p+1} \overline{u^p})}{2\Delta t} dx - \int_{x_\ell}^{x_r} i \overline{v^{p+1}} \partial_x^2 v^{p+1} dx - \int_{x_\ell}^{x_r} i W^{p+1} |v^{p+1}|^2 dx = 0.$$

On intègre alors par parties le deuxième terme. Cela donne, pour $p \geq 0$,

$$\int_{\Omega} \frac{|u^{p+1}|^2 - |u^p|^2 + 2i \operatorname{Im}(u^{p+1}\overline{u^p})}{2\Delta t} dx - i \left[\overline{v^{p+1}} \partial_x v^{p+1} \right]_{x_\ell}^{x_r} + i \int_{\Omega} |\partial_x v^{p+1}|^2 dx - i \int_{\Omega} W^{p+1} |v^{p+1}|^2 dx = 0.$$

Comme le terme W est réel (on considère un potentiel réel), la partie réelle de cette expression donne

$$\frac{\|u^{p+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|u^p\|_{L^2(\Omega)}^2}{2\Delta t} = \operatorname{Re} \left(i \left[\overline{v^{p+1}} \partial_x v^{p+1} \right]_{x_\ell}^{x_r} \right).$$

On somme les termes de l'égalité précédente pour p allant de 0 à $n-1$, il reste

$$\frac{1}{2\Delta t} \left(\|u^n\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|u^0\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) = \operatorname{Re} \left(\sum_{p=0}^{n-1} i \left[\overline{v^{p+1}} \partial_x v^{p+1} \right]_{x_\ell}^{x_r} \right) = \sum_{\gamma=\ell, r} A_\gamma, \quad (1.158)$$

avec

$$A_\gamma = \operatorname{Re} \left(\sum_{p=0}^{n-1} i \overline{v^{p+1}(x_\gamma)} \partial_{\mathbf{n}} v^{p+1}(x_\gamma) \right) \quad \text{pour } \gamma = \ell, r. \quad (1.159)$$

Nous allons à présent utiliser l'expression de la condition aux limites discrétisée pour déterminer le signe des termes A_γ . Nous considérons ici la condition d'ordre quatre sous l'hypothèse appropriée sur $\partial_{\mathbf{n}} W$. Le résultat pour la condition d'ordre deux s'en déduira immédiatement. Enfin, on se limite au bord droit x_r du domaine, le bord gauche se traitant de manière similaire. Les termes de la somme se réécrivent

$$\begin{aligned} i \overline{v^{p+1}}(x_r) \partial_{\mathbf{n}} v^{p+1}(x_r) &= -ie^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} e^{i\mathscr{W}_r^{p+1}} \overline{v_r^{p+1}} \sum_{k=0}^{p+1} \beta_{p+1-k} e^{-i\mathscr{W}_r^k} v_r^k \\ &\quad - \operatorname{sg}(\partial_{\mathbf{n}} W_r^{p+1}) \frac{\Delta t}{2} \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W_r^{p+1}|}}{2} e^{i\mathscr{W}_r^{p+1}} \overline{v_r^{p+1}} \sum_{k=0}^{p+1} \gamma_{p+1-k} \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W_r^k|}}{2} e^{-i\mathscr{W}_r^k} v_r^k, \end{aligned}$$

donc la somme est égale à

$$\begin{aligned} \sum_{p=0}^{n-1} i \overline{v^{p+1}}(x_r) \partial_{\mathbf{n}} v^{p+1}(x_r) &= -ie^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{p=0}^{n-1} \overline{\chi_r^{p+1}} \sum_{k=0}^{p+1} \beta_{p+1-k} \chi_r^k \\ &\quad - \operatorname{sg}(\partial_{\mathbf{n}} W_r) \frac{\Delta t}{2} \sum_{p=0}^{n-1} \overline{\psi_r^{p+1}} \sum_{k=0}^{p+1} \gamma_{p+1-k} \psi_r^k, \end{aligned}$$

avec $\chi_r^k = e^{-i\mathscr{W}_r^k} v_r^k$ et $\psi_r^k = \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W_r^k|}}{2} e^{-i\mathscr{W}_r^k} v_r^k$. L'hypothèse d'indépendance en temps du signe de $\partial_{\mathbf{n}} W_{l,r}$ est utilisée de manière fondamentale pour sortir le signe de la somme. Remarquons également que les fonctions χ et ψ étant nulles au temps $t=0$, les sommes peuvent être réindiciées en

$$\sum_{p=0}^n \overline{\chi_r^p} \sum_{k=0}^p \beta_{p-k} \chi_r^k \quad \text{et} \quad \sum_{p=0}^n \overline{\psi_r^p} \sum_{k=0}^p \gamma_{p-k} \psi_r^k.$$

Pour étudier le signe de ces termes, on s'appuie sur le lemme suivant, analogue semi-discret du lemme 1.10.

Lemme 1.22. Pour $(\beta_n)_n$, $(\alpha_n)_n$ et $(\gamma_n)_n$ les suites de coefficients données par (1.149), et $(\varphi^k)_{k \in \mathbb{N}}$ une suite de nombres complexes telle que $\hat{R}_\varphi < 1$, on a les propriétés suivantes :

$$Q_\beta = \sum_{p=0}^n \overline{\varphi^p} \sum_{k=0}^p \beta_{p-k} \varphi^k \in e^{i\pi/4} \mathbb{R}^+ \cup e^{-i\pi/4} \mathbb{R}^+, \quad (1.160)$$

$$Q_\alpha = \sum_{p=0}^n \overline{\varphi^p} \sum_{k=0}^p \alpha_{p-k} \varphi^k \in e^{i\pi/4} \mathbb{R}^+ \cup e^{-i\pi/4} \mathbb{R}^+, \quad (1.161)$$

$$Q_\gamma = \sum_{p=0}^n \overline{\varphi^p} \sum_{k=0}^p \gamma_{p-k} \varphi^k \in \{\operatorname{Re}(z) \geq 0\}. \quad (1.162)$$

On a, sous ces notations,

$$A_r = \operatorname{Re} \left(-ie^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} Q_\beta - \operatorname{sg}(\partial_{\mathbf{n}} W_r) \frac{\Delta t}{2} Q_\gamma \right). \quad (1.163)$$

Or, le lemme assure que

$$-ie^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} Q_\beta \in \mathbb{R}^- \cup i\mathbb{R}^-,$$

donc la partie réelle du premier terme de (1.163) est négative. Par ailleurs, toujours d'après le lemme, on a $\operatorname{Re}(Q_\gamma) \geq 0$, et on a fait l'hypothèse que $\partial_{\mathbf{n}} W_r$ reste positif. Ceci assure que la partie réelle du deuxième terme est négative également, et conclut la preuve du théorème 1.21. \square

Prouvons à présent le lemme. Seuls les résultats (1.160) et (1.162) sont nécessaires pour le moment, mais la preuve du résultat (1.161) est totalement analogue à celle de (1.160) et sera utile en dimension deux, dans la preuve du théorème 4.46.

Preuve du lemme. Pour cette preuve, nous nous appuyons sur un résultat démontré dans la thèse de G. Dauphin [44]. Avant d'énoncer ce résultat, rappelons quelques termes de vocabulaires provenant de la théorie du traitement du signal. Un *filtre discret* est défini comme une suite $(h_p)_{0 \leq p \leq n}$ à coefficients réels. Pour le filtre discret (h_p) , la *sortie associée à l'entrée* $(u_p)_{0 \leq p \leq n}$ est la suite $(y_p)_{0 \leq p \leq n}$ définie par $y_p = h_p \star u_p$, au sens de la convolution discrète déjà évoquée. Enfin, on appelle *fonction de transfert* associée au filtre discret (h_p) la fonction \mathcal{H}_h définie pour $|z| > 1$ par

$$\mathcal{H}_h(z) = \sum_{n=0}^{+\infty} h_n z^{-n}.$$

Ainsi, la fonction de transfert du filtre (h_p) n'est autre que la transformée en \mathcal{Z} de (h_p) . On note encore $\mathbb{E} = \{|z| > 1\}$ l'extérieur du disque unité, et $\mathbb{H}^1(\mathbb{E})$ l'ensemble des fonctions de transfert \mathcal{H} holomorphes sur \mathbb{E} qui vérifient la condition

$$\sup_{r>1} \int_{-\pi}^{\pi} |\mathcal{H}(re^{i\omega})| d\omega < \infty,$$

de sorte que les fonctions de $\mathbb{H}^1(\mathbb{E})$ sont prolongeables de manière intégrable sur le cercle unité. De [44], nous citons le théorème suivant.

Théorème 1.23. Soient (u_p) et $y_p = (h_p \star u_p)$ les entrées et sorties complexes du filtre à coefficients réels \mathcal{H} . Si $\mathcal{H} \in \mathbb{H}^1(\mathbb{E})$, alors on a

$$\sum_{p=0}^n \overline{u_p} (h_p \star u_p) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \mathcal{H}(e^{i\omega}) \left| \sum_{p=0}^n u_p e^{-i\omega p} \right|^2 d\omega. \quad (1.164)$$

Ce théorème est démontré en annexe B.2 de [44] et assure l'équivalence de la définition de la notion de positivité des filtres numériques par la condition entrée-sortie ($\sum_p u_p y_p \geq 0$ pour une entrée réelle $(u_p)_p$) et par la condition fréquentielle ($\operatorname{Re}(\mathcal{H}(e^{i\omega})) \geq 0$ pour $\omega \in]-\pi; \pi[$). Nous allons appliquer ce résultat aux filtres discrets (β_p) et (α_p) .

Afin de prouver le lemme 1.22, on réécrit d'abord le terme Q_β sous forme de convolution :

$$Q_\beta = \sum_{p=0}^n \left(\overline{\varphi^p} \sum_{k=0}^p \beta_{p-k} \varphi^k \right) = \sum_{p=0}^n \overline{\varphi^p} (\beta_p \star \varphi^p).$$

En termes de théorie du signal, la suite $(\beta_p \star \varphi^p)$ est la sortie associée au filtre discret (β_p) . La fonction de transfert \mathcal{H}_β du filtre (β_p) , qui correspond à sa transformée en \mathcal{Z} , est donnée par (1.150). On a donc, pour $\omega \in]-\pi; \pi[$,

$$\mathcal{H}_\beta(e^{i\omega}) = \sqrt{\frac{e^{i\omega} - 1}{e^{i\omega} + 1}},$$

et cette fonction est intégrable sur $]-\pi; \pi[$ malgré sa singularité en $\omega = \pm\pi$. On est donc dans les conditions d'application du théorème 1.23, et on a

$$Q_\beta = \sum_{p=0}^n \overline{\varphi^p} (\beta_p \star \varphi^p) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \mathcal{H}_\beta(e^{i\omega}) \left| \sum_{p=0}^n \varphi^p e^{-i\omega p} \right|^2 d\omega,$$

c'est-à-dire

$$Q_\beta = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sqrt{\frac{e^{i\omega} - 1}{e^{i\omega} + 1}} \left| \sum_{p=0}^n \varphi^p e^{-i\omega p} \right|^2 d\omega.$$

Or pour $\omega \in]-\pi; \pi[$,

$$\sqrt{\frac{e^{i\omega} - 1}{e^{i\omega} + 1}} = \sqrt{i \tan\left(\frac{\omega}{2}\right)},$$

donc l'application $z \mapsto \sqrt{\frac{z-1}{z+1}}$ envoie le cercle unité sur $e^{i\pi/4}\mathbb{R}^+ \cup e^{-i\pi/4}\mathbb{R}^+$, ce qui implique que

$$Q_\beta \in e^{i\pi/4}\mathbb{R}^+ \cup e^{-i\pi/4}\mathbb{R}^+.$$

En particulier, $-ie^{-i\pi/4}Q_\beta$ est de partie réelle négative.

De manière similaire, la fonction de transfert associée au filtre discret (α_p) est $\mathcal{Z}(\alpha_p)(z)$ donnée par (1.150). On a alors, pour $\omega \in]0; 2\pi[$,

$$\mathcal{H}_\alpha(e^{i\omega}) = \sqrt{\frac{e^{i\omega} + 1}{e^{i\omega} - 1}},$$

donc $\mathcal{H}_\alpha(e^{i\omega})$ est intégrable sur $]0; 2\pi[$. On a donc, en vertu du théorème 1.23,

$$Q_\alpha = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \mathcal{H}_\alpha(e^{i\omega}) \left| \sum_{p=0}^n \varphi^p e^{-i\omega p} \right|^2 d\omega.$$

Or, l'application $z \mapsto \sqrt{\frac{z+1}{z-1}}$ envoie le cercle unité sur $e^{i\pi/4}\mathbb{R}^+ \cup e^{-i\pi/4}\mathbb{R}^+$, ce qui assure (1.161).

La preuve de (1.162) est un peu différente. En effet, la fonction de transfert associée au filtre (γ_p) est

$$\mathcal{H}_\gamma(z) = \frac{z+1}{z-1}$$

qui est singulière en $z = 1$, et n'est pas intégrable sur le cercle unité. On procède donc différemment. Le terme Q_γ peut s'interpréter comme un produit scalaire hermitien

$$Q_\gamma = \sum_{p=0}^n \overline{\varphi^p} (\gamma_p \star \varphi^p) = {}^t \overline{\varphi} A \varphi = \langle \varphi, A \varphi \rangle$$

où φ est le vecteur de taille $n+1$ à coefficients complexes

$$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{pmatrix},$$

et A désigne la matrice de taille $(n+1) \times (n+1)$ à coefficients réels, définie par

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 2 & 1 & \ddots & & \vdots \\ 2 & 2 & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & 0 \\ 2 & \dots & \dots & 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

La matrice $\tilde{A} = \frac{A+A^*}{2}$ étant la matrice ne contenant que des 1, elle est hermitienne positive, puisque ses valeurs propres sont 0 (avec ordre de multiplicité n) et $n+1$ (d'ordre de multiplicité un). Par conséquent, pour tout vecteur \mathbf{x} réel, on a

$$\langle \mathbf{x}, A \mathbf{x} \rangle \geq 0.$$

Décomposons maintenant le vecteur complexe φ en $\varphi = \mathbf{x} + i\mathbf{y}$ avec \mathbf{x} et \mathbf{y} réels. On calcule le produit scalaire hermitien

$$Q_\gamma = \langle \varphi, A \varphi \rangle = \langle \mathbf{x}, A \mathbf{x} \rangle + \langle \mathbf{y}, A \mathbf{y} \rangle + i[\langle \mathbf{x}, A \mathbf{y} \rangle - \langle \mathbf{y}, A \mathbf{x} \rangle].$$

On a donc

$$\operatorname{Re}(Q_\gamma) = \langle \mathbf{x}, A \mathbf{x} \rangle + \langle \mathbf{y}, A \mathbf{y} \rangle \geq 0,$$

et

$$\operatorname{Im}(Q_\gamma) = \langle \mathbf{x}, A \mathbf{y} \rangle - \langle \mathbf{y}, A \mathbf{x} \rangle,$$

ce terme étant non nul dès que \mathbf{x} ou \mathbf{y} sont non nuls, puisque A n'est pas symétrique. Par conséquent, on a

$$Q_\gamma \in \{\operatorname{Re}(z) \geq 0\}.$$

Ceci achève la preuve du lemme 1.22. □

1.7.4 Discrétisation des CLA basée sur les fonctions auxiliaires

La stratégie précédente, basée sur des opérateurs de convolution discrets, semble précise et fournit un résultat de stabilité, mais peut entraîner des coûts de calcul importants. De plus, nous verrons lors des simulations numériques que des pas de temps Δt très petits sont requis pour atteindre la précision optimale de la condition aux limites artificielle basée sur les opérateurs de convolution. Cette contrainte peut être assouplie en suivant l'approche décrite ci-après, inspirée de [33].

Approximants de Padé

On peut approcher de manière rationnelle la racine carrée grâce une approximation à m termes :

$$R_m(z) = a_0^m + \sum_{k=1}^m \frac{a_k^m z}{z + d_k^m} = \sum_{k=0}^m a_k^m - \sum_{k=1}^m \frac{a_k^m d_k^m}{z + d_k^m}, \quad (1.165)$$

où les coefficients a_k^m et d_k^m sont donnés par $a_0^m = 0$, et pour $1 \leq k \leq m$

$$a_k^m = \frac{1}{m \cos^2 \left(\frac{(2k-1)\pi}{4m} \right)}, \quad d_k^m = \tan^2 \left(\frac{(2k-1)\pi}{4m} \right). \quad (1.166)$$

Pour éviter la coupure sur la demi-droite \mathbb{R}^- , on peut utiliser des coefficients de Padé complexes liés à la technique de rotation de branche d'angle θ . D'après [17], la valeur optimale de θ est $\theta = \pi/4$. Avec la rotation de branche, \sqrt{z} est approché par

$$\sqrt{z} \approx e^{i\theta/2} R_m(e^{-i\theta} z),$$

d'où

$$\sqrt{z} \approx \sum_{k=0}^m A_k^m - \sum_{k=1}^m \frac{A_k^m D_k^m}{z + D_k^m}$$

avec les nouveaux coefficients $A_0^m = 0$, et pour $1 \leq k \leq m$:

$$A_k^m = e^{i\theta/2} a_k^m = \frac{e^{i\theta/2}}{m \cos^2 \left(\frac{(2k-1)\pi}{4m} \right)}, \quad D_k^m = e^{i\theta} d_k^m = e^{i\theta} \tan^2 \left(\frac{(2k-1)\pi}{4m} \right). \quad (1.167)$$

Approximation des conditions ABC_2^M

Nous avons vu que les conditions ABC_1^M et ABC_2^M sont équivalentes dans le cas de potentiels indépendants du temps. Cela n'est plus vrai pour une fonction V qui dépend du temps. Dans une telle situation, le schéma développé précédemment peut être utilisé pour traiter le cas de ABC_1^M . Quant à ABC_2^M , la discrétisation des opérateurs pseudodifférentiels qui y sont impliqués n'est pas facile à obtenir. En particulier, les opérateurs dont le symbole est en racine carrée ne peuvent pas être exprimés en terme d'opérateurs fractionnaires en temps, car on n'a pas d'analogue au lemme 1.15 dans ce cas. Pour ces raisons, nous introduisons les approximations suivantes.

Lemme 1.24. *Nous avons les deux approximations suivantes :*

$$Op \left(\sqrt{-\tau + V} \right) = \sqrt{i\partial_t + V} \quad \text{mod } OPS_S^{-3/2}, \quad (1.168)$$

et

$$Op \left(\frac{\partial_x V}{4} \frac{1}{-\tau + V} \right) = \text{sg}(\partial_n V) \frac{\sqrt{|\partial_n V|}}{2} (i\partial_t + V)^{-1} \frac{\sqrt{|\partial_n V|}}{2} \quad \text{mod } OPS_S^{-3}. \quad (1.169)$$

Avant de démontrer ce lemme, remarquons que dans l'optique d'écrire la condition aux limites d'ordre deux, incluant les termes $\lambda_{1/2}^+$ et λ_0^+ , on pourrait se contenter dans (1.168) d'approcher le premier opérateur par un opérateur d'ordre $-1/2$. Cependant, cela ne suffit pas si on veut écrire la condition d'ordre quatre, qui inclut le symbole λ_{-1}^+ d'ordre -1 . De manière générale, il faut prendre soin que les opérateurs négligés dans ces approximations soient d'ordre strictement inférieur à l'ordre des derniers opérateurs considérés dans la condition aux limites. Nous avons écrit ici les approximations permettant d'écrire les conditions aux limites jusqu'à l'ordre quatre.

Démonstration. Posons $A = \sqrt{i\partial_t + V}$. L'opérateur A est d'ordre $1/2$, donc son symbole total σ_A admet un développement asymptotique sous la forme :

$$\sigma(A) \sim \sum_{j=0}^{+\infty} \sigma_{1/2-j/2}.$$

Comme $A^2 = i\partial_t + V$, on a d'une part

$$\sigma(A^2) = \sigma(i\partial_t + V) = -\tau + V, \quad (1.170)$$

et d'autre part, d'après la formule de composition

$$\sigma(A^2) = \sigma(AA) \sim \sum_{\alpha=0}^{+\infty} \frac{(-i)^\alpha}{\alpha!} \partial_\tau^\alpha \sigma_A \partial_t^\alpha \sigma_A. \quad (1.171)$$

On compare les termes de même ordre issus des expressions (1.170) et (1.171). L'identification des termes d'ordre 1 donne

$$(\sigma_{1/2})^2 = -\tau + V,$$

d'où

$$\sigma_{1/2} = \pm \sqrt{-\tau + V}.$$

Pour déterminer le signe de $\sigma_{1/2}$, on se réfère au cas sans potentiel. Lorsque $V = 0$, l'opérateur A est égal à $A = \sqrt{i\partial_t}$ dont le symbole est $\sqrt{-\tau}$. En conséquence, c'est le signe plus qui est retenu pour $\sigma_{1/2}$ ici, de sorte que

$$\sigma_{1/2} = \sqrt{-\tau + V}.$$

L'identification des termes d'ordre $1/2$ donne

$$2\sigma_0\sigma_{1/2} = 0,$$

d'où $\sigma_0 = 0$. La lecture des termes d'ordre 0 conduit *a priori* à

$$2\sigma_{1/2}\sigma_{-1/2} - i\partial_\tau\sigma_{1/2}\partial_t\sigma_{1/2} = 0,$$

mais comme $\sigma_{1/2}$ n'est pas un symbole homogène, $\partial_t\sigma_{1/2}$ est en fait d'ordre $-1/2$ et non d'ordre $1/2$. En conséquence, le terme produit $\partial_\tau\sigma_{1/2}\partial_t\sigma_{1/2}$ est d'ordre -1 , et ne sera comptabilisé que pour le calcul de $\sigma_{-3/2}$. Il reste alors $\sigma_{-1/2} = 0$. De la même manière, on obtient $\sigma_{-1} = 0$. Enfin, l'identification des termes d'ordre -1 conduit à

$$2\sigma_{-3/2}\sigma_{1/2} + 2\sigma_{-1}\sigma_0 - (\sigma_{-1/2})^2 - i\partial_\tau\sigma_{1/2}\partial_t\sigma_{1/2} = 0.$$

Il vient alors

$$\sigma_{-3/2} = \frac{i\partial_\tau\sigma_{1/2}\partial_t\sigma_{1/2}}{2\sigma_{1/2}} = \frac{i\partial_t V}{8\sqrt{-\tau+V}^3}.$$

Finalement, on a obtenu les premiers termes du développement asymptotique de $\sigma(A)$

$$\sigma(\sqrt{i\partial_t+V}) = \sqrt{-\tau+V} - \frac{i}{8} \frac{\partial_t V}{\sqrt{-\tau+V}^3} \quad \text{mod } S_S^{-5/2}.$$

En particulier, nous avons

$$\sigma(\sqrt{i\partial_t+V}) = \sqrt{-\tau+V} \quad \text{mod } S_S^{-3/2}.$$

En revenant aux d'opérateurs, cela fournit la relation (1.168).

On traite le cas du deuxième terme de manière similaire, en posant $B = (i\partial_t + V)^{-1}$. L'opérateur B est d'ordre -1 et son symbole total admet le développement asymptotique

$$\sigma(B) \sim \sum_{j=0}^{+\infty} \sigma_{-1-j}.$$

L'opérateur inverse $B^{-1} = i\partial_t + V$ a pour symbole $\sigma(B^{-1}) = -\tau + V$. On utilise alors l'identité $\sigma(BB^{-1}) = 1$ pour en déduire l'asymptotique de B

$$1 = \sigma(BB^{-1}) = \sum_{\alpha=0}^{+\infty} \frac{(-i)^\alpha}{\alpha!} \partial_\tau^\alpha \sigma(B) \partial_t^\alpha \sigma(B^{-1}). \quad (1.172)$$

Comme $\partial_\tau \sigma(B^{-1}) = -1$ et $\partial_\tau^\alpha \sigma(B^{-1}) = 0$ dès que $\alpha \geq 2$, il reste :

$$1 = (-\tau + V)\sigma(B) + i\partial_t \sigma(B). \quad (1.173)$$

Compte tenu de l'asymptotique de B , l'équation (1.173) se réécrit :

$$1 = \sum_{j=0}^{+\infty} (-\tau + V)\sigma_{-1-j} + \sum_{j=0}^{+\infty} i\partial_t \sigma_{-1-j}.$$

La lecture des termes d'ordre 0 conduit à

$$1 = (-\tau + V)\sigma_{-1},$$

d'où le terme σ_{-1}

$$\sigma_{-1} = \frac{1}{-\tau + V}.$$

La lecture des termes d'ordre -1 conduit *a priori* à

$$0 = (-\tau + V)\sigma_{-2} + i\partial_t \sigma_{-1},$$

mais, dû à l'inhomogénéité de σ_{-1} , le terme dérivé $\partial_t \sigma_{-1}$ est d'ordre -2 . Il interviendra donc dans le calcul de σ_{-3} . On en déduit que $\sigma_{-2} = 0$. La lecture des termes d'ordre -2 conduit à

$$0 = (-\tau + V)\sigma_{-3} + i\partial_t \sigma_{-1},$$

d'où l'identification

$$\sigma_{-3} = \frac{i\partial_t V}{(-\tau + V)^3}.$$

Finalement, le début de l'asymptotique de $\sigma(B)$ est :

$$\sigma\left((i\partial_t + V)^{-1}\right) = \frac{1}{-\tau + V} + \frac{i\partial_t V}{(-\tau + V)^3} \pmod{S_S^{-4}},$$

ce qui donne

$$\sigma\left((i\partial_t + V)^{-1}\right) = \frac{1}{-\tau + V} \pmod{S_S^{-3}}. \quad (1.174)$$

D'autre part, si $\sigma_p(P)$ désigne le symbole principal d'un opérateur pseudodifférentiel P , l'égalité suivante est vérifiée :

$$\sigma_p\left(\operatorname{sg}(\partial_{\mathbf{n}}V) \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}}{2} (i\partial_t + V)^{-1} \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}}{2}\right) = \operatorname{sg}(\partial_{\mathbf{n}}V) \frac{|\partial_{\mathbf{n}}V|}{4} \sigma_p(i\partial_t + V)^{-1}. \quad (1.175)$$

On en déduit, d'après (1.174)

$$\sigma_p\left(\operatorname{sg}(\partial_{\mathbf{n}}V) \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}}{2} (i\partial_t + V)^{-1} \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}}{2}\right) = \frac{\partial_x V}{4} \frac{1}{-\tau + V}. \quad (1.176)$$

En combinant (1.174) et (1.176), on obtient (1.169) au niveau des opérateurs. \square

En conséquence du lemme 1.24, l'opérateur

$$\Lambda_2^2(x, t, \partial_t) = Op\left(-i\sqrt{-\tau + V}\right)$$

est approché par

$$\widetilde{\Lambda}_2^2(x, t, \partial_t) = -i\sqrt{i\partial_t + V}, \quad (1.177)$$

et l'opérateur

$$\Lambda_2^4(x, t, \partial_t) = \Lambda_2^2(x, t, \partial_t) + Op\left(\frac{\partial_x V}{4} \frac{1}{-\tau + V}\right)$$

est approché par

$$\widetilde{\Lambda}_2^4(x, t, \partial_t) = \widetilde{\Lambda}_2^2(x, t, \partial_t) + \operatorname{sg}(\partial_{\mathbf{n}}V) \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}}{2} (i\partial_t + V)^{-1} \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}}{2}, \quad (1.178)$$

les termes additionnels étant négligeables dans les deux cas. Les nouvelles conditions approchées \widetilde{ABC}_2^M sont finalement données par la proposition suivante.

Proposition 1.25. *Les conditions aux limites ABC_2^M données par la proposition 1.14 sont approchées par les conditions d'ordre M suivantes :*

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\sqrt{i\partial_t + V}u = 0, \quad (1.179)$$

pour la condition d'ordre deux, notée \widetilde{ABC}_2^2 , et

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\sqrt{i\partial_t + V}u + \operatorname{sg}(\partial_{\mathbf{n}}V) \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}}{2} (i\partial_t + V)^{-1} \left(\frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}}{2} u\right) = 0, \quad (1.180)$$

pour la condition d'ordre quatre, notée \widetilde{ABC}_2^4 .

Ces approximations des conditions ABC_2^M faciliteront leur implémentation.

Remarque 1.4. Les approximations faites en passant des conditions ABC_2^M aux conditions \widetilde{ABC}_2^M sont raisonnables, au sens où les opérateurs négligés dans (1.168) et (1.169) sont d'ordre inférieur aux derniers termes retenus dans la condition aux limites. En effet, le premier terme négligé dans (1.118) est d'ordre $-3/2$, alors que le dernier opérateur retenu dans la condition aux limites est d'ordre -1 . En revanche, il ne serait pas possible d'inclure dans la condition l'opérateur associé au symbole $\lambda_{-3/2}^+$ sans y inclure également le terme d'ordre $-3/2$ négligé dans (1.168). Ainsi, la précision requise lors de troncatures telles que (1.168)–(1.169) est évidemment liée à l'ordre de la condition aux limites considérée.

Introduction des fonctions auxiliaires pour \widetilde{ABC}_2^M et discrétisation

Commençons par étudier la condition d'ordre deux \widetilde{ABC}_2^2 . L'approche alternative aux convolutions discrètes consiste à approcher l'opérateur de racine carrée $i\partial_t + V$ par son approximant de Padé d'ordre m , défini par (1.165), et dont nous retiendrons la deuxième formulation. Rappelons que pour un nombre complexe z , cet approximant $R_m(z)$ est défini par

$$R_m(z) = \sum_{k=0}^m a_k^m - \sum_{k=1}^m \frac{a_k^m d_k^m}{z + d_k^m},$$

où les coefficients $(a_k^m)_{0 \leq k \leq m}$ et $(d_k^m)_{1 \leq k \leq m}$ sont donnés par (1.166) ou (1.167). Formellement, $\sqrt{i\partial_t + V}$ est alors approché par $R_m(i\partial_t + V)$, ce qui donne en remplaçant dans (1.179)

$$\partial_{\mathbf{n}} u - i \sum_{k=0}^m a_k^m u + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m (i\partial_t + V + d_k^m)^{-1} u = 0, \quad (1.181)$$

qui définit une condition aux limites artificielles d'ordre deux, désignée par $ABC_{2,m}^2$ dans la suite. Pour réécrire cette condition sous une forme se prêtant à son implémentation numérique, il est classique d'introduire m fonctions auxiliaires φ_k , pour $1 \leq k \leq m$ (voir Lindmann [66]) comme suit :

$$\varphi_k = (i\partial_t + V + d_k^m)^{-1} u, \quad 1 \leq k \leq m. \quad (1.182)$$

Cette équation est constituée de deux équations différentielles du premier ordre en temps, portant sur la fonction φ_k , l'une au point x_ℓ et l'autre au point x_r

$$i\partial_t \varphi_k + V \varphi_k + d_k^m \varphi_k = u, \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m, \quad x = x_{\ell,r}, \quad (1.183)$$

avec la condition initiale $\varphi_k(x, 0) = 0$ en chacun des points $x = x_{\ell,r}$.

Finalement, la discrétisation de la condition aux limites $ABC_{2,m}^2$ conduit à un système d'une équation et de m équations différentielles couplées, portant sur u et sur les m fonctions auxiliaires φ_k , $1 \leq k \leq m$

$$\begin{cases} \partial_{\mathbf{n}} u - i \sum_{k=0}^m a_k^m u + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k = 0, & x = x_{\ell,r}, \\ i\partial_t \varphi_k + V \varphi_k + d_k^m \varphi_k = u, & 1 \leq k \leq m, \quad x = x_{\ell,r}, \\ \varphi_k(x, 0) = 0, & 1 \leq k \leq m. \end{cases} \quad (1.184)$$

Considérons à présent la discrétisation du problème associé à cette condition. La discrétisation (1.125) pour l'équation intérieure est inchangée. En conséquence, la discrétisation du système (1.184),

en utilisant les fonctions $v^{n+1} = u^{n+1/2}$ et $W^{n+1} = V^{n+1/2}$, est la suivante

$$\begin{cases} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} - i \sum_{k=0}^m a_k^m v^{n+1} + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k^{n+1/2} = 0, & x = x_{\ell,r}, \\ i \frac{\varphi_k^{n+1} - \varphi_k^n}{\Delta t} + W^{n+1} \varphi_k^{n+1/2} + d_k^m \varphi_k^{n+1/2} = v^{n+1}, & 1 \leq k \leq m, x = x_{\ell,r}, \\ \varphi_k^0(x_{\ell,r}) = 0, & 1 \leq k \leq m. \end{cases} \quad (1.185)$$

Si le système continu (1.184) couple les variables u et φ_k , dans le système discrétisé (1.185), les variables v^{n+1} et $\varphi_k^{n+1/2}$ peuvent être partiellement découplées. En effet, on peut tirer de la deuxième équation l'expression de $\varphi_k^{n+1/2}$ au point $x_{\ell,r}$ en fonction de φ_k^n et de v^{n+1}

$$\varphi_k^{n+1/2}(x_{\ell,r}) = \frac{1}{\frac{2i}{\Delta t} + W_{\ell,r}^{n+1} + d_k^m} v^{n+1}(x_{\ell,r}) + \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + W_{\ell,r}^{n+1} + d_k^m} \varphi_k^n(x_{\ell,r}), \quad (1.186)$$

pour $1 \leq k \leq m$. Cette expression de $\varphi_k^{n+1/2}$ est réinjectée dans la première équation, de manière à exprimer $\partial_{\mathbf{n}} v^{n+1}$ en fonction de v^{n+1} et φ_k^n uniquement. On obtient, en $x = x_{\ell,r}$

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} - i \left(\sum_{k=0}^m a_k^m \right) v^{n+1} + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \frac{1}{\frac{2i}{\Delta t} + W^{n+1} + d_k^m} v^{n+1} \\ + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + W^{n+1} + d_k^m} \varphi_k^n = 0. \end{aligned} \quad (1.187)$$

L'équation (1.187) donne une condition aux limites artificielle locale inhomogène, de type Fourier-Robin, dans laquelle le second membre est actualisé grâce à (1.186).

Voyons à présent ce qu'il en est pour la condition d'ordre quatre donnée par (1.180). De même que pour la condition d'ordre deux, on note $\text{ABC}_{2,m}^4$ la condition résultant de (1.180) après approximation du premier terme par m fonctions de Padé. Il faut ajouter au système (1.186)–(1.187) la discrétisation du terme

$$\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V) \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}}{2} (i\partial_t + V)^{-1} \left(\frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}}{2} u \right).$$

Pour cela, on applique à nouveau le principe des fonctions auxiliaires. On introduit la fonction ψ définie par

$$\psi = (i\partial_t + V)^{-1} \left(\frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}}{2} u \right). \quad (1.188)$$

Avec cette définition, le terme correctif à ajouter dans la première équation de (1.184) s'écrit

$$\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V) \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}}{2} \psi.$$

Quant à ψ , elle est solution d'une équation différentielle d'ordre un

$$i\partial_t \psi + V\psi = \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}}{2} u, \quad x = x_{\ell,r},$$

avec la condition initiale $\psi(x_{\ell,r}, 0) = 0$. Le système associé à $ABC_{2,m}^4$ est finalement :

$$\begin{cases} \partial_{\mathbf{n}} u - i \sum_{k=0}^m a_k^m u + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k + \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V) \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}}{2} \psi = 0, & x = x_{\ell,r}, \\ i \partial_t \varphi_k + V \varphi_k + d_k^m \varphi_k = u, & 1 \leq k \leq m, \quad x = x_{\ell,r}, \\ i \partial_t \psi + V \psi = \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}}{2} u, & x = x_{\ell,r}, \\ \varphi_k(x_{\ell,r}, 0) = 0, & 1 \leq k \leq m, \\ \psi(x_{\ell,r}, 0) = 0. \end{cases} \quad (1.189)$$

Pour conclure, étudions la discrétisation du système (1.189) associé à la condition d'ordre quatre. Sa discrétisation naturelle, en accord avec le schéma intérieur, est

$$\begin{cases} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} - i \sum_{k=0}^m a_k^m v^{n+1} + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k^{n+1/2} + \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}) \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}|}}{2} \psi^{n+1/2} = 0, & x = x_{\ell,r}, \\ i \frac{\varphi_k^{n+1} - \varphi_k^n}{\Delta t} + W^{n+1} \varphi_k^{n+1/2} + d_k^m \varphi_k^{n+1/2} = v^{n+1}, & 1 \leq k \leq m, \quad x = x_{\ell,r}, \\ i \frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\Delta t} + W^{n+1} \psi^{n+1/2} = \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}|}}{2} v^{n+1}, & x = x_{\ell,r}, \\ \varphi_k^0(x_{\ell,r}) = 0, \quad \psi^0(x_{\ell,r}) = 0. \end{cases} \quad (1.190)$$

On découple le système (1.190) en procédant comme pour l'ordre deux. Les deuxième et troisième équations du système (1.190) permettent d'exprimer $\varphi_k^{n+1/2}$ en fonction de v^{n+1} et φ_k^n , d'une part, et $\psi^{n+1/2}$ en fonction de v^{n+1} et ψ^n , d'autre part. On réinjecte ensuite ces expressions dans la première équation afin d'exprimer $\partial_{\mathbf{n}} v^{n+1}$ en fonction de v^{n+1} , φ_k^n et ψ^n uniquement. L'équation de mise à jour de $\varphi_k^{n+1/2}$ est inchangée par rapport à (1.186). Pour les fonctions $\psi^{n+1/2}$, on obtient

$$\psi^{n+1/2}(x_{\ell,r}) = \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W_{\ell,r}^{n+1}|}}{2} \frac{1}{\frac{2i}{\Delta t} + W_{\ell,r}^{n+1}} v^{n+1}(x_{\ell,r}) + \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + W_{\ell,r}^{n+1}} \psi^n(x_{\ell,r}). \quad (1.191)$$

Finalement, la première équation de (1.190) devient, en $x = x_{\ell,r}$

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} - i \left(\sum_{k=0}^m a_k^m \right) v^{n+1} + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \frac{1}{\frac{2i}{\Delta t} + W^{n+1} + d_k^m} v^{n+1} + \frac{\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}}{4} \frac{1}{\frac{2i}{\Delta t} + W^{n+1}} v^{n+1} \\ + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + W^{n+1} + d_k^m} \varphi_k^n + \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}) \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}|}}{2} \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + W^{n+1}} \psi^n = 0, \end{aligned} \quad (1.192)$$

et le système complet semi-discrétisé pour $\text{ABC}_{1,m}^4$ est

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} - i \left(\sum_{k=0}^m a_k^m \right) v^{n+1} + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \frac{1}{\frac{2i}{\Delta t} + W^{n+1} + d_k^m} v^{n+1} + \frac{\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}}{4} \frac{1}{\frac{2i}{\Delta t} + W^{n+1}} v^{n+1} \\ + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + W^{n+1} + d_k^m} \varphi_k^n + \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}) \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}|}}{2} \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + W^{n+1}} \psi^n = 0, \quad x = x_{\ell,r}, \\ \varphi_k^{n+1/2} = \frac{1}{\frac{2i}{\Delta t} + W^{n+1} + d_k^m} v^{n+1} + \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + W^{n+1} + d_k^m} \varphi_k^n, \quad x = x_{\ell,r}, \quad 1 \leq k \leq m, \\ \psi^{n+1/2} = \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}|}}{2} \frac{1}{\frac{2i}{\Delta t} + W^{n+1}} v^{n+1} + \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + W^{n+1}} \psi^n, \quad x = x_{\ell,r}, \\ \varphi_k^0(x_{\ell,r}) = \psi^0(x_{\ell,r}) = 0, \quad 1 \leq k \leq m, \end{array} \right. \quad (1.193)$$

pour $0 \leq n \leq N - 1$.

Etude de la stabilité du schéma

On a montré précédemment (voir le théorème 1.21) que les schémas basés sur les convolutions discrètes sont inconditionnellement stables. Cela ne semble pas être le cas lorsqu'on utilise les approximations rationnelles de type Padé. Nous n'avons pas de preuve de ce résultat, mais expliquons tout d'abord pourquoi la stabilité inconditionnelle semble perdue, au travers d'expérimentations numériques. L'un des points-clés du théorème 1.21, lors de la preuve de stabilité inconditionnelle pour le schéma basé sur les opérateurs de convolution, est que l'application

$$F : z \mapsto F(z) := e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{z-1}{z+1}}$$

envoie $\mathcal{C}(0,1)$ sur $\mathbb{R}^+ \cup i\mathbb{R}^-$. Les points images du cercle unité ont donc leur argument égal à $-\pi/2$ ou à 0. Un résultat de stabilité analogue pour l'approximation par Padé pourrait être obtenu si ce résultat restait vrai pour l'application

$$F_m : z \mapsto F_m(z) := e^{-i\pi/4} R_m \left(\frac{z-1}{z+1} \right)$$

au moins pour certaines valeurs de m . Malheureusement, cela semble faux, indépendamment du nombre m de fonctions de Padé. En particulier, les points images par F_m du cercle unité ne sont même pas confinés au quatrième quadrant. Pour illustrer ce point, on représente simultanément sur la figure 1.7 l'image dans le plan complexe de $F(\mathcal{C}(0,1))$ et de $F_{50}(\mathcal{C}(0,1))$ (figure 1.7(a)) puis l'argument des points images (figure 1.7(b)). Comme on peut le voir, l'argument de $F_{50}(\mathcal{C}(0,1))$ ne reste pas inclus dans l'intervalle $[-\frac{\pi}{2}; 0]$. Lorsqu'on prend davantage de fonctions de Padé que $m = 50$, les irrégularités constatées diminuent en amplitude, mais ne disparaissent jamais. Ceci exclut toute preuve d'un résultat de stabilité inconditionnelle pour ce système.

Cependant, des travaux récents [93] ont permis de démontrer des estimations *a priori* pour un système entièrement discrétisé associé à l'équation de Schrödinger avec potentiel, et à des conditions aux limites absorbantes approchées par approximants de Padé, dans le cas de différences finies. Bien que ce résultat ne s'applique pas immédiatement au système semi-discret obtenu ici et à la formulation éléments finis considérée, on peut envisager que les techniques mises en jeu dans [93] s'adaptent et permettent de démontrer, pour cette stratégie également, des estimations *a priori*.

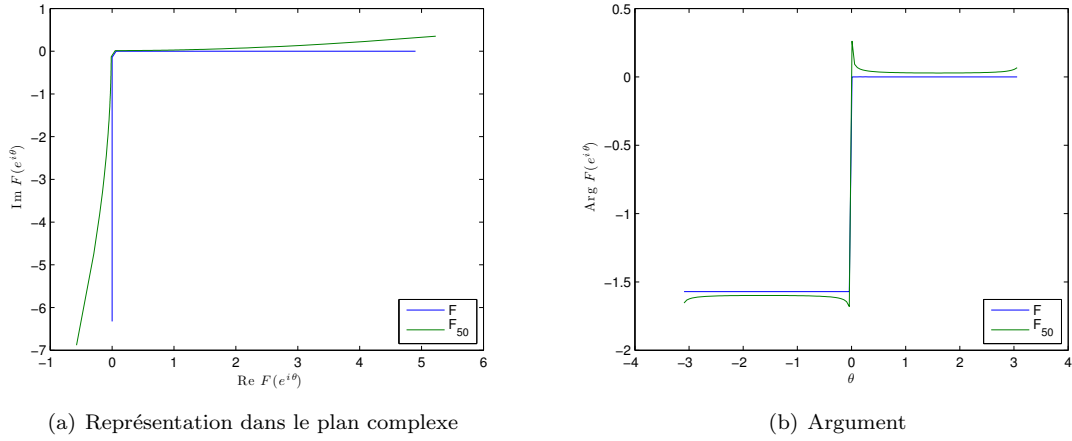


FIGURE 1.7 – Possible perte de stabilité pour l'approximation rationnelle par Padé. On compare $F(e^{i\theta})$ et de $F_{50}(e^{i\theta})$ pour $\theta \in [0; 2\pi]$.

1.8 Résultats numériques

Pour les simulations numériques, on considère la donnée initiale gaussienne

$$u_0(x) = e^{ik_0x - x^2}, \quad (1.194)$$

où k_0 désigne le nombre d'onde, fixé à $k_0 = 10$.

1.8.1 Formulation variationnelle

Le schéma intérieur est donnée par la discrétisation de Crank-Nicolson (1.126). Afin de résoudre numériquement le problème, nous allons utiliser une technique d'éléments finis linéaires. L'intervalle de calcul $[x_\ell; x_r]$ est découpé en n_h éléments uniformes de longueur h . Classiquement, nous considérons les CLA comme des conditions de type Fourier-Robin. Notons $\mathbf{u} \in \mathbb{C}^{n_h+1}$ (resp. \mathbf{v}) le vecteur nodal de l'interpolation \mathbb{P}_1 de u (resp. v). Soit $\mathbb{M} \in \mathcal{M}_{n_h+1}(\mathbb{R})$ la matrice de masse \mathbb{P}_1 associée à la forme bilinéaire

$$\int_{\Omega} v\psi dx$$

pour toute fonction-test $\psi \in H^1(\Omega)$ et soit $\mathbb{S} \in \mathcal{M}_{n_h+1}(\mathbb{R})$ la matrice de raideur \mathbb{P}_1 associée à la forme bilinéaire

$$\int_{\Omega} \partial_x v \partial_x \psi dx.$$

Désignons par $\mathbb{M}_{V^{n+1/2}} \in \mathcal{M}_{n_h+1}(\mathbb{R})$ la matrice de masse généralisée associée à

$$\int_{\Omega} V^{n+1/2} v\psi dx$$

pour toute fonction-test $\psi \in H^1(\Omega)$. Enfin, soit $\mathbb{B}_p^{M,n+1} \in \mathcal{M}_{n_h+1}(\mathbb{C})$ la matrice des contributions aux bords issues de la condition aux limites ABC $_p^M$ à l'itération $n+1$

$$\mathbb{B}_p^{M,n+1} = \begin{pmatrix} B_{p,\ell}^{M,n+1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B_{p,r}^{M,n+1} \end{pmatrix}. \quad (1.195)$$

Finalement, la formulation faible (1.127) provenant du schéma de Crank-Nicolson (1.126) s'écrit matriciellement

$$\left(\frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} + \mathbb{B}_p^{M,n+1} - \mathbb{S} + \mathbb{M}_{W^{n+1}} \right) \mathbf{v}^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t} \mathbf{u}^n + \mathbf{b}_p^{M,n+1}, \quad (1.196)$$

où $W^{n+1} = V^{n+1/2} = \frac{V^{n+1} + V^n}{2}$ et le vecteur $\mathbf{b}_p^{M,n+1} \in \mathbb{C}^{n_h+1}$, découlant de la discrétisation des conditions aux limites, est donné par

$$\mathbf{b}_p^{M,n+1} = \begin{pmatrix} b_{p,\ell}^{M,n+1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ b_{p,r}^{M,n+1} \end{pmatrix}. \quad (1.197)$$

Nous résolvons ce système par une méthode LU. Lorsque V ne dépend pas du temps, la matrice de masse généralisée associée \mathbb{M}_W est constante. On effectue donc une unique factorisation avant de commencer les itérations en temps. Pour un potentiel $V(x, t)$ en revanche, la matrice $\mathbb{M}_{W^{n+1}}$ n'est plus constante et doit être réassemblée à chaque itération en temps. Cela ne pose aucune difficulté théorique, mais alourdit considérablement les calculs. Cependant, dans le cas particulier d'un potentiel découplé de la forme

$$V(x, t) = f(x)g(t),$$

on peut réduire les temps de calcul, en remarquant que la matrice de masse associée est de la forme

$$\mathbb{M}_{W^{n+1}} = \mathbb{M}_{V^{n+1/2}} = g(t_{n+1/2})\mathbb{M}_f,$$

où \mathbb{M}_f est la matrice de masse généralisée associée au potentiel $f(x)$. C'est une matrice constante en temps. Ainsi, la matrice $\mathbb{M}_{W^{n+1}}$ s'obtient à chaque itération à partir d'une simple multiplication d'une même matrice constante \mathbb{M}_f . Cette configuration ne dispense pas d'une nouvelle factorisation LU à chaque itération en temps, la matrice du système linéaire n'étant pas constante. Elle fait néanmoins l'économie d'un réassemblage coûteux, ce qui réduit considérablement les temps de calcul. C'est ce cas de figure qui sera étudié dans les exemples numériques qui suivent.

1.8.2 Solutions de référence

La proposition 1.3 fournit des solutions analytiques pour les potentiels $V = \alpha x$, $V = -\beta^2 x^2$, $V = \beta^2 x^2$. On dispose alors pour ces potentiels de solutions exactes de référence auxquelles on pourra comparer les résultats obtenus en utilisant les conditions aux limites. Etudions pour commencer le cas du potentiel $V(x) = x$. On se place sur le domaine de calcul $\Omega = [-5; 15]$ et le temps final de calcul est $T_f = 2.5$. La figure 1.8(a) présente l'évolution de la solution pour différents instants t . On observe que l'onde solution sort du domaine de calcul en s'étalant. La figure 1.8(b) représente la trace

du module de cette solution dans le plan (x, t) . Les zones de plus fortes amplitude correspondent aux échelles de couleur rouge foncé; les zones blanches correspondent à des niveaux inférieurs à 10^{-6} .

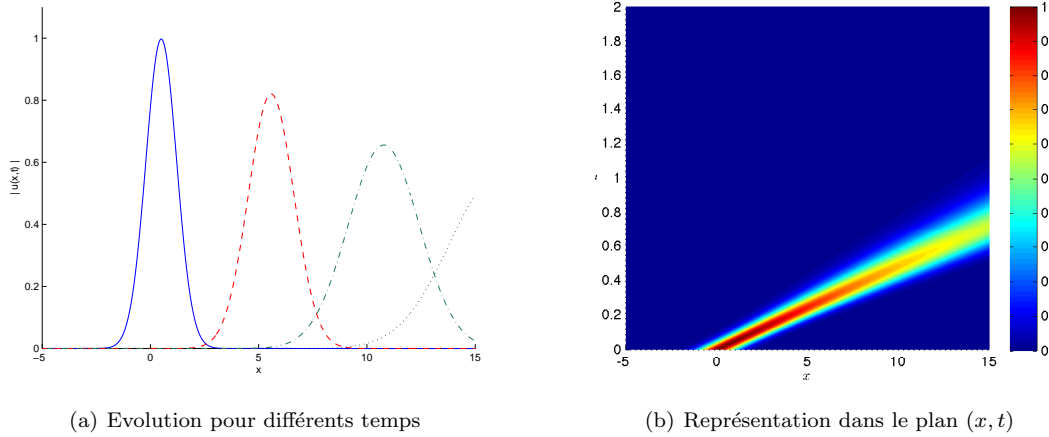


FIGURE 1.8 – Représentation de la solution exacte pour $V(x) = x$.

On considère ensuite le potentiel $V(x) = x^2$. Le domaine de calcul est $\Omega_T = [-5; 15] \times [0; 2.5]$, et on représente de la même manière la solution exacte dans le plan (x, t) (figure 1.9(a)). On observe un profil légèrement différent de celui associé au potentiel linéaire, les rayons étant un peu plus incurvés. On considère ensuite le potentiel $V(x) = -x^2$ et on constate à quel point le changement de signe a un effet fondamental sur l'allure de la solution. Alors que le potentiel $V(x) = x^2$ est répulsif et a pour effet de faire sortir l'onde du domaine, le potentiel $V(x) = -x^2$ est au contraire un potentiel confinant. Dans ce cas, il suffit de placer la frontière du domaine de calcul suffisamment loin du support de l'onde pour que la solution n'atteigne jamais la frontière. L'usage d'une condition aux limites est assez superflu dans ce cas.

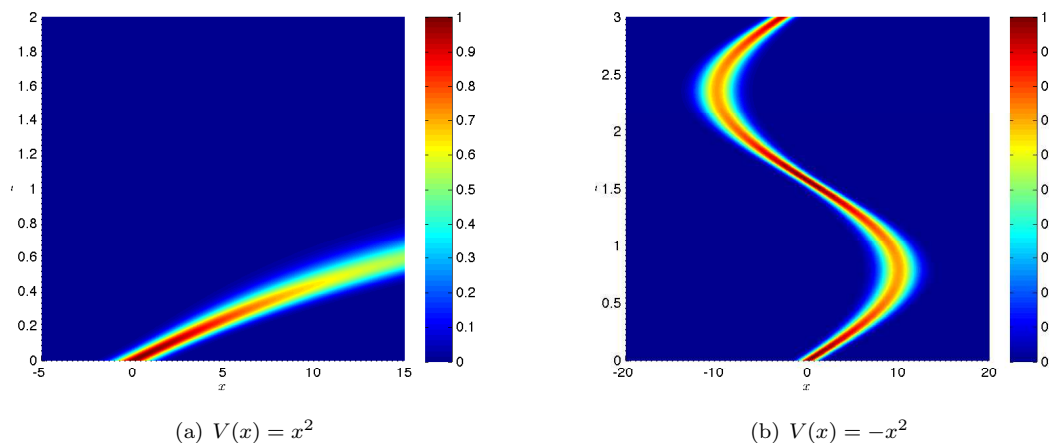


FIGURE 1.9 – Représentation dans le plan (x, t) de la solution exacte pour $V(x) = \pm x^2$

Voyons maintenant comment mesurer la précision des CLA. Considérons comme exemple le potentiel $V(x) = x^2$ sur le domaine $\Omega_T = [-5; 15] \times [0; 2.5]$, avec le pas de discrétisation en espace

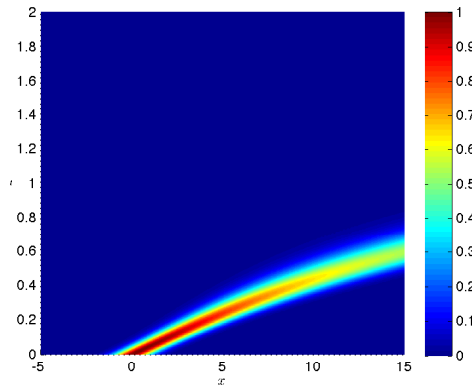
$h = 2.5 \times 10^{-3}$. On compare la solution exacte (figure 1.9(a)) avec la solution calculée sur Ω_T en utilisant la condition aux limites ABC_1^2 (condition d'ordre deux discrétisée par convolutions discrètes). Le résultat, figure 1.10(a), n'est pas différentiable de la solution exacte à l'œil nu. On représente alors de nouveau la solution exacte (figure 1.10(b)) et la solution numérique approchée (figure 1.10(c)) mais en échelle logarithmique cette fois, et en représentant les courbes de niveau de 10^{-1} à 10^{-6} . Le calcul de la solution numérique, qui semblait jusqu'ici sans défaut, révèle alors une réflexion issue de la frontière droite. Cette réflexion apparaît dès que l'onde atteint la frontière du domaine de calcul. Grâce aux courbes de niveau, on constate que le niveau maximum de cette réflexion est de l'ordre de 10^{-3} . La réflexion parasite observée est liée à la condition aux limites artificielle. La « meilleure » condition aux limites artificielle sera donc celle qui conduira à la réflexion la plus faible. Dorénavant, toutes les courbes de solutions seront représentées en échelle logarithmique, afin d'observer avec précision le niveau de la réflexion engendrée par la condition aux limites. Les zones blanches correspondent à des niveaux d'amplitude inférieure à 10^{-6} .

Cependant, il faut garder à l'esprit que dans l'immense majorité des cas, il n'existe pas de solution exacte analytique. Il faut néanmoins disposer d'une solution de référence afin de tester la précision des conditions aux limites sur un panel varié de potentiels. On souhaite notamment inclure dans nos tests des potentiels dépendant aussi du temps. Pour cela, on calcule une solution de référence numérique en effectuant un calcul sur un domaine suffisamment grand pour que sa frontière n'influence pas le calcul sur le domaine initial Ω . On utilise alors par exemple une condition aux limites de Dirichlet homogène. La restriction à Ω de cette simulation fournit une référence numérique. Ce calcul est évidemment beaucoup plus coûteux que les simulations usuelles, puisque le domaine considéré est environ cinq fois plus grand que le domaine initial ; mais il permet d'obtenir un aperçu de la solution pour n'importe quel potentiel $V(x, t)$. Pour le potentiel $V(x) = x^2$, on souhaite calculer les solutions sur le domaine $\Omega = [-5; 15]$ avec $T = 2$. Le domaine agrandi pour le calcul de la solution de référence est $\tilde{\Omega} = [-5; 95]$ dont la longueur est exactement cinq fois celle de Ω . Ici, le domaine a été élargi seulement sur le côté droit, il n'a pas été nécessaire de l'élargir également à gauche. Le résultat de ce calcul sur grand domaine avec condition de Dirichlet homogène se trouve figure 1.11(a). On zoome alors sur Ω pour en déduire une référence numérique. Dans ce cas particulier, on peut comparer le résultat à la solution exacte figure 1.10(b). En toute généralité et en l'absence de solution exacte, c'est ce type de solution qui servira de référence.

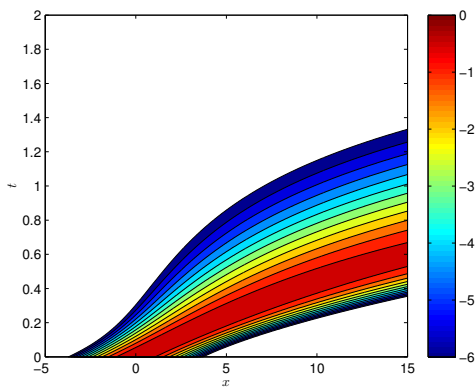
1.8.3 Influence de différents paramètres

Influence de l'ordre M de la condition (figure 1.12)

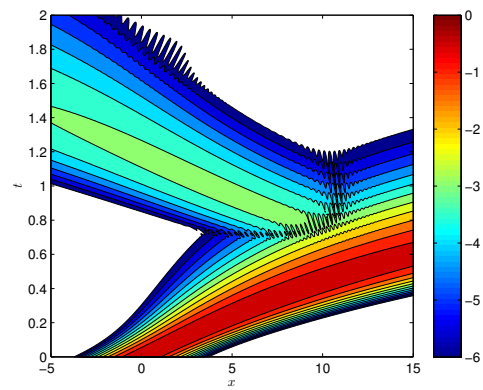
Les CLA ont été écrites avec différents ordres de précision correspondant à l'ordre de la troncature dans le développement asymptotique de λ^+ . La condition artificielle qui nous servira de repère est la condition (1.122) associée à l'équation sans potentiel. Cette condition aux limites est exacte en l'absence de potentiel, mais *a priori* peu précise lorsque le potentiel est non nul, puisqu'elle ne tient pas compte du potentiel. Par extension, cette condition aux limites sera aussi appelée « condition sans potentiel ». On peut la discrétiser soit en approchant l'opérateur $\partial_t^{1/2}$ à l'aide des convolutions discrètes, et la CLA semi-discrétisée en résultant sera encore notée ABC_0 , soit en utilisant des approximants de Padé d'ordre m , et cette CLA sera notée $ABC_{0,m}$. On la comparera aux conditions d'ordre deux et d'ordre quatre issues de la stratégie du changement de jauge. Le potentiel retenu pour



(a) Solution approchée

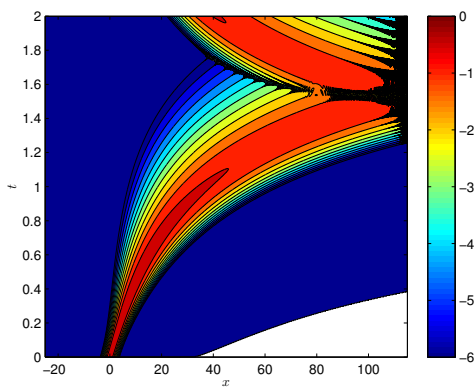


(b) Solution exacte, échelle logarithmique

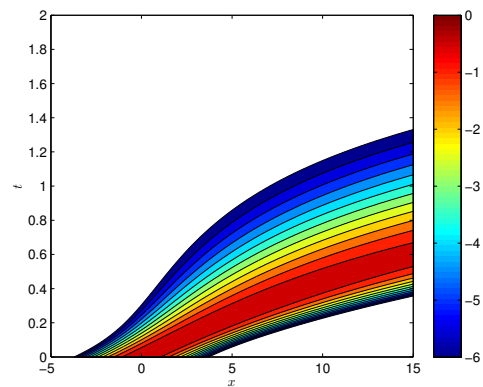


(c) Solution approchée, échelle logarithmique

FIGURE 1.10 – Comparaison de la solution exacte et d’une solution approchée, pour $V(x) = x^2$.



(a) Calcul sur grand domaine $\tilde{\Omega}$



(b) Calcul tronqué à Ω (zoom)

FIGURE 1.11 – Calcul de la solution de référence pour $V(x) = x^2$ sur $\Omega = [-5; 15]$.

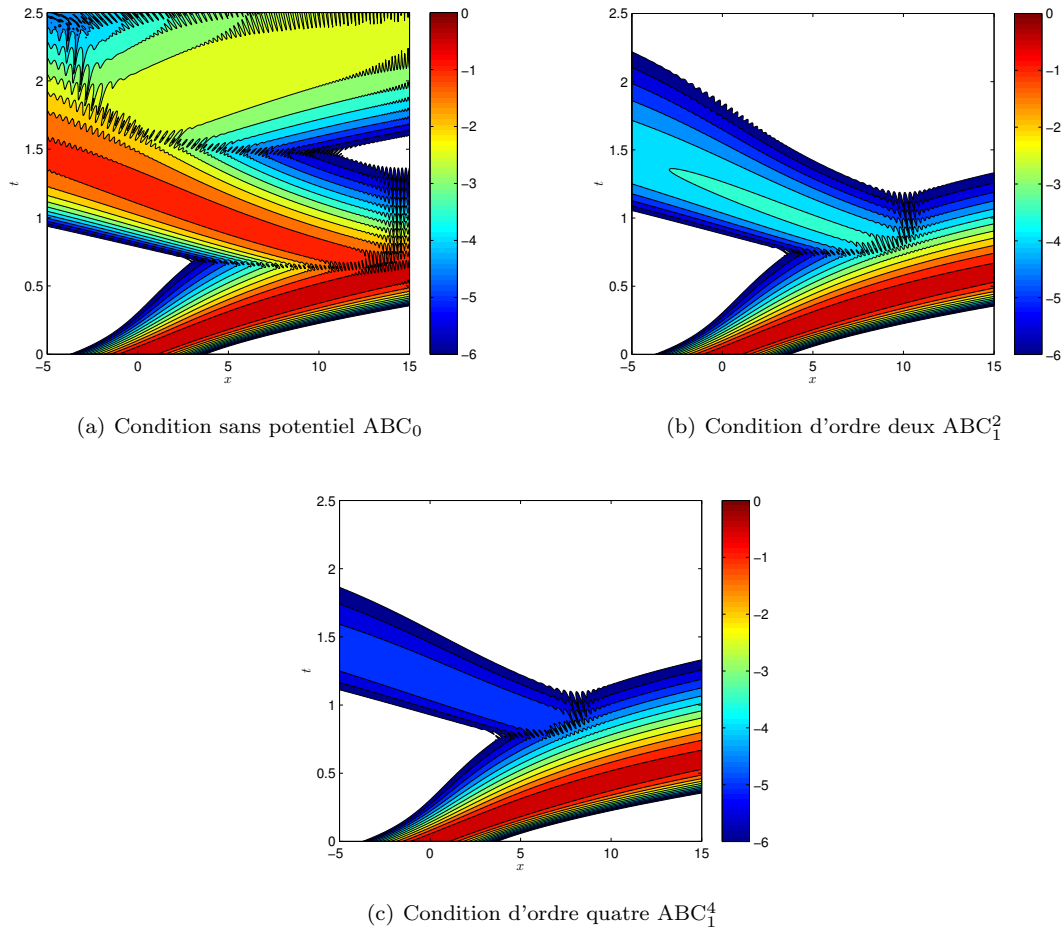


FIGURE 1.12 – Représentation de $\log_{10}(|u|)$ pour les conditions ABC_0 et ABC_1^M , discrétisées par quadratures, et le potentiel $V(x) = x^2$, avec les paramètres $h = 2.5 \times 10^{-3}$, $\Delta t = 10^{-4}$.

cette simulation est $V(x) = x^2$. Le pas d'espace h pour les éléments finis \mathbb{P}_1 est $h = 2.5 \times 10^{-3}$, et le pas de temps vaut $\Delta t = 10^{-4}$. On choisit un pas de temps suffisamment petit pour que l'erreur liée au schéma ne vienne pas perturber la comparaison des ordres des conditions artificielles. Enfin, on choisit la discrétisation par convolution discrète, naturellement associée aux conditions ABC_1^M . Pour les trois conditions, on compare l'amplitude de l'onde anormalement réfléchie. Ainsi, la condition sans potentiel n'est clairement pas satisfaisante quand on est en présence d'un potentiel non nul, car l'erreur maximale observée est de l'ordre de $10^{-0.5}$. L'erreur est si élevée dans ce cas, qu'on pourrait observer la réflexion parasite même sans utiliser une échelle logarithmique (figure 1.13). Ce n'est pas le cas en revanche pour les conditions d'ordres deux et quatre. La comparaison des conditions d'ordres deux et quatre avec la condition sans potentiel montre une très nette amélioration lorsqu'on prend en compte le potentiel dans la condition. Au sein des conditions aux limites prenant en compte le potentiel, on remarque aussi de manière nette la classification des conditions en fonction de leur ordre. En effet, la condition d'ordre quatre divise pratiquement par deux l'erreur obtenue avec la condition d'ordre deux.

Une manière un peu plus visuelle de comparer les résultats consiste à représenter, pour chaque

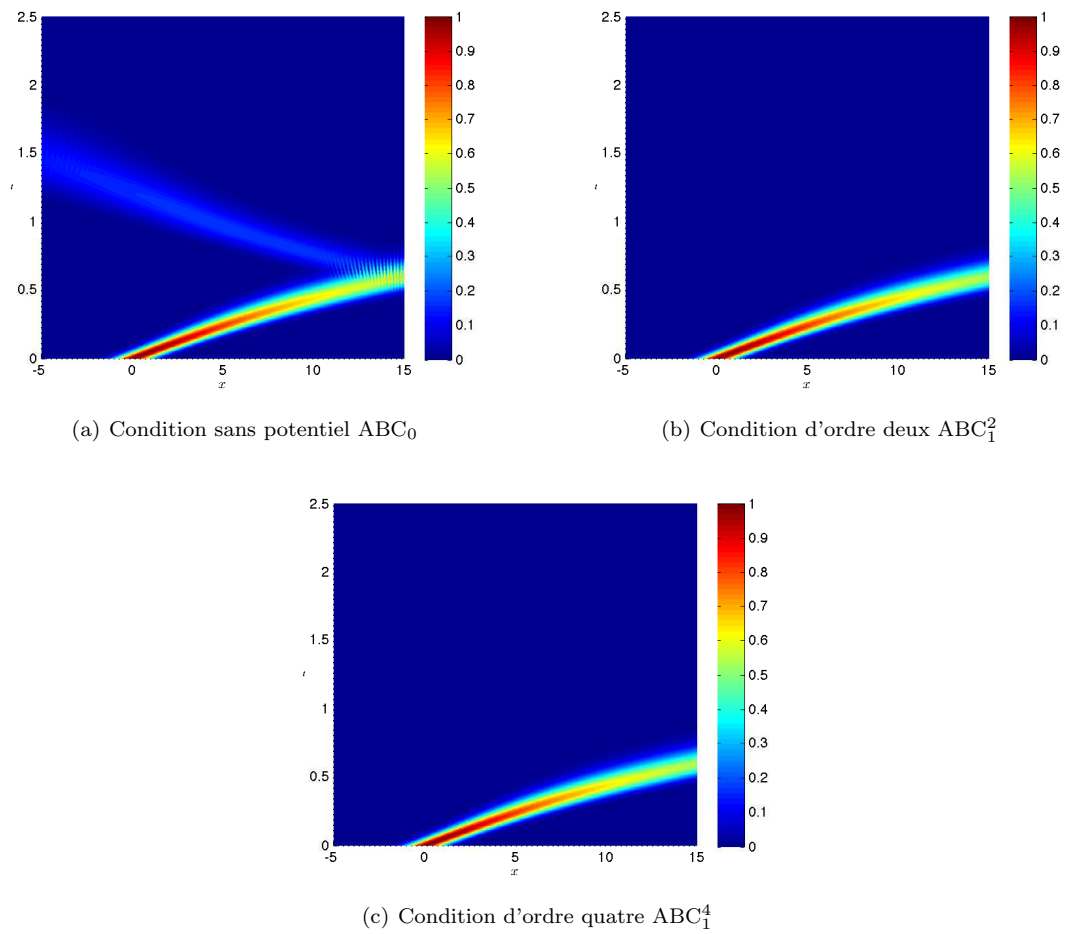


FIGURE 1.13 – Représentation du module de la solution pour les conditions ABC_0 et ABC_1^M , discrétisées par quadratures, et le potentiel $V(x) = x^2$, avec les paramètres $h = 2.5 \times 10^{-3}$, $\Delta t = 10^{-4}$.

condition testée, la trace de la solution $|u(x_\ell, t)|$ sur la frontière gauche du domaine, pendant l'intervalle de temps $[0; T]$. Cette trace est représentée en échelle logarithmique (figure 1.14). On visualise ainsi l'amplitude de la réflexion lorsque l'onde réfléchie à la traversée du bord droit du domaine atteint l'autre bord du domaine. On observe qu'à condition de prendre une discrétisation assez fine, comme c'est le cas ici, la précision des CLA est surtout liée à leur ordre. Sans surprise, la condition sans potentiel donne de mauvais résultats. Pour les conditions d'ordre deux, le maximum de réflexion est de l'ordre de 10^{-4} , et il est de l'ordre de 5×10^{-6} pour les conditions d'ordre quatre.

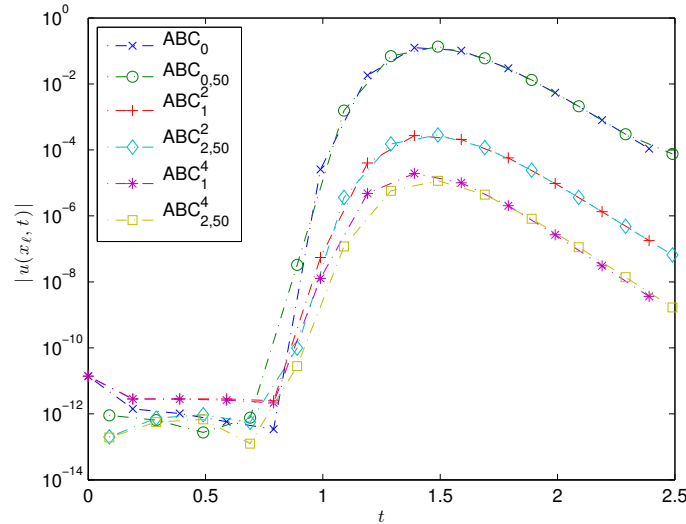


FIGURE 1.14 – Trace de la solution sur la frontière gauche x_ℓ pour $V(x) = x^2$ et les différentes CLA, pour $h = 2.5 \times 10^{-3}$ et $\Delta t = 10^{-4}$.

On peut remarquer que la réflexion est légèrement plus faible pour les conditions aux limites basées sur les approximants de Padé. Cela est confirmé par la figure 1.15. Sur cette figure, on repère le logarithme du maximum de réflexion sur la frontière gauche, pour différents pas de temps Δt , en fonction du pas du maillage h . En particulier, on voit que les conditions de type Padé conduisent à une réflexion plus faible, pour un pas de temps donné Δt , que les conditions basées sur les convolutions. C'est donc une manière plus rapide d'obtenir une précision déterminée à l'avance. Les conditions discrétisées par convolution permettent également d'atteindre la même précision, mais à condition de prendre une discrétisation suffisamment fine. Ainsi, pour des pas de temps inférieurs ou égaux à $\Delta t = 10^{-4}$, les résultats sont similaires pour les deux familles de conditions aux limites. On observe également une stagnation de la précision obtenue lorsque h devient très petit ($h \approx 10^{-2.8}$). L'erreur constatée est alors liée à l'erreur du schéma, et non plus uniquement de la condition aux limites. Enfin, indépendamment de la discrétisation choisie, la comparaison des figures 1.15(a) et 1.15(b) confirme que les conditions d'ordre quatre sont plus précises que les conditions d'ordre deux.

Influence du nombre m de fonctions de Padé (figure 1.16)

On considère à présent les conditions aux limites $ABC_{2,m}^M$ discrétisées par approximants de Padé avec m termes dans l'approximation de Padé. On s'intéresse à l'influence du nombre de fonctions de Padé dans la précision des résultats. On étudie quatre situations, associées à quatre valeurs de m

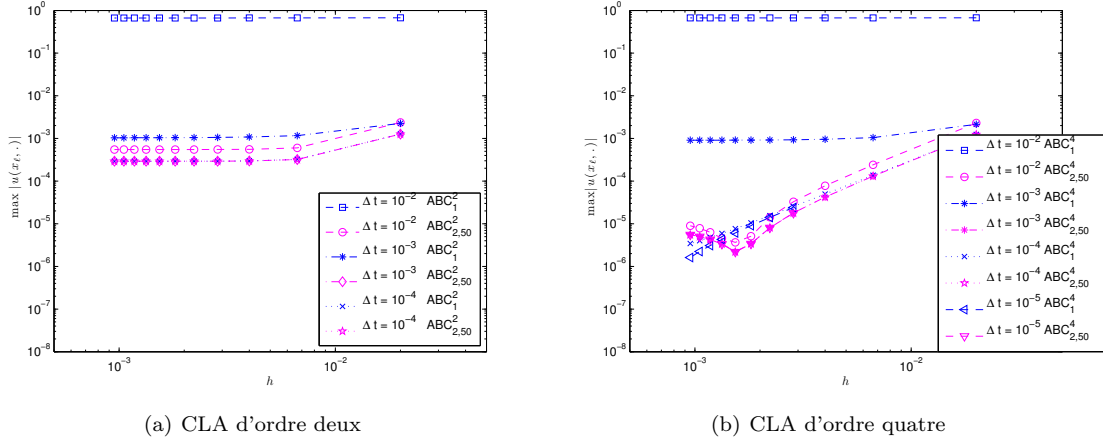


FIGURE 1.15 – Maximum de réflexion sur la frontière gauche pour les différentes CLA, en fonction du pas de temps Δt et du pas d'espace h , pour le potentiel $V(x) = x^2$.

différentes : $m = 5$, $m = 15$, $m = 30$, $m = 50$. Le potentiel d'étude est toujours $V(x) = x^2$ sur le domaine $\Omega_T = [-5; 15] \times [0; 2.5]$, et les paramètres valent $h = 2.5 \times 10^{-3}$ et $\Delta t = 10^{-4}$. On travaille avec la condition d'ordre deux. Les résultats sont représentés figure 1.16.

Dans un premier temps, on remarque l'amélioration des résultats lorsqu'on augmente le nombre de fonctions de Padé. Avec un nombre insuffisant de fonctions, la racine carrée est approchée trop grossièrement pour que la condition aux limites donne de bons résultats. A partir d'un certain nombre de fonctions, le profil de la solution n'évolue plus : l'erreur de la condition prend le pas sur l'erreur d'approximation de la racine carrée. La précision s'améliore jusqu'à $m = 50$, puis on observe une saturation, et la réflexion ne diminue plus lorsqu'on continue à faire augmenter m .

Par la suite, nous prendrons systématiquement la valeur $m = 50$, qui semble être assez élevée pour qu'on ait à chaque fois atteint la saturation en terme de précision dans l'approximation de la racine carrée. Par ailleurs, on note qu'augmenter le nombre de fonctions retenues est d'un coût de calcul pratiquement nul, il n'est donc pas utile de chercher à minimiser m le plus précisément possible.

Comparaison des deux discrétisations et raffinement en temps (figures 1.15 et 1.17)

Après avoir étudié, pour une discrétisation fixée, l'influence de l'ordre des CLA, nous nous intéressons à présent à comparer l'effet de la discrétisation, sur des CLA d'un même ordre. Pour cette étude, le potentiel est toujours $V(x) = x^2$, le pas d'espace est $h = 2.5 \times 10^{-3}$, et on prend $m = 50$ de Padé. On choisit différents pas de temps : $\Delta t = 10^{-2}$, $\Delta t = 10^{-3}$, $\Delta t = 10^{-4}$. Pour chacun de ces pas de temps, on compare aussi bien la précision de la solution obtenue (*via* l'amplitude de l'onde réfléchie, figure 1.17, en échelle logarithmique) que le temps de calcul nécessaire (tableau 1.2) pour les deux types de discrétisations : quadratures numériques ou approximation rationnelle de la racine carrée. Par souci de clarté, on ne retient que les conditions d'ordre quatre pour la figure 1.17.

En observant les figures 1.17(e) et 1.17(f) correspondant à $\Delta t = 10^{-4}$, on remarque qu'il est possible d'obtenir une précision tout à fait comparable entre les conditions ABC_1^M discrétisées par convolution discrètes, et les conditions $ABC_{2,50}^M$ discrétisées par approximants de Padé. Cependant, les temps de calcul nécessaires pour obtenir ce résultat sont beaucoup plus importants dans le cas des

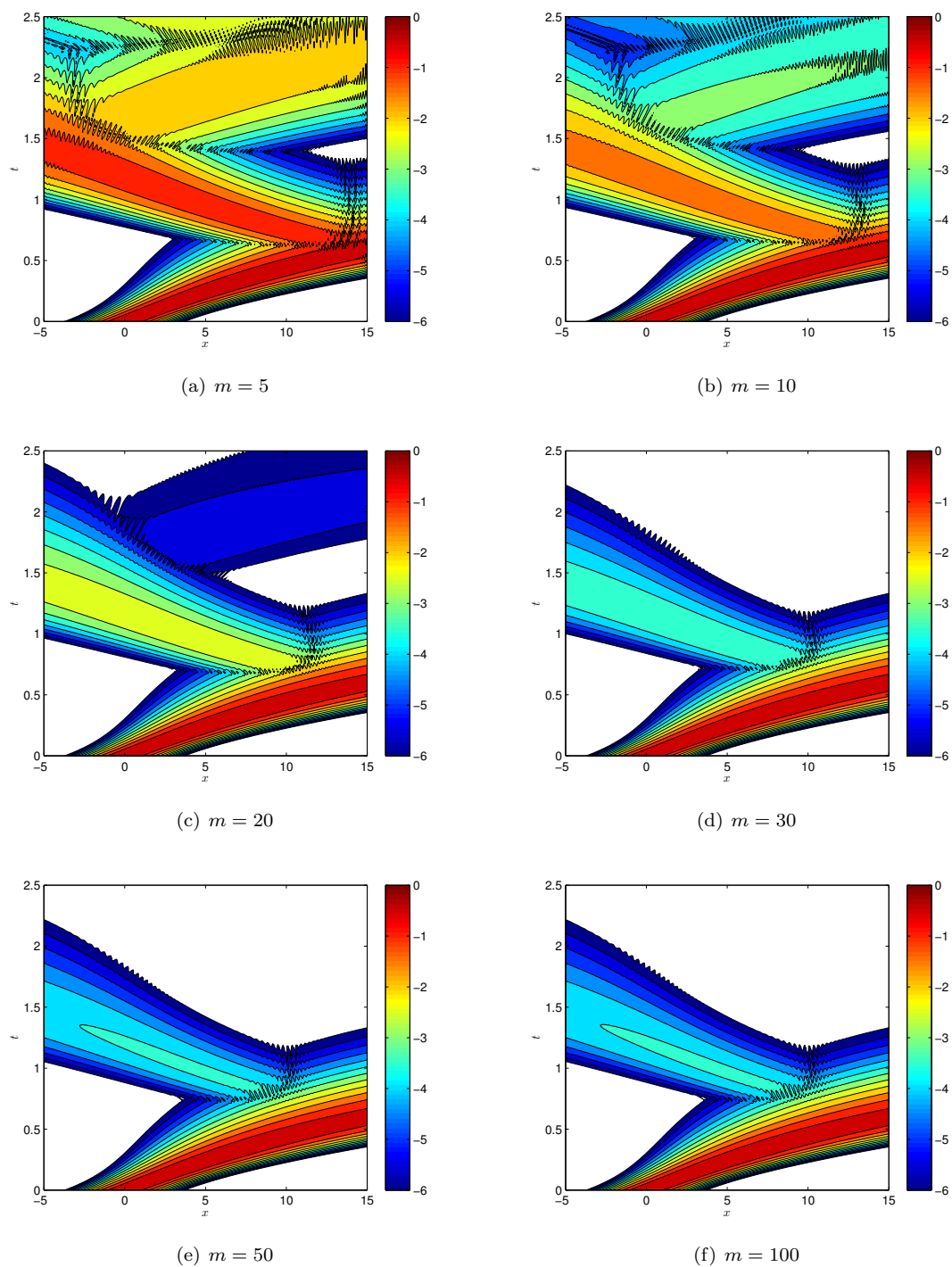


FIGURE 1.16 – Représentation de $\log_{10} |u|$ pour la condition $ABC_{2,m}^2$ discrétisée par approximants de Padé avec m fonctions.

Potentiel	$V(x) = x^2$				$V(x, t) = x(2 + \cos(2t))$	
	$\Delta t = 10^{-2}$	$\Delta t = 10^{-3}$	$\Delta t = 2 \times 10^{-4}$	$\Delta t = 10^{-4}$	$\Delta t = 10^{-3}$	$\Delta t = 10^{-4}$
ABC_1^2	12.3	17.6	137	445	36.4	1069
ABC_1^4	12.0	18.0	175	616	53.5	1579
$ABC_{2,50}^2$	12.6	21.2	61.9	111	43.2	320
$ABC_{2,50}^4$	12.5	21.4	62.0	111	44.0	323

TABLE 1.2 – Temps de calcul (temps cpu en secondes) pour les différentes conditions ABC_p^M , différents pas de temps et deux potentiels différents.

convolutions discrètes que dans le cas de la localisation par approximants de Padé (près de deux fois plus longs). Si on observe ce qui se passe pour un pas de temps plus usuel $\Delta t = 10^{-3}$ (figures 1.17(c) et 1.17(d)), la simulation de la condition $ABC_{2,50}^4$ donne la même précision que pour $\Delta t = 10^{-4}$, alors que pour la condition ABC_1^4 , les résultats sont nettement moins bons pour $\Delta t = 10^{-3}$ que pour $\Delta t = 10^{-4}$. Ainsi, il apparaît que les conditions $ABC_{2,50}^M$ discrétisées par approximants de Padé ne dépendent pas ou presque de la discrétisation en temps, alors que les conditions ABC_1^M en dépendent fortement.

Le tableau 1.2 détaille les temps de calculs pour chacune des conditions aux limites, et différents pas de temps. Tous les calculs de cette section ont été réalisés sur la même machine, un portable MacBook Pro bi-processeur Intel Core 2 (2.8 GHz) avec 8 Go de mémoire vive (1067 MHz DDR3), et la version 7.9.0.529 (R2009b) de Matlab, sous Mac OS X 10.5.8. On a testé deux potentiels : le potentiel $V(x) = x^2$, ainsi qu'un potentiel dépendant aussi du temps, $V(x, t) = x(2 + \cos(2t))$. Pour un potentiel dépendant du temps, les itérations sont plus longues car la matrice de masse associée au potentiel doit être réassemblée à chaque itération en temps. La différence de temps de calcul entre les convolutions discrètes et les approximants de Padé est donc encore plus visible dans ce cas. Ainsi, pour $\Delta t = 10^{-4}$, le temps de calcul associé aux conditions ABC_1^M est trois fois plus grand que le temps de calcul associé aux conditions $ABC_{2,m}^M$, alors que pour $\Delta t = 10^{-3}$, les temps de calcul étaient comparables.

Comparaison des discrétisations et raffinement en espace

On effectue la même comparaison qu'au paragraphe précédent en faisant varier cette fois le pas d'espace h pour les conditions d'ordre quatre ABC_1^4 et $ABC_{2,50}^4$. Les autres paramètres sont fixés à $\Delta t = 10^{-3}$, $m = 50$ fonctions de Padé, $\Omega = [-5; 15]$, $T = 2.5$. La figure 1.18 représente les résultats pour $h = 10^{-2}$, $h = 5 \times 10^{-3}$ et $h = 10^{-3}$, toujours en échelle logarithmique, et le tableau 1.3 donne les temps de calcul associés.

L'effet du raffinement en espace est visible pour les deux discrétisations, mais on observe dans les deux cas une stagnation de la précision à partir d'un certain pas h . Ce pas d'espace limite dépend de la valeur du pas de temps choisi pour cette simulation. On rejoint ainsi les observations de la figure 1.15.

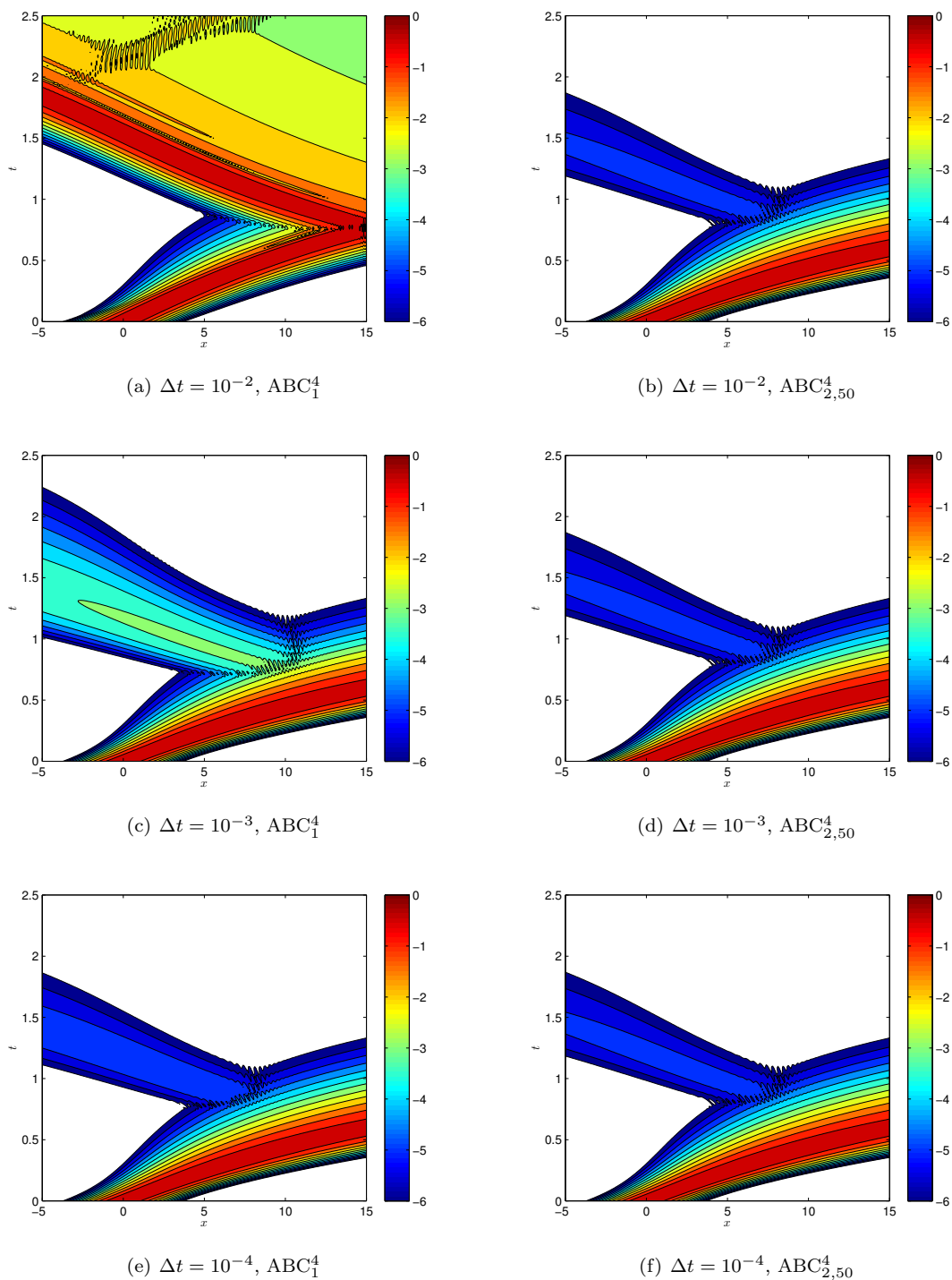


FIGURE 1.17 – Comparaison des discrétisations pour les conditions d'ordre quatre et différentes valeurs de Δt .

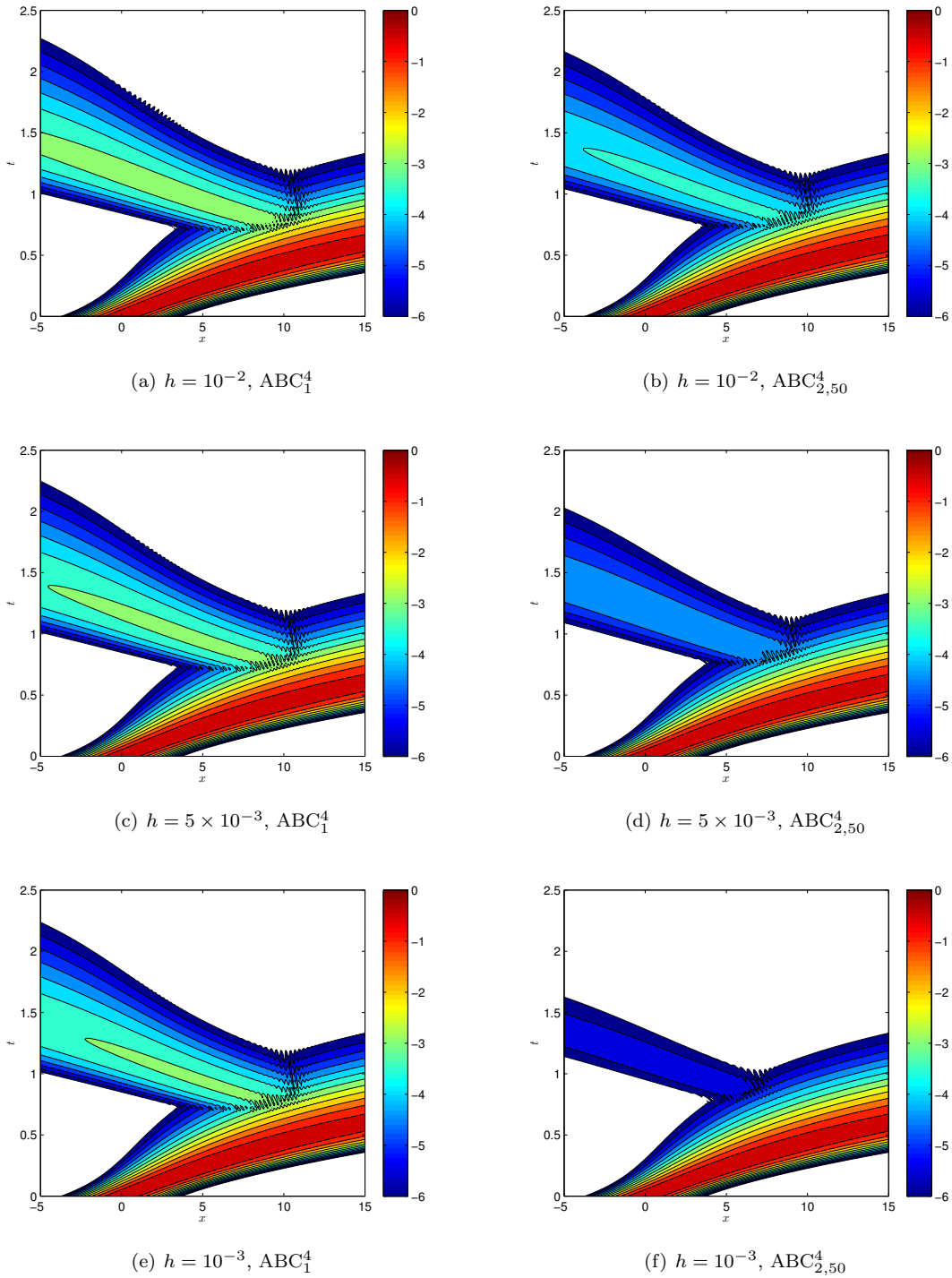


FIGURE 1.18 – Comparaison des discrétisations pour les conditions d'ordre quatre et différentes valeurs de h .

Points intérieurs	Pas d'espace	ABC ₁ ⁴	ABC _{2,50} ⁴
$n_h = 2\,000$	$h = 1 \times 10^{-2}$	7,5	7,1
$n_h = 4\,000$	$h = 5 \times 10^{-3}$	13,7	13,8
$n_h = 10\,000$	$h = 2 \times 10^{-3}$	33,3	36,1
$n_h = 20\,000$	$h = 1 \times 10^{-3}$	69,3	78,0
$n_h = 25\,000$	$h = 8 \times 10^{-4}$	87,7	98,4

TABLE 1.3 – Evolution du temps de calcul (temps cpu en secondes) pour les conditions d'ordre quatre ABC_p⁴ en fonction du pas d'espace h , pour $V(x) = x^2$ et $\Delta t = 10^{-3}$.

Comparaison avec les PML

On compare à présent la performance des conditions aux limites artificielles avec une autre méthode permettant de résoudre l'équation de Schrödinger avec potentiel variable $V(x, t)$: les PML (Perfectly Matched Layer). Cette dernière technique consiste à regarder l'équation de Schrödinger

$$i\partial_t u + \frac{1}{1 + R\sigma(x)} \partial_x \left(\frac{1}{1 + R\sigma(x)} \partial_x u \right) + V(x, t)u = 0, \quad (1.198)$$

avec

$$\sigma(x) = \begin{cases} \sigma_0(x - x_\ell)^2, & x_{\ell p} < x < x_\ell, \\ 0, & x_\ell < x < x_r, \\ \sigma_0(x - x_r)^2, & x_r < x < x_{rp}, \end{cases} \quad (1.199)$$

les distances $|x_{rp} - x_r|$ et $|x_\ell - x_{\ell p}|$ correspondant à l'épaisseur des zones d'absorption à droite et à gauche du domaine de calcul (voir figure 1.19). On choisit $\sigma_0 = 10$ et le domaine de calcul est

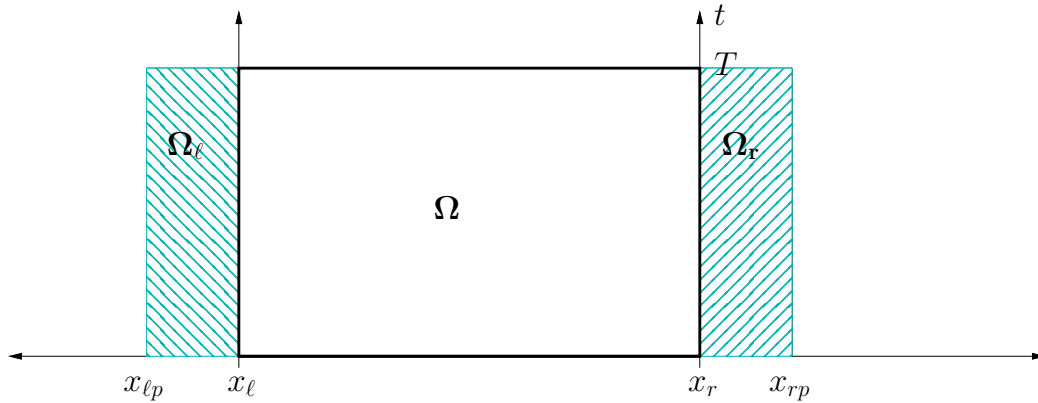


FIGURE 1.19 – Le domaine de calcul pour les PML.

$\Omega = [-5; 15]$, on prend $x_{\ell p} = -9$ et $x_{rp} = 19$. Ces paramètres de la PML sont optimisés comme dans l'article [95]. Notons qu'une des difficultés des PML est liée justement au choix adéquat de ces variables.

Pour la comparaison, on considère toujours le potentiel $V(x) = x^2$, avec $T = 2.5$ et $m = 50$. Sur les figures 1.20, 1.21 et 1.22, on compare les PML, la condition artificielle ABC₁⁴ et la condition ABC_{2,50}⁴ pour trois discrétisations de plus en plus fines : $h = 5 \times 10^{-3}$ et $\Delta t = 5 \times 10^{-3}$, $h = 2.5 \times 10^{-3}$ et $\Delta t = 10^{-3}$ puis $h = 10^{-3}$ et $\Delta t = 10^{-4}$.

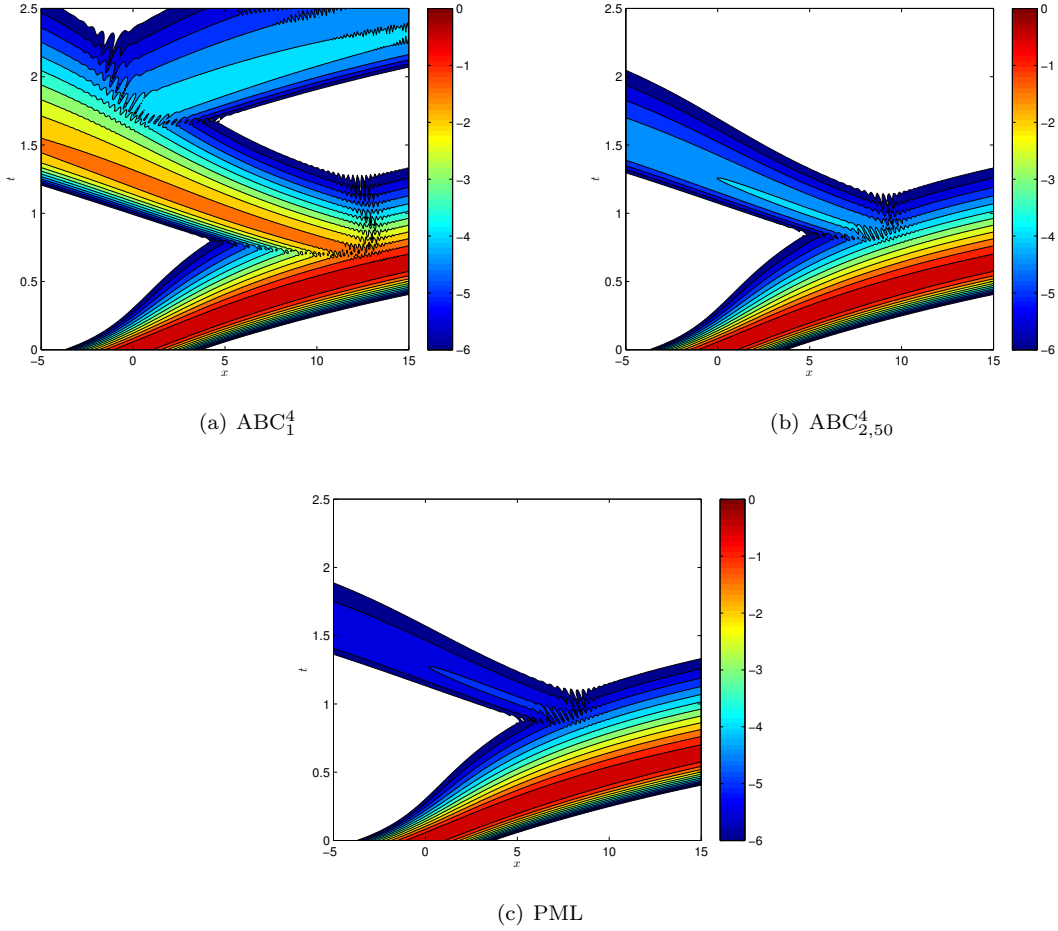


FIGURE 1.20 – Comparaison des conditions ABC_1^4 et $ABC_{2,50}^4$ avec les PML, pour $h = 5 \times 10^{-3}$ et $\Delta t = 5 \times 10^{-3}$.

On observe que les PML conduisent à des résultats précis sans qu'il ne soit nécessaire de prendre un maillage très fin. Ces résultats sont très comparables à ce qu'on observe pour la condition aux limites $ABC_{2,50}^4$ discrétisée par approximants de Padé (figures 1.21 et 1.22). Pour que la condition ABC_1^4 puisse rivaliser avec les PML en terme de précision (mesurée à la faible amplitude de la réflexion parasite), il faut choisir h et surtout Δt suffisamment petits, comme on l'a vu lors de la comparaison entre les conditions de type ABC_1^M et $ABC_{2,m}^M$ (figure 1.17). Ainsi, pour $h = 10^{-3}$ et $\Delta t = 10^{-4}$, la précision donnée par la condition ABC_1^4 égale la précision donnée par les PML.

Par ailleurs, les temps de calcul sont comparables pour les trois méthodes, du moins tant que $\Delta t \geq 5 \times 10^{-4}$ (tableau 1.4). Ensuite, comme on l'a vu précédemment, la résolution par convolutions discrètes devient beaucoup plus coûteuse que celle par approximants de Padé. Les temps de calcul pour les PML et pour les conditions discrétisées par Padé restent, quant à eux, du même ordre de grandeur.

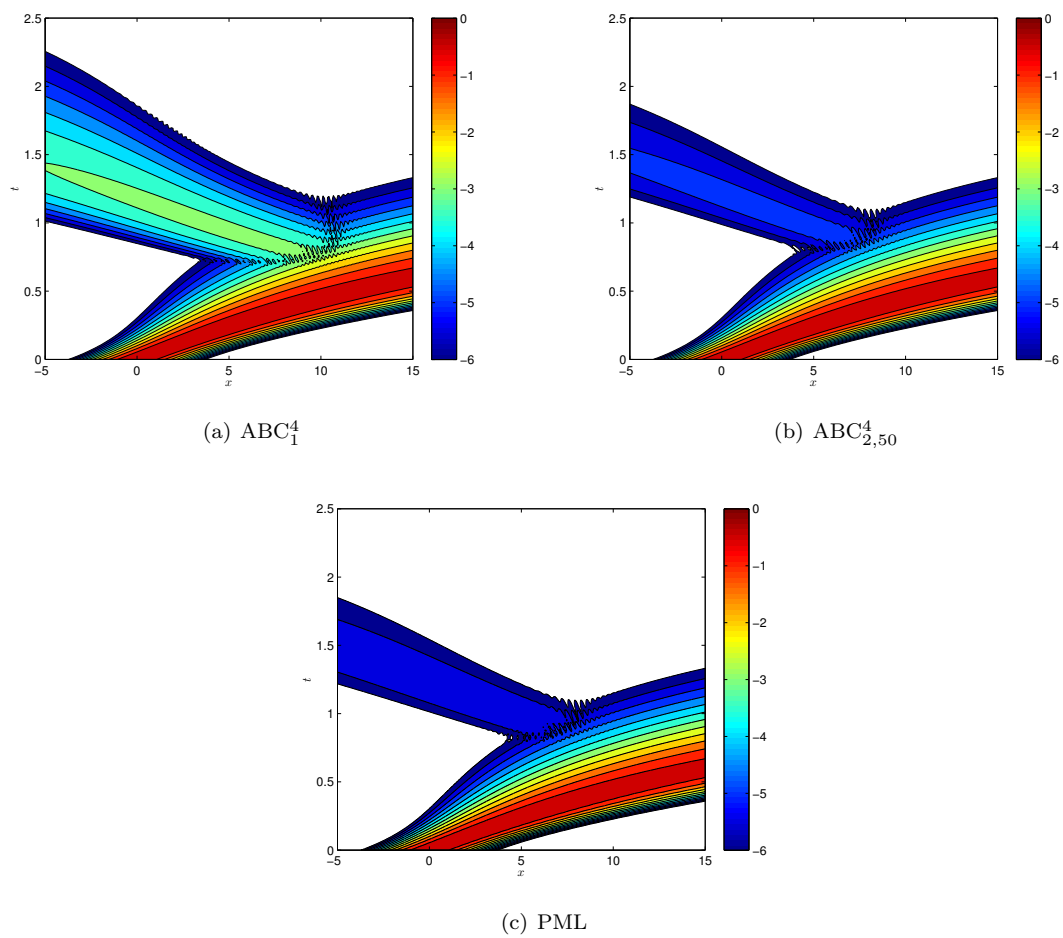


FIGURE 1.21 – Comparaison des conditions ABC_1^4 et $ABC_{2,50}^4$ avec les PML, pour $h = 2.5 \times 10^{-3}$ et $\Delta t = 10^{-3}$.

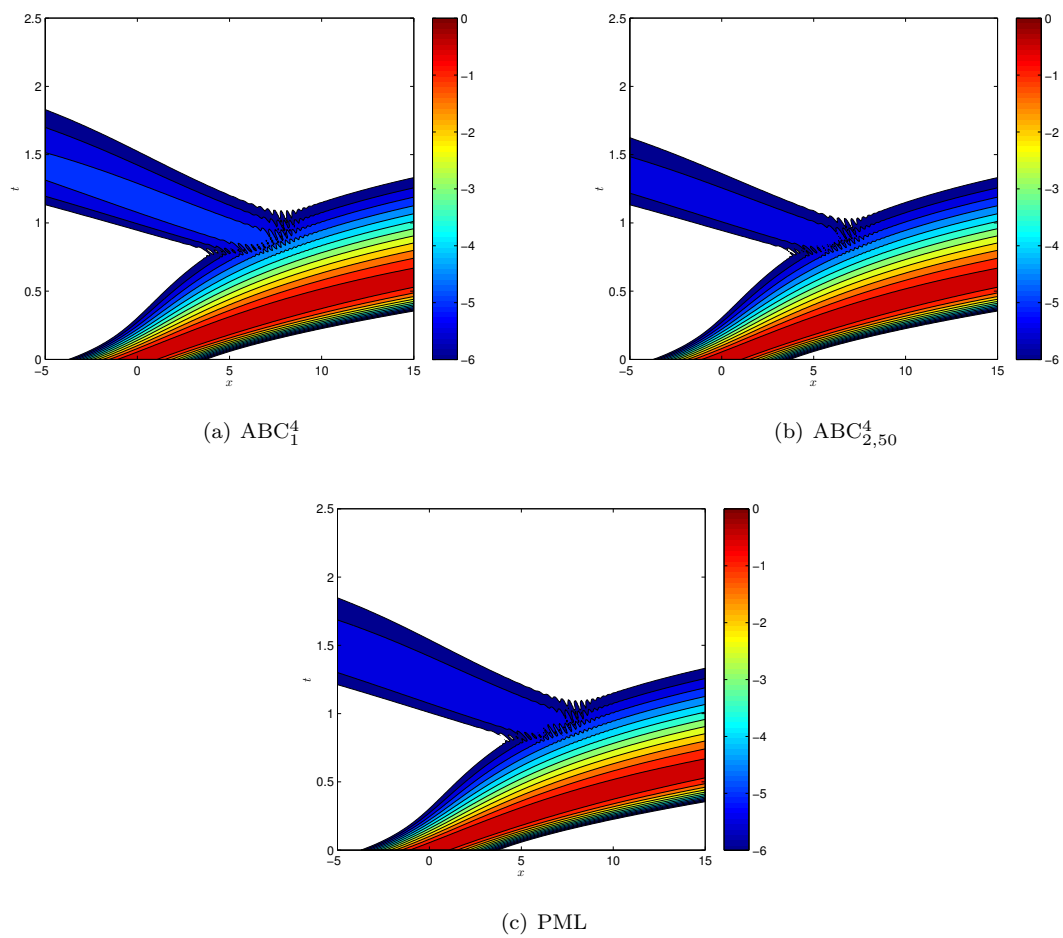


FIGURE 1.22 – Comparaison des conditions ABC_1^4 et $ABC_{2,50}^4$ avec les PML, pour $h = 10^{-3}$ et $\Delta t = 10^{-4}$.

Points intérieurs	Pas d'espace	Pas de temps	ABC ₁ ⁴	ABC _{2,50} ⁴	PML
$n_h = 4\,000$	$h = 5 \times 10^{-3}$	$\Delta t = 5 \times 10^{-3}$	6.0	6.5	5.1
$n_h = 8\,000$	$h = 2.5 \times 10^{-3}$	$\Delta t = 10^{-3}$	18.7	22.3	17.5
$n_h = 20\,000$	$h = 10^{-3}$	$\Delta t = 5 \times 10^{-4}$	99.8	87.2	81.2
$n_h = 20\,000$	$h = 10^{-3}$	$\Delta t = 10^{-4}$	686	304	233

TABLE 1.4 – Temps de calcul (temps cpu en secondes) pour les conditions aux limites ABC₁⁴ et ABC_{2,50}⁴, et pour les PML.

Le cas des potentiels non répulsifs

Étudions brièvement ce qui se passe pour un potentiel qui ne rentre pas dans le cadre de notre étude. Nous considérons ici un potentiel non répulsif, c'est-à-dire tel que la solution n'est pas sortante. C'est par exemple le cas du potentiel quadratique attractif $V(x) = -x^2$ dont nous connaissons d'ailleurs la solution exacte (figure 1.23(a)) grâce à la proposition 1.3. Le temps final est $T = 3$, les pas de temps et d'espace $\Delta t = 10^{-3}$ et $h = 2.5 \times 10^{-3}$. La frontière est placée de manière symétrique en $x_{\ell,r} = \pm 10$ alors que la solution reste confinée dans le domaine $[-20; 20]$. La solution de référence, calculée numériquement sur ce domaine raccourci, montre qu'en $x_r = 10$, une partie de l'onde sort du domaine avant d'y rentrer à nouveau. Or, les tests numériques réalisés avec les conditions artificielles ABC₁² et ABC₁⁴ (figures 1.23(c) et 1.23(d)) montrent que les conditions aux limites en x_r ne permettent pas de gérer ce retour de l'onde à l'intérieur du domaine de calcul. En conséquence, les erreurs constatées par rapport à la solution de référence sont importantes. Pour ce genre de potentiels, la seule possibilité raisonnable est de prendre un domaine assez grand pour que la solution soit numériquement à support compact dans ce domaine de calcul. Le choix de la condition aux limites n'intervient alors pratiquement plus. En effet, si on place la frontière en $x_{\ell,r} = \pm 20$, on observe la même courbe que la courbe de référence. Mais la question de restreindre le domaine n'est alors pas résolue.

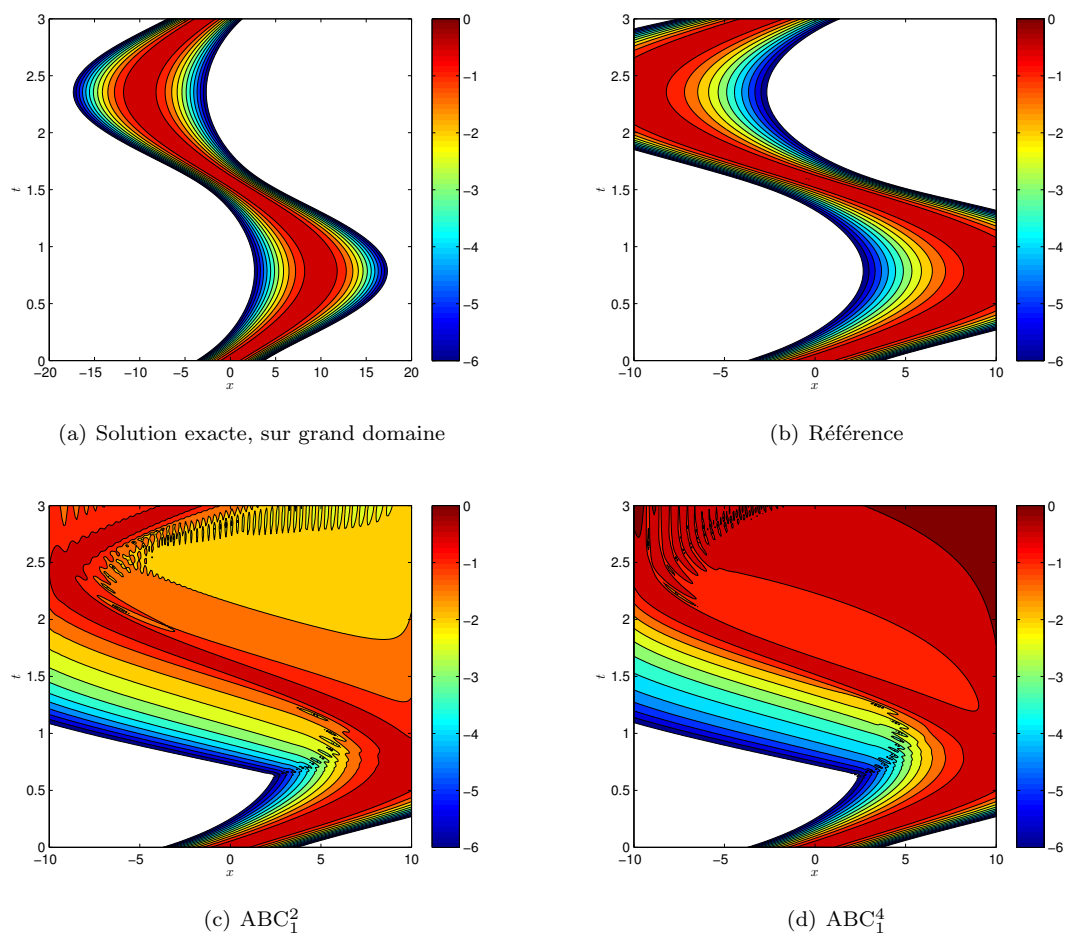


FIGURE 1.23 – Solutions calculées numériquement sur le domaine $[-10; 10]$ pour le potentiel non répulsif $V(x) = -x^2$.

1.8.4 Etude de potentiels au cas par cas

Maintenant que les caractéristiques générales des conditions artificielles ont été mises en évidence sur l'exemple $V(x) = x^2$, nous allons passer en revue d'autres exemples de potentiels, dépendant de l'espace et/ou du temps, afin d'apprécier la contribution et l'efficacité des conditions artificielles dans diverses situations. Pour chacun des potentiels mentionnés dans les tests numériques, nous vérifions que nous sommes bien dans les conditions d'application de la proposition 1.12 de manière à avoir la stabilité du problème avec condition aux limites ABC_1^4 . Pour cela, il faut s'assurer que $\partial_{\mathbf{n}}V$ ne change pas de signe sur la frontière x_ℓ ou x_r , au cours du temps, c'est-à-dire sur les domaines $\Sigma_{\ell,T} := \{x_\ell\} \times [0; T]$ et $\Sigma_{r,T} := \{x_r\} \times [0; T]$. Cela est toujours vrai pour les potentiels ne dépendant que de x . Pour le potentiel $V(x, t) = 5xt$, nous avons pour tout temps t ,

$$\partial_{\mathbf{n}}V(x_\ell, t) = -5t \quad \text{et} \quad \partial_{\mathbf{n}}V(x_r, t) = 5t$$

donc pour $t \geq 0$, $\partial_{\mathbf{n}}V$ est bien de signe constant sur chacune des frontières gauche et droite. Enfin, pour le potentiel $V(x, t) = x(2 + \cos(2t))$, nous avons pour tout temps t ,

$$\partial_{\mathbf{n}}V(x_\ell, t) = -(2 + \cos(2t)) \quad \text{et} \quad \partial_{\mathbf{n}}V(x_r, t) = 2 + \cos(2t)$$

donc $\partial_{\mathbf{n}}V$ est aussi de signe constant sur chaque frontière $\Sigma_{\ell,T}$ et $\Sigma_{r,T}$ dans ce cas.

Le potentiel $V(x)$: $V(x) = 5(2 + \cos x)$

Considérons d'abord un autre potentiel ne dépendant que de x , $V(x) = 5(2 + \cos x)$. Le domaine de calcul retenu est $\Omega = [-10; 10]$, avec $T = 2$, $\Delta t = 10^{-4}$ et $n_h = 8 \times 10^3$. La solution numérique de référence, calculée pour ce potentiel, est représentée en échelle logarithmique figure 1.24(a). Les autres représentations de la figure 1.24 correspondent à l'ensemble des résultats obtenus pour les conditions ABC_p^M , $M \in \{2, 4\}$ et $p \in \{1, 2\}$, ainsi que pour la condition sans potentiel ABC_0 . Comme dans l'étude générale menée pour $V(x) = x^2$, on remarque l'imprécision de la condition sans potentiel, et la hiérarchisation des conditions ABC_p^M selon leur ordre. Les deux discrétisations conduisent à des résultats sensiblement équivalents. Globalement, les niveaux de réflexion constatés sont faibles pour les conditions d'ordre deux (de l'ordre de 5×10^{-4}) et très faibles pour les conditions d'ordre quatre (de l'ordre de 10^{-5}).

Comme pour le potentiel $V(x) = x^2$, on peut également étudier les niveaux de réflexion en représentant la trace des solutions numériques sur la frontière gauche du domaine de calcul (figure 1.25), et l'évolution du maximum de cette trace en fonction de la discrétisation (h , Δt) (figure 1.26) pour les conditions d'ordre quatre. L'amplitude de la réflexion décroît bien avec h et Δt , et elle sature aux environs de $h = 10^{-4.8}$. Contrairement à ce qui se passait pour $V(x) = x^2$, et à condition de prendre $\Delta t \leq 10^{-3}$, une discrétisation en temps donnée pour une CLA conduit au même niveau de précision. Pour $\Delta t = 10^{-2}$, on observe que les conditions $ABC_{2,50}^M$ sont déjà très performantes, alors que les conditions ABC_1^M conduisent à un niveau de réflexion nettement supérieur.

Un premier potentiel dépendant aussi du temps : $V(x, t) = 5xt$

Après les exemples de deux potentiels ne dépendant que de l'espace, nous passons à l'étude d'exemples où les potentiels sont de la forme $V(x, t)$. Le premier d'entre eux est $V(x, t) = 5xt$ et un aperçu de la solution associée est donné par la figure 1.27(a). Les solutions numériques pour la

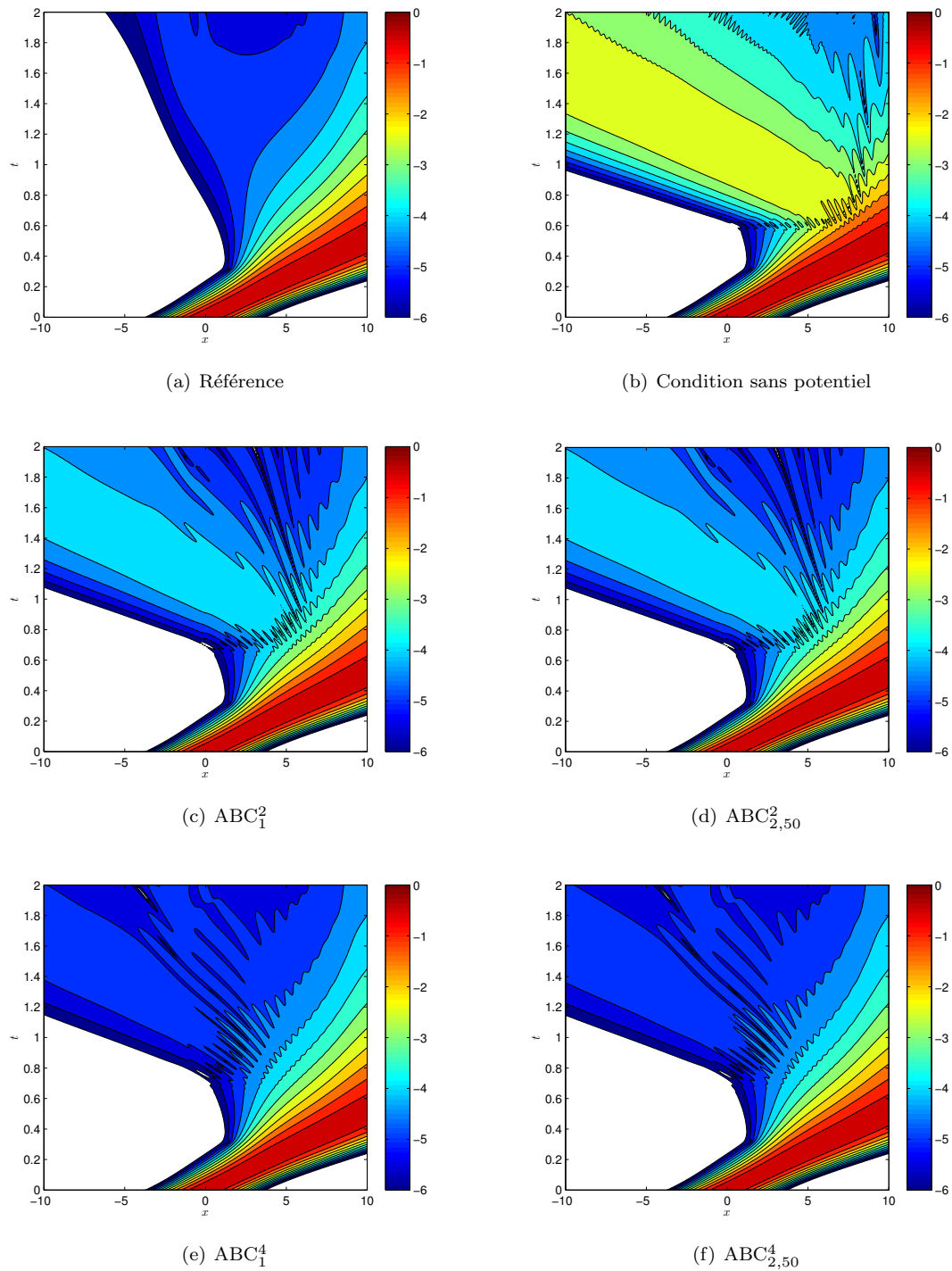


FIGURE 1.24 – Les différentes CLA pour le potentiel $V(x) = 5(2 + \cos x)$.

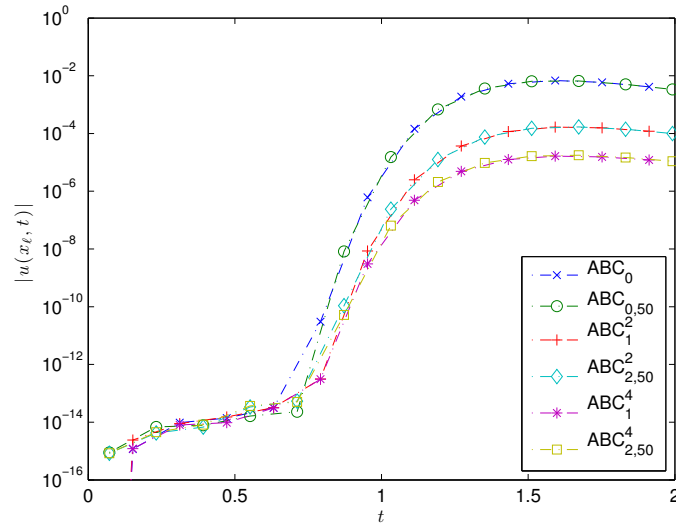


FIGURE 1.25 – Réflexion sur la frontière gauche pour $V(x) = 5(2 + \cos x)$ et les différentes CLA. $h = 2.5 \times 10^{-3}$ et $\Delta t = 10^{-4}$

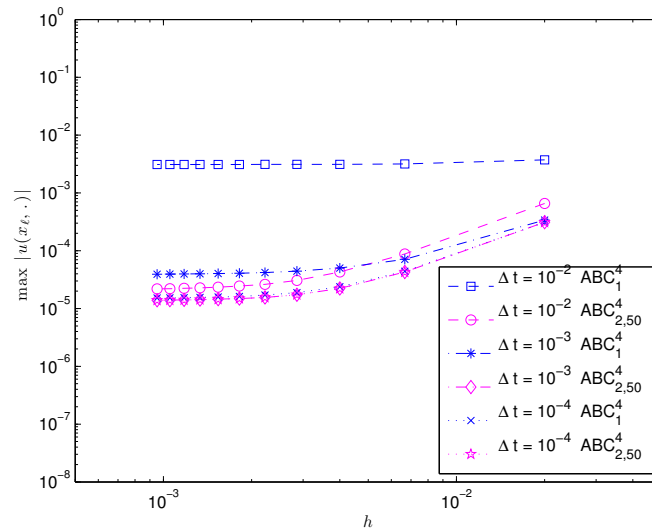


FIGURE 1.26 – Réflexion sur la frontière gauche pour $V(x) = 5(2 + \cos x)$ en fonction de la discrétisation $(h, \Delta t)$, pour les conditions d'ordre quatre ABC_1^4 et $ABC_{2,50}^4$.

condition sans potentiel et toutes les conditions artificielles sont données figure 1.27. Le domaine de calcul est $[x_\ell, x_r] = [-5, 10]$, le temps de calcul final est $T = 2.5$. Le pas de temps vaut $\Delta t = 5 \times 10^{-4}$ et on utilise $n_h = 8 \times 10^3$ points intérieurs pour la discrétisation en espace. On remarque de nouveau la classification des CLA selon leur ordre. De plus, la condition $ABC_{2,50}^4$ fournit une précision légèrement meilleure que ABC_1^4 . Cela est confirmé par les figures 1.28 et 1.29. L'évolution de l'erreur en fonction de la discrétisation montre ici nettement l'amélioration de la précision avec le raffinement en temps, bien que les deux discrétisations ne conduisent pas toujours à la même précision, pour un pas de temps fixé.

Un second potentiel dépendant aussi du temps : $V(x, t) = x(2 + \cos(2t))$

Pour terminer l'étude de potentiels de la forme $V(x, t)$, on considère ensuite $V(x, t) = x(2 + \cos(2t))$ sur le domaine $\Omega_T = [-5; 15] \times [0; 2.5]$, avec la discrétisation $h = 2 \times 10^{-3}$ et $\Delta t = 10^{-3}$. La solution de référence de ce potentiel est représentée figure 1.30(a). On représente figure 1.31 les résultats des simulations pour le pas de temps $\Delta t = 10^{-4}$. Dans l'ensemble, les résultats sont semblables à tous ceux obtenus précédemment. La condition sans potentiel donne de mauvais résultats, avec une réflexion parasite qui est presque de l'ordre de grandeur de la solution. Les conditions d'un même ordre donnent des résultats similaires indépendamment de la discrétisation utilisée : le niveau de réflexion est de 5×10^{-4} pour les conditions d'ordre deux, et 5×10^{-5} pour les conditions d'ordre quatre. On rappelle cependant que le coût algorithmique n'est pas le même pour les deux discrétisations, les convolutions discrètes utilisées pour ABC_1^M étant beaucoup plus coûteuses que les approximants de Padé utilisés pour localiser les conditions $ABC_{2,50}^M$. Pour un pas de temps suffisamment petit comme $\Delta t = 10^{-4}$, la différence de temps de calcul est significative.

A titre de comparaison, on peut étudier ce qui se passe pour les conditions d'ordre quatre lorsqu'on raffine moins en temps, choisissant par exemple $\Delta t = 10^{-3}$ (figure 1.31). Pour la condition $ABC_{2,50}^4$, on observe pratiquement la même précision que pour $\Delta t = 10^{-4}$, indiquant que pour cette condition, avec ce pas d'espace, la saturation de la précision est obtenue dès $\Delta t = 10^{-3}$. En revanche, la condition ABC_1^4 est nettement moins précise si on ne prend que $\Delta t = 10^{-3}$. Encore une fois, les conditions ABC_1^M discrétisées par convolutions discrètes nécessitent un pas de temps plus petit pour que la saturation soit obtenue.

Les figures 1.32 et 1.33 complètent l'étude de ce potentiel.

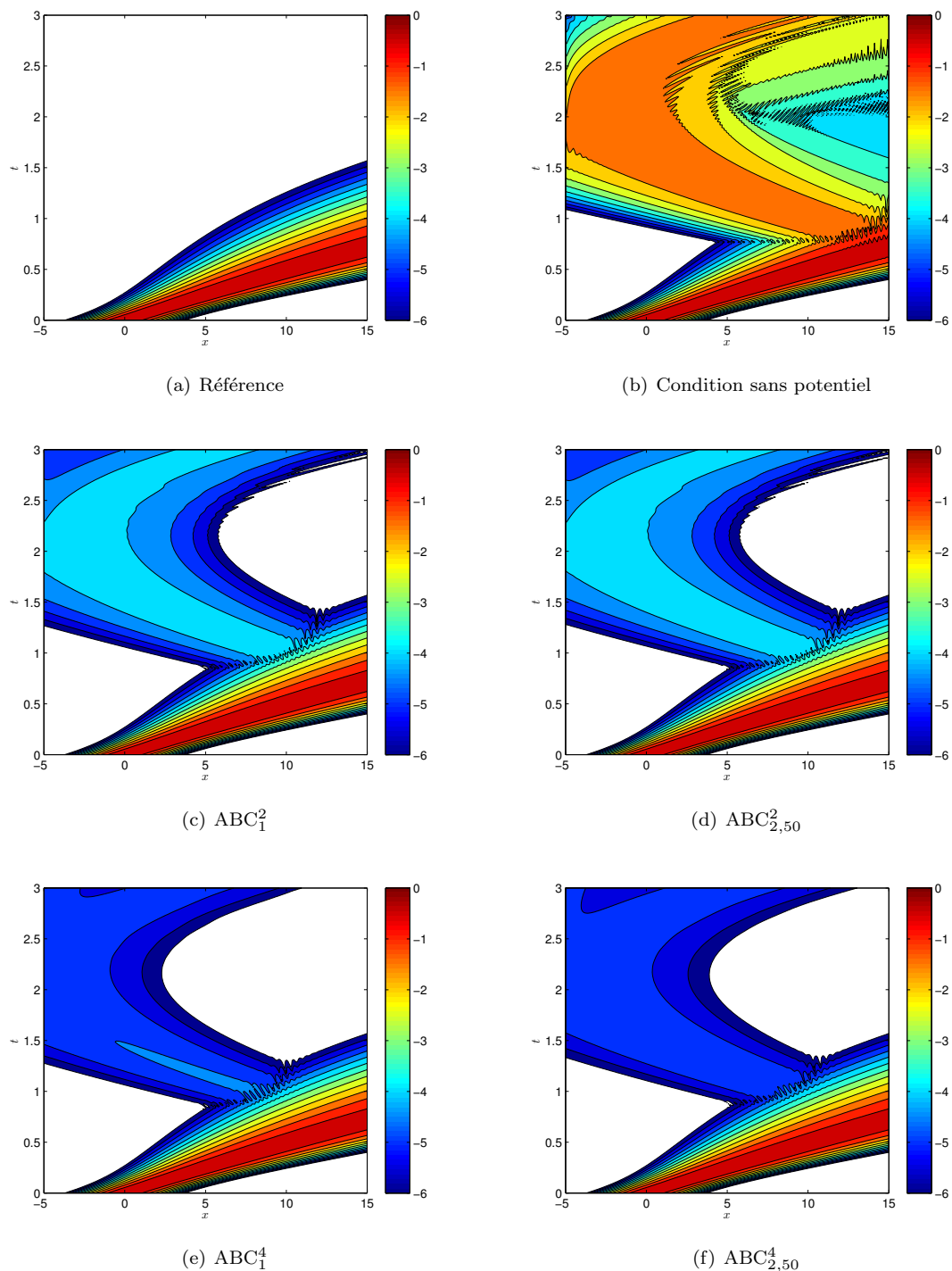


FIGURE 1.27 – Représentation de $\log_{10}|u|$ pour toutes les conditions pour le potentiel $V_3(x, t) = 5xt$ et $\Delta t = 10^{-4}$.

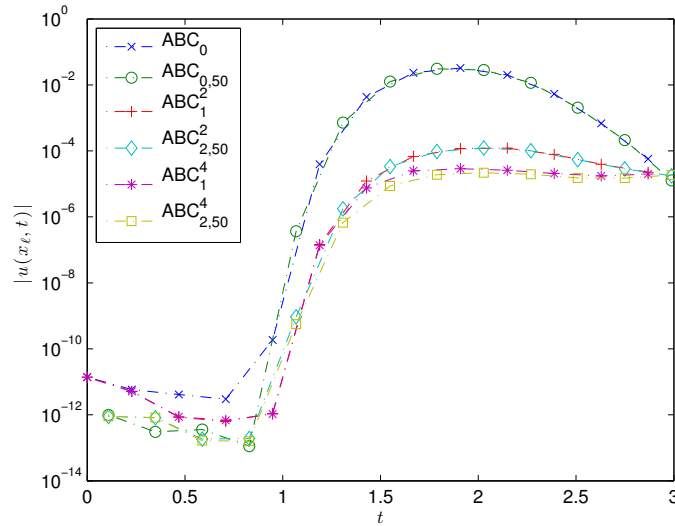


FIGURE 1.28 – Réflexion sur la frontière gauche pour $V(x, t) = 5xt$ et les différentes CLA, lorsque $h = 2.5 \times 10^{-3}$ et $\Delta t = 5 \times 10^{-4}$.

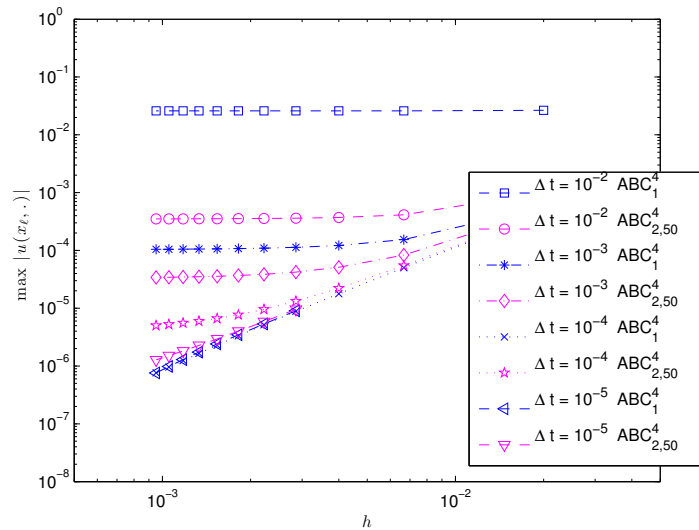


FIGURE 1.29 – Maximum de la réflexion sur la frontière gauche pour les conditions ABC_p^4 , en fonction de la discrétisation, pour le potentiel $V(x, t) = 5xt$.

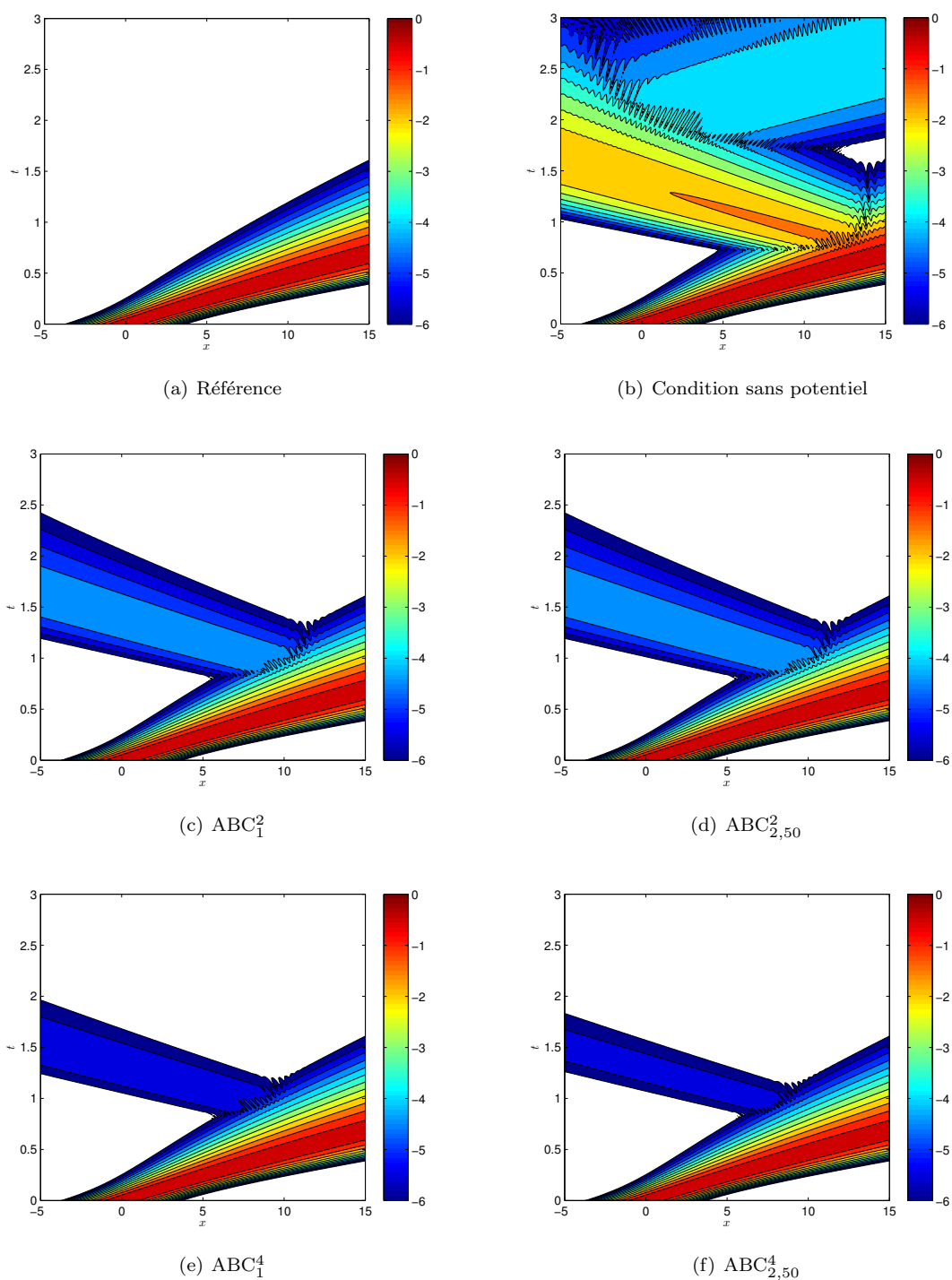


FIGURE 1.30 – Représentation de $\log_{10}|u|$ pour toutes les conditions pour le potentiel $V(x,t) = x(2 + \cos(2t))$ et $\Delta t = 10^{-4}$.

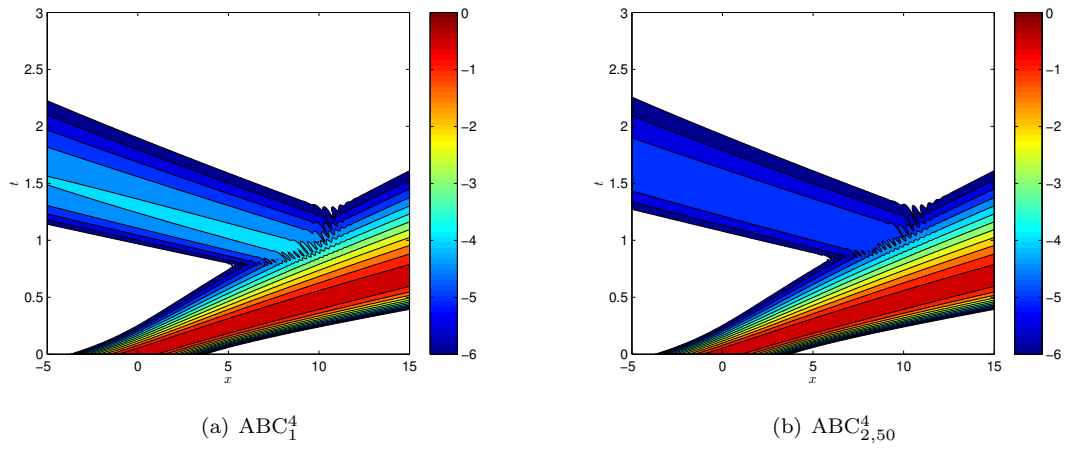


FIGURE 1.31 – Représentation de $\log_{10} |u|$ pour les conditions d'ordre quatre pour le potentiel $V(x, t) = x(2 + \cos(2t))$ et $\Delta t = 10^{-3}$.

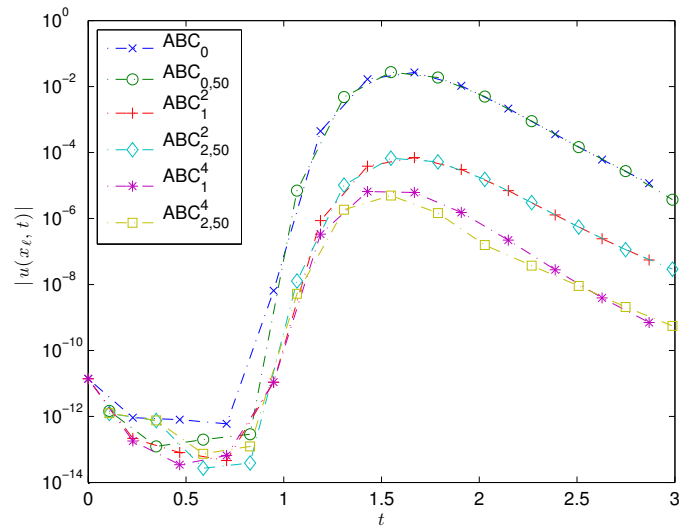


FIGURE 1.32 – Réflexion sur la frontière gauche pour $V(x, t) = x(2 + \cos 2t)$ et les différentes CLA.

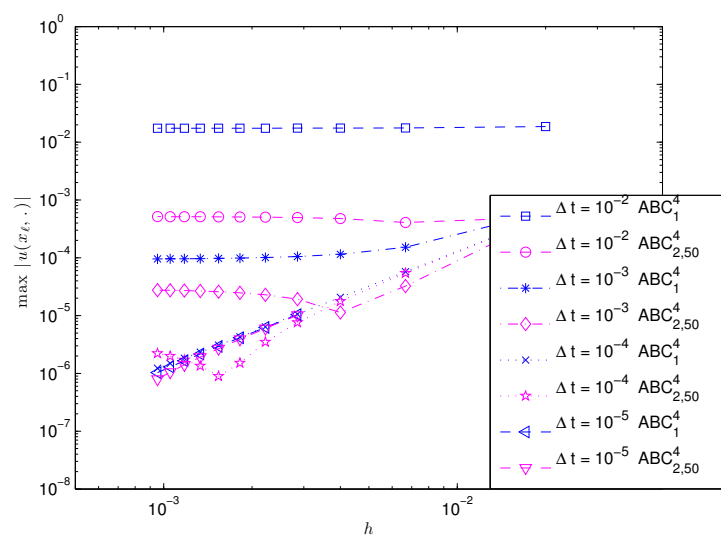


FIGURE 1.33 – Maximum de réflexion sur la frontière gauche pour les différentes CLA, en fonction du pas de temps Δt et du pas d'espace h , pour le potentiel $V(x, t) = x(2 + \cos 2t)$.

1.9 Conclusion

Nous avons développé deux familles de conditions aux limites ABC_1^M et ABC_2^M , respectivement basées sur une approche par changement de jauge et une approche directe. Ces deux approches se confondent lorsque le potentiel ne dépend pas du temps. Pour les CLA obtenues par changement de jauge, on a obtenu un résultat de stabilité pour la condition d'ordre deux, ainsi que pour la condition d'ordre quatre sous une hypothèse supplémentaire. Les conditions de type ABC_1^M sont ensuite discrétisées en temps à l'aide de convolution discrètes, et les résultats de stabilité sont préservés. Quant aux conditions de type ABC_2^M , elles sont discrétisées en utilisant une approximation rationnelle de la racine carrée et en introduisant des fonctions auxiliaires, solutions d'une équation différentielle. Aucun résultat de stabilité n'est disponible pour les CLA issues de l'approche directe, ni au niveau continu ni au niveau semi-discret. Plus précisément, on a mis en évidence numériquement qu'un tel résultat de stabilité était certainement faux. Ainsi, les conditions ABC_1^M présentent l'avantage, par rapport aux conditions ABC_2^M , de s'inscrire dans un cadre théorique bien défini.

Les simulations numériques en revanche montrent que les conditions ABC_2^M sont plus performantes à double titre. D'une part, leur évaluation est moins coûteuse que celle des CLA basées sur les convolutions discrètes. D'autre part, pour obtenir une précision équivalente, elles tolèrent une grille plus grossière en temps. En effet, pour les conditions ABC_2^M discrétisées par approximants de Padé, le maximum de précision est obtenu pour des pas de temps de l'ordre de 5×10^{-3} voire 10^{-2} , alors que pour observer la même précision avec les conditions ABC_1^M , il faut généralement choisir $\Delta t = 10^{-4}$. Le nombre d'itérations à effectuer est alors beaucoup plus important pour les conditions ABC_1^M . De plus, il faut préciser que malgré l'absence de résultat de stabilité pour les conditions ABC_2^M , aucun souci n'a été observé lors des diverses simulations effectuées.

Finalement, si l'objectif est de calculer une bonne approximation de la solution de manière rapide, les conditions ABC_2^M de la méthode directe sont tout à fait appropriées. Si on souhaite au contraire calculer la solution avec la plus grande précision possible, sans se préoccuper des temps de calcul, les deux méthodes se valent, avec un avantage aux méthodes issues du changement de jauge si on veut être certain d'éviter tout problème de stabilité. Nous verrons que dans le cas d'un potentiel non linéaire, il n'en ira pas forcément de même.

Chapitre 2

L'équation de Schrödinger avec potentiel et non linéarité

Ce chapitre a fait l'objet d'un article soumis [14].

Sommaire

2.1	Adaptation des CLA pour une non linéarité	107
2.2	Etude du problème aux limites dans le cas NLABC₁²	108
2.3	Semi-discrétisation des conditions aux limites	110
2.3.1	Discrétisation des conditions NLABC ₁ ^M basée sur les convolutions discrètes	111
2.3.2	Etude de la stabilité du système discrétisé	113
2.3.3	Discrétisation des conditions NLABC ₂ ^M basée sur une approximation rationnelle de la racine carrée : NLABC _{2,m} ^M	114
2.4	Implémentation des CLA dans un environnement éléments finis	115
2.5	Simulations numériques	119
2.5.1	Le potentiel cubique	119
2.5.2	D'autres potentiels non linéaires	127
2.6	Conclusion	138

Dans ce chapitre, nous souhaitons étudier l'extension des résultats précédents au cas de l'équation de Schrödinger avec non linéarité. Essentiellement, le potentiel V est remplacé par le potentiel non linéaire \mathcal{V} défini par $\mathcal{V}(x, t, u) = f(u)$ et nous traitons le problème initial

$$\begin{cases} i\partial_t u + \partial_x^2 u + \mathcal{V}(x, t, u)u = 0, & (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+, \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}. \end{cases} \quad (2.1)$$

La fonction f est une fonction à valeurs réelles et sera généralement de la forme $f(u) = g(|u|^2)$ avec $g \in C^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{R})$. Par exemple, dans le cas dit *cubique* on a $f(u) = q|u|^2$, où le facteur q peut être positif ou négatif. Nous considérons aussi des cas prenant en compte un potentiel spatial et une non linéarité comme par exemple : $\mathcal{V}(x, t, u) = V(x) + f(u) = x^2/10 + q|u|^2$. Cette étude généralise l'approche développée dans [11] et [16] pour l'équation de Schrödinger cubique. D'autres techniques reposent sur la stratégie paradifférentielle [86].

Divers résultats existent quant à l'étude du caractère bien posé du système non linéaire. A titre d'exemple, énonçons le résultat suivant qui peut être trouvé dans [20, 39, 36].

Proposition 2.26. *Considérons l'équation de Schrödinger non linéaire suivante :*

$$\begin{cases} i\partial_t u + \frac{1}{2}\Delta u - V(\mathbf{x})u - \beta|u|^{2\sigma}u = 0, & \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \quad t \geq 0 \\ u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x}), & \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \end{cases} \quad (2.2)$$

où $\sigma > 0$ est une constante positive ($\sigma = 1$ correspond à une non linéarité cubique et $\sigma = 2$ à une non linéarité quintique), $V(\mathbf{x}) \in C^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ est un potentiel subquadratique à valeurs réelles, β peut être positif ou négatif selon qu'on est dans le cas défocalisant ou focalisant. Deux invariants du système (2.2) sont conservés, la norme L^2 :

$$\|u(\cdot, t)\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \int_{\mathbb{R}^d} |u(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x} = \|u_0\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}, \quad t \geq 0 \quad (2.3)$$

et l'énergie

$$E(u(\cdot, t)) = \int_{\mathbb{R}^d} \left[\frac{1}{2} |\nabla u(\mathbf{x}, t)|^2 + V(\mathbf{x})|u(\mathbf{x}, t)|^2 + \frac{\beta}{\sigma+1} |u(\mathbf{x}, t)|^{2\sigma+2} \right] d\mathbf{x} = E(u_0), \quad t \geq 0, \quad (2.4)$$

où $\|\cdot\|_{L^2}$ désigne la norme $L^2(\mathbb{R}^d)$ en espace.

En considérant désormais $V(\mathbf{x}) = 0$ dans (2.2), nous avons les résultats d'existence suivants, toujours d'après [20, 39].

Théorème 2.27 (Existence globale dans H^1). *Soit σ tel que $0 \leq \sigma < 2/(d-2)$ (pour $d \geq 3$) si $\beta < 0$ (non linéarité attractive) ou $0 \leq \sigma < 2/d$ si $\beta > 0$ (non linéarité répulsive). Pour tout $u_0 \in H^1$, il existe une unique solution $u \in C(\mathbb{R}, H^1(\mathbb{R}^d))$. Cette solution vérifie les lois de conservation (2.3) et (2.4) et dépend continûment de la condition initiale $u_0 \in H^1(\mathbb{R}^d)$.*

Théorème 2.28 (Existence globale dans L^2). *Pour $0 \leq \sigma < 2/d$ et $u_0 \in L^2(\mathbb{R}^d)$, il existe une unique solution $u \in C(\mathbb{R}, L^2(\mathbb{R}^d)) \cap L^q_{loc}(\mathbb{R}, L^{2\sigma+2}(\mathbb{R}^d))$ avec $q = 4(\sigma+1)/d\sigma$. Cette solution vérifie la loi de conservation (2.3) et dépend continûment de la donnée initiale dans L^2 .*

Dans certains cas, liés à σ et au signe de β , on a explosion de la solution en temps fini. Les résultats classiques d'explosion sont basés sur l'identité de la variance. Définissons la variance par $\delta_V(t) = \int_{\mathbb{R}^d} |\mathbf{x}|^2 |u|^2 d\mathbf{x}$, on a l'identité

$$\frac{d^2}{dt^2} \delta_V(t) = 4E(u_0) + \frac{2\beta(d\sigma-2)}{\sigma+1} \int_{\mathbb{R}^d} |u|^{2\sigma+2} d\mathbf{x} \quad (2.5)$$

Nous avons alors le résultat suivant [20, 39, 83].

Théorème 2.29. *Soit $\beta < 0$ et $d\sigma \geq 2$. Considérons une donnée initiale $u_0 \in H^1$ avec $\delta_V(0)$ fini, et qui vérifie l'une des conditions suivantes :*

1. $E(u_0) < 0$,
2. $E(u_0) = 0$ et $\delta'_V(0) = 2 \operatorname{Re} \left(\int_{\mathbb{R}^d} u_0^* (\mathbf{x} \cdot \nabla u_0) d\mathbf{x} \right) < 0$,
3. $E(u_0) > 0$ et $|\delta'_V(0)| \geq 2\sqrt{2E(u_0)\delta_V(0)} = 2\sqrt{2E(u_0)}\|u_0\|_{L^2}$.

Alors, il existe un temps $t_* < \infty$ tel que

$$\lim_{t \rightarrow t_*} \|\nabla u\|_{L^2} \quad \text{et} \quad \lim_{t \rightarrow t_*} \|u\|_{L^\infty} = \infty. \quad (2.6)$$

2.1 Adaptation des CLA pour une non linéarité

Nous nous plaçons maintenant, et pour simplifier l'exposition de notre approche, dans le cas purement non linéaire : $\mathcal{V}(x, t, u) = f(u)(x, t)$. Formellement, l'extension à l'ajout d'un potentiel est assez directe. Pour obtenir les conditions aux limites associées au système non linéaire (2.1), nous adaptons la méthode décrite dans [11] : on considère les conditions établies précédemment pour le potentiel V et on remplace formellement V par $\mathcal{V} = f(u)$. Les deux stratégies développées dans les sections précédentes mènent donc à deux familles de CLA d'ordre M , qui sont notées $\widetilde{\text{NLABC}}_1^M$ pour la première stratégie, et $\widetilde{\text{NLABC}}_2^M$ – $\widetilde{\text{NLABC}}_{2,m}^M$ pour la seconde.

En conséquence, la nouvelle fonction de phase jouant de rôle de \mathcal{V} est désormais

$$\mathbb{V}(x, t, u) = \int_0^t \mathcal{V}(x, s, u) ds = \int_0^t f(u)(x, s) ds. \quad (2.7)$$

Pour un potentiel variable V , les conditions aux limites d'ordre deux sont ABC_1^2

$$\partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4} e^{i\mathcal{V}(x,t)} \partial_t^{1/2} \left(e^{-i\mathcal{V}(x,t)} u \right) = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T, \quad (2.8)$$

et $\widetilde{\text{ABC}}_2^2$

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\sqrt{i\partial_t + V} u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T. \quad (2.9)$$

On en déduit ainsi respectivement les deux conditions associées au système non linéaire

$$\partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4} e^{i\mathbb{V}(x,t,u)} \partial_t^{1/2} \left(e^{-i\mathbb{V}(x,t,u)} u \right) = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T, \quad (2.10)$$

que l'on note $\widetilde{\text{NLABC}}_1^2$ et

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\sqrt{i\partial_t + f(u)} u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T, \quad (2.11)$$

désignée par $\widetilde{\text{NLABC}}_2^2$.

Concernant les CLA d'ordre quatre, elles sont données dans le cas linéaire pour $\mathcal{V} = V$ par ABC_1^4

$$\partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4} e^{i\mathcal{V}} \partial_t^{1/2} \left(e^{-i\mathcal{V}} u \right) - i \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}}V) \frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}}{2} e^{i\mathcal{V}} I_t \left(\frac{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}}{2} e^{-i\mathcal{V}} u \right) = 0, \quad (2.12)$$

et $\widetilde{\text{ABC}}_2^4$

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\sqrt{i\partial_t + V} u + \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}}V) \frac{\sqrt{\partial_{\mathbf{n}}V}}{2} (i\partial_t + V)^{-1} \left(\frac{\sqrt{\partial_{\mathbf{n}}V}}{2} u \right) = 0, \quad (2.13)$$

sur Σ_T . Dans ces conditions et principalement pour la formulation de la première stratégie, nous avons veillé à préserver la symétrie du second terme. Cette symétrie était cruciale dans la preuve de stabilité et apparaissait déjà de manière naturelle dans le premier terme. Afin de préserver cette symétrie, le terme $\partial_{\mathbf{n}}V(x_{\ell,r}, t)$ a été réécrit sous la forme

$$\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}}V_{\ell,r}) \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V_{\ell,r}|} \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V_{\ell,r}|}. \quad (2.14)$$

De plus, on a formulé l'hypothèse que $\partial_{\mathbf{n}}V_{\ell,r}$ ne change pas de signe au cours du temps sur la frontière considérée (gauche ou droite). Cette hypothèse est nécessaire à la preuve de stabilité, mais également essentielle dans l'écriture de la condition car elle assure que $\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}}V_{\ell,r})$ est une constante, et, donc, que les fonctions manipulées dans la condition restent régulières. Cette hypothèse est facile à tester pour un potentiel V donné (elle est d'ailleurs vérifiée dès que V ne dépend que de x , par exemple).

Dans le cas non linéaire considéré à présent, l'hypothèse de non changement de signe sur la frontière devient beaucoup moins réaliste. En fait, il est *a priori* impossible de déterminer si $\partial_{\mathbf{n}}f(u)$ est de signe constant en $x = x_{\ell,r}$, ou non. Le plus vraisemblable est d'ailleurs que cela soit généralement faux, auquel cas la fonction signe associée est discontinue. Dans ce cas, la réécriture (2.14) introduit une discontinuité, peu compatible avec l'utilisation du calcul pseudodifférentiel. Il est alors préférable d'utiliser la formulation non symétrique des CLA, qui préserve leur régularité, d'autant plus que la preuve de stabilité n'est de toute façon plus valable dans le cas non linéaire.

Pour la première stratégie, la condition d'ordre quatre utilisée dans le cas non linéaire est donc la condition NLABC_1^4 non symétrisée

$$\partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4}e^{i\mathbb{V}(x,t,u)}\partial_t^{1/2}\left(e^{-i\mathbb{V}(x,t,u)}u\right) - \frac{i}{4}\partial_{\mathbf{n}}f(u)e^{i\mathbb{V}(x,t,u)}I_t\left(e^{-i\mathbb{V}(x,t,u)}u\right) = 0. \quad (2.15)$$

Pour la deuxième stratégie, la formulation non symétrique de la condition d'ordre quatre peut s'écrire, dans le cas d'un potentiel, soit

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\sqrt{i\partial_t + V}u + \frac{1}{4}\partial_{\mathbf{n}}V(i\partial_t + V)^{-1}u = 0,$$

soit

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\sqrt{i\partial_t + V}u + \frac{1}{4}(i\partial_t + V)^{-1}(\partial_{\mathbf{n}}Vu) = 0,$$

dans la mesure où les opérateurs $\partial_{\mathbf{n}}V(i\partial_t + V)^{-1}$ et $(i\partial_t + V)^{-1}(\partial_{\mathbf{n}}V \cdot)$ ont le même symbole principal, à savoir

$$\frac{\partial_{\mathbf{n}}V}{-\tau + V}.$$

Nous choisissons la deuxième expression pour faciliter l'implémentation numérique. La condition NLABC_1^4 utilisée pour une non linéarité est donc

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\sqrt{i\partial_t + f(u)}u + \frac{1}{4}(i\partial_t + f(u))^{-1}(\partial_{\mathbf{n}}f(u)u) = 0. \quad (2.16)$$

Remarque 2.1. Dans [16], les conditions aux limites retenues pour le non linéaire sont

$$\partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4}\partial_t^{1/2}u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T,$$

pour l'ordre deux, et

$$\partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4}\partial_t^{1/2}u - e^{i\pi/4}\frac{f(u)}{2}I_t^{1/2}u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T,$$

pour l'ordre trois. Ces conditions correspondent à celles qu'on obtiendrait à partir du cas potentiel, en considérant la méthode directe et en prenant pour symbole principal $\lambda_{1/2}^+ = -\sqrt{-\tau}$ au lieu de $\lambda_{1/2}^+ = -\sqrt{-\tau + V}$. D'un point de vue pseudodifférentiel, les conditions ainsi obtenues sont moins précises, puisqu'elles résultent d'une approximation à $|\tau|$ grand des conditions NLABC_1^M .

2.2 Etude du problème aux limites dans le cas NLABC_1^2

Dans la partie concernant un potentiel linéaire $\mathcal{V} = V$, on a prouvé que la résolution de l'équation sur Ω_T couplée aux conditions ABC_1^M conduit à un problème bien posé, grâce à l'inégalité de masse. Le théorème suivant indique l'extension de ce résultat au cadre non linéaire.

Théorème 2.30. Soit $u_0 \in L^2(\Omega)$ une donnée initiale à support compact dans Ω . Soit f une fonction $f : u \mapsto f(u)$, continue, à valeurs réelles. On suppose qu'il existe une fonction $u \in C^1([0; T]; H^1(\Omega))$ solution du problème avec donnée initiale u_0 et avec la condition aux limites artificielle NLABC₁², soit

$$\begin{cases} i\partial_t u + \partial_x^2 u + f(u)u = 0, & \text{dans } \Omega_T, \\ \partial_{\mathbf{n}} u + \Lambda_1^2 u = 0, & \text{sur } \Sigma_T, \\ u(x, 0) = u_0(x), & \forall x \in \Omega, \end{cases} \quad (2.17)$$

où l'opérateur Λ_1^2 est défini par

$$\Lambda_1^2(x, t, \partial_t, u) = e^{-i\pi/4} e^{i\mathbb{V}(x, t, u)} \partial_t^{1/2} \left(e^{-i\mathbb{V}(x, t, u)} u \right), \quad (2.18)$$

et \mathbb{V} est défini par la formule (2.7). Alors, u satisfait l'inégalité de masse

$$\forall t > 0, \quad \|u(t)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u_0\|_{L^2(\Omega)}. \quad (2.19)$$

Remarque 2.2. Contrairement au cas linéaire, l'inégalité (2.19) n'implique pas l'unicité de la solution u du problème avec donnée initiale et condition aux limites (2.17). Nous n'avons pas non plus de résultat d'existence du problème avec condition aux limites artificielles, aucun résultat n'étant à ce jour connu sur cette question.

Démonstration. La preuve suit exactement le même schéma que celle du théorème 1.13.

On multiplie par $-i\bar{u}$ l'équation vérifiée par u et on intègre en espace sur le domaine Ω

$$\int_{\Omega} \bar{u} \partial_t u \, dx - i \int_{\Omega} \bar{u} \partial_x^2 u \, dx - i \int_{\Omega} f(u) |u|^2 \, dx = 0.$$

On prend ensuite la partie réelle de cette équation, et on intègre par parties le deuxième terme

$$\partial_t \int_{\Omega} \frac{|u|^2}{2} \, dx - \operatorname{Re} \left(i [\bar{u} \partial_x u]_{x_\ell}^{x_r} \right) + \operatorname{Re} \left(i \int_{\Omega} |\partial_x u|^2 \, dx \right) - \operatorname{Re} \left(i \int_{\Omega} f(u) |u|^2 \, dx \right) = 0.$$

Or le troisième terme de cette expression est imaginaire pur, de même que le quatrième terme étant donné que la fonction f est à valeurs réelles. En identifiant les normes $L^2(\Omega)$ mises en jeu, puis en intégrant entre l'instant initial et un temps quelconque T , on obtient pour les deux termes restants

$$\int_0^T \partial_t \frac{\|u\|_{L^2(\Omega)}^2}{2} \, dt - \operatorname{Re} \left(i \int_0^T [\bar{u} \partial_x u]_{x_\ell}^{x_r} \, dt \right) = 0.$$

c'est-à-dire

$$\frac{1}{2} \left(\|u(T)\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|u_0\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) = \operatorname{Re} \left(\int_0^T [i \bar{u} \partial_{\mathbf{n}} u]_{x_\ell}^{x_r} \, dt \right). \quad (2.20)$$

Pour déterminer le signe du second membre, on explicite la condition aux limites NLABC₁²

$$\partial_{\mathbf{n}} u = -e^{-i\pi/4} e^{i\mathbb{V}} \partial_t^{1/2} \left(e^{-i\mathbb{V}} u \right),$$

d'où

$$\sum_{\gamma=\ell, r} \overline{i u(x_\gamma)} \partial_{\mathbf{n}} u(x_\gamma) = -i e^{-i\pi/4} \sum_{\gamma=\ell, r} \overline{e^{-i\mathbb{V}_\gamma} u_\gamma} \partial_t^{1/2} \left(e^{-i\mathbb{V}_\gamma} u_\gamma \right), \quad (2.21)$$

avec les notations $u_\gamma(t) = u(x_\gamma, t)$ et $\mathbb{V}_\gamma(t) = \mathbb{V}(x_\gamma, t, u(x_\gamma, t))$, pour $\gamma \in \{\ell, r\}$. On pose ensuite

$$\varphi_\gamma(t) = e^{-i\mathbb{V}_\gamma(t)} u_\gamma(t), \quad \gamma = \ell, r,$$

de sorte que le terme (2.21) s'écrit

$$\sum_{\gamma=\ell,r} i \overline{u_\gamma} \partial_{\mathbf{n}} u_\gamma = -ie^{-i\pi/4} \sum_{\gamma=\ell,r} \overline{\varphi_\gamma} \partial_t^{1/2} \varphi_\gamma.$$

Ainsi, l'équation (2.20) devient

$$\frac{1}{2} \left(\|u(T)\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|u_0\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) = \sum_{\gamma=\ell,r} \operatorname{Re} \left(\int_0^T -ie^{-i\pi/4} \overline{\varphi_\gamma} \partial_t^{1/2} \varphi_\gamma dt \right).$$

Le second membre de cette expression est le même terme que (1.116) pour une autre fonction φ_γ . De façon similaire, le lemme 1.10 assure que ce terme est négatif. D'où, pour tout temps $T > 0$, on montre que

$$\|u(T)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u_0\|_{L^2(\Omega)},$$

ce qui achève la preuve. \square

Remarque 2.3. Dans le cas d'un potentiel linéaire V , le problème est également bien posé lorsqu'on utilise la condition ABC_1^4 sous l'hypothèse supplémentaire que $\operatorname{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V)$ est constant sur la frontière. Dans le cas non linéaire, on a vu que, pour des raisons liées à de la régularité, la condition d'ordre quatre retenue est celle qui est non symétrisée par rapport à son deuxième terme. Alors, l'adaptation de la preuve de l'inégalité de masse (2.19) ne peut se faire que sous la condition très restrictive que le signe de $\partial_{\mathbf{n}} f(u)$ est indépendant du temps sur la frontière. Cette fois, le résultat ne s'étend donc pas à l'ordre quatre.

2.3 Semi-discrétisation des conditions aux limites

On reprend les notations utilisées précédemment. Le pas de temps est noté $\Delta t = T/N$, l'intervalle $[0; T]$ est discrétisé uniformément en N intervalles, les instants intermédiaires étant $t_n = n\Delta t$ pour $0 \leq n \leq N$. On note $u^n(x)$ une approximation de $u(x, t_n)$.

Dans le cas non linéaire, le traitement numérique est légèrement différent du cas avec potentiel V . Le schéma usuel symétrique de Crank-Nicolson s'écrit

$$i \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \partial_x^2 \frac{u^{n+1} + u^n}{2} + \left(\frac{f(u^{n+1}) + f(u^n)}{2} \right) \frac{u^{n+1} + u^n}{2} = 0. \quad (2.22)$$

Un schéma plus adapté au calcul de solution de type soliton est celui de Duràn et Sanz-Serna [51]

$$i \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \partial_x^2 \frac{u^{n+1} + u^n}{2} + f \left(\frac{u^{n+1} + u^n}{2} \right) \frac{u^{n+1} + u^n}{2} = 0, \quad (2.23)$$

que nous choisissons ici. De plus, ce schéma a pour effet de simplifier l'écriture de l'algorithme de résolution. En effet, si on introduit la suite (v^n) définie par

$$v^{n+1} = \frac{u^{n+1} + u^n}{2}$$

et $v^0 = 0$, le schéma (2.22) s'écrit désormais, pour $n \geq 0$,

$$2i \frac{v^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \partial_x^2 v^{n+1} + f(v^{n+1}) v^{n+1} = 0. \quad (2.24)$$

On voit ici immédiatement que, du fait de sa symétrie, le schéma (2.23) est plus aisé à traiter que le schéma (2.22). Dans ce schéma, la condition aux limites intervient dans sa discrétisation au point $v^{n+1} = u^{n+1/2}$. Nous verrons dans la partie 2.4, lors de l'étude détaillée de l'algorithme de calcul, qu'il est important de distinguer dans la CLA les contributions linéaires et non linéaires selon v^{n+1} en écrivant la condition sous la forme

$$\partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} = B_L v^{n+1} + B_{NL}(v^{n+1}), \quad (2.25)$$

où B_L est un coefficient et B_{NL} une fonction non linéaire à préciser. La question suivante est de déterminer quels sont les coefficients B_L et les fonctions B_{NL} pour chacune des deux discrétisations envisagées, convolutions discrètes pour NLABC_1^M et approximations rationnelles pour NLABC_2^M .

2.3.1 Discrétisation des conditions NLABC_1^M basée sur les convolutions discrètes

Considérons pour commencer le cas des conditions NLABC_1^M . Comme dans le cas linéaire, les opérateurs fractionnaires sont approchés par des convolutions discrètes grâce à la proposition 1.19, ce qui donne pour NLABC_1^4 et le schéma de Düran-Sanz-Serna

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} + e^{-i\pi/4} e^{i\mathbb{W}^{n+1}} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{k=0}^{n+1} \beta_{n+1-k} e^{-i\mathbb{W}^k} v^k \\ - \frac{i}{4} \partial_{\mathbf{n}} f(v^{n+1}) e^{i\mathbb{W}^{n+1}} \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=0}^{n+1} \gamma_{n+1-k} e^{-i\mathbb{W}^k} v^k = 0, \quad \text{sur } \Sigma. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Le point délicat est la discrétisation \mathbb{W}^{n+1} du terme

$$\int_0^t f(u(x, s)) ds$$

au temps $t_{n+1/2}$. La fonction f étant non linéaire, $f(u)$ est discrétisé au temps $t_{n+1/2}$ en suivant la discrétisation de Düran-Sanz-Serna

$$f\left(\frac{u^{n+1} + u^n}{2}\right)$$

ce terme étant égal à $f(v^{n+1})$. L'intégrale étant linéaire, elle est discrétisée au temps $t_{n+1/2}$ comme la demi-somme des approximations des intégrales aux temps t_{n+1} et t_n . On prend comme approximation de l'intégrale les sommes de Riemann de pas Δt . On obtient

$$\mathbb{W}^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\sum_{l=0}^n f(v^l) \Delta t + \sum_{l=0}^{n+1} f(v^l) \Delta t \right)$$

ce qui, après regroupement des deux sommes, conduit à

$$\mathbb{W}^{n+1} = \Delta t \sum_{l=0}^n f(v^l) + \frac{\Delta t}{2} f(v^{n+1}) \quad (2.27)$$

On introduit la notation

$$\mathbb{E}^p = \exp(i\mathbb{W}^p) = \exp\left(i\Delta t \sum_{l=1}^{p-1} f(v^l)\right) \exp\left(i\frac{\Delta t}{2} f(v^p)\right) = \widetilde{\mathbb{E}^{p-1}} \exp\left(i\frac{\Delta t}{2} f(v^p)\right), \quad (2.28)$$

avec

$$\widetilde{\mathbb{E}}^{p-1} = \exp \left(i \Delta t \sum_{l=1}^{p-1} f(v^l) \right), \quad \widetilde{\mathbb{E}}^0 = 1. \quad (2.29)$$

Remarquons que si on avait utilisé une discrétisation de Crank-Nicolson pour traiter le terme non linéaire

$$\exp \left(i \int_0^t f(u) \right),$$

on aurait obtenu un terme de la forme

$$\mathbb{E}^p = \exp \left(i \Delta t \sum_{l=1}^{p-1} \frac{f(u^l) + f(u^{l-1})}{2} \right) \exp \left(i \frac{\Delta t}{2} \frac{f(u^p) + f(u^{p-1})}{2} \right).$$

Finalement, en utilisant ces notations et en mettant en évidence les termes v^{n+1} , la discrétisation de NLABC₁⁴ s'écrit

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} + e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} v^{n+1} + e^{-i\pi/4} \mathbb{E}^{n+1} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{k=0}^n \beta_{n+1-k} \overline{\mathbb{E}}^k v^k \\ - \frac{i}{4} \partial_{\mathbf{n}} f(v^{n+1}) \frac{\Delta t}{2} v^{n+1} - \frac{i}{4} \partial_{\mathbf{n}} f(v^{n+1}) \mathbb{E}^{n+1} \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=0}^n \gamma_{n+1-k} \overline{\mathbb{E}}^k v^k = 0. \end{aligned} \quad (2.30)$$

La discrétisation de la condition NLABC₁² en est évidemment un sous-produit en tronquant les termes correcteurs

$$\partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} + e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} v^{n+1} + e^{-i\pi/4} \mathbb{E}^{n+1} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{k=0}^n \beta_{n+1-k} \overline{\mathbb{E}}^k v^k = 0. \quad (2.31)$$

Concernant la condition d'ordre deux, les termes linéaires en v^{n+1} se réduisent à $e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} v^{n+1}$, tandis que le deuxième terme est non linéaire en v^{n+1} du fait du facteur \mathbb{E}^{n+1} , lequel s'écrit plus particulièrement

$$\mathbb{E}^{n+1} = \exp \left(i \frac{\Delta t}{2} f(v^{n+1}) \right) \widetilde{\mathbb{E}}^n, \quad (2.32)$$

où $\widetilde{\mathbb{E}}^n$ dépend seulement de v^0, v^1, \dots, v^n mais pas de v^{n+1} . Dans la condition d'ordre quatre, tous les termes correctifs sont non linéaires selon v^{n+1} et sont donnés par la seconde ligne de l'équation (2.30). Finalement, en distinguant termes isolés en v^{n+1} et convolutions des (v^0, \dots, v^k) , termes linéaires et non linéaires en v^{n+1} , on met NLABC₁⁴ sous la forme

$$\partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} = B_{1,L}^4 v^{n+1} + B_{1,NL}^4(v^{n+1}), \quad (2.33)$$

avec

$$B_{1,L} = -e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \quad (2.34)$$

$$B_{1,NL}(v^{n+1}) = -e^{-i\pi/4} e^{i \frac{\Delta t}{2} f(v^{n+1})} \widetilde{\mathbb{E}}^n \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{k=0}^n \beta_{n+1-k} \overline{\mathbb{E}}^k v^k \quad (2.35)$$

$$+ \frac{i}{4} \partial_{\mathbf{n}} f(v^{n+1}) \frac{\Delta t}{2} v^{n+1} + \frac{i}{4} \partial_{\mathbf{n}} f(v^{n+1}) e^{i \frac{\Delta t}{2} f(v^{n+1})} \widetilde{\mathbb{E}}^n \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=0}^n \gamma_{n+1-k} \overline{\mathbb{E}}^k v^k. \quad (2.36)$$

Dans le cas de la condition NLABC₁², il suffit de ne pas considérer dans ce qui précède les termes correcteurs. La condition aux limites correspondante est alors notée sous la forme (2.25) par le biais d'opérateurs $B_{1,L}^2$ et $B_{1,NL}^2$.

2.3.2 Etude de la stabilité du système discrétisé

Comme dans le chapitre précédent, nous étudions comment se transmet le théorème 2.30 au système discret constitué de (2.24) et de (2.31).

Théorème 2.31. *Soit $(u^n)_{n \in \mathbb{N}}$ une solution du système avec condition aux limites d'ordre deux*

$$\begin{cases} 2i \frac{v^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \partial_x^2 v^{n+1} + f(v^{n+1}) v^{n+1} = 0, & \text{dans } \Omega, \\ \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} + \Lambda_{1,n+1}^2 v^{n+1} = 0, & \text{sur } \Sigma, \\ u^0 = u_0, & \text{dans } \Omega, \end{cases} \quad (2.37)$$

avec $u^{n+1} = 2v^{n+1} - u^n$, où l'opérateur semi-discrétisé $\Lambda_{1,n+1}^2$ est défini par

$$\Lambda_{1,n+1}^2 v^{n+1} = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} v^{n+1} + e^{-i\pi/4} e^{i\mathbb{W}^{n+1}} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{k=0}^n \beta_{n+1-k} e^{-i\mathbb{W}^k} v^k, \quad (2.38)$$

et $\mathbb{W}^{n+1} = \frac{\mathbb{V}^{n+1} + \mathbb{V}^n}{2}$. Alors, on a l'inégalité de masse suivante

$$\forall n \in \{0, \dots, N\}, \quad \|u^n\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u^0\|_{L^2(\Omega)}. \quad (2.39)$$

Remarque 2.4. Comme dans le cas continu, on peut ajouter que, sous l'hypothèse que $\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} f(v^k))$ est une constante, (2.39) reste vérifiée si on a choisi la condition d'ordre quatre dans (2.37). Cependant, de façon similaire au cas continu, cette hypothèse n'est pas raisonnable dans le cas non linéaire. Ainsi, nous ne traitons pas le cas $M = 4$ ici.

Démonstration. Soit p un entier compris entre 0 et $n - 1$. On écrit l'équation intérieure de (2.37) au temps t_{p+1}

$$i \frac{u^{p+1} - u^p}{\Delta t} + \partial_x^2 v^{p+1} + f(v^{p+1}) v^{p+1} = 0,$$

que l'on multiplie ensuite par $-i \overline{v^{p+1}}$. Le premier terme est arrangé de la manière suivante

$$\begin{aligned} (u^{p+1} - u^p) \overline{v^{p+1}} &= \frac{1}{2} (u^{p+1} - u^p) (\overline{u^{p+1} + u^p}) = \frac{1}{2} (|u^{p+1}|^2 - |u^p|^2 + u^{p+1} \overline{u^p} - u^p \overline{u^{p+1}}) \\ &= \frac{1}{2} (|u^{p+1}|^2 - |u^p|^2 + 2i \text{Im}(u^{p+1} \overline{u^p})). \end{aligned}$$

Puis, on intègre sur le domaine Ω

$$\int_{\Omega} \frac{|u^{p+1}|^2 - |u^p|^2 + 2i \text{Im}(u^{p+1} \overline{u^p})}{2\Delta t} dx - \int_{\Omega} i \overline{v^{p+1}} \partial_x^2 v^{p+1} dx - \int_{\Omega} i f(v^{p+1}) |v^{p+1}|^2 dx = 0,$$

et on intègre par parties sur Ω le deuxième terme. Ceci donne, pour $p \geq 0$,

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{|u^{p+1}|^2 - |u^p|^2 + i \text{Im}(u^{p+1} \overline{u^p})}{2\Delta t} dx - i \left[\overline{v^{p+1}} \partial_x v^{p+1} \right]_{x_\ell}^{x_r} + i \int_{\Omega} |\partial_x v^{p+1}|^2 dx \\ - i \int_{\Omega} f(v^{p+1}) |v^{p+1}|^2 dx = 0. \end{aligned}$$

Comme la fonction g est à valeurs réelles, la partie réelle de l'expression ci-dessus conduit à

$$\frac{\|u^{p+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|u^p\|_{L^2(\Omega)}^2}{2\Delta t} = \text{Re} \left(i \left[\overline{v^{p+1}} \partial_x v^{p+1} \right]_{x_\ell}^{x_r} \right).$$

On somme les termes de l'équation précédente pour p allant de 0 à $n-1$ pour obtenir

$$\frac{1}{2\Delta t} \left(\|u^n\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|u^0\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) = \operatorname{Re} \left(\sum_{p=0}^{n-1} i \left[\overline{v^{p+1}} \partial_x v^{p+1} \right]_{x_\ell}^{x_r} \right) = \sum_{\gamma=\ell,r} A_\gamma,$$

avec

$$A_\gamma = \operatorname{Re} \left(\sum_{p=0}^{n-1} i \overline{v^{p+1}(x_\gamma)} \partial_{\mathbf{n}} v^{p+1}(x_\gamma) \right), \quad \text{pour } \gamma = \ell, r.$$

Considérons à présent le bord droit x_r du domaine, le bord gauche se traitant de manière similaire.

On a alors

$$i \overline{v^{p+1}(x_r)} \partial_{\mathbf{n}} v^{p+1}(x_r) = -ie^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} e^{i\mathbb{W}_r^{p+1}} \overline{v_r^{p+1}} \sum_{k=0}^{p+1} \beta_{p+1-k} e^{-i\mathbb{W}_r^k v_r^k},$$

c'est-à-dire

$$\sum_{p=0}^{n-1} i \overline{v^{p+1}(x_r)} \partial_{\mathbf{n}} v^{p+1}(x_r) = -ie^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{p=0}^{n-1} \overline{\chi_r^{p+1}} \sum_{k=0}^{p+1} \beta_{p+1-k} \chi_r^k,$$

avec $\chi_r^k = e^{-i\mathbb{W}_r^k} v_r^k$. Pour étudier le signe de ce terme, on s'appuie de nouveau sur le lemme 1.22 qui assure immédiatement que la partie réelle du terme ci-dessus est négative. Ceci conclut la preuve de la proposition. \square

2.3.3 Discrétisation des conditions $\widetilde{\text{NLABC}}_2^M$ basée sur une approximation rationnelle de la racine carrée : $\text{NLABC}_{2,m}^M$

Avant de semi-discrétiser la condition aux limites $\widetilde{\text{NLABC}}_2^4$

$$\partial_{\mathbf{n}} u - i\sqrt{i\partial_t + f(u)} u + \frac{1}{4}(i\partial_t + f(u))^{-1}(\partial_{\mathbf{n}} f(u) u) = 0,$$

on approche formellement l'opérateur racine carrée en utilisant une approximation de Padé, définie en (1.165) par la fonction R_m . Ceci conduit formellement à la condition notée $\text{NLABC}_{2,m}^4$

$$\partial_{\mathbf{n}} u - iR_m(i\partial_t + f(u))u + \frac{1}{4}(i\partial_t + f(u))^{-1}(\partial_{\mathbf{n}} f(u) u) = 0.$$

En explicitant cette condition, on peut écrire

$$\partial_{\mathbf{n}} u - i \left(\sum_{k=0}^m a_k^m u - \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m (i\partial_t + f(u) + d_k^m)^{-1} u \right) + \frac{1}{4}(i\partial_t + f(u))^{-1}(\partial_{\mathbf{n}} f(u) u) = 0. \quad (2.40)$$

On introduit alors les fonctions auxiliaires $(\varphi_k)_{1 \leq k \leq m}$ définies par

$$\varphi_k = (i\partial_t + f(u) + d_k^m)^{-1} u,$$

pour le terme d'ordre deux, et ψ

$$\psi = (i\partial_t + f(u))^{-1}(\partial_{\mathbf{n}} f(u) u),$$

pour le terme d'ordre quatre. La condition aux limites artificielle devient ainsi

$$\partial_{\mathbf{n}} u - i \left(\sum_{k=0}^m a_k^m \right) u + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k + \frac{1}{4} \psi = 0,$$

dont la semi-discrétisation en temps est donnée par

$$\partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} - i \sum_{k=0}^m a_k^m v^{n+1} + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k^{n+1/2} + \frac{1}{4} \psi^{n+1/2} = 0. \quad (2.41)$$

Les définitions des fonctions auxiliaires conduisent aux équations différentielles

$$i \partial_t \varphi_k + f(u) \varphi_k + d_k^m \varphi_k = u, \quad x = x_{\ell,r},$$

et

$$i \partial_t \psi + f(u) \psi = \partial_{\mathbf{n}} f(u) u, \quad x = x_{\ell,r}.$$

Celles-ci sont discrétisées respectivement en $\varphi_k^{n+1/2} = \frac{\varphi_k^{n+1} + \varphi_k^n}{2}$ et en $\psi^{n+1/2} = \frac{\psi^{n+1} + \psi^n}{2}$ par

$$\frac{2i}{\Delta t} \varphi_k^{n+1/2} + f(v^{n+1}) \varphi_k^{n+1/2} + d_k^m \varphi_k^{n+1/2} = v^{n+1} + \frac{2i}{\Delta t} \varphi_k^n, \quad x = x_{\ell,r},$$

et

$$\frac{2i}{\Delta t} \psi^{n+1/2} + f(v^{n+1}) \psi^{n+1/2} = \partial_{\mathbf{n}} f(v^{n+1}) v^{n+1} + \frac{2i}{\Delta t} \psi^n, \quad x = x_{\ell,r}.$$

Les équations semi-discrètes de mise à jour des fonctions auxiliaires sont donc, en $x = x_{\ell,r}$

$$\varphi_k^{n+1/2} = \frac{1}{\frac{2i}{\Delta t} + f(v^{n+1}) + d_k^m} v^{n+1} + \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + f(v^{n+1}) + d_k^m} \varphi_k^n, \quad (2.42)$$

et

$$\psi^{n+1} = \frac{\partial_{\mathbf{n}} f(v^{n+1})}{\frac{2i}{\Delta t} + f(v^{n+1})} v^{n+1} + \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + f(v^{n+1})} \psi^n. \quad (2.43)$$

En réinjectant $\varphi_k^{n+1/2}$ et $\psi^{n+1/2}$ dans la condition aux limites semi-discrétisée (2.41), on obtient le système suivant pour $x = x_{\ell,r}$

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} - i \left(\sum_{k=0}^m a_k^m \right) v^{n+1} + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \frac{1}{\frac{2i}{\Delta t} + f(v^{n+1}) + d_k^m} v^{n+1} + \frac{1}{4} \frac{\partial_{\mathbf{n}} f(v^{n+1})}{\frac{2i}{\Delta t} + f(v^{n+1}) + d_k^m} v^{n+1} \\ + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + f(v^{n+1}) + d_k^m} \varphi_k^n + \frac{1}{4} \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + f(v^{n+1}) + d_k^m} \psi^n = 0, \end{aligned} \quad (2.44a)$$

$$\varphi_k^{n+1/2} = \frac{1}{\frac{2i}{\Delta t} + f(v^{n+1}) + d_k^m} v^{n+1} + \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + f(v^{n+1}) + d_k^m} \varphi_k^n, \quad (2.44b)$$

$$\psi^{n+1} = \frac{\partial_{\mathbf{n}} f(v^{n+1})}{\frac{2i}{\Delta t} + f(v^{n+1})} v^{n+1} + \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + f(v^{n+1})} \psi^n. \quad (2.44c)$$

2.4 Implémentation des CLA dans un environnement éléments finis

Le schéma pour l'équation intérieure est donné par (2.24). Lorsqu'on écrit la formulation variationnelle de cette équation, on est amené à discrétiser la dérivée normale de v au temps t_{n+1} . En effet, par multiplication par une fonction-test $\psi \in H^1(\Omega)$ de l'équation (2.24) puis intégration par parties, la formulation variationnelle est obtenue, pour $n \geq 0$, par

$$\frac{2i}{\Delta t} \int_{\Omega} v^{n+1} \psi \, dx + [\partial_x v^{n+1} \psi]_{x_{\ell}}^{x_r} - \int_{\Omega} \partial_x v^{n+1} \partial_x \psi \, dx + \int_{\Omega} f(v^{n+1}) v^{n+1} \psi \, dx = \frac{2i}{\Delta t} \int_{\Omega} u^n \psi \, dx$$

Rappelons que la forme des CLA non linéaires est, par exemple pour la première classe de CLA,

$$\partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} = B_{1,L}^M v^{n+1} + B_{1,NL}^M v^{n+1}. \quad (2.45)$$

Le problème étant globalement non linéaire, l'approximation est faite par le biais d'un point fixe. A un instant t_n donné, nous posons $\zeta^0 = v^n$, et calculons la solution v^{n+1} par itération sur

$$\frac{2i}{\Delta t} \int_{\Omega} \zeta^{s+1} \psi \, dx + [\partial_x \zeta^{s+1} \psi]_{x_\ell}^{x_r} - \int_{\Omega} \partial_x \zeta^{s+1} \partial_x \psi \, dx = \frac{2i}{\Delta t} \int_{\Omega} u^n \psi \, dx - \int_{\Omega} f(\zeta^s) \zeta^s \psi \, dx \quad (2.46)$$

avec la condition aux limites

$$\partial_{\mathbf{n}} \zeta^{s+1} = B_{1,L}^M \zeta^{s+1} + B_{1,NL}^M(\zeta^s). \quad (2.47)$$

Nous avons choisi de rendre explicite la non linéarité sur f afin de ne pas avoir à recalculer la matrice de masse généralisée associée à chaque itération. Ce terme contribue donc au second membre de l'équation. Ceci permet de considérer la CLA (2.47) comme une simple condition de type Fourier-Robin, la non linéarité agissant simplement comme un terme source du bord qui est placé dans le second membre de l'équation. En cela, l'algorithme est très similaire au cas linéaire. Pour ne pas noyer le lecteur dans les détails des manipulations algébriques, donnons à titre d'exemple les coefficients dans le cas de la condition d'ordre quatre

$$B_{1,L}^4 = -e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}}$$

et

$$\begin{aligned} B_{1,NL}^4(\zeta^s) = & -e^{-i\pi/4} e^{i\frac{\Delta t}{2} f(\zeta^s)} \widetilde{\mathbb{E}}^n \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{k=0}^n \beta_{n+1-k} \overline{\mathbb{E}}^k v^k \\ & + \frac{i}{4} \partial_{\mathbf{n}}(f(\zeta^s)) \frac{\Delta t}{2} + \frac{i}{4} \partial_{\mathbf{n}}(f(\zeta^s)) e^{i\frac{\Delta t}{2} f(\zeta^s)} \widetilde{\mathbb{E}}^n \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=0}^n \gamma_{n+1-k} \overline{\mathbb{E}}^k v^k. \end{aligned}$$

Remarquons que la condition d'ordre deux ne nécessite que de tronquer une partie du terme non linéaire $B_{1,NL}^4(\zeta^s)$ et ne modifie en rien le terme linéaire $B_{1,L}^4$.

La discrétisation du système variationnel (2.46)–(2.47) s'effectue par éléments finis \mathbb{P}_1 . Le pas de discrétisation uniforme est désigné par h , pour n_h nœuds de discrétisation de Ω . Notons \mathbb{S} la matrice de raideur et \mathbb{M} la matrice de masse. Le terme matriciel de bord associé à $B_{1,L}^M$ est noté $\mathbb{B}_{1,L}^M$. Le second membre est donné par la discrétisation du membre de droite de l'équation (2.46) et par la contribution associée à $B_{1,NL}^M(\zeta^s)$. Nous notons $\mathbf{b}_1^{M,s}$ le second membre. Ainsi, à chaque itération du point fixe, le système à résoudre est donné par

$$\left(\frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} - \mathbb{S} + \mathbb{B}_{1,L}^M \right) \zeta^{s+1} = \mathbf{b}_1^{M,s} \quad (2.48)$$

avec une initialisation $\zeta^0 = \mathbf{v}^n$, ce dernier vecteur désignant le vecteur nodal de v^n pour des éléments finis \mathbb{P}_1 . Les matrices \mathbb{M} et \mathbb{S} désignent respectivement les matrices éléments finis de masse et de raideur, introduites au paragraphe 1.8.1. Le vecteur nodal éléments finis est $\zeta^{s+1} \in \mathbb{C}^{n_h+1}$. Le critère d'arrêt est donné par $\|\zeta^{s+1} - \zeta^s\|_{L^2(\Omega)} < \varepsilon$, pour une tolérance ε fixée *a priori*. Une valeur maximale de s , notée s^{max} est aussi fixée *a priori* afin de prévenir d'une éventuelle divergence de l'algorithme. Enfin, on note $\|\cdot\|_2$ la norme euclidienne dans l'espace \mathbb{C}^{n_h+1} . Nous pouvons résumer cet algorithme

dans la table ci-dessous, en rappelant que les indices de temps n varient entre 0 et $N - 1$, le temps final étant $T = N\Delta t$.

<p>Pour $n = 0, \dots, N - 1$</p> <p style="padding-left: 20px;">Initialisation : $\zeta^0 = \mathbf{v}^n, s = 0$</p> <p style="padding-left: 20px;">Calcul de $\mathbb{M}, \mathbb{S}, \mathbb{B}_{1,L}^M$</p> <p style="padding-left: 20px;">Boucle sur s tant que $\ \mathbb{M}(\zeta^{s+1} - \zeta^s)\ _2 > \varepsilon$ et $s \leq s^{max}$</p> <p style="padding-left: 40px;">Calcul du second membre $\mathbf{b}_1^{M,s}$</p> <p style="padding-left: 40px;">Résolution du problème linéaire</p> <p style="padding-left: 40px;">$\left(\frac{2i}{\Delta t}\mathbb{M} - \mathbb{S} - \mathbb{B}_{1,L}^M\right)\zeta^{s+1} = \mathbf{b}_1^{M,s}$</p> <p style="padding-left: 40px;">$s = s + 1$</p> <p style="padding-left: 20px;">Fin de la boucle sur s</p> <p style="padding-left: 20px;">$\mathbf{v}^{n+1} = \zeta^{s+1}$</p> <p style="padding-left: 20px;">$\mathbf{u}^{n+1} = 2\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{u}^n$</p> <p>Fin de la boucle sur n</p>

La discrétisation de la condition aux limites $NLABC_{2,m}^4$ est décrite par le système (2.44) et contient notamment les deux équations de mise à jour des fonctions auxiliaires $(\varphi_k^{n+1/2})_{1 \leq k \leq n}$ et $\psi^{n+1/2}$. Comme la condition aux limites et les équations qui lui sont couplées sont destinées à être incorporées dans un schéma de point fixe, on applique la même règle aux équations (2.44a), (2.44b) et (2.44c), en remplaçant les termes linéaires en v^{n+1} par ζ^{s+1} et les termes non linéaires par ζ^s . On fait de même avec les fonctions $\varphi_k^{n+1/2}$ et $\psi^{n+1/2}$ puisque ces termes sont encore inconnus. Nous leur ferons donc correspondre respectivement les termes ϕ_k^{s+1} et χ^{s+1} , mis à jour à chaque boucle de l'algorithme de point fixe, et dont la valeur finale, à convergence du point fixe, fournira respectivement $\varphi_k^{n+1/2}$ et $\psi^{n+1/2}$. Les fonctions φ_k^n, ψ^n sont initialisées sur Σ par $\varphi_k^0 = 0$, pour $1 \leq k \leq m$, et $\psi^0 = 0$. Au cours de chaque itération en temps, on initialise le point fixe par $\phi_k^0 = \varphi_k^{n-1/2}$ pour $1 \leq k \leq m$, et $\chi^0 = \psi^{n-1/2}$. A la convergence du point fixe, on affecte $\varphi_k^{n+1/2}$ et $\psi^{n+1/2}$ par le biais de : $\varphi_k^{n+1/2} = \phi_k^{s+1}$ et $\psi^{n+1/2} = \chi^{s+1}$. Ces substitutions donnent

$$\begin{aligned} \partial_n \zeta^{s+1} - i \left(\sum_{k=0}^m a_k^m \right) \zeta^{s+1} + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \frac{1}{\frac{2i}{\Delta t} + f(\zeta^s) + d_k^m} \zeta^s + \frac{1}{4} \frac{\partial_n f(\zeta^s)}{\frac{2i}{\Delta t} + f(\zeta^s) + d_k^m} \zeta^s \\ + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + f(\zeta^s) + d_k^m} \varphi_k^n + \frac{1}{4} \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + f(\zeta^s) + d_k^m} \psi^n = 0, \end{aligned} \quad (2.49)$$

pour la condition aux limites, et

$$\phi_k^{s+1} = \frac{1}{\frac{2i}{\Delta t} + f(\zeta^s) + d_k^m} \zeta^s + \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + f(\zeta^s) + d_k^m} \varphi_k^n, \quad (2.50)$$

et

$$\chi^{s+1} = \frac{\partial_n f(\zeta^s)}{\frac{2i}{\Delta t} + f(\zeta^s)} \zeta^s + \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + f(\zeta^s)} \psi^n. \quad (2.51)$$

pour les équations différentielles. Synthétiquement, cette condition s'écrit sous la forme d'une condition de type Fourier-Robin

$$\partial_n \zeta^{s+1} = B_{2,m,L}^M \zeta^{s+1} + B_{2,m,NL}^M(\zeta^s, \varphi_k^n, \psi^n), \quad (2.52)$$

avec les notations

$$B_{2,m,L}^M = i \sum_{k=0}^m a_k^m, \quad (2.53)$$

$$B_{2,m,NL}^A(\zeta^s, \varphi_k^n, \psi^n) = -i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \phi_k^{s+1} - \frac{1}{4} \partial_{\mathbf{n}} f(\zeta^s) \chi^{s+1} \quad (2.54)$$

et ϕ_k^{s+1} et χ^{s+1} donnés respectivement par (2.50) et (2.51).

Par conséquent, nous obtenons une formulation éléments finis avec point fixe proche de celle obtenue avec la première classe de CLA, en utilisant le système augmenté par les fonctions auxiliaires, comme dans le cas linéaire. Encore une fois, considérer la condition d'ordre deux ne demande qu'à modifier la forme du second membre du système linéaire. La situation est résumée dans l'algorithme suivant.

Pour $n = 0, \dots, N-1$

Initialisation : $\zeta^0 = \mathbf{v}^n$, $\phi_k^0 = \varphi_k^n$, $\chi^0 = \psi^n$, $s = 0$

Boucle sur s tant que $\|\mathbb{M}(\zeta^{s+1} - \zeta^s)\|_2 > \varepsilon$ et $s \leq s^{max}$

Calcul du second membre $\mathbf{b}_{2,m}^{M,s}$

Résolution du problème linéaire

$$\left(\frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} - \mathbb{S} - \mathbb{B}_{2,m,L}^M \right) \zeta^{s+1} = \mathbf{b}_{2,m}^{M,s}$$

$s = s + 1$

Fin de la boucle sur s

$$\mathbf{v}^{n+1} = \zeta^{s+1}, \quad \varphi_k^{n+1/2} = \phi_k^{s+1}, \quad \psi^{n+1/2} = \chi^{s+1}$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = 2\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{u}^n$$

$$\varphi_k^{n+1} = 2\varphi_k^{n+1/2} - \varphi_k^n$$

$$\psi^{n+1} = 2\psi^{n+1/2} - \psi^n$$

Fin de la boucle sur n

Les conditions NLABC₁^M et NLABC_{2,m}^M s'adaptent très facilement au cas où le potentiel est constitué de deux parties, un terme linéaire $V(x)$ et un terme non linéaire $f(u)$. Tous les paragraphes précédents restent valables dans ce cadre. On a alors

$$\mathbb{V}(x, t) = tV(x) + \int_0^t f(u)(x, s) ds.$$

Les condition aux limites d'ordre quatre sont données par

$$\partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\pi/4} e^{i\mathbb{V}(x,t)} \partial_t^{1/2} \left(e^{-i\mathbb{V}(x,t)} u \right) + \frac{i}{4} (\partial_{\mathbf{n}} V(x) + \partial_{\mathbf{n}} f(u)) e^{i\mathbb{V}(x,t)} I_t \left(e^{-i\mathbb{V}(x,t)} u \right) = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T,$$

pour le changement de jauge, et

$$\partial_{\mathbf{n}} u - i\sqrt{i\partial_t + V(x) + f(u)} u + \frac{1}{4} (i\partial_t + V(x) + f(u))^{-1} ((\partial_{\mathbf{n}} V(x) + \partial_{\mathbf{n}} f(u)) u) = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T,$$

pour la méthode directe. Pour les conditions semi-discrétisées, nous obtenons $\text{NLABC}_{1,n+1}^4$

$$\begin{aligned} & \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} + e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} v^{n+1} + e^{-i\pi/4} e^{i\mathbb{W}^{n+1}} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{k=0}^n \beta_{n+1-k} e^{-i\mathbb{W}^k} v^k \\ & + \frac{i}{4} (\partial_{\mathbf{n}} W + \partial_{\mathbf{n}} f(v^{n+1})) \frac{\Delta t}{2} v^{n+1} + \frac{i}{4} (\partial_{\mathbf{n}} W + \partial_{\mathbf{n}} f(v^{n+1})) \mathbb{E}^{n+1} \frac{\Delta t}{2} \sum_{k=0}^n \gamma_{n+1-k} \overline{\mathbb{E}^k} v^k = 0, \end{aligned}$$

avec \mathscr{W}^{n+1} défini par

$$\mathscr{W}^{n+1} = t_{n+1/2} W + \Delta t \sum_{l=0}^n f(v^l) + \frac{\Delta t}{2} f(v^{n+1}),$$

et $\text{NLABC}_{2,m,n+1}^4$

$$\begin{cases} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} - i \sum_{k=0}^m a_k^m v^{n+1} + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k^{n+1/2} + \frac{1}{4} \psi^{n+1/2} = 0, \\ \varphi_k^{n+1/2} = \frac{1}{\frac{2i}{\Delta t} + W + f(v^{n+1}) + d_k^m} v^{n+1} + \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + W + f(v^{n+1}) + d_k^m} \varphi_k^n, \\ \psi^{n+1} = (\partial_{\mathbf{n}} W + \partial_{\mathbf{n}} f(v^{n+1})) \frac{1}{\frac{2i}{\Delta t} + W + f(v^{n+1})} v^{n+1} + \frac{\frac{2i}{\Delta t}}{\frac{2i}{\Delta t} + W + f(v^{n+1})} \psi^n. \end{cases}$$

Enfin, les mêmes conditions s'adapteraient sans problème au cas où la partie linéaire du potentiel dépend aussi du temps : $\mathscr{V}(x, t, u) = V(x, t) + f(u)(x, t)$ en remplaçant W par W^{n+1} . Notamment, le caractère bien posé du problème associé à la condition aux limites NLABC_1^2 est toujours valable, puisque V , comme la fonction f , est réel.

2.5 Simulations numériques

Nous testerons dans cette section plusieurs types de potentiels non linéaires. Tout d'abord, une place particulière est réservée au potentiel cubique, potentiel très classique pour lequel des résultats sont connus, permettant d'approfondir l'étude numérique. Nous verrons ensuite d'autres types de potentiels qui s'expriment comme une fonction de u , et pour finir, un exemple de potentiel mixte, somme d'un potentiel $V(x)$ et d'une fonction de u . La tolérance ε du point fixe est fixée à $\varepsilon = 10^{-10}$ et le nombre maximal d'itérations est 100. Il est important de prendre des paramètres assez exigeants pour le point fixe, faute de quoi les résultats obtenus pour les conditions $\text{NLABC}_{2,m}^M$ sont nettement moins bons que ceux obtenus pour NLABC_1^M (on verra plus loin que pour les conditions approchées par approximants de Padé, le point fixe est significativement plus long à converger que pour les convolutions discrètes).

2.5.1 Le potentiel cubique

Dans le problème cubique, le potentiel est donné par la non linéarité

$$\mathscr{V} = q|u|^2 \tag{2.55}$$

avec paramètre q positif (« focusing ») ou négatif (« defocusing »). Ce potentiel est dit « cubique » car le terme associé au potentiel dans l'équation sera $Vu = q|u|^2u$ qui est cubique en u . La donnée

initiale considérée pour q positif est le soliton

$$u_0(x) = \sqrt{\frac{2a}{q}} \operatorname{sech}(\sqrt{a}x) \exp\left(i\frac{c}{2}x + i\theta_0\right) \quad (2.56)$$

Sauf mention contraire, dans les tests numériques qui suivront, les paramètres seront choisis égaux à $q = 1$, $a = 2$, $c = 15$, $\theta_0 = 0$.

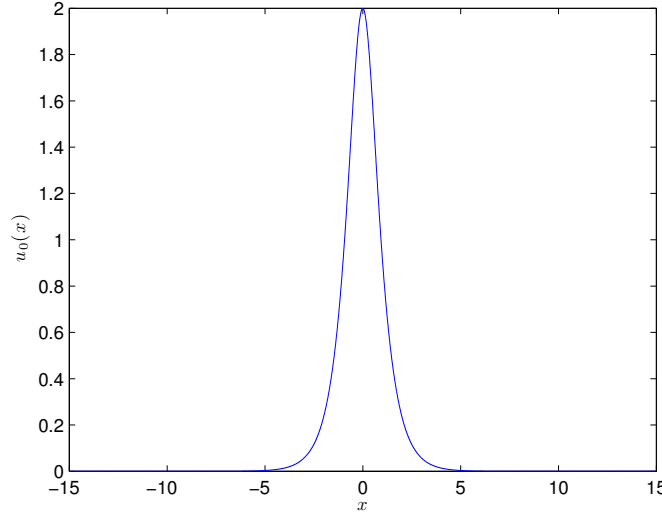


FIGURE 2.1 – Donnée initiale (soliton) pour le potentiel cubique.

Avec cette donnée initiale solitonique, la solution exacte du problème est donnée par u_{ex} :

$$u_{ex}(x, t) = \sqrt{\frac{2a}{q}} \operatorname{sech}(\sqrt{a}(x - ct)) \exp\left(i\frac{c}{2}(x - ct) + i\theta_0\right) \exp\left(i\left(a + \frac{c^2}{4}\right)t\right) \quad (2.57)$$

La figure 2.2 représente le profil de solution exacte, en échelle logarithmique, dans le plan (x, t) .

On peut également construire numériquement une solution de référence sur $\Omega = [-10; 10]$ en résolvant l'équation sur un domaine suffisamment large pour ne pas avoir besoin de condition aux limites (on prendra $[-30; 90]$), puis en restreignant à Ω le résultat obtenu (figure 2.3).

Les solutions numériques pour chacune des conditions aux limites sont représentées sur la figure 2.4 : condition de Dirichlet homogène $u = 0$, condition sans potentiel ABC_0 , conditions $NLABC_1^2$, $NLABC_1^4$, $NLABC_{2,50}^2$, $NLABC_{2,50}^4$. On compare aussi les résultats obtenus par une technique de PML (Perfectly Matched Layer). Cette dernière consiste à regarder l'équation de Schrödinger

$$i\partial_t u + \frac{1}{1 + R\sigma(x)} \partial_x \left(\frac{1}{1 + R\sigma(x)} \partial_x u \right) + q|u|^2 u = 0, \quad (2.58)$$

avec

$$\sigma(x) = \begin{cases} \sigma_0(x - x_\ell)^2, & x_{\ell p} < x < x_\ell, \\ 0, & x_\ell < x < x_r, \\ \sigma_0(x - x_r)^2, & x_r < x < x_{rp}. \end{cases} \quad (2.59)$$

Les paramètres de simulation sont $\Omega = [-10; 10]$, $T = 2$, $\Delta t = 10^{-3}$, $n_h = 4000$, $m = 50$. Les paramètres pour la simulation par PML sont choisis en suivant [95] : $\sigma_0 = 10$, $x_{\ell p} = -14$, $x_{rp} = 14$.

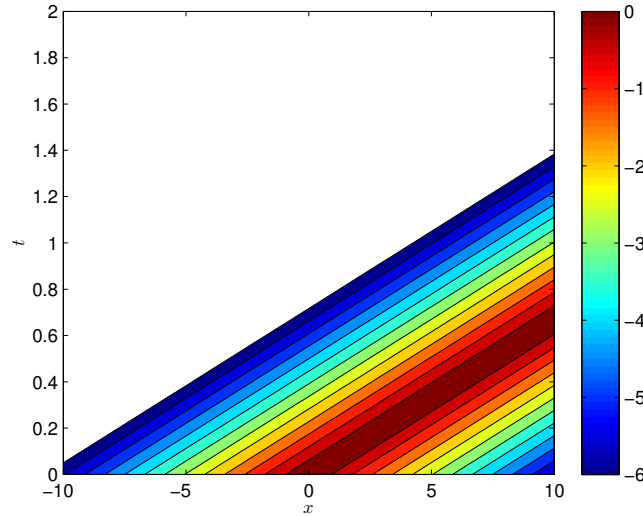


FIGURE 2.2 – Solution exacte pour le potentiel cubique avec $q = 1$, $a = 2$, $c = 15$, $\theta_0 = 0$.

Ce sont les paramètres optimaux pour ce cas spécifique. Comme on pouvait s’y attendre, la condition de Dirichlet homogène ne convient pas du tout dans ce cas. La condition sans potentiel ABC_0 génère une réflexion dont l’ordre de grandeur est 10^{-2} . Pour les autres conditions, la précision dépend essentiellement de l’ordre, et peu du type de condition et du type de discrétisation. Pour les conditions d’ordre deux et d’ordre quatre, l’ordre de grandeur de la réflexion est de 10^{-3} , mais l’erreur est globalement un peu plus faible pour les conditions d’ordre quatre.

Pour mieux estimer la précision des approximations, on met à profit la solution exacte u_{ex} afin de calculer l’erreur L^2 relative

$$\text{Err}_{\text{rel}}(\text{NLABC}_p^M, t) = \frac{\|u(t) - u_{ex}(t)\|_{L^2([x_\ell; x_r])}}{\|u_{ex}(t)\|_{L^2([x_\ell; x_r])}} \quad (2.60)$$

au cours du temps (figure 2.5(a)). Il apparaît clairement que seul l’ordre de la condition aux limites influe sur le niveau de l’erreur, puisqu’à M fixé, les conditions NLABC_1^M et $\text{NLABC}_{2,50}^M$ conduisent à la même erreur L^2 . En revanche l’influence de l’ordre est nettement visible : les résultats sont bien meilleurs avec les conditions d’ordre deux ou 4 qu’avec la condition sans potentiel, et les conditions d’ordre quatre améliorent de manière visible les conditions d’ordre deux. La classification des conditions reste ainsi toujours valable. On remarque un pic de l’erreur au temps $t = 0.6$, qui correspond au temps auquel l’onde traverse la frontière du domaine de calcul. Ce pic coïncide avec l’erreur L^2 obtenue en comparant la solution numérique de référence à la solution exacte. Pour préciser les choses et vérifier si ce pic correspond bien à l’erreur du schéma, raffinons en espace et en temps. Pour clarifier les choses, nous ne gardons que la solution numérique de référence et les deux conditions NLABC_1^M . Pour $n_h = 8000$ et $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$, on obtient la figure 2.5(b) que l’on peut comparer avec la figure 2.5(a). On remarque qu’en raffinant le maillage, l’amplitude du pic en $t = 0.6$ a diminué de manière identique pour la solution numérique de référence et pour les solutions obtenues avec condition aux limites. L’erreur observée à ce niveau est donc liée uniquement à l’erreur du schéma, et ne provient pas de la condition aux limites. Par ailleurs, on constate que l’erreur provenant de la

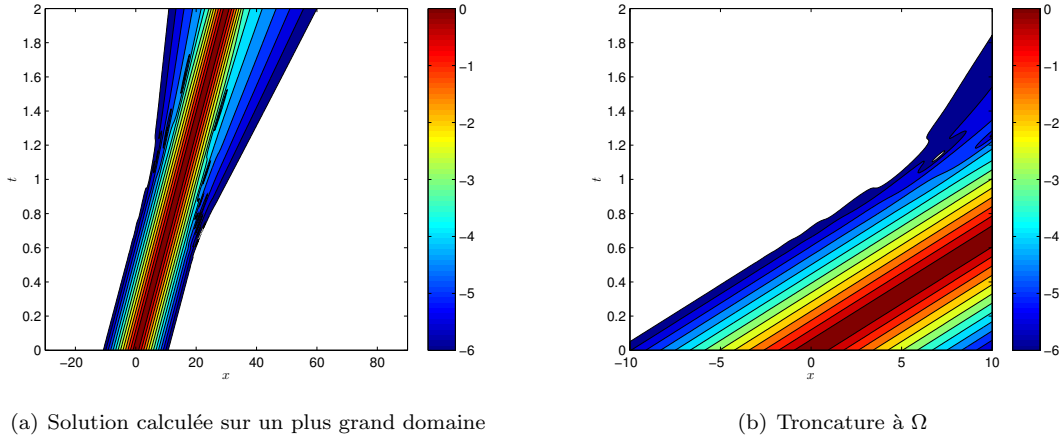
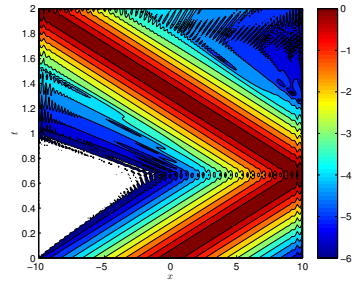


FIGURE 2.3 – Solution numérique de référence pour le potentiel cubique $\mathcal{V} = |u|^2$ sur le domaine de calcul $\Omega = [-10; 10]$.

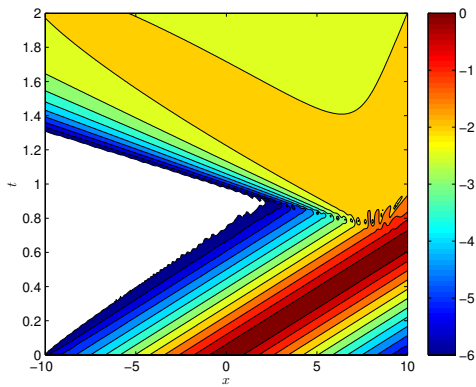
CLA pour $t \in [0.7; 2]$ reste à un niveau identique lorsqu'on raffine le maillage.

Pour étudier plus précisément l'effet du raffinement sur la condition aux limites, on se réfère à la figure 2.6. Pour différentes discrétisations h et Δt , on reporte le maximum, pour $t \in [0; 2]$, de l'erreur L^2 relative $\text{Err}_{\text{rel}}(\text{NLABC}_p^M, t)$. Ce travail est effectué pour la solution numérique de référence et pour les trois conditions aux limites ABC_0 , NLABC_1^2 et NLABC_1^4 , pour les pas de temps $\Delta t = 10^{-3}$, $\Delta t = 5 \times 10^{-4}$ et $\Delta t = 10^{-4}$, avec $n_h = 4000$, $n_h = 8000$ et $n_h = 12000$ points intérieurs. Pour la condition sans potentiel, le pic de l'erreur L^2 stagne à une valeur constante (égale à 0.019 d'après la figure 2.5), indépendamment de h et de Δt . Pour $\Delta t = 10^{-3}$, les conditions NLABC_1^M ont le même pic d'erreur L^2 , qui correspond à l'erreur liée au schéma, lorsque l'onde atteint la frontière. A partir de $\Delta t = 5 \times 10^{-4}$ cette erreur a suffisamment diminué pour que le maximum d'erreur soit lié à la réflexion parasite, une fois l'onde sortie du domaine. On voit alors les conditions d'ordre deux et 4 se détacher l'une de l'autre, et se détacher de la référence numérique. Cependant, une fois que l'erreur liée au schéma est devenue inférieure à l'erreur liée aux conditions aux limites, et que le maximum d'erreur L^2 constaté est bien lié à la réflexion parasite (à partir de $\Delta t = 5 \times 10^{-4}$), la précision des conditions aux limites semble peu affectée par la discrétisation. En revanche, pour la référence numérique, l'erreur L^2 continue à décroître lorsqu'on raffine en espace et/ou en temps. Finalement, l'erreur directement liée aux CLA correspond bien à la deuxième partie de la courbe des figures 2.5. De plus, cette erreur semble pratiquement insensible à la discrétisation, ce qui n'était pas du tout le cas lorsque le potentiel était linéaire.

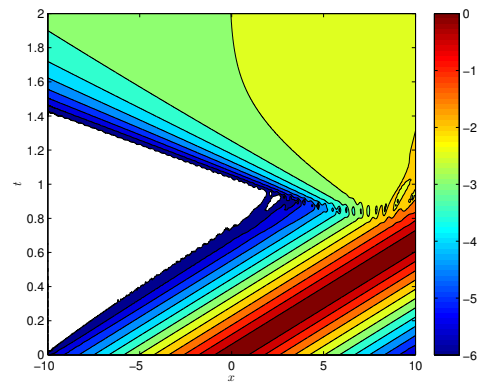
Un autre phénomène est à prendre en compte pour la comparaison des méthodes. Au-delà de la précision numérique du résultat obtenu, il faut aussi considérer la question de l'efficacité calculatoire. De ce point de vue, la discrétisation par convolutions discrètes semble plus efficace et requiert moins d'itérations du point fixe. Le nombre d'itérations est compris entre 5 itérations, et 2 itérations seulement une fois que l'onde a franchi la frontière. Pour la méthode Padé en revanche, le point fixe effectue nettement plus d'itérations avant de converger, avec un pic à plus d'une trentaine d'itérations lorsque la solution traverse la frontière du domaine de calcul. Même une fois que l'onde est sortie du domaine, le nombre d'itérations reste relativement élevé, aux alentours d'une vingtaine d'itérations.



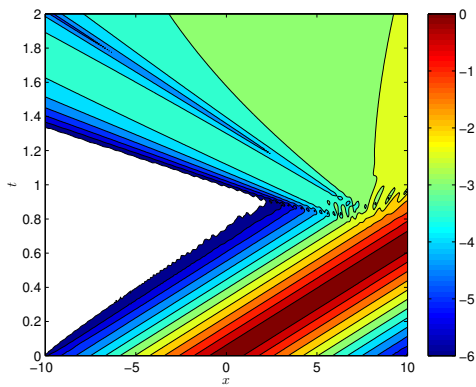
(a) Dirichlet



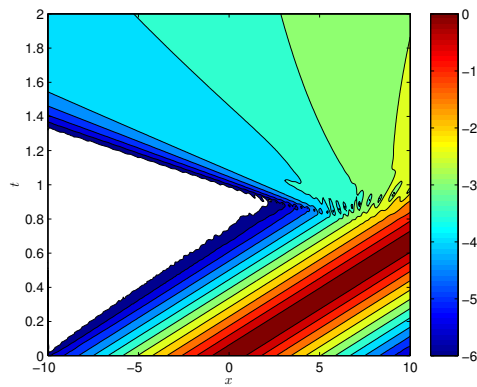
(b) Condition sans potentiel



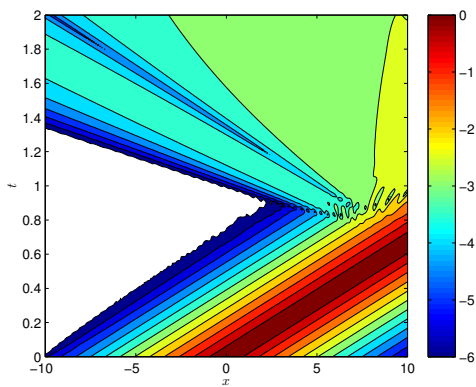
(c) PML



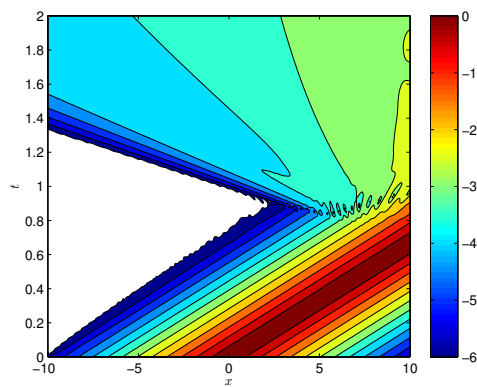
(d) NLABC₁²



(e) NLABC₁⁴

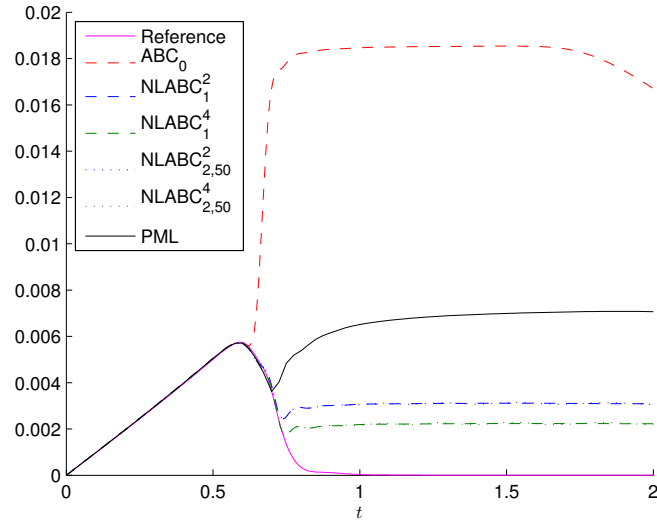
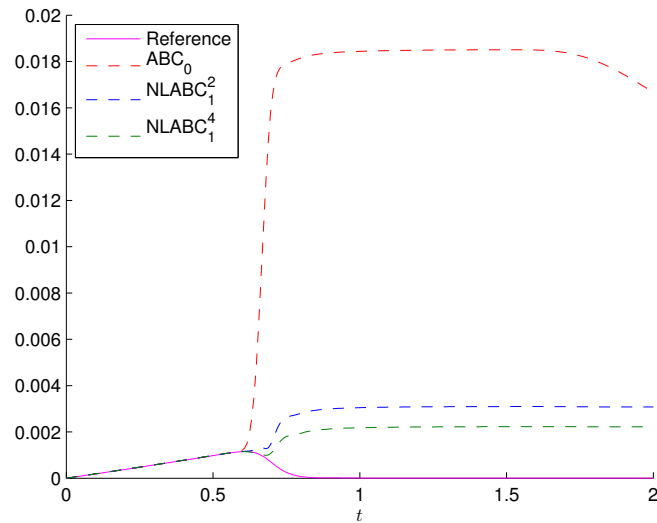


(f) NLABC_{2,50}²



(g) NLABC_{2,50}⁴

FIGURE 2.4 – Les différentes CLA pour le potentiel cubique avec $q = 1$.

(a) $n_n = 4000$, $\Delta t = 10^{-3}$ (b) $n_h = 8000$, $\Delta t = 5 \times 10^{-5}$ FIGURE 2.5 – Erreur L^2 relative en fonction du temps pour le potentiel cubique et deux grilles différentes.

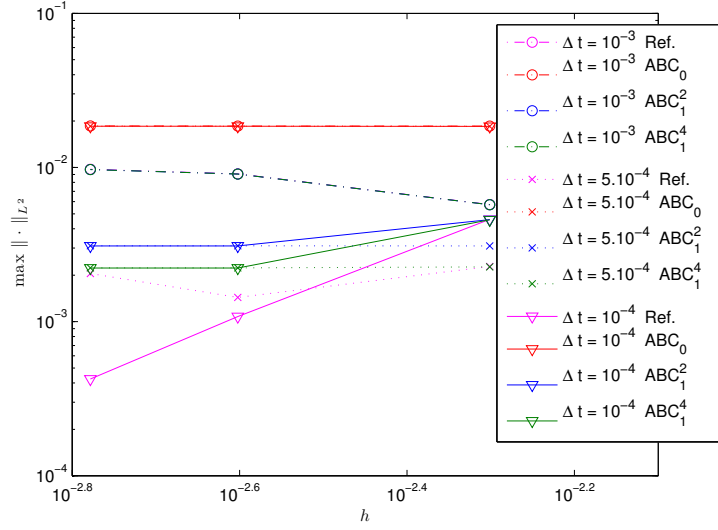


FIGURE 2.6 – Maximum de l’erreur L^2 , en fonction de la discrétisation $(h, \Delta t)$ pour la solution numérique de référence et les solutions obtenues avec les conditions aux limites $NLABC_1^M$.

Cette différence est représentée sur la figure 2.7. Pour chaque méthode, on a représenté, par tranche de 50 itérations en temps, le nombre moyen d’itérations effectuées par le point fixe lors du calcul de v^{n+1} avant de converger. Cette moyenne est très fidèle à la réalité, car si on observe le détail du nombre d’itérations de point fixe effectuées pour chaque groupe de 50 itérations en temps, les valeurs minimales et maximales sont très proches, et ne diffèrent, aux moments-clés du calcul, que d’une ou deux unités. Pour la figure 2.7, on a retenu les conditions aux limites d’ordre quatre, mais des résultats similaires seraient obtenus pour la condition d’ordre deux, ou même pour la condition sans potentiel discrétisée par les deux méthodes.

En fait, on peut vérifier que la durée moyenne d’une itération du point fixe est sensiblement la même pour les deux types de conditions (tableau 2.1). La machine de calcul pour ce paragraphe est toujours celle du chapitre 1. Toute la différence, en terme de temps de calcul, provient donc de la différence du nombre d’itérations nécessaires pour que le point fixe converge. Or, le point fixe effectue six à sept fois plus d’itérations dans le cas des conditions de type Padé par rapport aux conditions discrétisées par convolutions discrètes. Les temps de calcul s’en ressentent en conséquence. Ceci est très différent du cas linéaire, où les conditions de type Padé étaient plus performantes puisqu’elles permettaient de prendre des pas de temps plus grands que pour les conditions de type convolution. Or, ici, non seulement le choix du pas de temps n’a plus l’importance qu’il avait dans le cas linéaire, ce qui devrait placer de nouveau les deux familles de conditions aux limites sur un pied d’égalité ; mais la présence de l’algorithme itératif à chaque étape de la résolution amène de nouvelles disparités en temps de calcul, cette fois favorables à la méthode de changement de jauge.

Ces observations montrent que le cas non linéaire a un comportement assez différent du cas linéaire, que rien ne laissait présager *a priori*. Cependant, les disparités observées ici restent liées à la méthode choisies pour résoudre l’équation non linéaire. D’autres méthodes pourraient être envisagées à la place du point fixe, comme une méthode de Newton. Remarquons que si on parvient à déterminer une méthode qui permette de résoudre l’équation non linéaire en un même nombre d’itérations pour

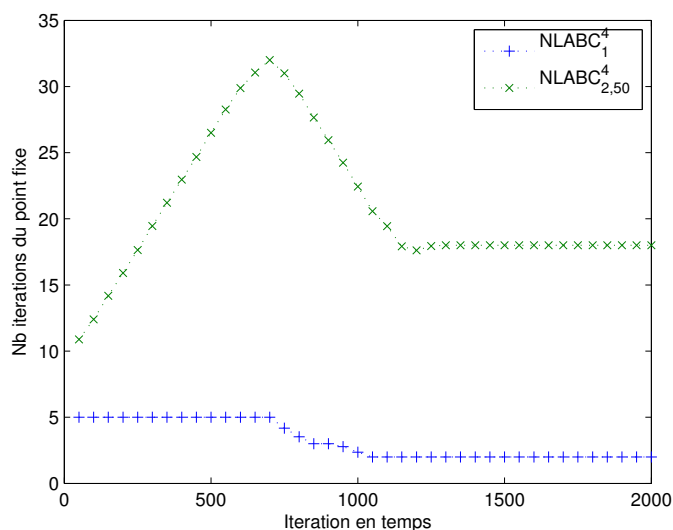


FIGURE 2.7 – Nombre moyen d’itérations du point fixe ($\varepsilon = 10^{-10}$, $it_{max} = 100$) en fonction de la discrétisation, pour les conditions d’ordre quatre $NLABC_p^4$.

les deux stratégies, alors la résolution du problème aux limites se fera en des temps équivalents pour le changement de jauge et pour l’approximation de type Padé. En effet, les temps de calcul pour une itération du point fixe sont sensiblement égaux pour les deux méthodes.

Quant aux PML, ils conduisent à des temps de calcul comparables à ceux obtenus pour les conditions $NLABC_1^M$. Le temps de calcul global est légèrement supérieur à celui des conditions discrétisées par convolutions discrètes. En effet, le nombre d’itérations nécessaires à la convergence du point fixe est sensiblement égal, mais la durée nécessaire à une itération du point fixe est un peu plus grande que celle nécessaire dans le cas du changement de jauge, mais aussi dans le cas de Padé (voir tableau 2.1). Ainsi, si on parvient à réduire le nombre d’itérations nécessaires de l’algorithme non linéaire pour les conditions de type Padé, les PML seront plus coûteux en temps non seulement que les conditions aux limites de type $NLABC_1^M$, mais aussi que celles de type $NLABC_{2,m}^M$. Enfin, il faut garder à l’esprit que la précision obtenue est nettement inférieure à ce qu’on peut obtenir avec les conditions aux limites.

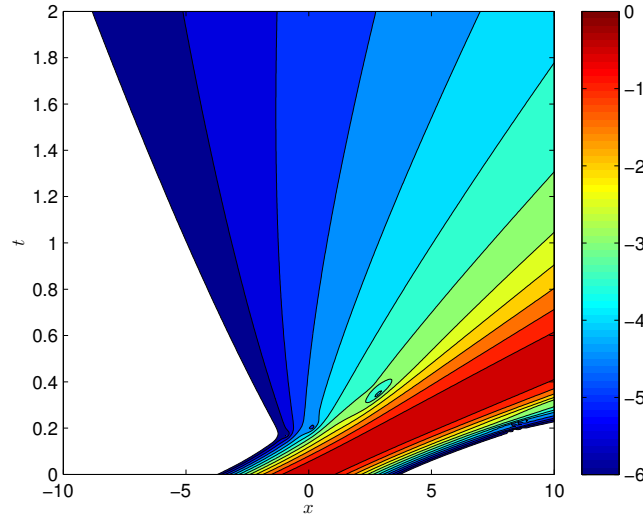
Méthode	Temps cpu	TMIT	NMIPF	TMIPF
$NLABC_1^2$	64.7	0.031	3.2	0.0098
$NLABC_1^4$	64.4	0.031	3.2	0.0097
$NLABC_{2,50}^2$	399	0.198	20.8	0.0095
$NLABC_{2,50}^4$	397	0.198	20.8	0.0095
PML	72.7	0.035	3.2	0.0112

TMIT = Temps moyen par itération en temps

NMIPF = Nombre moyen d’itérations du point fixe

TMIPF = Temps moyen par itération du point fixe

TABLE 2.1 – Temps de calcul (temps cpu en secondes) pour les conditions $NLABC_p^M$ et les PML dans le cas du potentiel cubique.

FIGURE 2.8 – Solution de référence pour le potentiel quintique $\mathcal{V} = -|u|^4$.

2.5.2 D'autres potentiels non linéaires

Considérons à présent d'autres formes de potentiels non linéaires. Pour ces potentiels, la donnée initiale sera une gaussienne, comme pour les potentiels linéaires.

$$u_0(x) = e^{-x^2 + ik_0 x} \quad (2.61)$$

Le nombre d'onde sera pris égal à $k_0 = 10$.

Pour le potentiel cubique, on a pu observer que les conditions NLABC_1^M et $\text{NLABC}_{2,m}^M$ conduisaient à des résultats tout à fait identiques en termes de précision. Ce sera encore le cas pour les potentiels non linéaires à venir (du moins sans partie linéaire). Ainsi, nous ne présenterons généralement les résultats que pour la famille de conditions NLABC_1^M , étant sous-entendu que l'on obtiendrait les mêmes courbes en choisissant les conditions $\text{NLABC}_{2,m}^M$.

Le potentiel quintique

Parallèlement au potentiel cubique, un autre potentiel non linéaire couramment utilisé est le potentiel quintique décrit par

$$\mathcal{V} = q|u|^4 \quad (2.62)$$

De même que pour le potentiel cubique, ce potentiel est dit quintique car il conduit à un terme de potentiel égal à $|u|^4 u$, de l'ordre de u à la puissance cinq. Le facteur q peut également prendre des valeurs positives ou négatives, mais pour q assez grand, on observe une explosion en temps fini de la solution. Nous considérerons donc uniquement le cas $q < 0$. La solution de référence pour $q = -1$ est alors donnée par la figure 2.8. Les simulations numériques associées aux différentes conditions aux limites sont présentées sur la figure 2.9, avec pour domaine $\Omega = [-10; 10]$, $T = 2$, $\Delta t = 10^{-3}$, $h = 5 \cdot 10^{-3}$.

Au vu des résultats apportés par la condition de Dirichlet homogène (figure 2.9(a)), la nécessité d'utiliser une condition aux limites appropriée ne fait pas de doute. Les conditions tenant compte

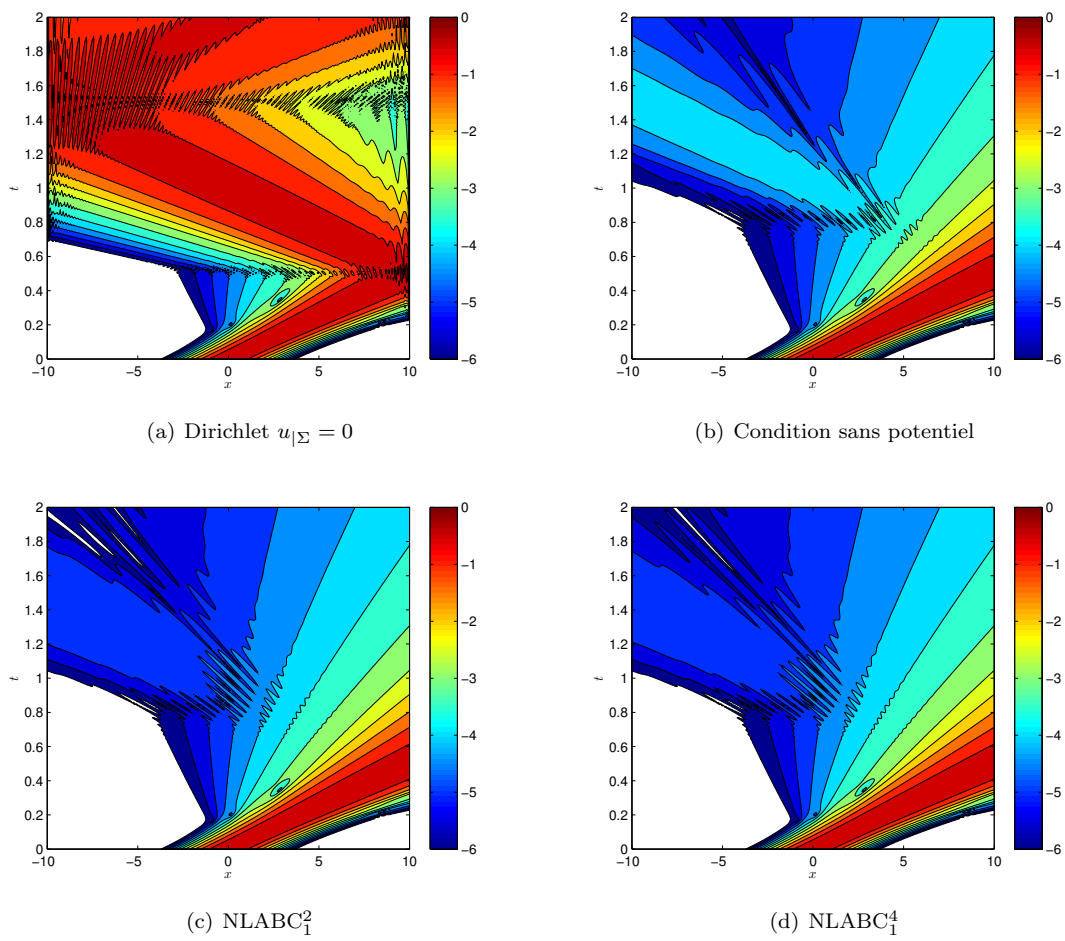


FIGURE 2.9 – Les différentes CLA pour le potentiel quintique $\mathcal{V} = -|u|^4$.

du potentiel, NLABC_1^M et $\text{NLABC}_{2,m}^M$, se détachent nettement par rapport à la condition sans potentiel ABC_0 , la réflexion étant environ dix fois supérieure en intensité lorsqu'on utilise la condition sans potentiel. En revanche, le choix de l'ordre de cette condition aux limites semble n'avoir qu'une influence limitée, les conditions d'ordre quatre donnant des résultats assez similaires aux conditions d'ordre deux.

Le potentiel cubique-quintique

Le potentiel cubique-quintique correspond comme son nom l'indique à une combinaison linéaire d'un potentiel cubique et d'un potentiel quintique, dont les coefficients sont notés respectivement n_2 pour la partie cubique et n_4 pour la partie quintique.

$$\mathcal{V} = n_2|u|^2 + n_4|u|^4 \quad (2.63)$$

Quelques exemples de profils des solutions, en fonctions des coefficients n_2 et n_4 , sont donnés sur la figure 2.10 en calculant la solution numérique de référence.

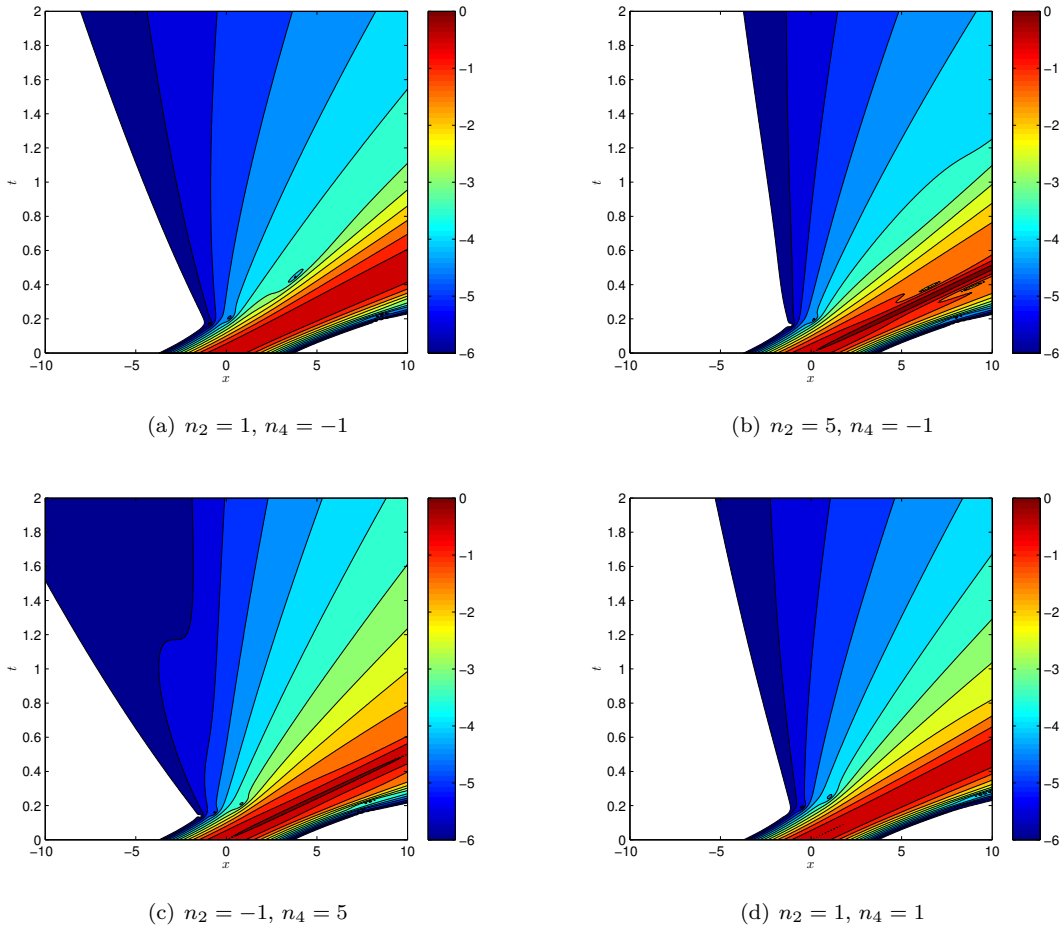


FIGURE 2.10 – Solutions de référence pour le potentiel cubique-quintique $\mathcal{V} = n_2|u|^2 + n_4|u|^4$ avec différentes valeurs de n_2 et de n_4 .

La figure 2.11 montre les solutions calculées numériquement avec les différentes conditions, pour

le potentiel $\mathcal{V} = |u|^2 + |u|^4$. La condition sans potentiel donne déjà un résultat assez précis avec une faible réflexion (inférieure à 10^{-2}), mais les conditions d'ordre deux améliorent cette précision en diminuant la réflexion d'un facteur 10, et les conditions d'ordre quatre sont encore plus précises. Les conditions aux limites dans ce cas fournissent une très bonne précision, puisqu'à l'ordre quatre la réflexion parasite est abaissée à 10^{-5} .

Comme pour le potentiel cubique, on réalise une étude des temps de calcul (en temps cpu) pour comparer les performances des conditions aux limites. Les résultats sont reportés dans le tableau 2.2. Les temps de calcul moyens par itération du point fixe restent similaires d'une condition à l'autre, mais sont légèrement supérieurs à ceux constatés dans le cas cubique, puisque l'algorithme spécifique au potentiel cubique est particularisé pour ce potentiel, ce qui permet notamment de limiter les appels à des fonctions secondaires. Les conclusions de cette étude sont globalement les mêmes que dans le cas cubique : l'ordre n'influe que peu sur les temps de calcul, alors que le type de discrétisation est fondamental. Les temps moyens par itérations de point fixe sont sensiblement égaux pour les deux discrétisations, mais la différence porte sur le nombre d'itérations effectuées par le point fixe avant convergence. Dans cet exemple, les conditions $\text{NLABC}_{2,m}^M$ discrétisées par approximants de Padé requièrent environ quatre fois plus d'itérations avant d'obtenir la convergence du point fixe. En conséquence, les temps de calcul globaux sont à peu près multipliés par quatre également.

Condition	Temps cpu	TMIT	NMIPF	TMIPF
NLABC_1^2	91.4	0.045	2.8	0.0162
NLABC_1^4	102	0.050	2.8	0.0095
$\text{NLABC}_{2,50}^2$	382	0.192	13.4	0.0086
$\text{NLABC}_{2,50}^4$	439	0.219	13.3	0.0081

TMIT = Temps moyen par itération en temps

NMIPF = Nombre moyen d'itérations du point fixe

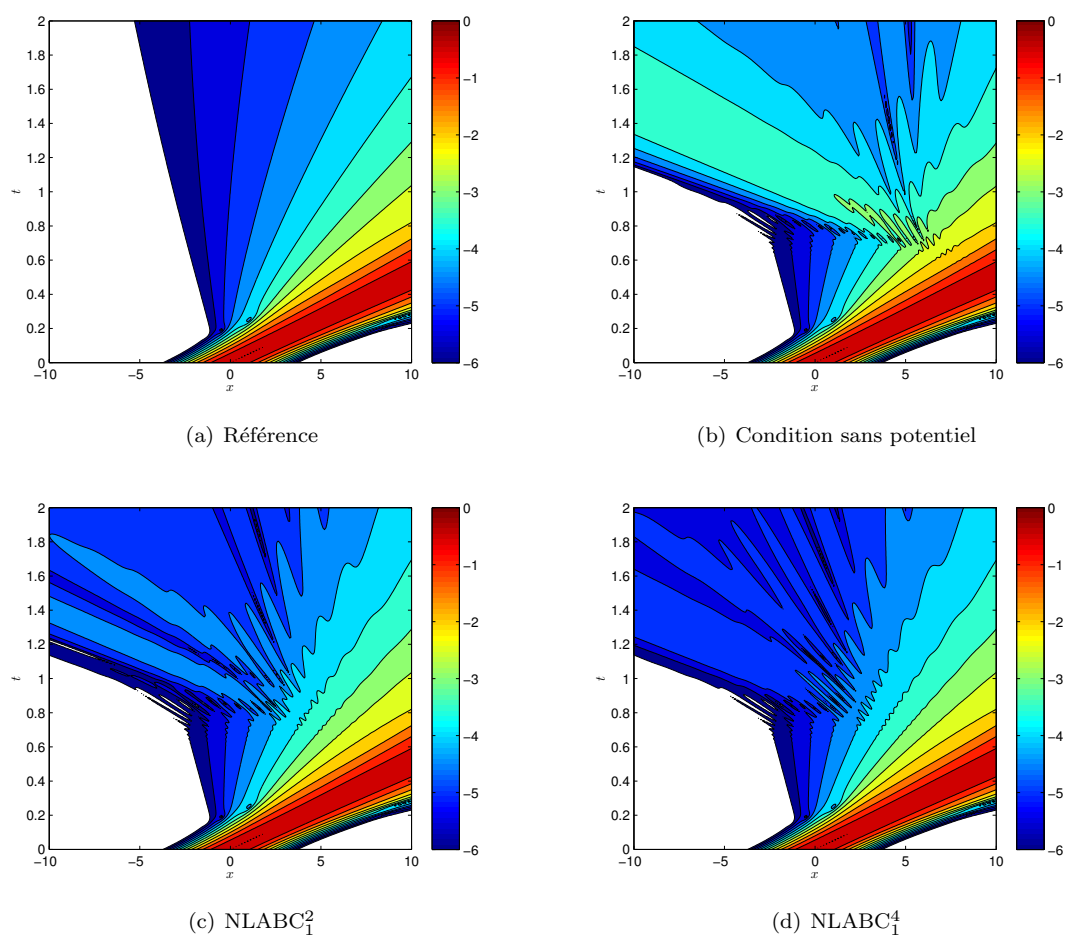
TMIPF = Temps moyen par itération du point fixe

TABLE 2.2 – Temps de calcul (temps cpu en secondes) pour les conditions NLABC_p^M dans le cas du potentiel cubique-quintique $\mathcal{V} = |u|^2 + |u|^4$.

Le potentiel « inverse »

$$\mathcal{V} = \frac{|u|^2}{1 + \sigma|u|^2} \quad (2.64)$$

Quelques solutions numériques de référence sont données sur la figure 2.12 pour différentes valeurs de σ . Pour tester les conditions aux limites, on a choisi $\sigma = 0.5$ et les résultats sont présentés figure 2.13. L'emploi des conditions d'ordre deux ou 4 diminue d'un facteur 10 la réflexion observée si on utilise la condition sans potentiel, ce qui est une amélioration significative. La condition NLABC_1^4 améliore légèrement la condition NLABC_1^2 mais les différences de niveau sont plus faibles.

FIGURE 2.11 – Les diff rentes CLA pour le potentiel cubique-quintique $\mathcal{V} = |u|^2 + |u|^4$.

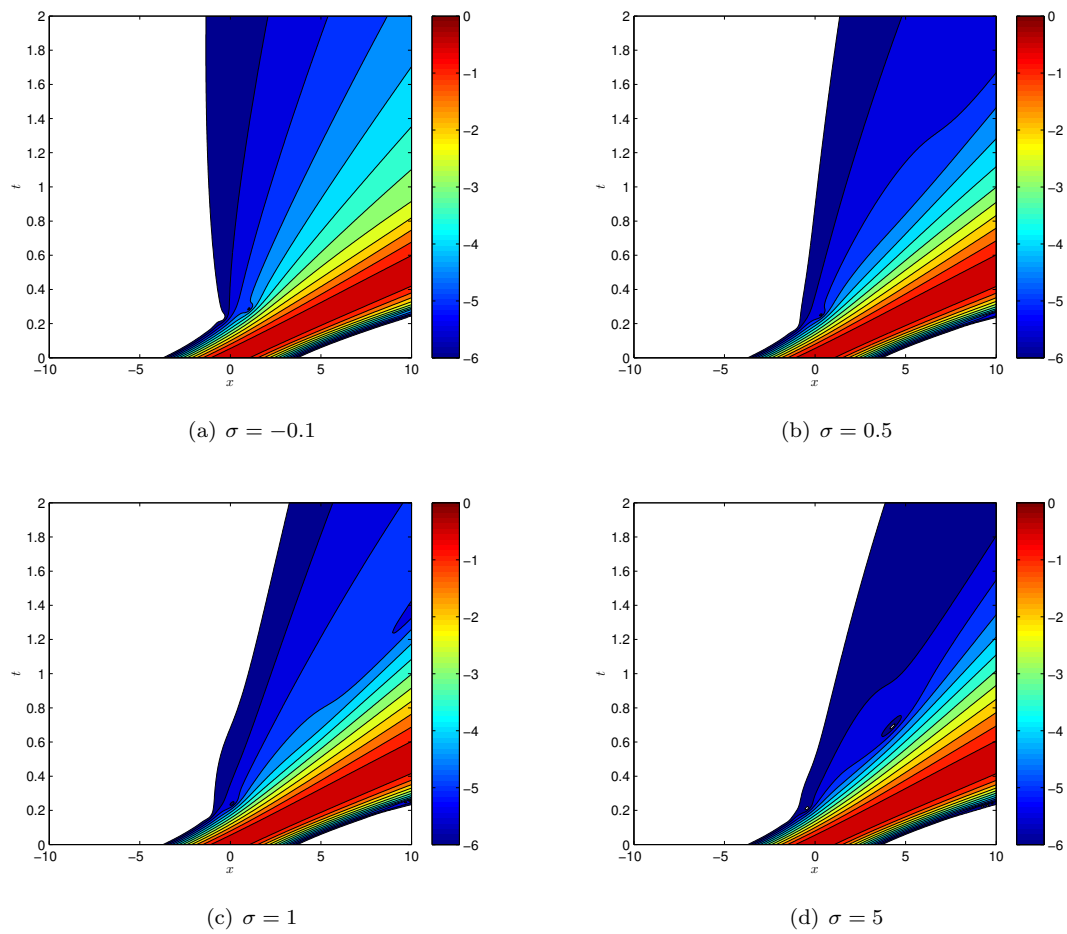


FIGURE 2.12 – Solutions de référence pour le potentiel $\mathcal{V} = \frac{|u|^2}{1+\sigma|u|^2}$ pour différentes valeurs de σ .

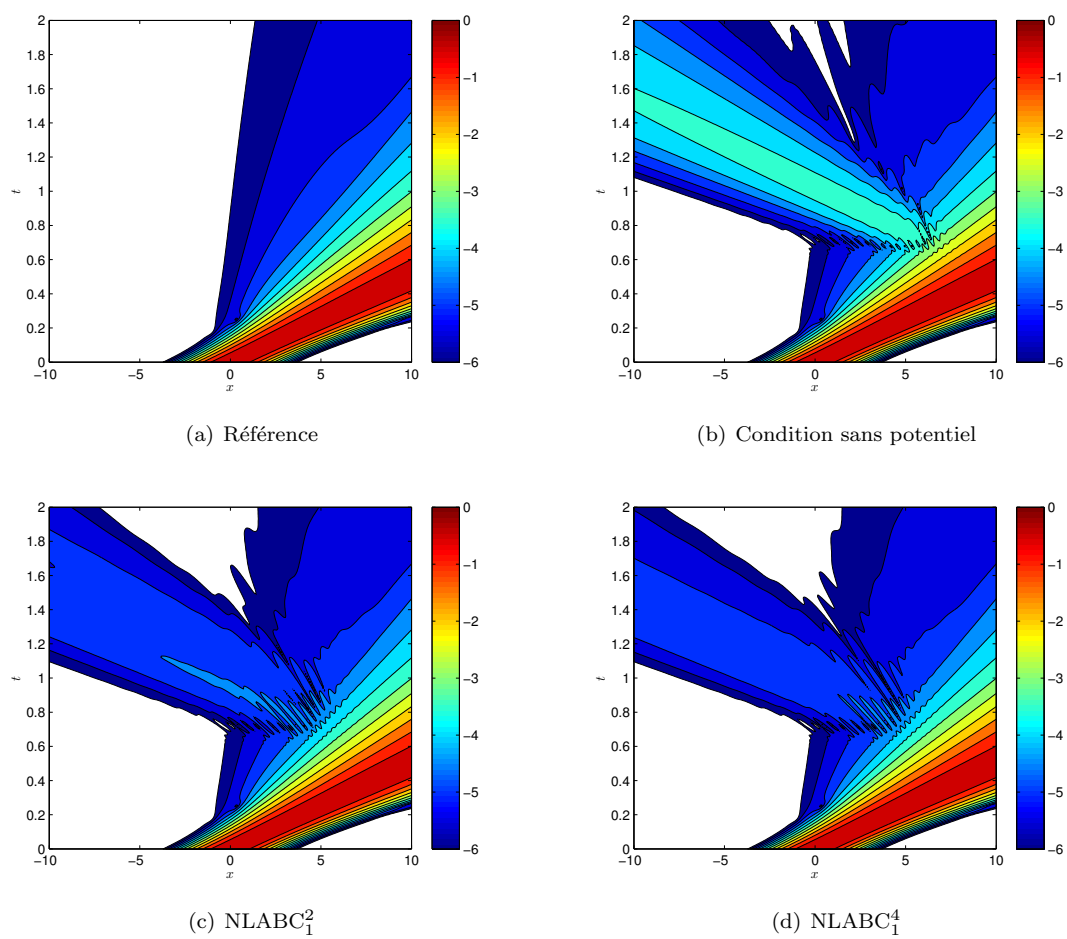


FIGURE 2.13 – Solutions num riques obtenues pour le potentiel $\mathcal{V} = \frac{|u|^2}{1+\sigma|u|^2}$ avec $\sigma = 0.5$.

Un potentiel mixte

Comme nous l'avons souligné, il n'est pas difficile d'élargir les tests à des potentiels mixtes comprenant une partie linéaire $V(x)$ et une partie non linéaire $f(u)$. Nous considérons à titre d'exemple le cas où $V(x) = \pm\beta x^2$ et $f(u) = \pm q|u|^2$. Plus particulièrement, on considère le potentiel

$$\mathcal{V} = x^2/10 - |u|^2 \quad (2.65)$$

dont la solution de référence se trouve figure 2.14. Ce potentiel renferme *a priori* deux effets antagonistes : la partie linéaire $V(x) = x^2/10$ est répulsive et a tendance à faire sortir le potentiel, alors que le signe de la partie cubique $f(u) = -|u|^2$ est choisi de telle sorte que ce terme soit défocalisant. On observe donc une compétition de l'effet linéaire répulsif et de l'effet non linéaire attractif. La solution de référence montre qu'avec ce jeu de coefficients, l'effet répulsif semble l'emporter.

Un point différencie cet exemple des exemples non linéaires précédents. Pour tous les cas-tests étudiés jusqu'ici, on a choisi comme pas de temps $\Delta t = 10^{-3}$, et les conditions des deux types conduisaient à des erreurs de même niveau, pour un ordre fixé. Ici, ce n'est plus le cas. Pour $\Delta t = 10^{-3}$, on a les résultats de la figure 2.14, et on constate que les conditions NLABC_1^M conduisent à une précision moindre que les conditions $\text{NLABC}_{2,50}^M$. Cela est particulièrement visible pour l'ordre quatre où il y a un facteur 5 entre l'amplitude de l'onde réfléchie avec NLABC_1^4 et celle de l'onde réfléchie avec $\text{NLABC}_{2,50}^4$. En fait, comme dans le cas d'un potentiel $V(x, t)$, cette différence est liée à la discrétisation en temps, et peut être effacée en prenant un pas de temps plus petit. On représente figure 2.15 les simulations associées aux conditions NLABC_1^M pour le pas de temps $\Delta t = 10^{-4}$. On obtient alors la même précision qu'avec les $\text{NLABC}_{2,50}^M$.

Une fois ce raffinement en temps effectué, la hiérarchisation des CLA selon leur ordre est de nouveau très claire sur cet exemple. Alors que la condition sans potentiel conduit à une réflexion d'amplitude non négligeable (environ $5 \cdot 10^{-2}$), les conditions d'ordre deux (figures 2.15(a) et 2.14(e)) font baisser cette réflexion à 10^{-4} , et les conditions d'ordre quatre (figures 2.15(b) et 2.14(e)) la réduisent à 10^{-5} , ce qui constitue une amélioration très nette de la précision.

Cet exemple couple les particularités des potentiels $V(x, t)$ (le fait que les conditions des deux familles conduisent à la même précision, mais que pour les conditions approchées par Padé, cette précision soit atteinte pour des valeurs de Δt plus grandes) et les particularités des potentiels non linéaires (notamment le fait que l'algorithme de point fixe converge plus rapidement pour les conditions NLABC_1^M que pour les conditions $\text{NLABC}_{2,m}^M$). Ainsi, en termes d'efficacité, il faudra faire un choix entre l'efficacité des conditions par convolutions discrètes, et la nécessité d'utiliser des pas de temps plus petits.

En terme d'efficacité pour un potentiel mixte, nous avons deux situations à comparer. Si on considère les convolutions discrètes, on sait qu'elles sont performantes au niveau du point fixe, mais, en contrepartie, il faudra faire plus d'itérations en temps puisqu'un pas de temps de l'ordre de $\Delta t = 10^{-4}$ est nécessaire pour obtenir la meilleure précision. Si on considère les approximations de Padé, alors il suffit de prendre $\Delta t = 10^{-3}$ pour avoir la meilleure précision, mais le nombre d'itérations du point fixe pénalise la performance de la méthode, contrairement au cas linéaire. Pour trancher entre les deux méthodes, il faut comparer l'écart du nombre d'itérations qu'effectue le point fixe, et l'écart du nombre d'itérations en temps en fonction des pas de temps retenus. Le tableau 2.3 répond à cette question pour le potentiel (2.65). Dans ce cas, puisque le point fixe effectue environ 4 fois moins d'itérations pour NLABC_1^M que pour $\text{NLABC}_{2,m}^M$, mais que passer de $\Delta t = 10^{-3}$ à $\Delta t = 10^{-4}$

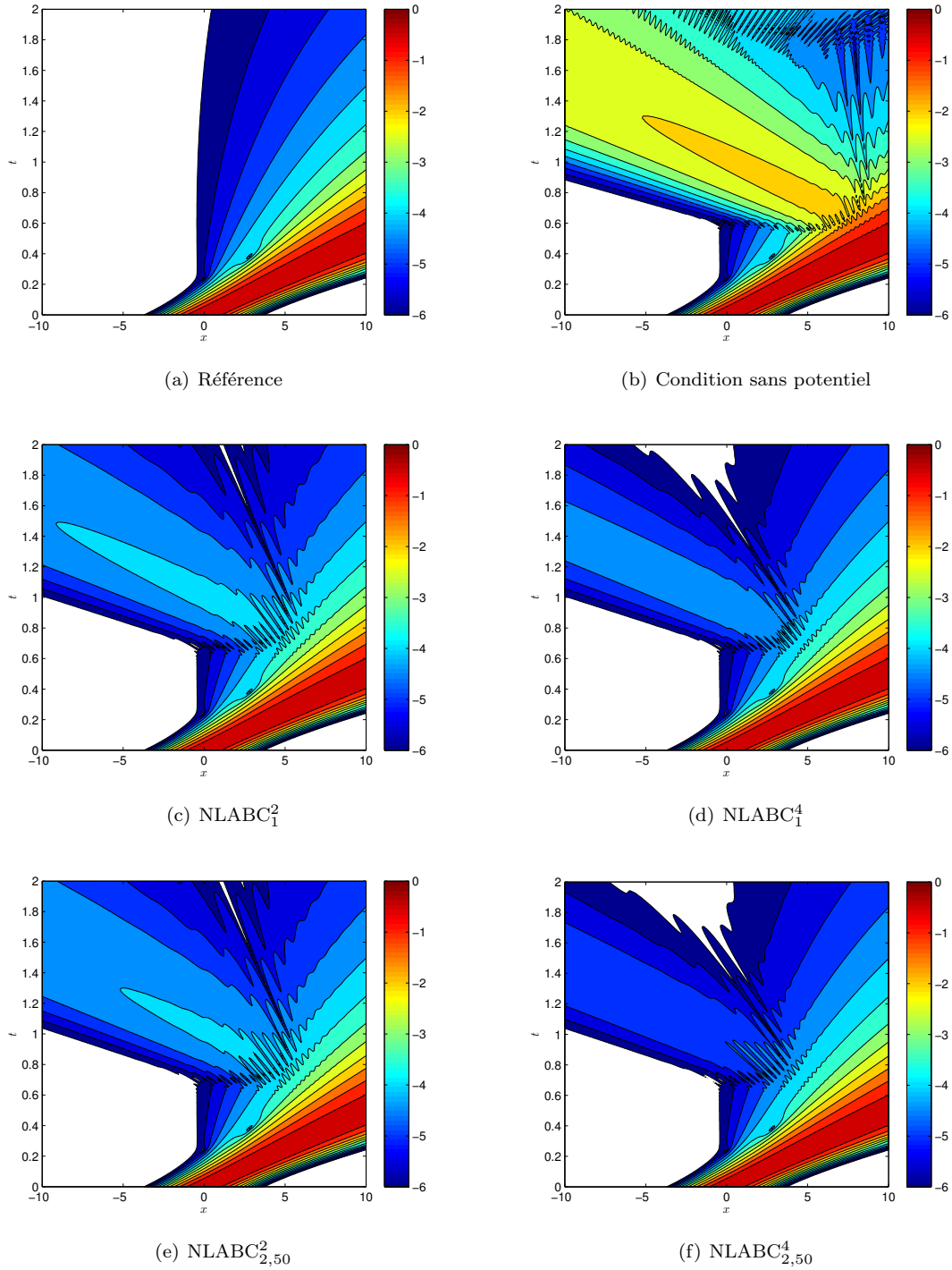


FIGURE 2.14 – Solutions numériques obtenues pour le potentiel mixte $\mathcal{V} = x^2/10 - |u|^2$ et $\Delta t = 10^{-3}$.

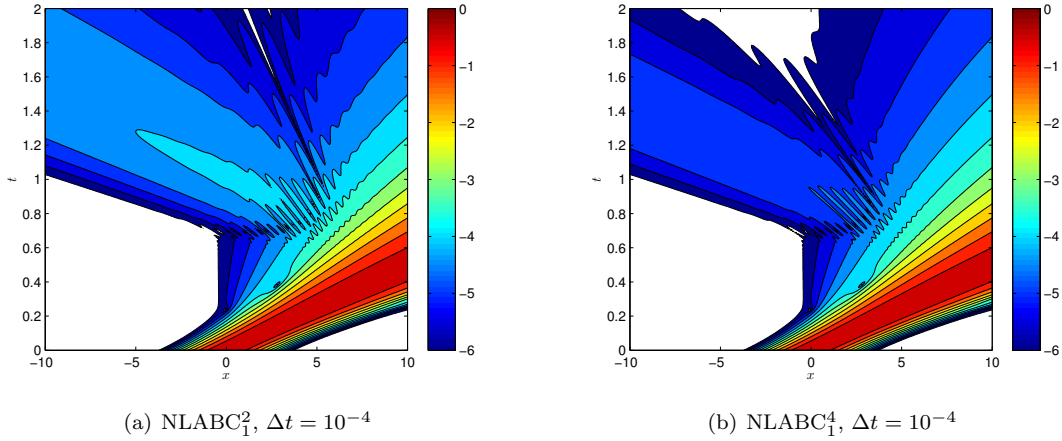


FIGURE 2.15 – Raffinement en temps ($\Delta t = 10^{-4}$) pour les conditions NLABC₁⁴ et le potentiel $\mathcal{V} = x^2/10 - |u|^2$.

Pas de temps	$\Delta t = 10^{-3}$		$\Delta t = 10^{-4}$	
	Temps cpu	Itérations PF	Temps cpu	Itérations PF
NLABC ₁ ²	71.4	2.8	658	2.4
NLABC ₁ ⁴	82.6	2.8	813	2.4
NLABC _{2,50} ²	295	13.4	—	—
NLABC _{2,50} ⁴	305	13.3	—	—

TABLE 2.3 – Temps de calcul (temps cpu en secondes) pour les conditions NLABC_p^M dans le cas du potentiel mixte $\mathcal{V} = x^2/10 - |u|^2$ pour $\Delta t = 10^{-3}$ et $\Delta t = 10^{-4}$.

multiplie par 10 le nombre d'itérations en temps à effectuer, les conditions avec discrétisation par approximants de Padé seront plus efficaces que celles avec discrétisation par convolutions discrètes. Comme le confirme le tableau 2.3, les conditions NLABC₂^M (pour $\Delta t = 10^{-3}$) sont plus de deux fois plus rapides que les conditions NLABC₁^M (pour $\Delta t = 10^{-4}$). Cet écart est toutefois à nuancer, car il est délicat de définir *a priori* quel est le pas de temps permettant d'obtenir la précision optimale. Au final, les deux stratégies redeviennent comparables dans le cas d'un potentiel mixte, avec un léger avantage pour les CLA issues de la méthode directe.

Remarque 2.5. Dans [35], il est démontré que lorsqu'on combine un potentiel répulsif de type harmonique $V = \beta^2 x^2$ et une non linéarité $f(u) = q|u|^{2\sigma}$, alors en temps long, l'effet de la non linéarité devient négligeable devant l'effet du potentiel répulsif, au moins pour $q \leq 0$. Ce résultat est en accord avec les simulations obtenues figure 2.14.

Enfin, étudions un autre exemple de potentiel mixte, donné par $\mathcal{V} = -2x^2 - |u|^2$. Cette fois, on combine un potentiel linéaire et un potentiel non linéaire qui ont tous les deux un effet attractif. Comme le confirme la solution de référence figure 2.16(a), le potentiel mixte résultant est également attractif, et confine la solution. Comme la solution n'est pas sortante, on peut s'attendre à ce que les conditions aux limites ne donnent pas de bons résultats. C'est ce que confirment les tests de la figure 2.16.

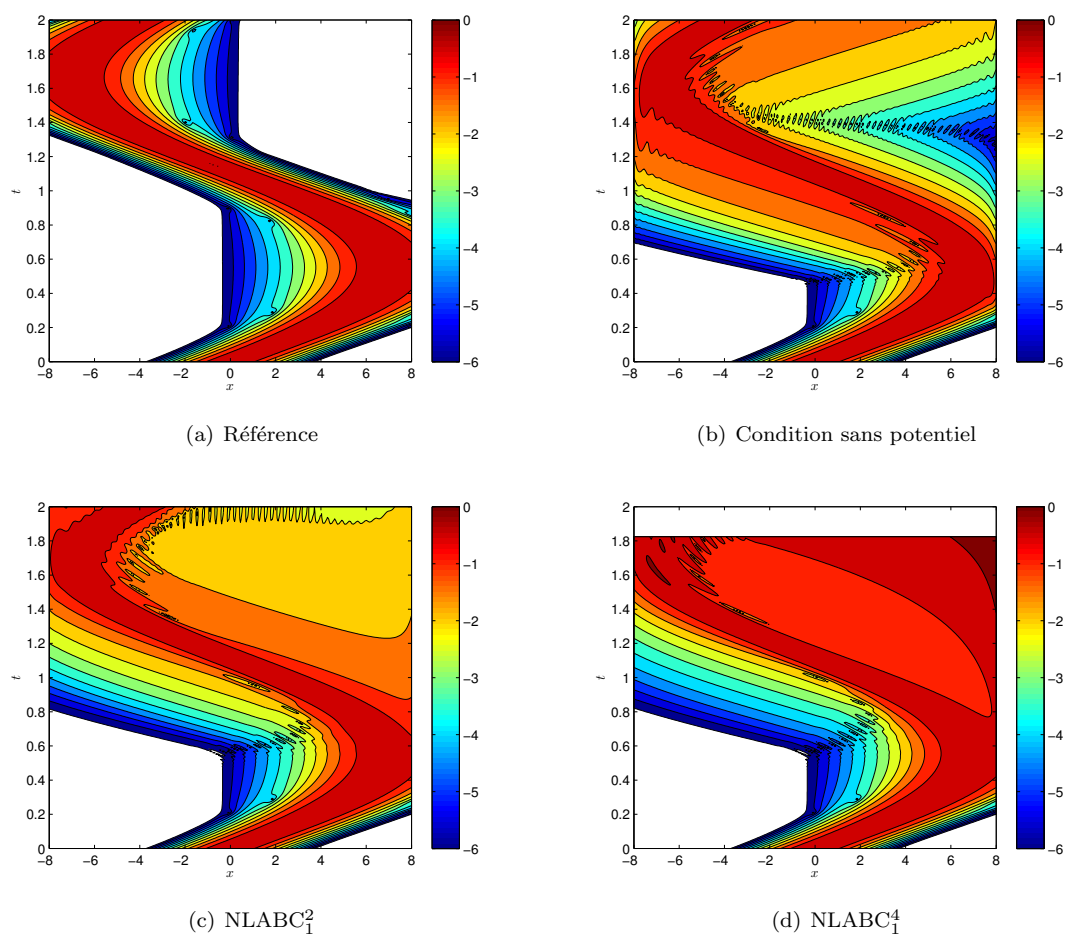


FIGURE 2.16 – Solutions numériques obtenues pour le potentiel mixte $\mathcal{V} = -2x^2 - |u|^2$ et $\Delta t = 10^{-3}$, sur $[-8; 8]$.

2.6 Conclusion

Nous avons pu généraliser les conditions aux limites artificielles du chapitre 1 au cas d'un potentiel non linéaire, et nous avons toujours deux familles de conditions NLABC_1^M et $\text{NLABC}_{2,m}^M$. Les inégalités de masse obtenues dans le cas d'un potentiel pour les conditions ABC_1^M restent vraies pour la condition d'ordre deux NLABC_1^2 . La généralisation des conditions aux limites est effectuée de manière formelle, *a priori* sans savoir si les non linéarités associées à des potentiels répulsifs ont bien les mêmes propriétés que les potentiels répulsifs sous-jacents.

Numériquement, ces CLA donnent de bons résultats et améliorent nettement la condition sans potentiel. Cependant, l'amélioration réalisée par les conditions d'ordre quatre sur les conditions d'ordre deux est moins marquée que dans le cas d'un potentiel. L'autre différence importante par rapport au cas d'un potentiel linéaire concerne l'efficacité des méthodes. En effet, l'algorithme de point fixe converge beaucoup plus vite pour les conditions NLABC_1^M que pour les conditions NLABC_2^M , diminuant d'autant les temps de calcul. Mais la durée d'une itération de point fixe étant la même pour les deux méthodes, cette disparité pourrait être gommée en choisissant une autre méthode pour la résolution du problème non linéaire. Par rapport à une méthode de PML, les temps de calcul sont comparables dans le cas des conditions NLABC_1^M , mais les CLA donnent des résultats plus précis que les PML. Enfin, la précision obtenue varie peu avec h comme avec Δt .

Finalement, un potentiel hybride de type $V(x) + f(u)$ combine les observations valables pour la partie « potentiel » et celles valables pour la partie non linéaire. Pour un pas de temps fixé, l'algorithme par convolution demeure plus rapide du fait de la performance du point fixe, mais le maximum de précision est obtenu avec les conditions de type Padé sans avoir besoin de raffiner autant en temps, ce qui contrebalance l'effet pénalisant du grand nombre d'itérations du point fixe. Finalement, les deux méthodes redeviennent concurrentielles dans le cas d'un potentiel mixte, avec un léger avantage aux conditions issues de la méthode directe.

Chapitre 3

Applications à l'équation de Schrödinger stationnaire : scattering et calcul d'états stationnaires

Sommaire

3.1	Introduction	139
3.2	Conditions aux Limites Artificielles : du temporel au stationnaire	140
3.3	Application au problème de scattering linéaire	141
3.3.1	Formulation du problème et approximation par éléments finis	141
3.3.2	Résultats numériques	142
3.4	Application au calcul d'états stationnaires : le cas linéaire	154
3.4.1	CLA : conditions de type racine carrée	154
3.4.2	CLA : linéarisation de la racine carrée par un développement de Taylor	156
3.4.3	Exemples numériques	157
3.5	Application au calcul d'états stationnaires : le cas non linéaire	173
3.5.1	Problème et schéma numérique	173
3.5.2	Résultats numériques	176
3.6	Conclusion	179

3.1 Introduction

Nous nous plaçons, dans ce chapitre, dans le cadre de l'équation de Schrödinger stationnaire. Nous cherchons à résoudre, pour un potentiel variable V donné, éventuellement non linéaire ($V := V(x, \varphi)$), l'équation suivante

$$\left(-\alpha \frac{d^2}{dx^2} + V\right) \varphi = E\varphi, \quad x \in \mathbb{R}, \quad (3.1)$$

ou encore

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{\alpha} [E - V]\right) \varphi = 0, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (3.2)$$

Plus précisément, nous étudions l'adaptation des conditions aux limites artificielles obtenues dans le cadre temporel aux deux situations suivantes

- scattering linéaire : la valeur de E étant donnée et le potentiel V étant linéaire (indépendant de φ) ou non linéaire, on cherche à calculer φ comme la solution du problème au limites (3.1).
- calcul d'états stationnaires : on cherche ici à calculer le couple (φ, E) , pour un potentiel V donné, linéaire ou non. Ce problème aux valeurs propres est aussi connu sous le nom de calcul des états propres (*bound states*). L'énergie du système est ainsi la valeur propre E et l'état propre associé est φ (fonction propre). On cherche notamment à calculer l'état fondamental (*ground state*) lié à la plus petite valeur propre, ou des états associés à des ordres plus élevés.

3.2 Conditions aux Limites Artificielles : du temporel au stationnaire

Afin de donner les conditions aux limites artificielles du problème stationnaire, revenons au cas temporel. Nous avons vu dans les sections 1.6 et 2.1 que, pour l'équation de Schrödinger linéaire ou non linéaire de potentiel \tilde{V} , en temps

$$\begin{cases} i\partial_t u + \partial_x^2 u + \tilde{V}u = 0, & \forall (x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+, \\ u(x, 0) = u_0(x), & x \in \mathbb{R}, \end{cases} \quad (3.3)$$

les CLA d'ordres deux et quatre liées à la deuxième stratégie (méthode directe) s'écrivent respectivement

$$\text{ABC}_2^2 \quad \partial_{\mathbf{n}} u - iOp\left(\sqrt{-\tau + \tilde{V}}\right)u = 0, \quad \text{sur } \Sigma \times \mathbb{R}^+, \quad (3.4)$$

$$\text{ABC}_2^4 \quad \partial_{\mathbf{n}} u - iOp\left(\sqrt{-\tau + \tilde{V}}\right)u + \frac{1}{4}Op\left(\frac{\partial_{\mathbf{n}} \tilde{V}}{-\tau + \tilde{V}}\right)u = 0, \quad \text{sur } \Sigma \times \mathbb{R}^+. \quad (3.5)$$

Rappelons que la frontière fictive Σ est constituée de deux points, x_ℓ et x_r . La normale unitaire sortante au domaine borné $\Omega =]x_\ell; x_r[$ est notée \mathbf{n} .

Afin d'obtenir des CLA en stationnaire pour (3.1) ou (3.2), il suffit de prendre dans ce qui précède un potentiel $\tilde{V} := -V/\alpha$. L'interprétation de la variable τ est moins évidente. En revanche, en cherchant des solutions sous la forme harmonique : $u(x, t) := \varphi(x)e^{-i\frac{E}{\alpha}t}$ et puisque

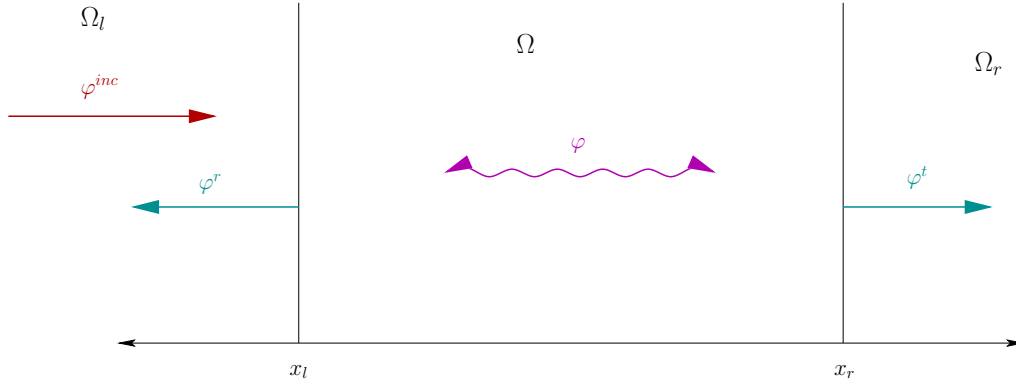
$$i\partial_t u = \frac{E}{\alpha}\varphi(x)e^{-i\frac{E}{\alpha}t},$$

on s'aperçoit que la variable $-\tau$ peut être identifiée à E/α . Ces considérations nous donnent par conséquent les CLA stationnaires suivantes et notées SABC^M (S pour Stationnaire)

$$\text{SABC}^2 \quad \partial_{\mathbf{n}} \varphi = i\frac{1}{\sqrt{\alpha}}\sqrt{E - V}\varphi, \quad \text{sur } \Sigma, \quad (3.6)$$

$$\text{SABC}^4 \quad \partial_{\mathbf{n}} \varphi = i\frac{1}{\sqrt{\alpha}}\sqrt{E - V}\varphi + \frac{1}{4}\frac{\partial_{\mathbf{n}} V}{E - V}\varphi, \quad \text{sur } \Sigma. \quad (3.7)$$

Remarque 3.1. Dans le cas instationnaire, nous avons construit deux familles de conditions aux limites, notées ABC_1^M et ABC_2^M . Celles-ci coïncident lorsque le potentiel ne dépend pas du temps. Dans le cas stationnaire, tous les potentiels considérés sont indépendants du temps et on se trouve de fait dans la situation où les deux familles de CLA sont équivalentes. Ainsi, on obtient une unique famille de CLA stationnaires, notées SABC^M (sans indice). L'écriture des conditions (3.6)–(3.7) est basée sur la famille de CLA ABC_2^M qui est la plus commode ici.

FIGURE 3.1 – Domaine de calcul Ω

3.3 Application au problème de scattering linéaire

3.3.1 Formulation du problème et approximation par éléments finis

Le problème de scattering auquel nous nous intéressons est le suivant. Nous considérons une onde incidente plane

$$\varphi^{inc}(x) = e^{ikx}, \quad x \in]-\infty; x_\ell], \quad (3.8)$$

venant de $-\infty$. Le paramètre k est le nombre d'onde réel positif. L'effet d'un potentiel V variable et linéaire ici agit comme un milieu inhomogène. Si l'on considère un domaine borné $\Omega =]x_\ell; x_r]$, nous faisons l'hypothèse que l'onde $\varphi - \varphi^{inc}$ est parfaitement réfléchie, se propageant vers la gauche du domaine. A droite de Ω , nous faisons l'hypothèse de l'espace libre et supposons que l'onde est totalement transmise dans le domaine $[x_r; +\infty[$, se propageant ainsi vers $+\infty$ sans partie réfléchie. La figure 3.1 illustre cette situation. Par conséquent, le problème que nous résolvons est le suivant

$$\begin{aligned} \left(-\alpha \frac{d^2}{dx^2} + V\right) \varphi &= E\varphi, & \text{pour } x \in \Omega, \\ \partial_{\mathbf{n}}\varphi &= g_{M,\ell}\varphi + f_{M,\ell}, & \text{en } x = x_\ell, \\ \partial_{\mathbf{n}}\varphi &= g_{M,r}\varphi, & \text{en } x = x_r, \end{aligned} \quad (3.9)$$

avec $f_{M,\ell} = \partial_{\mathbf{n}}\varphi^{inc}(x_\ell) - g_{M,\ell}\varphi^{inc}(x_\ell)$. Ici, M vaut 2 ou 4 en fonction du choix de $SABC^M$ (3.6) ou (3.7) et nous avons

$$\begin{aligned} g_{2,(\ell,r)} &:= i \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \sqrt{E - V_{\ell,r}}, \\ g_{4,(\ell,r)} &:= g_{2,(\ell,r)} + \frac{1}{4} \frac{\partial_{\mathbf{n}}V|_{x=x_{\ell,r}}}{E - V|_{x=x_{\ell,r}}}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Une autre écriture plus concise et utilisée par la suite est

$$\partial_{\mathbf{n}}\varphi = g_M\varphi + f_M, \quad \text{sur } \Sigma, \quad (3.11)$$

les fonctions étant adaptées en accord avec le point frontière considéré. Enfin, pour une onde plane $\varphi(x) = e^{ikx}$, la première équation de (3.9) considérée au point x_ℓ nous conduit à la relation de dispersion $E = \alpha k^2 + V_\ell$.

Dans la suite, tous les potentiels choisis seront réguliers, au moins dans les parties non bornées $] -\infty; x_\ell]$ et $[x_r; +\infty[$, ce qui est compatible avec la théorie des opérateurs pseudodifférentiels. De plus,

afin d'avoir une solution de référence numérique, nous supposons que les potentiels sont soit constants en dehors d'un domaine Ω suffisamment grand, soit quasi nuls en dehors de ce domaine de référence.

Pour la résolution numérique du problème, nous utilisons comme précédemment une technique d'éléments finis linéaires. L'intervalle de calcul $[x_\ell; x_r]$ est découpé en n_h éléments uniformes de longueur h . Classiquement, nous considérons les CLA comme des conditions de type Fourier-Robin. Notons $\varphi \in \mathbb{C}^{n_h+1}$ le vecteur nodal de l'interpolation \mathbb{P}_1 de φ . On désigne par \mathbb{S} la matrice de raideur et par \mathbb{M}_{V-E} la matrice de masse généralisée associée au potentiel $V - E$. Soit $\mathbb{B}_M \in \mathcal{M}_{n_h+1}(\mathbb{C})$ la matrice des contributions aux bords issues de la CLA SABCM

$$\mathbb{B}_M = \begin{pmatrix} \alpha g_{M,\ell} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha g_{M,r} \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Le second membre $\mathbf{b}_M \in \mathbb{C}^{n_h+1}$ est donné par

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} \alpha f_{M,\ell} \\ 0 \\ \dots \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.13)$$

Finalement, le système linéaire à résoudre est

$$(\alpha \mathbb{S} + \mathbb{M}_{V-E} + \mathbb{B}_M)\varphi = \mathbf{b}_M. \quad (3.14)$$

Nous résolvons ce système par une méthode LU.

3.3.2 Résultats numériques

Le cas d'un potentiel gaussien

L'équation étudiée est

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \varphi + V\varphi = E\varphi, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (3.15)$$

L'onde incidente est plane de nombre d'onde $k = 10$. On observe les résultats pour un potentiel, appelé potentiel gaussien, et donné par

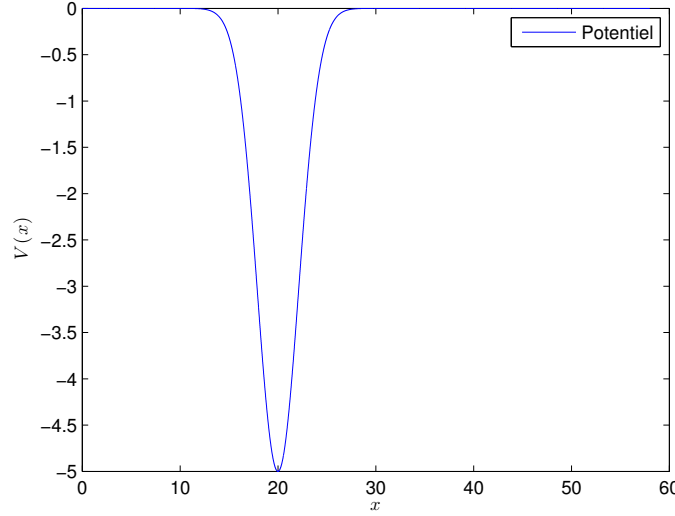
$$V(x) = A e^{-\frac{(x-x_c)^2}{w^2}}, \quad (3.16)$$

avec les paramètres

$$A = -5, \quad x_c = 20, \quad w = 3. \quad (3.17)$$

On veillera toujours à choisir x_c et w de sorte que le potentiel soit numériquement nul en $x_\ell = 0$. Une représentation graphique du potentiel est donnée figure 3.2.

La solution numérique de référence est calculée en prenant un grand domaine $]0; 60[$ et en effectuant le calcul avec la condition aux limites artificielle d'ordre quatre. Aux bords du domaine, le potentiel vaut $V(60) \approx 10^{-77}$ et $V(0) \approx 10^{-19}$. D'un point de vue numérique, on peut considérer que le potentiel est à support compact à l'intérieur de Ω . Les CLA sont alors très précises et permettent de générer une solution de référence φ_{ref} . On choisit un pas d'espace $h = 5 \cdot 10^{-3}$.

FIGURE 3.2 – Potentiel gaussien $V(x) = -5e^{-(x-20)^2/9}$.

On calcule ensuite les solutions obtenues avec les CLA sur un petit domaine en plaçant la frontière gauche en $x_\ell = 0$ et celle droite en $x_r = 18$, le potentiel étant loin d'être nul en ce dernier point. Dans le demi-espace négatif $x < x_\ell = 0$, le potentiel est pratiquement nul, ce qui assure que la condition d'ordre deux est très précise. C'est cette condition qu'on utilisera toujours au point gauche. On compare l'effet des CLA uniquement sur la frontière droite en x_r . On conserve le pas d'espace $h = 5 \cdot 10^{-3}$ utilisé dans le calcul de la solution de référence. La figure 3.3 représente, superposées au potentiel et à la solution de référence, les solutions obtenues, notées par la suite φ_{num} , avec les conditions aux limites artificielles d'ordre deux (en vert) et d'ordre quatre (en cyan) placées en x_r . Les fonctions étant à valeurs complexes, on représente ici leur partie réelle. On obtient exactement les mêmes courbes en représentant leur partie imaginaire. Les conditions artificielles donnent de bons résultats, comme on peut l'observer plus nettement sur la figure 3.3(b) sur laquelle on a zoomé autour de la frontière x_r afin de voir dans quelle mesure les courbes obtenues collent à la référence.

Visuellement, les courbes coïncident. On trace donc les courbes d'erreur afin de mesurer la précision de l'approximation. On représente l'erreur $x \mapsto |\text{Re}(\Delta\varphi(x))|$ commise sur la partie réelle (figure 3.4(a)) et l'erreur en module $x \mapsto |\Delta\varphi(x)|$ (figure 3.4(b)), avec $\Delta\varphi = \varphi_{\text{num}} - \varphi_{\text{ref}}$. Grâce à ces courbes, on note que la condition artificielle d'ordre deux approche la solution de référence à $5 \cdot 10^{-4}$ près, tandis que la condition artificielle d'ordre quatre l'approche pratiquement à 10^{-6} près qui est de l'ordre de l'erreur éléments finis $h^2 \approx 10^{-6}$. Ainsi, non seulement ces résultats sont précis, mais ils sont d'une précision croissante lorsqu'on choisit une condition d'ordre plus élevé. On peut aussi mettre en évidence la variation d'amplitude et de phase de la solution de référence, à l'approche du potentiel, selon l'amplitude de celui-ci. On considère toujours comme onde incidente $\varphi^{\text{inc}}(x) = e^{ikx}$ avec pour nombre d'onde $k = 8$ pour une meilleure visibilité, et comme potentiel

$$V(x) = A \exp\left(\frac{-(x-20)^2}{9}\right),$$

dont on fait varier l'amplitude A . Sur la figure 3.5 représentant le potentiel et la solution de référence, l'amplitude du potentiel vaut $A = -50$ et le nombre d'onde est $k = 8$. On observe, sur la partie réelle

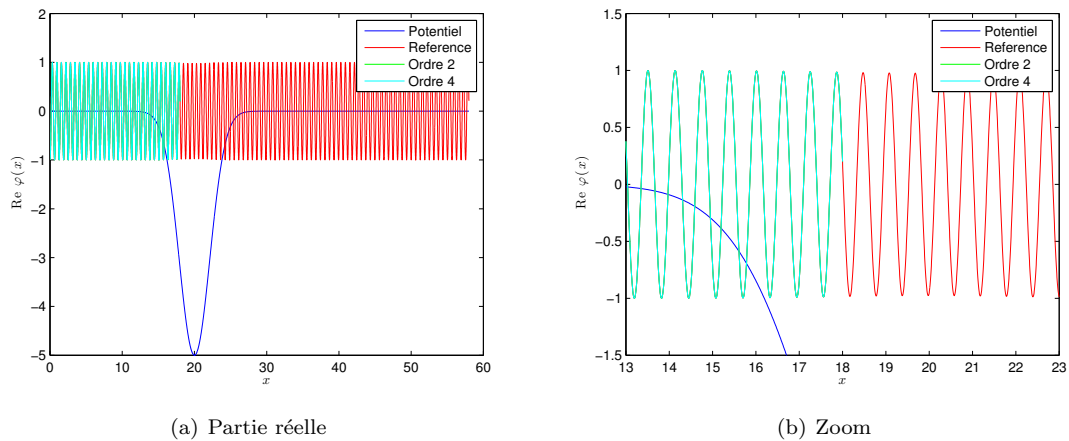


FIGURE 3.3 – Représentation de la partie réelle des solutions numériques.

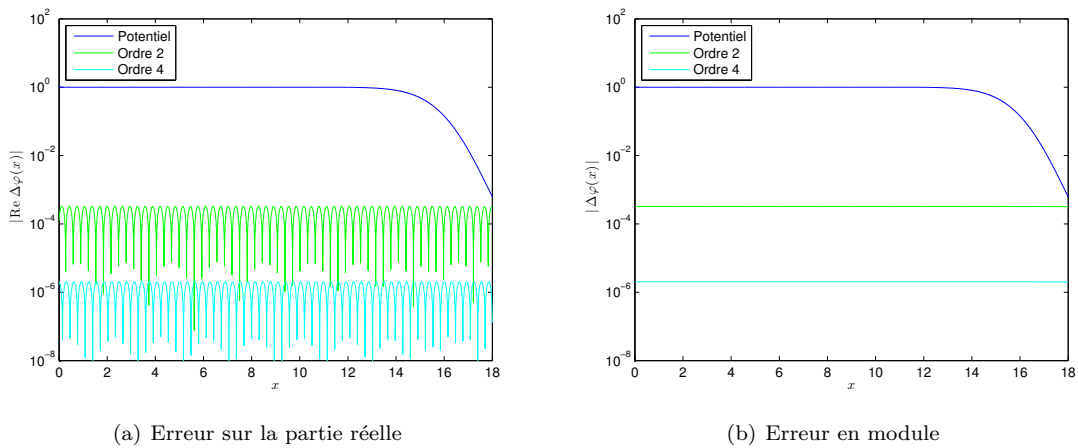


FIGURE 3.4 – Erreur par rapport à la solution numérique de référence pour le potentiel $V(x) = -5e^{-(x-20)^2/9}$.

(figure 3.5(a)), une diminution de l'amplitude de l'onde dans la zone dans laquelle le potentiel est, numériquement parlant, non nul. On remarque également une accélération de l'onde dans cette zone, ce qui est confirmé par la figure 3.5(b) qui représente l'argument de la solution de référence : celui-ci est modifié également.

La figure 3.6 présente des résultats analogues pour une valeur de A positive cette fois, $A = 20$. Sur la partie réelle (figure 3.6(a)) on observe cette fois une augmentation de l'amplitude de l'onde, ainsi qu'une diminution de sa fréquence, confirmée par la représentation de l'argument figure 3.6(b).

On étudie ensuite l'évolution des courbes d'erreur en fonction du nombre d'onde k de l'onde incidente. Les conditions aux limites étant écrites sous une hypothèse de haute fréquence, cela doit se traduire par de meilleures courbes d'erreur lorsqu'on prend k grand. Pour vérifier cette hypothèse, on fait varier k et on relève, pour chaque valeur de k , le maximum de l'erreur constaté sur $[0; x_r]$. En effet, on a pu remarquer que les courbes d'erreur ont toujours la même allure, périodique, avec un pic d'erreur correspondant aux extrema de la solution. L'erreur est donc convenablement décrite par

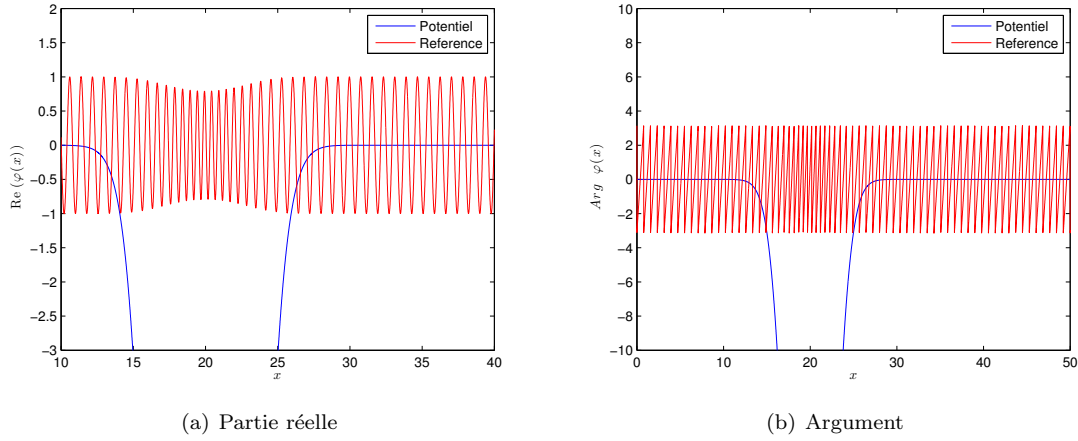


FIGURE 3.5 – Modification de la fréquence de l'onde à la traversée du potentiel, en fonction de l'amplitude de celui-ci, pour $V(x) = -50e^{-(x-20)^2/9}$ et $k = 8$.

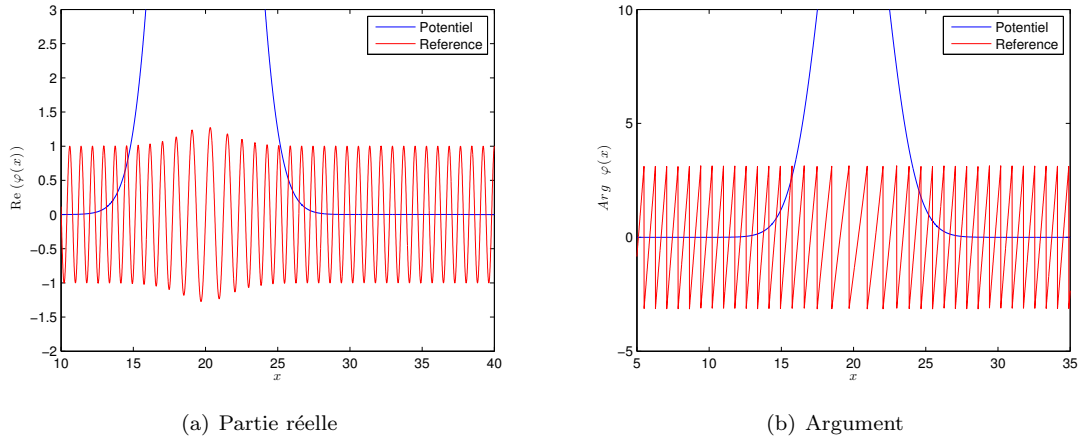


FIGURE 3.6 – Modification de la fréquence de l'onde à la traversée du potentiel, en fonction de l'amplitude de celui-ci, pour $V(x) = 20e^{-(x-20)^2/9}$ et $k = 8$.

la valeur prise sur ces extrema. On reporte sur la figure 3.7 les courbes de

$$\max_{x \in [0; x_r]} |\Delta\varphi(x)|$$

pour les conditions aux limites artificielles d'ordre deux et d'ordre quatre en fonction de k . Au lieu de représenter les courbes donnant l'erreur en module, on aurait également pu choisir de représenter l'erreur sur la partie réelle ou sur la partie imaginaire. Mais ces trois courbes sont en réalité extrêmement proches, ce qui fait qu'une seule suffit à décrire la situation convenablement.

Sur la figure 3.7(a) on observe bien dans un premier temps une diminution de l'erreur lorsque k augmente, et le fait que la condition d'ordre quatre est plus précise que celle d'ordre deux, pour une onde d'amplitude $A = 1$. Cependant, on remarque également une certaine dégradation de la précision des CLA lorsque k augmente à partir de la valeur $k = 8$ environ. Les résultats perdent de leur précision et il n'y a plus d'écart apparent entre la condition d'ordre deux et celle d'ordre quatre.

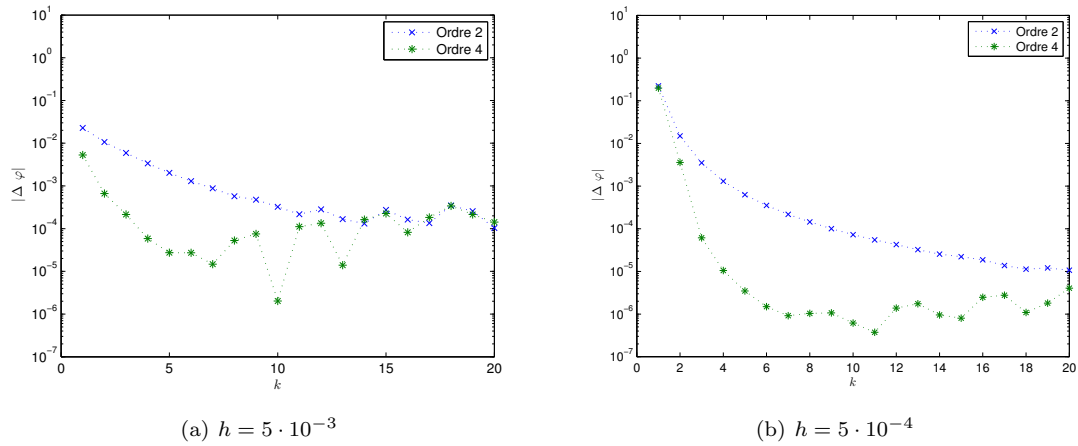


FIGURE 3.7 – Evolution de l’erreur commise sur la solution, en fonction du nombre d’onde k et pour deux pas d’espace. L’amplitude du potentiel est $A = 1$.

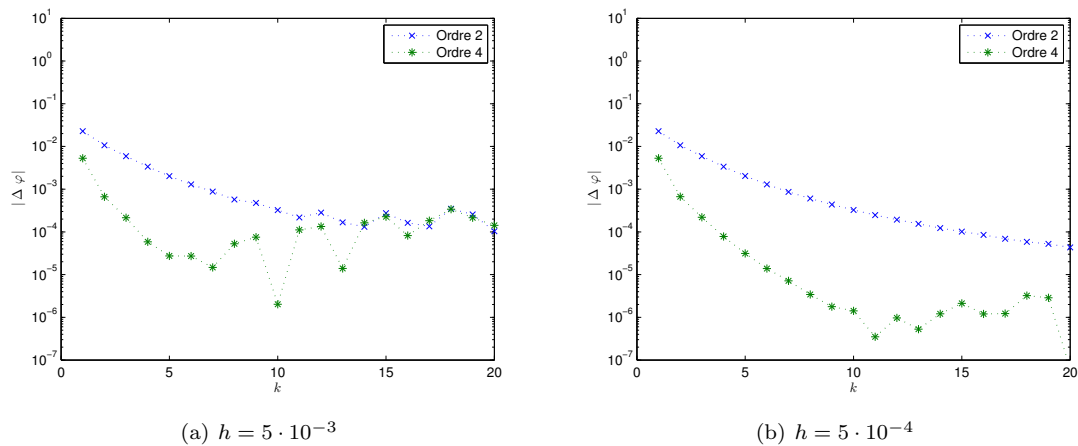


FIGURE 3.8 – Evolution de l’erreur commise sur la solution, en fonction du nombre d’onde k , pour le potentiel gaussien d’amplitude $A = -5$, et deux pas d’espace différents.

Or, les CLA sont des conditions développées dans le cadre de la haute fréquence, normalement plus appropriée à des ondes rapides pour des nombres d’onde k relativement grands. C’est d’ailleurs ce que tend à montrer la première partie de la courbe, où la précision obtenue s’améliore lorsque k augmente. En réalité, les perturbations observées pour des valeurs plus grandes de k correspondent à de la dispersion numérique. Plus le nombre d’onde est grand, et plus il est nécessaire de raffiner en espace selon x pour garder un résultat précis. Pour confirmer cela, la figure 3.7(b) reprend les mêmes courbes d’erreur mais avec un pas d’espace dix fois plus petit, $h = 5 \cdot 10^{-4}$. Le résultat est concluant : les courbes d’erreur pour les CLA d’ordres deux et quatre se réordonnent entre $k = 8$ et $k = 20$ avec une précision qui cette fois continue à s’améliorer lorsque k augmente. La différence de précision entre les deux CLA est de nouveau visible et assez importante. La figure 3.8 représente la même chose que la figure 3.7, mais pour un potentiel dont l’amplitude est cette fois $A = -5$ au lieu de $A = 1$. On observe les mêmes phénomènes.

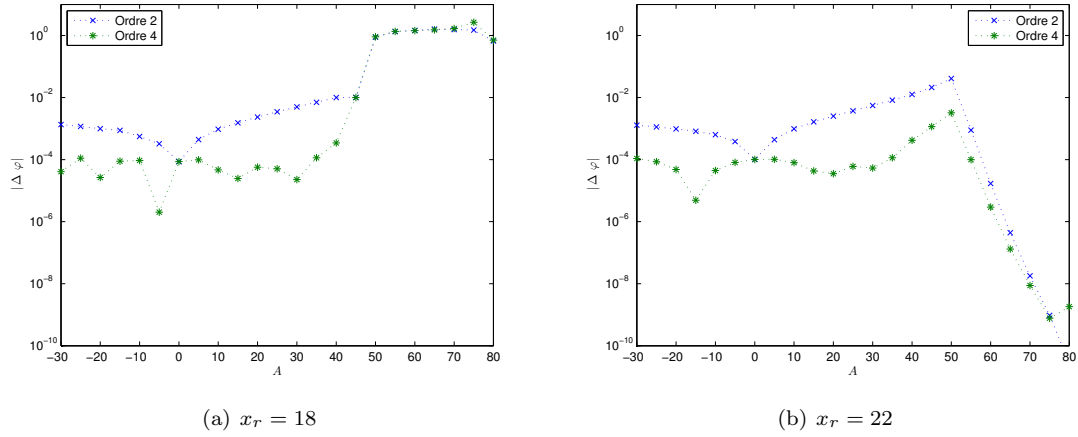


FIGURE 3.9 – Evolution de l’erreur commise sur la solution, en fonction de l’amplitude A du potentiel. Le nombre d’onde est fixé égal à $k = 10$.

Pour répondre à la question « Où peut-on placer la frontière artificielle, et où ne peut-on pas ? », on effectue quelques tests expérimentaux sur le potentiel gaussien (3.16) avec $x_c = 20$, $w = 3$ et A variable. A k fixé, on fait varier x_r et on observe la précision obtenue (figure 3.12). On s’aperçoit rapidement que celle-ci dépend de la valeur de l’amplitude A du potentiel. Si A est négatif, les choses se passent très bien, on peut placer x_r aussi bien à droite de x_c (centre de la gaussienne) dans la partie « descendante » du potentiel, qu’à gauche de x_c dans la partie « montante ». Lorsque A est positif, on observe le même genre de phénomène si A n’est pas trop grand, mais pour de plus grandes valeurs de A les résultats sont complètement faux si on se place en $x_r \leq x_c$, et ne redeviennent corrects qu’à mesure que x_r s’éloigne de x_c par valeurs supérieures. Il existe donc une valeur critique de A à partir de laquelle on ne peut pas placer x_r n’importe où. Une autre manière de voir les choses est de fixer x_r , par exemple $x_r = 18$ ou $x_r = 22$, et d’observer ce qui se passe lorsque A varie (figure 3.9), de manière à identifier la valeur limite de A . Lorsque x_r est plus petit que x_c (figure 3.9(a)), la valeur de A à ne pas dépasser semble se situer aux alentours de $A = 50$. Cependant, en renouvelant ce test pour d’autres nombres d’onde k (figure 3.10), on remarque que cette valeur limite de A change avec le nombre d’onde. On conjecture donc qu’il existe une valeur critique de A , et que celle-ci est liée à k , x_r et x_c .

Fixons $k = 10$ et $x_r = 18$ (cf. figure 3.11). On est ainsi dans la situation $x_r < x_c$ puisque $x_c = 20$. Afin d’expliquer ces remarques, rappelons que la relation de dispersion liant l’énergie E au nombre d’onde k est

$$E = V_\ell + \frac{k^2}{2}. \quad (3.18)$$

On remplace E dans l’équation (3.15) par l’expression ci-dessus et on obtient

$$-\frac{1}{2}\varphi'' + V\varphi = V_\ell\varphi + \frac{k^2}{2}\varphi,$$

soit

$$\varphi'' + [k^2 - 2(V - V_\ell)]\varphi = 0.$$

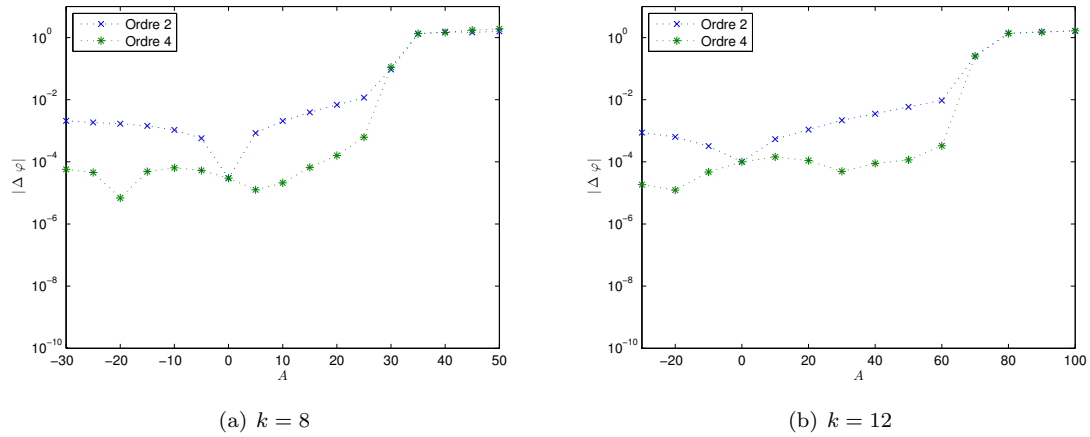


FIGURE 3.10 – Evolution de l'erreur commise sur la solution, en fonction de l'amplitude A du potentiel, pour deux nombres d'onde différents. La frontière est placée en $x_r = 18$.

Dans le cas du potentiel gaussien centré en $x_c = 20$ et d'écart-type $w = 3$, la gaussienne est centrée suffisamment loin de zéro pour que le potentiel $V_\ell = V(0)$ soit numériquement nul (pour $A = 1$, le potentiel vaut 10^{-20} en $x_\ell = 0$). On résout donc l'équation

$$\varphi'' + (k^2 - 2V)\varphi = 0. \quad (3.19)$$

On voit qu'il faudra discuter la solution de l'équation selon le signe de $k^2 - 2V$. Celui-ci est un nouveau nombre d'onde (variable) \tilde{k}^2 qui doit rester un réel positif sur $[x_r; +\infty[$ pour que la CLA soit précise. Il faut donc que le minimum du terme soit positif, ce qui donne la condition

$$\max_{x \in [x_r; +\infty[} V(x) \leq \frac{k^2}{2}. \quad (3.20)$$

Or, cette relation fait intervenir trois paramètres : k , A et x_r . A k donné, fixer A impose de prendre x_r assez grand, fixer x_r impose de se limiter à une valeur de A qui ne soit pas trop grande. Plus précisément, le maximum de V sur l'intervalle $[x_r; +\infty[$ vaut

$$\begin{cases} \max_{x \in [x_r; +\infty[} V(x) = V(x_c) = A, & \text{si } x_r < x_c, \\ \max_{x \in [x_r; +\infty[} V(x) = V(x_r), & \text{si } x_r \geq x_c. \end{cases} \quad (3.21)$$

Deux cas se présentent. Dans le premier cas, k et A vérifient la relation

$$A \leq \frac{k^2}{2}. \quad (3.22)$$

Alors, quel que soit x_r , la relation (3.20) est toujours vérifiée, on peut donc placer x_r librement, aussi bien plus petit que plus grand que x_c . Dans le deuxième cas, la relation (3.22) n'est pas vérifiée. Alors, les trois paramètres k , A et x_r doivent vérifier la relation

$$A \exp\left(-\frac{(x_r - x_c)^2}{w^2}\right) \leq \frac{k^2}{2}, \quad (3.23)$$

ce qui impose de choisir x_r plus grand que x_c . Plus précisément, une valeur minimale x_r^{\min} approximative de x_r est

$$x_r^{\min} \approx x_c + w \sqrt{\ln\left(\frac{2A}{k^2}\right)}. \quad (3.24)$$

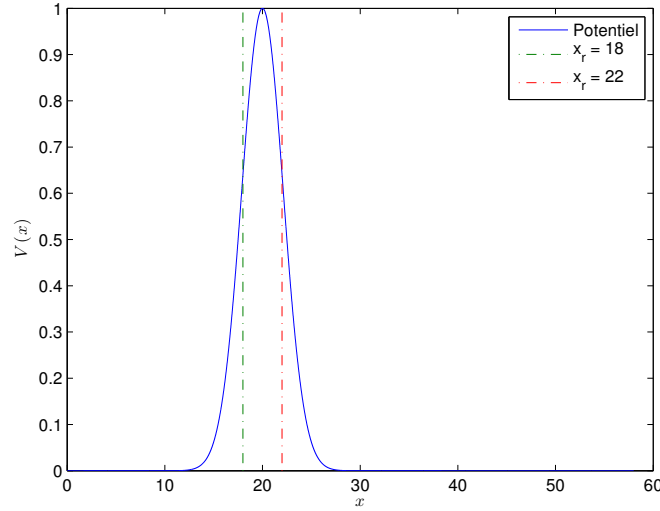


FIGURE 3.11 – Potentiel gaussien et placement de la frontière artificielle. Pour la représentation, $A = 1$.

Remarque 3.2. La condition qui impose à $\tilde{k}^2 = k^2 - 2(V - V_\ell)$ de rester positif sur $[x_r; +\infty[$ est la même que celle qui assure que les conditions aux limites sont bien définies. En effet, en exprimant $k^2 = 2(E - V_\ell)$, on a

$$\begin{aligned} k^2 - 2(V - V_\ell) \geq 0 &\Leftrightarrow 2(E - V_\ell) - 2(V - V_\ell) \geq 0 \\ &\Leftrightarrow E - V \geq 0. \end{aligned}$$

Dans les conditions d'ordres deux et quatre, on a alors $E - V_r \geq 0$ et le terme $\sqrt{E - V_r}$ est bien défini.

Dans l'exemple du potentiel gaussien et pour le nombre d'onde $k = 10$, l'amplitude limite donnée par (3.22) pour ne pas avoir de contrainte sur x_r est $A = 50$. Afin de mettre en évidence numériquement cette valeur limite, nous représentons l'erreur $|\Delta\varphi|$ associée à chaque condition, en fonction de A pour des valeurs variant dans l'intervalle $]-30; 80[$. Sur la figure 3.9. (a), pour $x_r = 18$ (et $x_c = 20$), nous remarquons que, jusqu'à $A = 40$, les résultats sont précis et les CLA se classent selon leur ordre M . Lorsque l'on s'approche de la valeur limite $A = 50$, l'erreur croît jusqu'à donner des résultats faux. Par ailleurs, remarquons que, en $A = 0$ (potentiel nul), les conditions artificielles d'ordres deux et quatre donnent exactement le même résultat puisqu'en l'absence de potentiel, les conditions aux limites sont alors équivalentes. On effectue sur la figure 3.9(b) un test similaire mais en fixant $x_r = 22$ (cf. figure 3.11). On voit cette fois que la restriction sur l'amplitude n'existe plus et que les résultats sont toujours satisfaisants.

Dans la série de courbes de la figure 3.12, on représente l'erreur $|\Delta\varphi|$ pour un potentiel d'amplitude A donnée $(-20, 30, 50, 60)$, lorsqu'on déplace la frontière droite x_r , k restant fixé à 10 et x_c à 20. Pour les deux premières figures 3.12(a) et 3.12(b) ($A = -20$ et $A = 30$), on est dans la configuration où $2A < k^2$. On observe alors une bonne précision des résultats qui est due au fait que l'on n'a pas de restriction *a priori* sur le placement de x_r . La figure 3.12(c) concerne le cas limite où $2A = k^2$. En accord avec (3.24), les résultats sont bons pour $x_r \geq x_r^{\min} = 20$. Enfin, la dernière figure correspond à

$2A > k^2$ et est globalement en accord avec la condition (3.24). Choisir $x_r < x_c$ ne donne pas de bons résultats, ce qui est tout à faire prévisible. Un peu plus surprenant est que les résultats commencent à s'arranger dès $x_r > x_c$ bien que la valeur théorique pour $A = 60$ soit $x_r^{\min} \approx 21.3$. Toutefois, on constate bien à partir de $x_r = 21$ une nouvelle amélioration des résultats. En particulier, c'est à partir de cette valeur de x_r que les conditions d'ordres deux et quatre se distinguent l'une de l'autre, et que celle d'ordre quatre est plus précise que celle d'ordre deux.

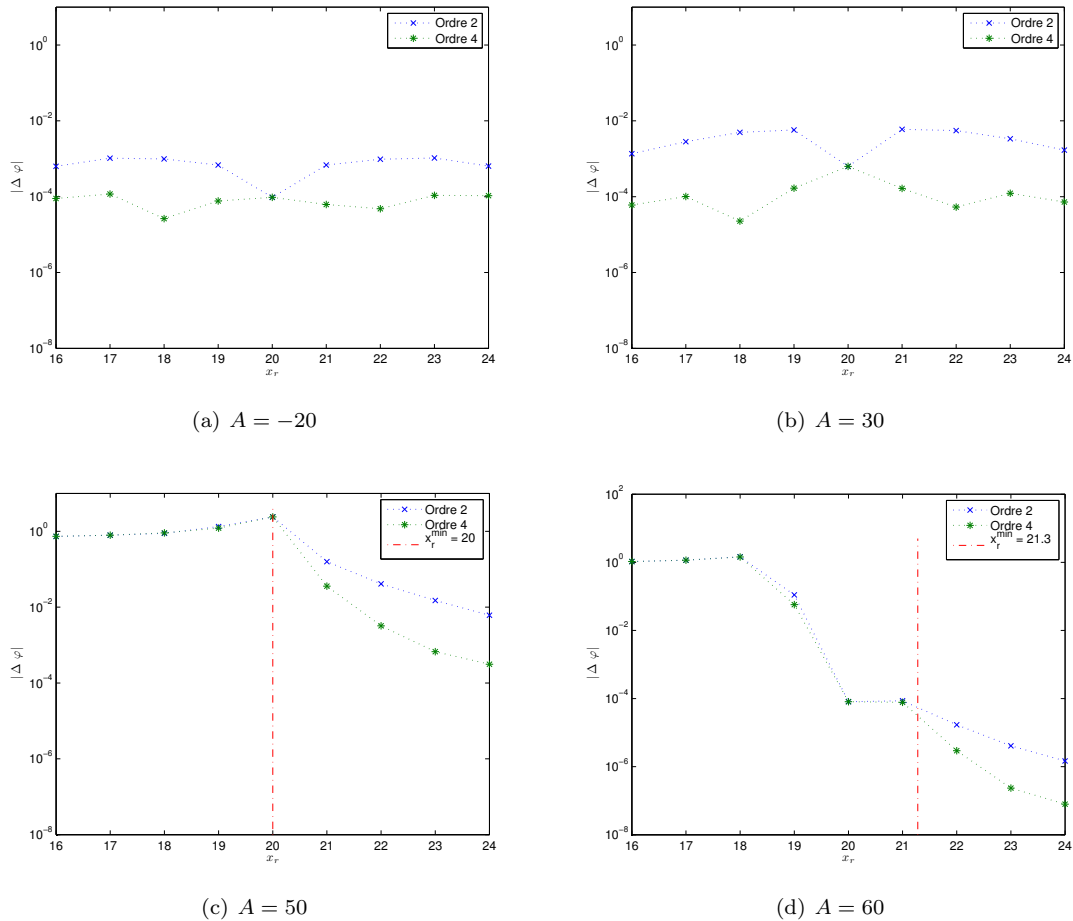


FIGURE 3.12 – Evolution de l'erreur commise sur la solution, en fonction de x_r (l'amplitude A est fixée, $k = 10$ et $x_c = 20$).

Cas d'un potentiel doublement gaussien

En corollaire de cette étude, on étudie l'effet d'un potentiel qui est constitué de deux gaussiennes successives sur le domaine de référence $]0; 60[$

$$V(x) = A_1 \exp\left(-\frac{(x - x_{c1})^2}{w_1^2}\right) + A_2 \exp\left(-\frac{(x - x_{c2})^2}{w_2^2}\right). \quad (3.25)$$

On choisit pour commencer les valeurs suivantes

$$x_{c1} = 24, \quad x_{c2} = 34, \quad w_1 = 5, \quad w_2 = 4, \quad (3.26)$$

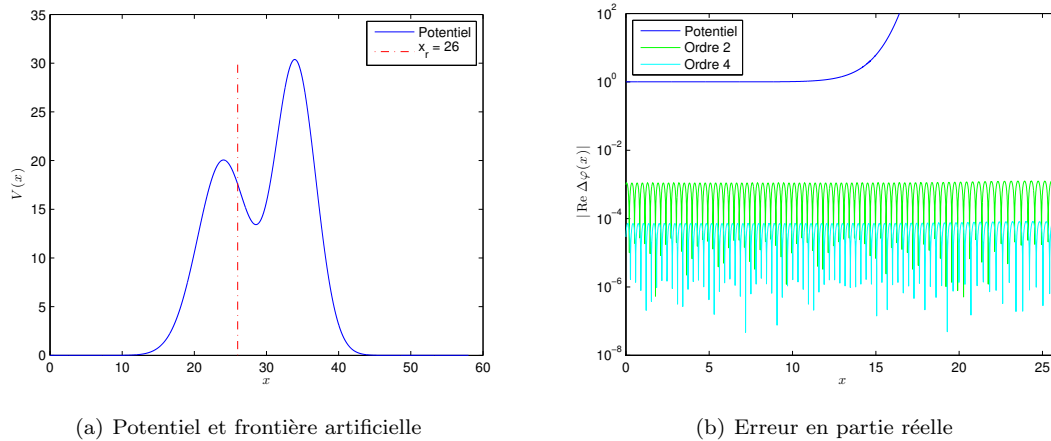


FIGURE 3.13 – Potentiel somme de deux gaussiennes, $V(x) = 20e^{-\frac{(x-24)^2}{25}} + 30e^{-\frac{(x-34)^2}{16}}$.

les amplitudes A_1 et A_2 pouvant varier dans cette étude. Tout au long de ce paragraphe, le nombre d'onde est pris égal à $k = 10$, et le pas de discrétisation vaut $h = 5 \cdot 10^{-3}$.

La figure 3.13 présente les résultats obtenus pour ce type de potentiel. On a placé la frontière en $x_r = 26$ et on observe l'erreur sur la partie réelle (figure 3.13(a)) (les autres courbes d'erreur étant très similaires). Les conditions artificielles permettent d'approcher très bien la solution alors que la frontière se trouve en plein au milieu du potentiel. La hiérarchisation des conditions selon leur ordre est visible.

La figure 3.14 présente un autre potentiel constitué de la somme de deux gaussiennes, avec cette fois l'existence d'un « palier » au milieu des deux bosses, et $x_r = 15$ situé dans cet intervalle. Dans cet exemple, les solutions calculées avec les conditions aux limites artificielles donnent de très bons résultats, avec une précision en norme infinie inférieure à 10^{-4} . Si les erreurs associées aux conditions d'ordres deux et quatre sont systématiquement confondues dans cet exemple, c'est que la frontière x_r est placée en un point situé entre les deux gaussiennes, où le potentiel est extrêmement plat. En conséquence, sa dérivée est presque nulle sur ce palier : $\partial_x V(15) \approx 10^{-3}$. Or, en un point où la dérivée du potentiel est nulle, le terme correcteur de la condition d'ordre quatre disparaît et les conditions d'ordres deux et quatre coïncident alors.

Considérons le cas d'un potentiel tel que l'amplitude de la deuxième gaussienne, voire des deux gaussiennes, soit négative. On se trouve alors dans le cas favorable où les conditions aux limites fonctionnent (cf. l'étude avec une seule gaussienne). De façon similaire, l'exemple de la figure 3.14 est satisfaisant car l'amplitude de la deuxième gaussienne n'est pas trop élevée. Si le coefficient A_2 valait 80 au lieu de 40, on devrait se résoudre, pour garder des résultats corrects, à choisir x_r plus grand ($x_r > 30$ essentiellement).

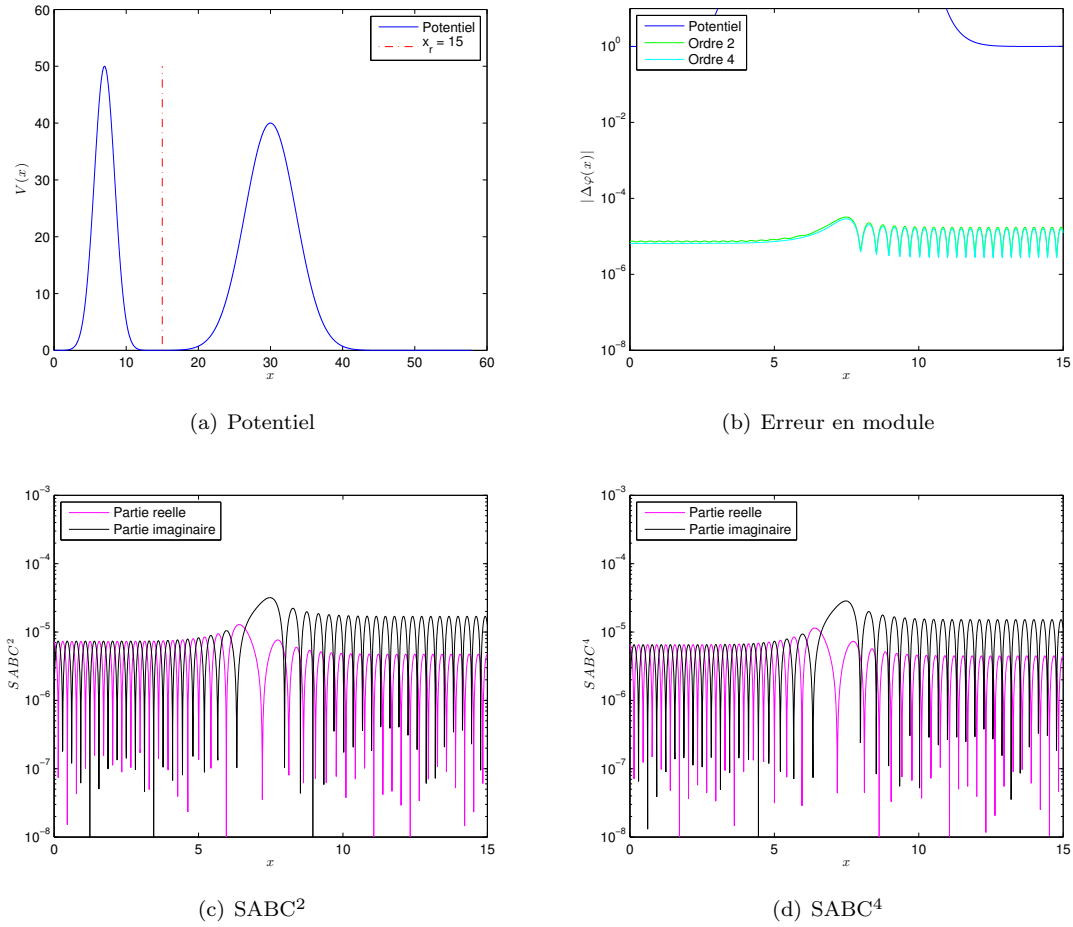


FIGURE 3.14 – Potentiel somme de deux gaussiennes, $V(x) = 50e^{-\frac{(x-7)^2}{4}} + 40e^{-\frac{(x-30)^2}{25}}$. Les figures du bas représentent l'erreur en partie réelle et en partie imaginaire, pour chacune des deux conditions.

Autres potentiels : partiellement quadratique, double barrière avec recollement quadratique

Le premier potentiel étudié est un potentiel quadratique défini sur $[0; 20]$ par

$$V(x) = \begin{cases} 2 + (x - 8)^2, & \text{pour } x \in [0; 8], \\ 2, & \text{pour } x \in]8; 20]. \end{cases} \tag{3.27}$$

On obtient les résultats présentés figure 3.15. Le potentiel étant constant en dehors de $[0; 8]$, on peut alors calculer la solution de référence en utilisant la condition aux limites transparente en chacun des points x_ℓ et x_r . La condition d'ordre deux conduit à une erreur de l'ordre de $5 \cdot 10^{-3}$, et la condition d'ordre quatre à une erreur de l'ordre de 10^{-4} . Rappelons que le pas d'espace est égal à $h = 5 \cdot 10^{-3}$.

Le potentiel suivant (figure 3.16) consiste en deux « cheminées ». C'est un potentiel appelé double

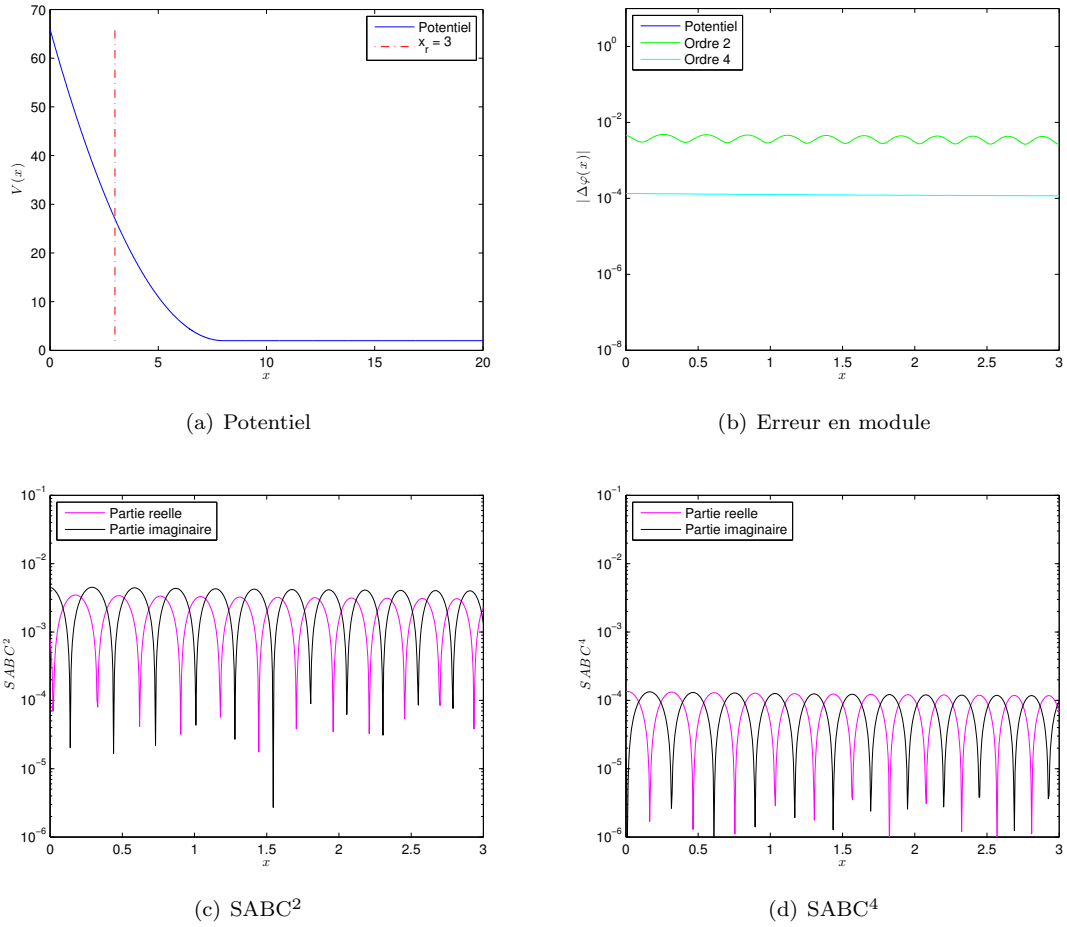
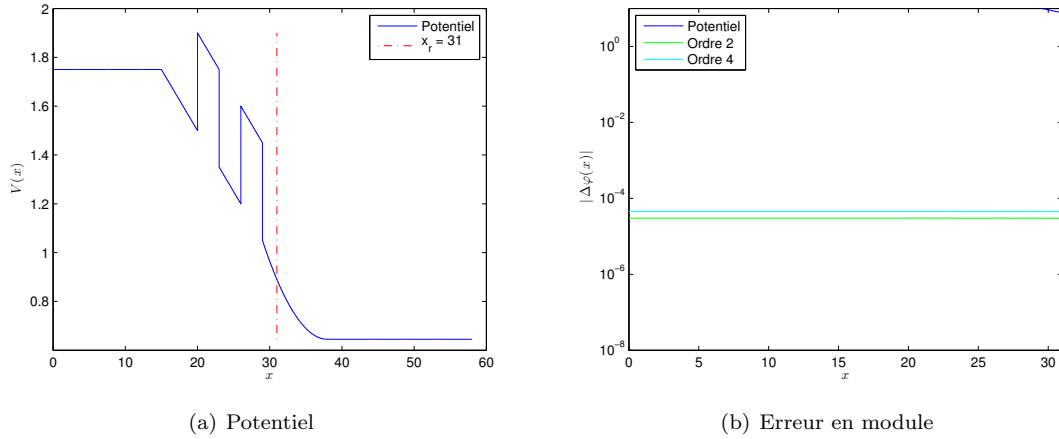


FIGURE 3.15 – Potentiel quadratique. La frontière est placée en $x_r = 3$. Les figures du bas représentent l'erreur en partie réelle et en partie imaginaire, pour chacune des deux conditions.

barrière avec un recollement quadratique. Son expression analytique est

$$V(x) = \begin{cases} 35/2, & x \leq 15 \\ 25 - x/2, & 15 \leq x \leq 20 \text{ et } 23 \leq x \leq 26 \\ 29 - x/2, & 20 \leq x \leq 23 \text{ et } 26 \leq x \leq 29 \\ 21/2 + ((x - 38)^2 - (29 - 38)^2) / 20, & 29 \leq x \leq 38 \\ 21/2 - (29 - 38)^2 / 20, & x \geq 38 \end{cases} \quad (3.28)$$

La différence fondamentale avec le potentiel donné par (3.25) est la présence de discontinuités dans le potentiel. En conséquence, il n'est cette fois pas possible d'approcher la solution en plaçant la frontière au milieu des cheminées (en $x_r = 24$ ou en $x_r = 27$ par exemple). On se limite donc à choisir x_r entre 29 et 38 (après 38, le potentiel est constant, les conditions artificielles sont donc exactes). On fixe $x_r = 31$. Ici, l'erreur obtenue avec la condition d'ordre quatre est très légèrement inférieure à celle obtenue avec la condition d'ordre deux, déjà en-deçà de 10^{-4} .


 FIGURE 3.16 – Potentiel à deux cheminées. La frontière est placée en $x_r = 31$.

3.4 Application au calcul d'états stationnaires : le cas linéaire

Le second problème auquel nous nous intéressons est le suivant. Etant donné le Hamiltonien H

$$H = -\alpha \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (3.29)$$

par le biais de α et V , on cherche à calculer le couple (ϕ_E, E) solution du problème aux valeurs propres généralisé

$$H\phi_E = E\phi_E. \quad (3.30)$$

Ce problème se formule également sous la forme : déterminer les valeurs propres $(E_n)_{n \in \mathbb{N}}$ (énergies) et les fonctions propres réelles associées $(\phi_n)_{n \in \mathbb{N}}$ (états propres ou bound states) solutions de

$$H\phi_n = E_n\phi_n. \quad (3.31)$$

Il est nécessaire, pour fixer la fonction propre de la considérer normalisée :

$$\|\phi_n\|_{L^2(\mathbb{R})} = 1, \quad (3.32)$$

ou

$$\|\phi_E\|_{L^2(\mathbb{R})} = 1. \quad (3.33)$$

Nous commençons notre étude par le cas où le potentiel ne dépend pas de la fonction propre, soit le cas linéaire. Le cas non linéaire est considéré plus tard dans la section 3.5.

3.4.1 CLA : conditions de type racine carrée

Pour fixer les idées et mettre en avant la difficulté présente ici et liée aux CLA, étudions pour commencer la manière de résoudre ce problème si on prend une condition aux limites de Dirichlet homogène. La formulation variationnelle de (3.30) s'écrit

$$-\alpha [\partial_n \phi_E \psi]_{x_\ell}^{x_r} + \alpha \int_{\Omega} \partial_x \phi_E \partial_x \psi dx + \int_{\Omega} V \phi_E \psi dx = E \int_{\Omega} \phi_E \psi dx, \quad (3.34)$$

pour des fonctions-test $\psi \in H_0^1(\Omega)$. Soient \mathbb{S}^0 , \mathbb{M}^0 et \mathbb{M}_V^0 respectivement les matrices de raideur, masse et masse généralisée associée au potentiel V pour des éléments finis de type \mathbb{P}_1 et condition aux limites de Dirichlet homogènes (matrices dans $\mathcal{M}_{n_h-1}(\mathbb{R})$). Le problème discret s'écrit alors classiquement comme le problème de valeurs propres généralisé : trouver le couple (E, ϕ_E) solution de

$$\begin{cases} (\alpha\mathbb{S}^0 + \mathbb{M}_V^0) \phi_E = E\mathbb{M}^0 \phi_E, \\ \|\mathbb{M}^0 \phi_E\|_2 = 1, \end{cases} \quad (3.35)$$

qui est un problème aux valeurs propres généralisé avec contrainte égalité. Ici, ϕ_E est un vecteur de \mathbb{R}^{n_h-1} normalisé par : $\|\mathbb{M}^0 \phi_E\|_2 = 1$ ($\|\mathbf{v}\|_2$ étant la norme euclidienne dans \mathbb{R}^{n_h-1}). La complexité de l'algorithme est alors essentiellement la somme de la complexité de l'assemblage des matrices creuses d'éléments finis, et de la complexité de l'algorithme de recherche de valeurs propres. Ici, nous utilisons la fonction `eigs` de Matlab qui renvoie simultanément les p premières plus petites valeurs propres positives et vecteurs propres correspondants du problème de valeurs propres généralisé. Ceci normalise aussi automatiquement le vecteur trouvé en norme euclidienne, résolvant le problème de la contrainte. Cette fonction est issue d'ARPACK (<http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/>). Dans le cas où le potentiel atteint des valeurs négatives, nous utilisons le fait que la plus petite valeur propre E_0 est toujours plus grande que le minimum du potentiel : V_{\min} et résolvons (3.35) par une translation de $-V_{\min}$. Enfin, la résolution de (3.35) génère la suite des p premières valeurs propres $(E_n^0)_{0 \leq n \leq p-1}$, vecteurs propres $(\phi_n^0)_{0 \leq n \leq p-1}$ et fonctions propres éléments finis $(\phi_n^0)_{0 \leq n \leq p-1}$ associées pour la condition aux limites de Dirichlet. Ce problème aux valeurs propres étant linéaire selon E , nous pouvons le résoudre directement sans effectuer de point fixe, contrairement à ce qui suit avec la CLA de type racine carrée.

Considérons maintenant comme condition aux limites la condition SABC² donnée par

$$\partial_{\mathbf{n}} \phi_E = \frac{i}{\sqrt{\alpha}} \sqrt{E - \bar{V}} \phi_E, \quad \text{sur } \Sigma. \quad (3.36)$$

Non seulement cette condition dépend de E , valeur propre à déterminer, mais cette dépendance est non linéaire. On ne peut donc pas regrouper les termes en (E, ϕ_E) dans le second membre de (3.34) de façon linéaire, c'est-à-dire de la forme $E\phi_E$. Plus précisément, l'équation aux valeurs propres non linéaire à résoudre est donnée par

$$\begin{cases} (\alpha\mathbb{S} + \mathbb{M}_V + \mathbb{B}_M(E^M)) \phi^M = E^M \mathbb{M} \phi^M, \\ \|\mathbb{M} \phi^M\|_2 = 1, \end{cases} \quad (3.37)$$

en reprenant les notations matricielles du cas stationnaire. Nous précisons que les couples de valeurs propres et fonctions propres dépendent de la CLA d'ordre M par le biais de la notation : (E^M, ϕ^M) . Nous indexons les p premières valeurs propres selon : (E_n^M, ϕ_n^M) , avec $0 \leq n \leq p-1$. La dépendance non linéaire sur le terme de bord se traduit par la présence de : $\mathbb{B}_M(E^M)$. Pour résoudre le problème de valeurs propres avec une CLA d'ordre M , on doit recourir à un algorithme itératif comme celui du point fixe (avec une tolérance ε), et mettre à jour E^M à chaque itération j . Ceci a pour conséquence que l'on doit choisir une valeur propre particulière d'indice n que l'on veut calculer. Notons-la E_n^M . C'est une restriction importante puisque l'on doit calculer *a priori* successivement toutes les valeurs propres et vecteurs propres associés. En fait il s'avère que `eigs` arrive quand même à faire converger les p premières valeurs propres $(E_n^{M,j})_{0 \leq n \leq p-1}$ vers $(E_n^M)_{0 \leq n \leq p-1}$ et vecteurs propres ϕ_n^M correspondants. Il faut, de fait, aussi recalculer les termes de bord présents dans $\mathbb{B}_M(E_n^{M,j})$. Le schéma itératif

par point fixe est donc

$$\begin{cases} (\alpha\mathbb{S} + \mathbb{M}_V + \mathbb{B}_M(E_n^{M,j})) \phi^{M,j+1} = E^{M,j+1} \mathbb{M} \phi^{M,j+1}, \\ \|\mathbb{M} \phi^{M,j+1}\|_2 = 1, \end{cases} \quad (3.38)$$

chaque problème linéaire étant résolu par **eigs**. De manière générale, pour une condition aux limites non linéaire par rapport à l'énergie, on utilise l'algorithme de point fixe associé. Comme nous l'avons dit, même si nous itérons par un point fixe, il s'avère que l'algorithme fournit quand même une approximation simultanée des autres valeurs propres et vecteurs propres (cf. la section numérique). Nous désignons par la suite cette approche par « directe », ce qui précise que nous itérons sur une seule valeur propre fixée *a priori*. Cet algorithme peut être répété en faisant passer successivement le point fixe sur chacune des valeurs propres et en ne gardant que celle sur laquelle on itère. Bien sûr, cet algorithme est plus coûteux mais aussi plus précis. Cette approche est alors désignée par « boucle » dans la suite. Remarquons que dans le cas du problème de Dirichlet, « directe » et « boucle » sont finalement synonymes dans ce contexte.

3.4.2 CLA : linéarisation de la racine carrée par un développement de Taylor

Contrairement à l'algorithme avec conditions de Dirichlet, nous venons de voir que l'algorithme associé à la CLA de type racine carrée est non linéaire et itératif. Pour remédier à ce problème, on peut envisager de linéariser les conditions SABC² et SABC⁴. Le principe de cette linéarisation est le suivant. Il est basé sur un développement de Taylor pour $E \ll V$. Cette asymptotique est justifiée notamment dans le cas du potentiel harmonique $V(x) = \frac{1}{2}x^2$ puisque V croît très vite, pour peu qu'on ne place pas la frontière trop près de l'origine et qu'on ne cherche pas des énergies trop élevées. On écrit alors, pour SABC² donnée par (3.36),

$$\partial_{\mathbf{n}} \phi_E = \frac{-1}{\sqrt{\alpha}} \sqrt{V-E} \phi_E = -\frac{\sqrt{V}}{\sqrt{\alpha}} \sqrt{1-\frac{E}{V}} \phi_E \approx -\frac{\sqrt{V}}{\sqrt{\alpha}} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{E}{V}\right) \phi_E.$$

Nous obtenons ainsi l'approximation de SABC², notée SABC²_{lin} et donnée par

$$\partial_{\mathbf{n}} \tilde{\phi}_E = -\frac{\sqrt{V_{\ell,r}}}{\sqrt{\alpha}} \tilde{\phi}_E + \frac{1}{2} \frac{E}{\sqrt{\alpha} \sqrt{V_{\ell,r}}} \tilde{\phi}_E. \quad (3.39)$$

On peut isoler la partie linéaire en E directement selon

$$\partial_{\mathbf{n}} \tilde{\phi}_E = \beta_{\ell,r}^2 \tilde{\phi}_E + E \gamma_{\ell,r}^2 \tilde{\phi}_E, \quad (3.40)$$

avec $\beta_{\ell,r}^2$ et $\gamma_{\ell,r}^2$ définis par (3.39). L'intégration de ces CLA dans la formulation faible (3.34) conduit, après discrétisation par éléments finis \mathbb{P}_1 , au problème linéarisé aux valeurs propres ($M = 2$)

$$\begin{cases} (\alpha\mathbb{S} + \mathbb{M}_V + \mathbb{C}_M) \tilde{\phi}^M = \tilde{E}^M (\mathbb{M} + \mathbb{D}_M) \tilde{\phi}^M, \\ \|\mathbb{M} \tilde{\phi}^M\|_2 = 1. \end{cases} \quad (3.41)$$

Nous avons défini ici les deux matrices ($M = 2$)

$$\mathbb{C}_M = \begin{pmatrix} \alpha\beta_{\ell}^M & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha\beta_r^M \end{pmatrix} \quad (3.42)$$

et

$$\mathbb{D}_M = \begin{pmatrix} -\alpha\gamma_\ell^M & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\alpha\gamma_r^M \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

Le problème (3.41) est résolu directement avec `eigs`, sans itération bien sûr. Le coût de calculs est alors identique à considérer une conditions aux limites de Dirichlet. De plus, n'ayant pas à itérer, l'algorithme fournit simultanément les p premières valeurs propres $(\tilde{E}_n^M)_{0 \leq n \leq p-1}$ et vecteurs propres associés $(\tilde{\phi}_n^M)_{0 \leq n \leq p-1}$. De façon conforme aux appellations précédemment utilisées, nous appelons l'algorithme résultant « direct ».

Dans le cas de la CLA SABC⁴, une stratégie par linéarisation de (3.7) conduit à considérer l'approximation

$$\partial_{\mathbf{n}} \tilde{\phi}_E = \beta_{\ell,r}^4 \tilde{\phi}_E + E \gamma_{\ell,r}^4 \tilde{\phi}_E, \quad (3.44)$$

avec $\beta_{\ell,r}^4$ et $\gamma_{\ell,r}^4$ donnés respectivement par

$$\beta_{\ell,r}^4 = \beta_{\ell,r}^2 - \frac{1}{4} \frac{\partial_{\mathbf{n}} V|_{x=x_{\ell,r}}}{V_{\ell,r}} \quad (3.45)$$

et

$$\gamma_{\ell,r}^4 = \gamma_{\ell,r}^2 - \frac{1}{4} \frac{\partial_{\mathbf{n}} V|_{x=x_{\ell,r}}}{V_{\ell,r}^2} \quad (3.46)$$

en passant par l'approximation

$$\frac{1}{4} \frac{\partial_{\mathbf{n}} V}{E - V} \approx -\frac{1}{4} \frac{\partial_{\mathbf{n}} V}{V} - \frac{1}{4} \frac{\partial_{\mathbf{n}} V}{V^2} E. \quad (3.47)$$

On a alors, en adaptant les fonctions, à résoudre un problème de la forme (3.41).

3.4.3 Exemples numériques

Dans cette partie, les potentiels considérés sont plutôt des potentiels confinant la solution, à l'inverse des cas étudiés pour l'équation instationnaire.

Potentiel harmonique

On considère d'abord le cas du potentiel (positif) dit harmonique

$$V(x) = \frac{1}{2} x^2. \quad (3.48)$$

Dans ce cadre, l'équation à résoudre s'écrit

$$-\frac{1}{2} \phi_E'' + \frac{1}{2} x^2 \phi_E = E \phi_E, \quad (3.49)$$

ce qui fixe α à $\frac{1}{2}$. Les solutions normalisées, de carré intégrable de (3.49) sont les fonctions de Hermite données, pour $n \geq 0$, par

$$\phi_n^{ex}(x) = \frac{\pi^{-1/4}}{\sqrt{2^n n!}} e^{x^2/2} \frac{d^n}{dx^n} \left(e^{-x^2} \right). \quad (3.50)$$

Les valeurs propres (énergies) correspondantes sont

$$E_n^{ex} = n + \frac{1}{2}. \quad (3.51)$$

Les premières fonctions propres sont représentées sur la figure 3.17. De manière générale, les fonctions propres tendent vers 0 à l'infini, mais cette décroissance est de moins en moins rapide lorsque n augmente.

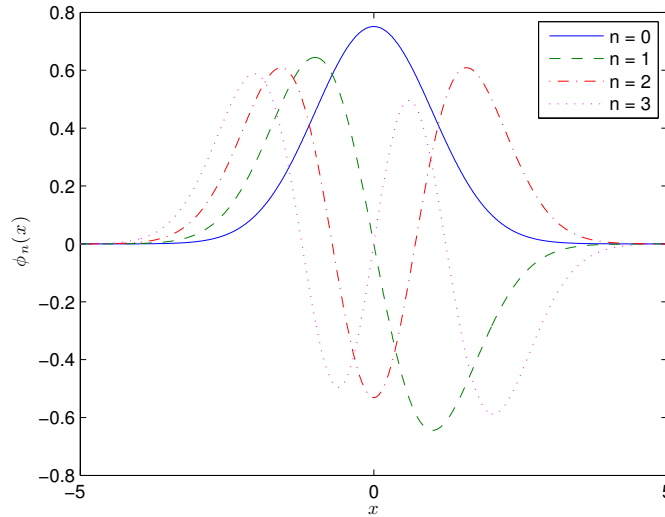


FIGURE 3.17 – Les quatre premières fonctions propres (de $n = 0$ à $n = 3$) associées au potentiel harmonique.

Avant d'effectuer les simulations, rappelons que, dans l'algorithme de point fixe pour les CLA de type racine carrée, nous avons deux stratégies, celle « directe » et celle « boucle ». Par la suite, lorsque nous représentons une courbe d'erreur en fonction de x_r ou h , c'est bien sûr les résultats par l'approche directe qui sont représentés puisque n est alors fixé. Par contre, lorsque nous effectuons un calcul par un balayage sur les valeurs propres (courbes avec n en abscisse), nous représentons les deux stratégies qui conduisent à des résultats de précisions différentes.

Un premier type de tests numériques consiste à observer la variation de l'erreur commise sur l'énergie et sur les fonctions propres lorsque l'on fait varier la taille du domaine. Pour le potentiel harmonique, on considère toujours un domaine symétrique de la forme $\Omega =]-x_r; x_r[$. Pour un état fixé, plus x_r est choisi grand, plus les fonctions propres seront proches de zéro sur la frontière du domaine. On devrait ainsi constater l'apport des conditions aux limites artificielles par rapport à une condition de Dirichlet homogène, en fonction du placement de la frontière. La figure 3.18 représente, pour l'état fondamental $n = 0$ et en échelle logarithmique, l'erreur absolue commise sur la valeur propre $|\Delta E| = |E_n^{\text{num}} - E_n^{\text{ex}}|$, d'une part, et l'erreur absolue (en échelle logarithmique) en norme L^2 commise sur la fonction propre $\|\Delta\phi\|_{L^2(\Omega)} = \|\phi_n^{\text{num}} - \phi_n^{\text{ex}}\|_{L^2(\Omega)}$ d'autre part, lorsque x_r varie de 1 à 7. Remarquons qu'une autre possibilité pour mesurer les erreurs consiste à considérer des erreurs en norme H^1 , qui est la norme naturellement liée à l'énergie. La figure 3.19 représente les mêmes résultats pour l'état $n = 4$ pour x_r variant de 3 à 10. Les résultats sont obtenus pour les valeurs propres numériques E_n^{num} égales à E_n^M (pour SABC^M) ou \tilde{E}_n^M (pour $\text{SABC}_{\text{lin}}^M$), selon l'ordre de la CLA d'ordre M et son type. Dans le cas non linéaire correspondant à SABC^M , le nombre d'itérations est de 50 pour obtenir une convergence à $\varepsilon = 10^{-12}$. Le pas d'espace est fixé à $h = 1 \cdot 10^{-3}$.

On observe que, à n fixé, plus x_r croît et s'éloigne de l'origine, meilleurs sont les résultats, pour

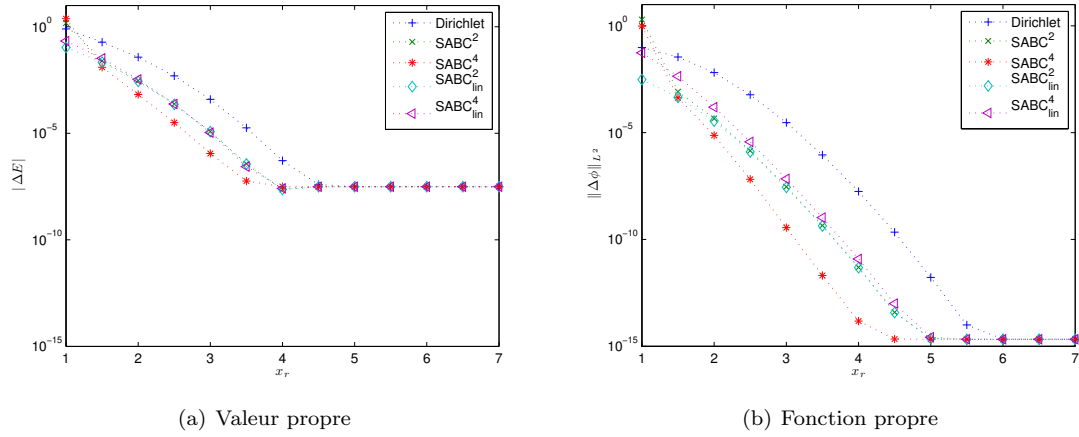


FIGURE 3.18 – Evolution de l'erreur sur le domaine $\Omega =]-x_r; x_r[$ lorsque x_r croît, pour l'état fondamental $n = 0$.

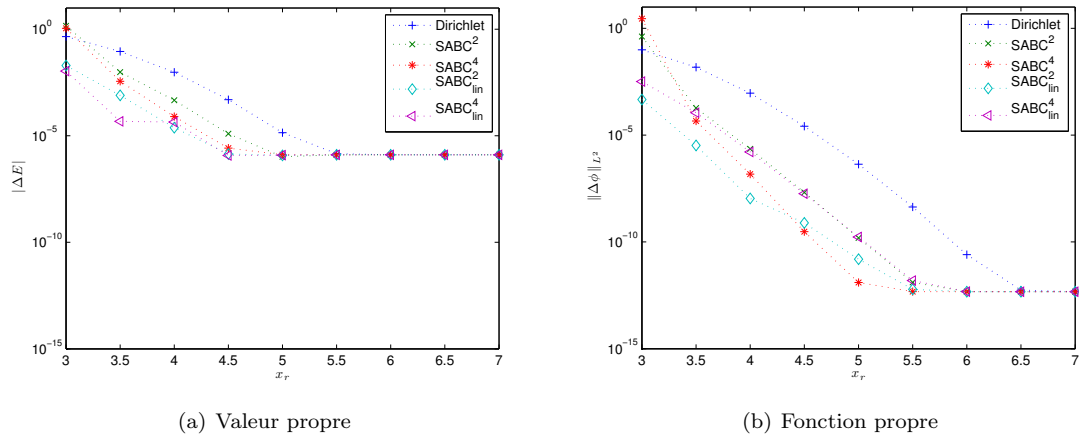
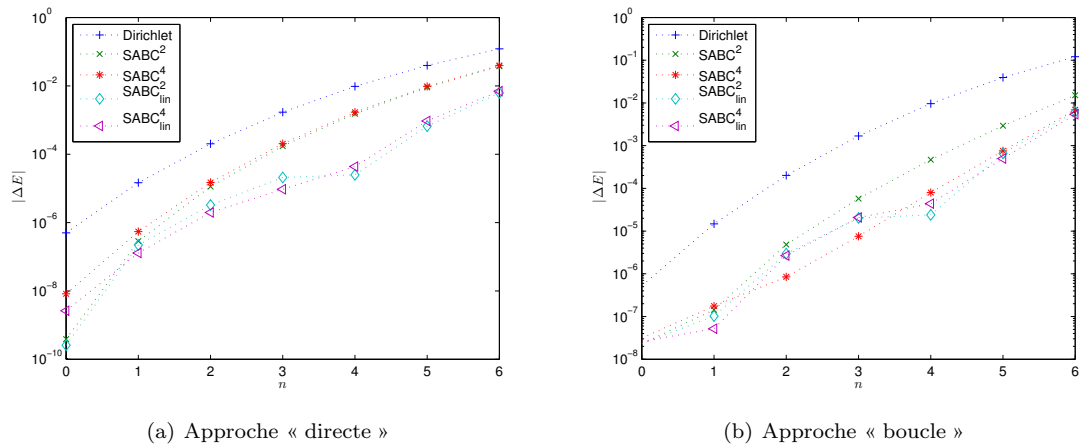


FIGURE 3.19 – Evolution de l'erreur sur le domaine $\Omega =]-x_r; x_r[$ lorsque x_r croît, pour l'état $n = 4$.

FIGURE 3.20 – Evolution de l’erreur sur la valeur propre en fonction de n , sur le domaine $\Omega =]-4; 4[$.

toutes les conditions aux limites. Lorsque x_r est choisi vraiment trop petit (par exemple $x_r = 1$ dans le cas $n = 0$, $x_r < 3$ dans le cas $n = 4$), les conditions donnent toutes de mauvais résultats. Cependant, la tendance est que, pour ces petites valeurs de x_r , les conditions aux limites linéarisées réussissent déjà à donner une approximation de la valeur propre, alors que les conditions de Dirichlet et $\text{SABC}^{2,4}$ ne la trouvent pas du tout. Ainsi en $x_r = 3$ pour $n = 4$, les conditions $\text{SABC}_{\text{lin}}^{2,4}$ trouvent \tilde{E}_n à 10^{-2} près, quand l’erreur pour Dirichlet est de 10^{-1} , et de l’ordre de 1 pour les conditions non linéarisées. On observe le même phénomène pour $n = 0$. Les conditions linéarisées semblent ainsi plus robustes à la réduction du domaine de calcul. De manière générale, les conditions aux limites artificielles donnent toujours des résultats au moins égaux à ceux obtenus avec la condition de Dirichlet et souvent nettement supérieurs en précision. Les conditions aux limites artificielles des différents ordres conduisent à des précisions tout à fait semblables avec toutefois un meilleur comportement des CLA de type racine carrée pour un surcoût lié au point fixe. Elles améliorent la condition de Dirichlet d’un facteur compris entre 10 et 10^3 selon la situation, avant que la zone de saturation ne soit atteinte. A partir d’une certaine valeur de x_r , toutes les conditions aux limites conduisent à la même précision, qui dépend uniquement du pas de discrétisation en espace. Pour le calcul des fonctions propres, cette valeur peut-être estimée à $x_r = 6$ dans le cas $n = 0$ et à $x_r = 6.5$ dans le cas $n = 4$. On remarque déjà que plus n augmente, et plus il faut augmenter x_r pour garder la même précision.

Pour confirmer cette observation, on compare la précision obtenue lorsque le domaine $\Omega =]-x_r; x_r[$ est fixé et qu’on fait varier n . On fixe $x_r = 4$ et pour $n \in [0, 10]$ on calcule l’erreur commise sur la valeur propre E_n en faisant le calcul sur Ω (figures 3.20) pour les approches « directe » et « boucle ». Il est très clair que la précision diminue lorsque n augmente, pour toutes les conditions aux limites pour la raison suivante. Les CLA ont été construites dans le cadre de la haute fréquence. Une traduction de cette hypothèse dans notre contexte est que l’on demande à ce que la propriété

$$E_n - V_r \ll 0 \quad (3.52)$$

soit vérifiée pour un point x_r donné et un potentiel V fixé. Par conséquent, cela limite un calcul précis des énergies sous la condition $E_n \ll x_r^2/2$ par exemple dans le cas harmonique. Dans la simulation proposée, fixer $x_r = 4$ conduit à $E_n \ll 8$, ce qui est conforme aux observations faites sur la figure 3.20.

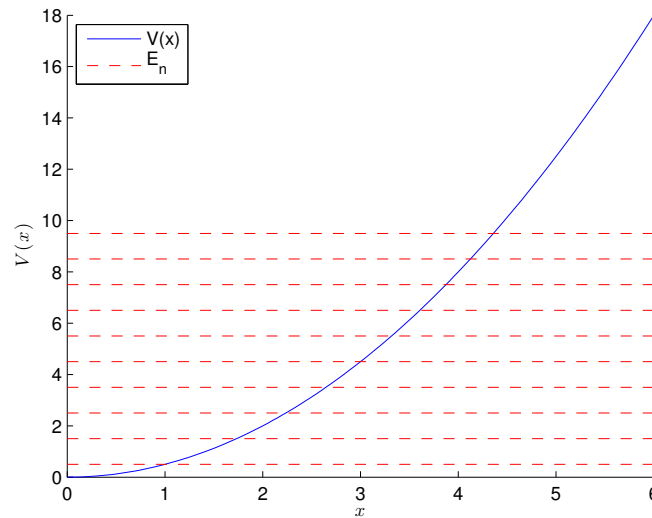


FIGURE 3.21 – Représentation du potentiel harmonique et des énergies E_n pour $0 \leq n \leq 9$.

Une autre façon de lire cette propriété est que, une augmentation de la précision et du domaine de calcul des valeurs propres doit être gérée par la relation (3.52) *a priori*. Pour visualiser cela, on représente figure 3.21 le potentiel V ainsi que les premières énergies E_n . On peut lire sur cette figure l'abscisse x à partir de laquelle $E - V$ devient négatif, et on peut se faire une idée de l'abscisse minimale x_r à choisir pour que l'écart entre E et $V(x_r)$ soit suffisant, dans le cadre de la relation (3.52). Par exemple, pour l'état fondamental $n = 0$, l'énergie associée E_0 est la courbe rouge de plus bas niveau. D'après l'intersection avec la courbe de $V(x)$, on lit que $E_0 - V(x)$ devient négatif pour $x \geq 1$, et on peut estimer que la différence d'ordre de grandeur entre E_0 et $V(x)$ sera suffisante à partir de $x \geq 2$ environ. Le retour à la figure 3.18 confirme ces valeurs, puisqu'en choisissant $x_r = 1$ le calcul est possible mais ne converge pas forcément vers E_0 , et avec $x_r = 2$, on obtient des approximations correctes de E_0 . On peut effectuer la même analyse pour $n = 4$ (cinquième courbe rouge à partir du bas). On lit alors que $E_4 - V(x)$ devient négatif à partir de $x \geq 3$, et « très négatif » à partir de $x \geq 4$, valeurs qu'on met en relation avec les courbes de la figure 3.19.

Sur cet exemple ($n = 4$), on remarque également que les conditions linéarisées sont plus précises que les conditions d'origine, elles apportent un facteur 10 en précision. Ce gain était également observable sur la figure 3.19 correspondant à l'état $n = 4$, particulièrement sur le calcul de la valeur propre. La précision obtenue pour $x_r \geq 4.5$ avec les conditions linéarisées est la même que pour les conditions non linéarisées, mais la linéarisation apporte un gain de précision sur les domaines plus petits, là où l'algorithme des conditions non linéarisées ne converge pas ($2 \leq x_r \leq 3$). De plus, notons que l'ensemble du calcul des valeurs propres est effectué simultanément dans le cas linéaire et sans itérer, ce qui est un gain en temps de calcul extrêmement important par rapport à l'approche « boucle ». Ceci montre l'intérêt crucial de la linéarisation. Par conséquent, il ressort ici que les conditions $SABC_{\text{lin}}^M$ sont, pour un coût de calcul similaire à la condition de Dirichlet, à privilégier pour des raisons de précision et/ou diminution de la taille du domaine de calcul. Notons aussi que le gain en précision par l'approche « boucle » est assez net sur la figure 3.19(a), mais pour un surcoût de calculs relativement important.

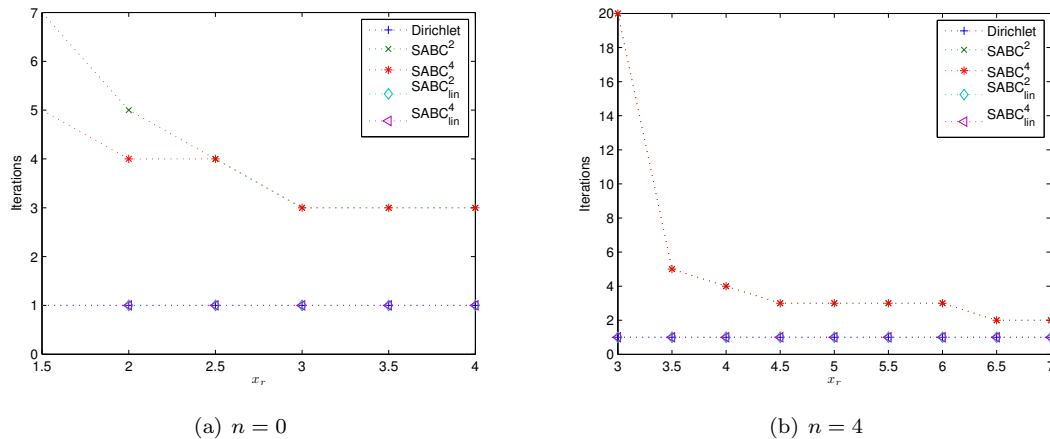


FIGURE 3.22 – Nombre d'itérations effectuées par les algorithmes associés aux différentes conditions aux limites, en fonction de x_r pour $n = 0$ et $n = 4$.

On souhaite ensuite comparer les performances respectives des conditions linéarisées et non linéarisées. Les courbes précédentes ont permis de comparer les deux types de conditions en terme de précision. Généralement, les conditions non linéarisées sont un peu meilleures, mais cela dépend grandement de l'état considéré ainsi que de la taille du domaine de calcul et de la manière de faire le calcul (« boucle » vs. « directe »). En terme de performance algorithmique, la différence fondamentale est que le problème associé aux conditions linéarisées est résolu de manière directe, alors que sans linéariser les conditions aux limites, on est obligé de passer par un schéma itératif. La figure 3.22 présente le nombre d'itérations effectuées lorsqu'on utilise les conditions $SABC^2$ et $SABC^4$, en fonction de x_r , dans deux situations : $n = 0$ et $n = 4$. Les figures 3.22(a) et 3.22(b) sont donc à mettre en relation avec les figures 3.18 et 3.19, qui sont leur équivalent en terme de précision. Pour la première valeur de x_r , on observe souvent que l'algorithme ne converge pas (le nombre maximal d'itérations du point fixe a été fixé à 20). C'est là l'intérêt des conditions linéarisées, puisque si on se reporte aux figures 3.18 et 3.19, elles permettent tout de même d'obtenir une valeur approchée, certes grossière, de la valeur propre. Pour x_r un tout petit peu plus grand, le nombre d'itérations du schéma reste aux alentours de 5. Enfin, lorsque la précision maximale est atteinte, l'algorithme effectue entre 2 et 3 itérations. Dans l'ensemble, les temps de calculs en utilisant les conditions non linéarisées sont donc environ cinq fois supérieurs aux temps de calculs nécessaires si on utilise les conditions linéarisées. En contrepartie, la précision obtenue est légèrement supérieure.

Enfin, on représente sur les figures 3.23 (associée à $n = 0$) et 3.24 (associée à $n = 4$) l'influence de la discrétisation sur la précision du calcul pour un domaine $]-x_r; x_r[$ donné. On fixe la valeur de x_r et on représente les courbes d'erreurs $|\Delta E|$ et $\|\Delta\phi\|_{L^2(\Omega)}$ en fonction du pas d'espace h , variant de $h = 5 \cdot 10^{-2}$ à $h = 1 \cdot 10^{-4}$. La valeur de x_r est choisie telle que la saturation n'a pas encore été atteinte, de sorte que les conditions aux limites artificielles apportent un gain de précision par rapport à la condition de Dirichlet. Ce qui est remarquable pour $n = 0$ (figure 3.23) est le fait que la précision obtenue avec les CLA augmente encore lorsqu'on raffine le maillage, alors qu'avec Dirichlet, en-deçà de $h = 10^{-2}$ il n'est plus possible de gagner en précision sans agrandir le domaine de calcul. En revanche pour les conditions artificielles (qui pour $h = 10^{-2}$ sont déjà bien plus précises que la

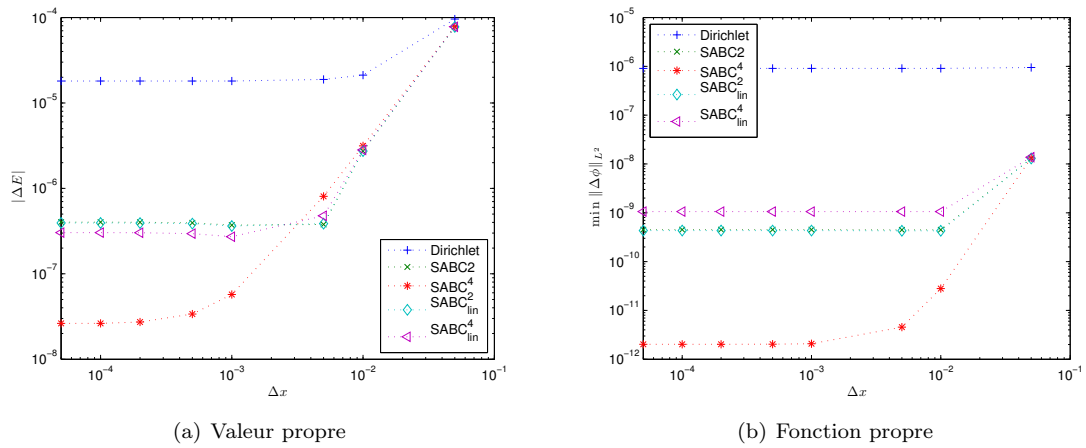


FIGURE 3.23 – Evolution de l'erreur lorsque $x_r = 3.5$ pour l'état fondamental $n = 0$, en fonction du pas h .

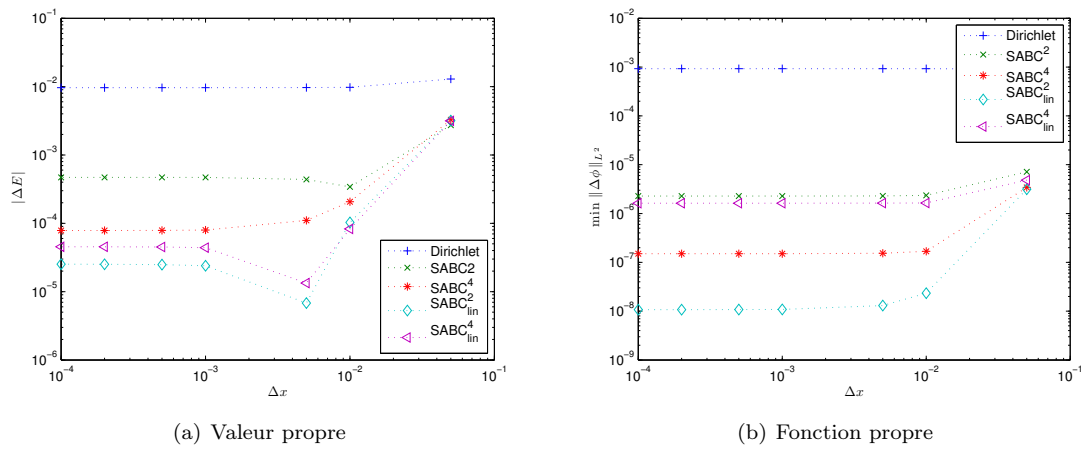


FIGURE 3.24 – Evolution de l'erreur lorsque $x_r = 4$ et $n = 4$, en fonction du pas h .

condition de Dirichlet), on peut encore gagner en précision en raffinant, surtout pour la condition $SABC^4$. Ce phénomène s'observe pour le calcul des valeurs propres comme des fonctions propres.

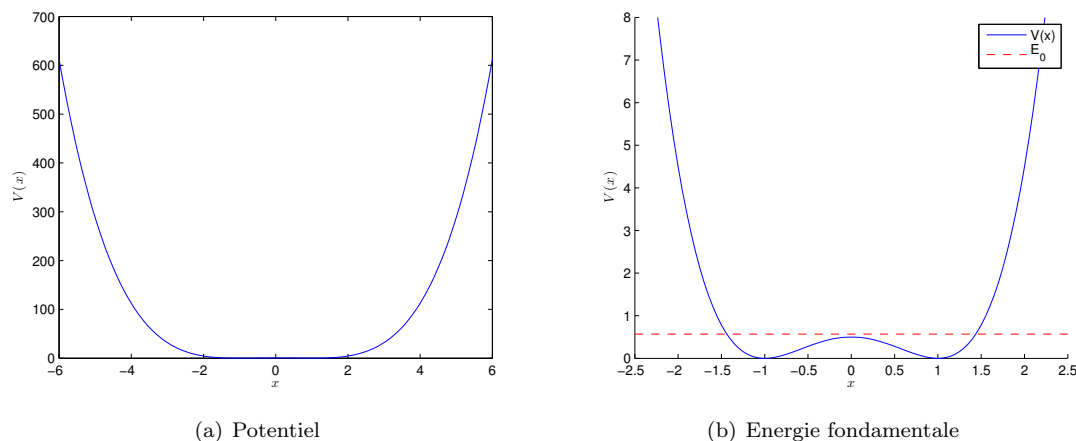


FIGURE 3.25 – Le potentiel « double-well » et son énergie fondamentale.

Potentiel « double-well »

Passons maintenant au cas d'autres potentiels. Commençons par le potentiel dit « double-well » qui s'écrit

$$V(x) = \frac{1}{2}(1 - x^2)^2 \quad (3.53)$$

et est représenté figure 3.25(a). Dans ce cadre, le coefficient α dans (3.29) vaut $\alpha = \frac{1}{2}$. Ce potentiel est étudié notamment dans [21], où il est mentionné que l'énergie de l'état fondamental est

$$E \approx 0.56889338. \quad (3.54)$$

Cette énergie fondamentale est représentée figure 3.25(b), superposée au potentiel. On peut y lire la condition haute-fréquence $E \ll (1 - x_r^2)^2/2$. Pour $x_r = 1.5$, on trouve $(1 - x_r^2)^2/2 \approx 0.78$ alors que $(1 - x_r^2)^2/2 = 4.5$ dans le cas $x_r = 2$. Il faudra donc choisir $x_r \geq 2$ pour le domaine de calcul afin d'obtenir une précision satisfaisante. On retrouve cette condition sur la figure 3.26, qui représente l'erreur commise sur le calcul de cette première valeur propre, pour chacune des conditions aux limites en fonction de la limite x_r du domaine de calcul. Comme pour le potentiel harmonique, on observe la décroissance de l'erreur lorsque la taille du domaine $] -x_r; x_r[$ croît. On peut observer que les CLA se rangent naturellement avec une précision nettement supérieure à celle obtenue avec Dirichlet, notamment pour les conditions linéarisées, et ceci pour un coût de calcul équivalent. Pour $x_r = 1.5$, on remarque que toutes les conditions conduisent à un calcul erroné de la valeur propre E . Cette erreur est corrigée dès $x_r = 2$, précisément lorsque la condition de haute fréquence est vérifiée.

Potentils de Pöschl-Teller, Woods-Saxon et Morse

Les trois potentiels que nous étudions à présent ont la propriété de conduire à des valeurs propres négatives. Tous ces exemples sont tirés de [82]. Une condition nécessaire pour effectuer les calculs précédents est de se placer dans la situation où

$$V(x_r) - E \geq 0. \quad (3.55)$$

Ainsi, selon n et le rang de la valeur propre que l'on cherche à calculer, il faudra choisir x_r suffisamment grand pour que la condition (3.55) soit réalisée. Cette fois, comme V prend des valeurs négatives et

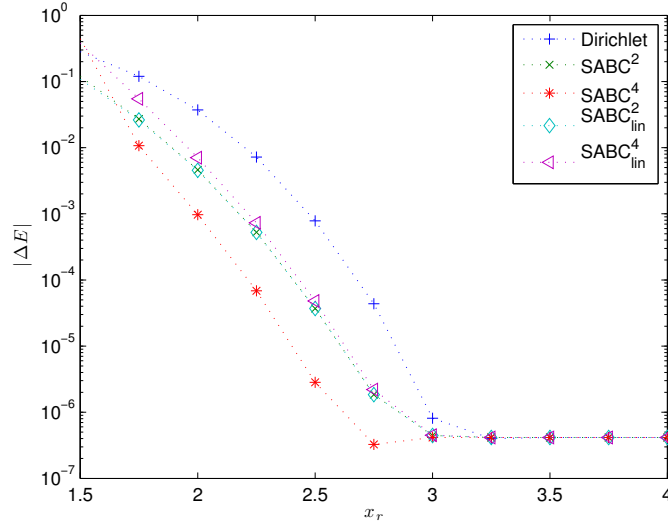


FIGURE 3.26 – Erreur sur la première valeur propre pour le potentiel « double-well » et $h = 10^{-3}$.

même si on a la relation $E \ll V$, linéariser les conditions $\text{SABC}^{2,4}$ en effectuant un développement de Taylor en E/V n'est plus judicieux puisque V peut s'annuler. On pose alors $V_{\min} = \min_{x \in \mathbb{R}} V(x)$, puis en utilisant la linéarité du problème, on définit un nouveau potentiel positif $W = V - V_{\min}$ et $F_n = E_n - V_{\min}$. Le problème (3.29)–(3.30) est alors équivalent à

$$-\alpha \phi_E'' + W \phi_E = F_n \phi_E. \quad (3.56)$$

Les conditions $\text{SABC}_{\text{lin}}^{2,4}$ sont donc les conditions linéarisées à partir de $\text{SABC}^{2,4}$ non plus en fonction de $1/V$, mais en fonction de $1/(V - V_{\min})$ en faisant l'hypothèse équivalente

$$E - V_{\min} \ll V - V_{\min}. \quad (3.57)$$

Potentiel de Pöschl-Teller

Le potentiel de Pöschl-Teller est donné par [82]

$$V(x) = -\frac{\lambda(\lambda + 1)}{\cosh^2(x)}, \quad (3.58)$$

et le coefficient $\alpha = 1$ dans (3.29). Ce potentiel intervient dans le domaine de la physique nucléaire. Il est toujours négatif. Il est représenté sur la figure 3.27(a). Pour $\lambda = 9$, il conduit à neuf valeurs propres

$$E_n = -(9 - n)^2, \quad 0 \leq n \leq 8. \quad (3.59)$$

Sur la figure 3.27(b), on représente ces différents niveaux d'énergie, comparés au potentiel (tracé pour x positif pour des questions de lisibilité). Pour tenir compte de la translation effectuée, on représente plutôt $V(x) - V_{\min}$ et $E_n - V_{\min}$. Pour un état propre donné, on peut estimer *a priori* la taille minimale du domaine de calcul à considérer pour que la condition de haute fréquence soit vérifiée et pour obtenir la convergence de l'algorithme. On choisit $h = 5 \cdot 10^{-4}$. On étudie à n fixé, $0 \leq n \leq 8$, l'évolution de l'erreur commise sur le calcul de E_n pour les différentes CLA, en fonction

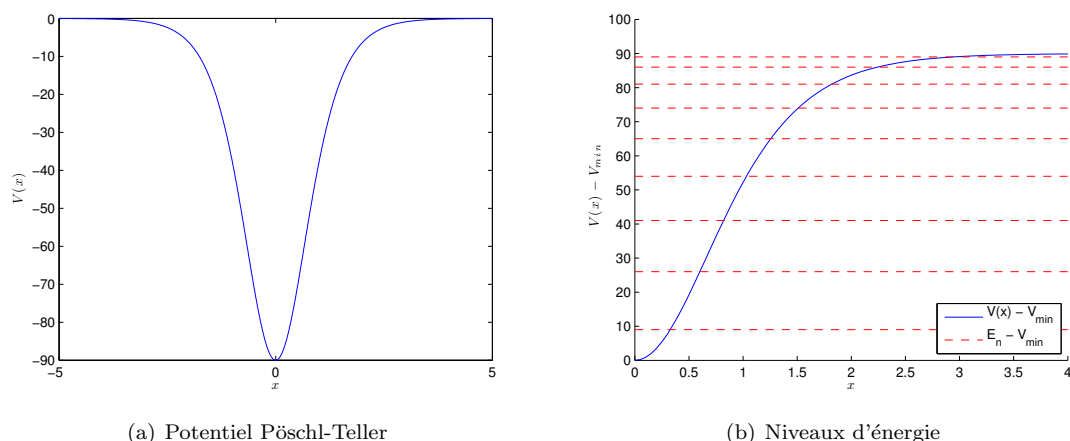


FIGURE 3.27 – Le potentiel Pöschl-Teller et ses neuf premiers niveaux d'énergie.

de la position x_r de la frontière du domaine symétrique $] -x_r; x_r[$. On représente sur la figure 3.28 les résultats pour $n = 0$, $n = 4$ et $n = 8$. On constate que les CLA améliorent toujours les résultats obtenus avec la condition de Dirichlet, parfois de manière spectaculaire. C'est pour n grand que la différence est la plus marquée. Pour $n = 8$, en effectuant le calcul sur $] -5; 5[$, la précision obtenue avec Dirichlet est inférieure à 10^{-2} , alors que pour les CLA SABC^{2,4} elle est de l'ordre de $5 \cdot 10^{-5}$. Pour obtenir cette précision avec la condition de Dirichlet, il faudrait choisir $x_r = 10$, ce qui conduit à un domaine de calcul deux fois plus grand. Ici, l'effet des conditions linéarisées est variable. Pour $n = 0$ les conditions SABC_{lin}^{2,4} sont presque aussi précises que les conditions SABC^{2,4}, mais lorsque n augmente, elles semblent se rapprocher de la condition de Dirichlet.

Pour ce même potentiel, on observe encore l'évolution de l'erreur à x_r fixé pour l'ensemble des états propres E_n (figure 3.29). Pour $x_r = 2$, on remarque un écart d'un facteur 10 à 100 entre la condition de Dirichlet et les CLA pour les états correspondants aux valeurs $2 \leq n \leq 6$. Les CLA d'ordres deux et quatre quant à elles sont visiblement équivalentes. En $x_r = 4$, toutes les conditions sont équivalentes pour les premiers états propres, mais lorsque n augmente, les CLA conservent leur précision lorsque la condition de Dirichlet devient moins précise ($n = 6$, $n = 7$) puis donnent encore une approximation à 10^{-3} près de la valeur propre, lorsque celle associée à la condition de Dirichlet ne l'approche plus qu'à 10^{-1} près ($n = 8$).

Potentiel de Woods-Saxon

Le potentiel de Woods-Saxon est défini par

$$V(x) = c_0 z(x) [1 - a(1 - z(x))], \quad x \in [0, +\infty[, \quad (3.60)$$

avec

$$z(x) = \frac{1}{e^{a(x-b)} + 1},$$

et les paramètres $c_0 = -50$, $a = 5/3$, $b = 7$. Le coefficient α dans (3.29) est cette fois égal à 1. Pour ce potentiel, les 14 premières valeurs propres de H sont strictement négatives, et des valeurs approchées

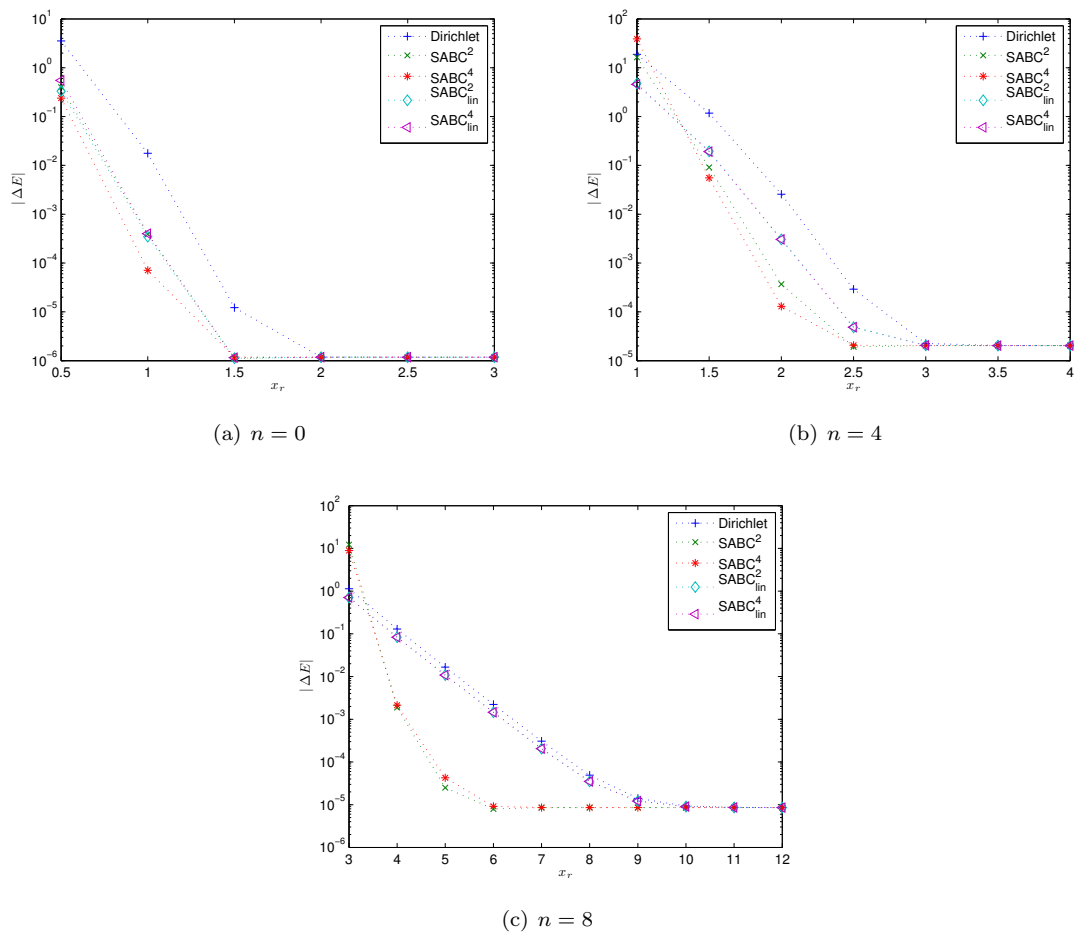


FIGURE 3.28 – Variation de l'erreur sur les valeurs propres en fonction des différents types de CLA pour le potentiel de Pöschl-Teller.

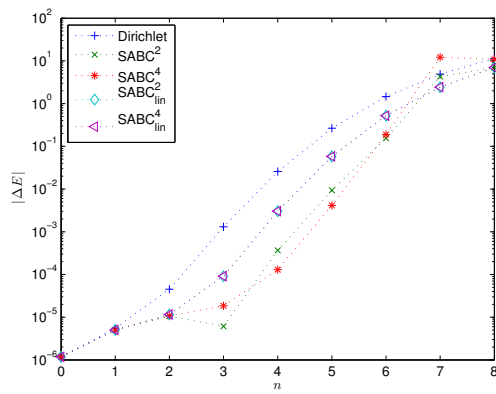
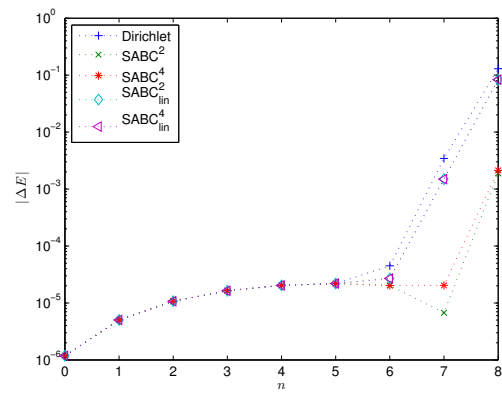
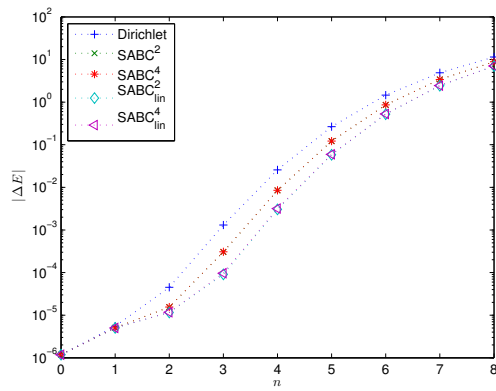
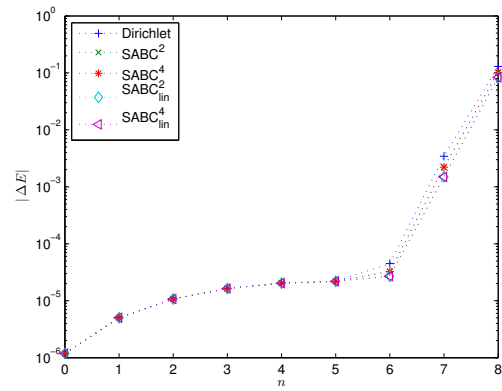
(a) $x_r = 2$ (boucle)(b) $x_r = 4$ (boucle)(c) $x_r = 2$ (directe)(d) $x_r = 4$ (directe)

FIGURE 3.29 – Erreur sur le calcul des valeurs propres sur le domaine $[-x_r; x_r]$, en fonction de n , pour le potentiel de Pöschl-Teller.

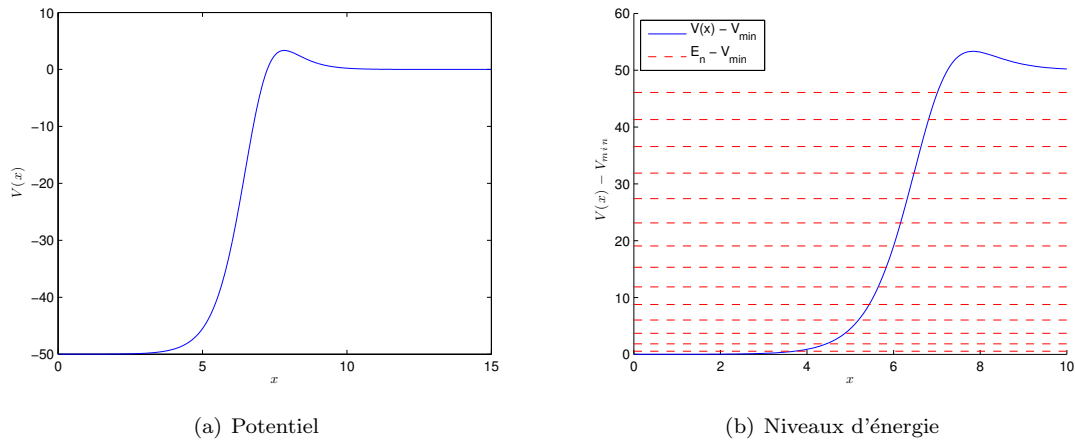


FIGURE 3.30 – Le potentiel de Woods-Saxon et ses niveaux d'énergie.

à 10^{-15} près sont données par [82]

$$\begin{aligned}
 E_1 &= -49.457788728082580 \\
 E_2 &= -48.148430420006361 \\
 E_3 &= -46.290753954466088 \\
 E_4 &= -43.968318431814233 \\
 E_5 &= -41.232607772180218 \\
 E_6 &= -38.122785096727920 \\
 E_7 &= -34.672313205699651 \\
 E_8 &= -30.912247487908848 \\
 E_9 &= -26.873448916059872 \\
 E_{10} &= -22.588602257693220 \\
 E_{11} &= -18.094688282124421 \\
 E_{12} &= -13.436869040250077 \\
 E_{13} &= -8.676081670736546 \\
 E_{14} &= -3.908232481206230
 \end{aligned}$$

Le potentiel de Woods-Saxon est défini uniquement pour des valeurs positives de x . Le calcul des valeurs propres s'effectue donc sur un domaine non symétrique $[0; x_r]$. En $x_\ell = 0$, on utilise une condition de Dirichlet homogène $\phi(0) = 0$. On représente ce potentiel sur la figure 3.30, ainsi que ses niveaux d'énergie $E_n - V_{\min}$, comparés à $V(x) - V_{\min}$.

Sur la figure 3.31, on représente, pour deux états propres $n = 3$ et $n = 14$, l'erreur sur le calcul des valeurs propres lorsqu'on déplace la frontière droite x_r . La discrétisation utilisée est $h = 5 \cdot 10^{-4}$. Indépendamment de l'état propre considéré, les CLA améliorent bien les résultats donnés par la condition de Dirichlet. Pour $n = 3$, la CLA d'ordre quatre semble conduire à une plus grande précision que la CLA d'ordre deux. Cependant, l'état $n = 14$ ne confirme pas vraiment ce fait. Quant aux conditions linéarisées, leur effet est variable. Pour $n = 3$, les conditions linéarisées d'ordre fixé

coïncident avec les conditions non linéarisées du même ordre. Linéariser ou non serait équivalent (en termes de précision). Pour $n = 14$ en revanche, les conditions linéarisées sont tout juste un peu meilleures que la condition de Dirichlet, et bien moins bonnes que les conditions non linéarisées. Le point extrême $x_r = 7$ fait cependant exception, puisque pour cette valeur de x_r l'algorithme associé aux conditions non linéarisées ne converge pas, alors que les conditions linéarisées donnent une valeur approchée de E_{14} à 0.5 près.

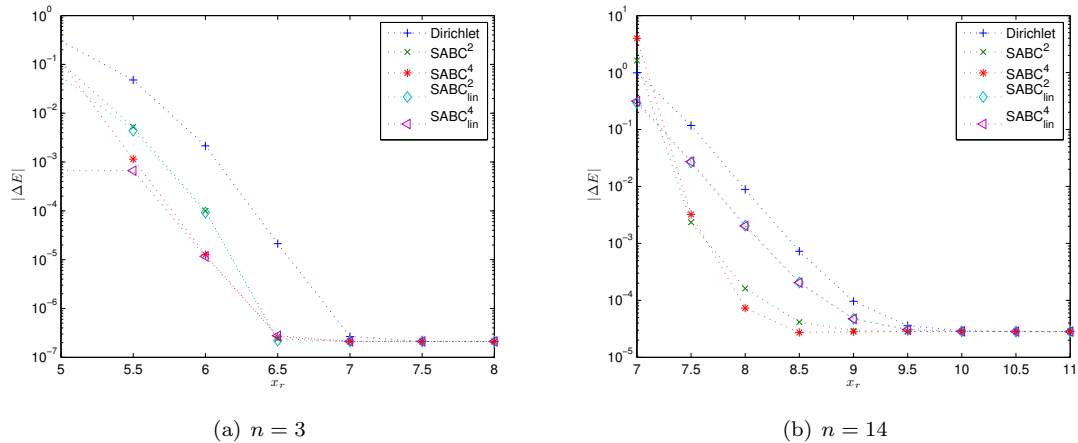


FIGURE 3.31 – L'étude du potentiel de Woods-Saxon en fonction de x_r , à n fixé.

Comme précédemment, on étudie aussi l'écart de précision entre les conditions aux limites pour un domaine donné en fonction de l'état propre considéré. La figure 3.32 représente cette évolution de l'erreur en fonction de n , le domaine $[0; x_r]$ étant fixé. Ces courbes confirment les observations précédentes, notamment l'amélioration de la précision lorsqu'on utilise les CLA. De plus, la condition d'ordre quatre conduit à une précision toujours au moins supérieure à la condition d'ordre deux, ce qui est observable en particulier en $x_r = 6$ puisqu'elle améliore la condition d'ordre deux d'un facteur 10, pour le calcul de presque tous les états propres. Ces calculs sont effectués pour l'approche « boucle ». Les CLA linéarisées donnent une amélioration nette de la précision obtenue avec Dirichlet pour un coût équivalent.

Potentiel de Morse

Pour finir, le potentiel de Morse est défini par [82]

$$V(x) = D_e \left[(1 - e^{-\beta(x-x_e)})^2 - 1 \right], \quad (3.61)$$

avec $\alpha = 1$ dans l'équation (3.29). La constante D_e est appelée énergie de dissociation, x_e est la valeur propre d'équilibre internucléique et β est un paramètre d'ajustement. Les valeurs numériques sont $D_e = 605559/1000$, $x_e = 240873/100000$, $\beta = 988879/1000000$. La n -ième valeur propre exacte est donnée par

$$E_n = -\beta^2 \left(\frac{\sqrt{D_e}}{\beta} - \left(n - \frac{1}{2} \right) \right)^2, \quad n \geq 1. \quad (3.62)$$

Ce potentiel et ses niveaux d'énergie sont donnés figure 3.33.

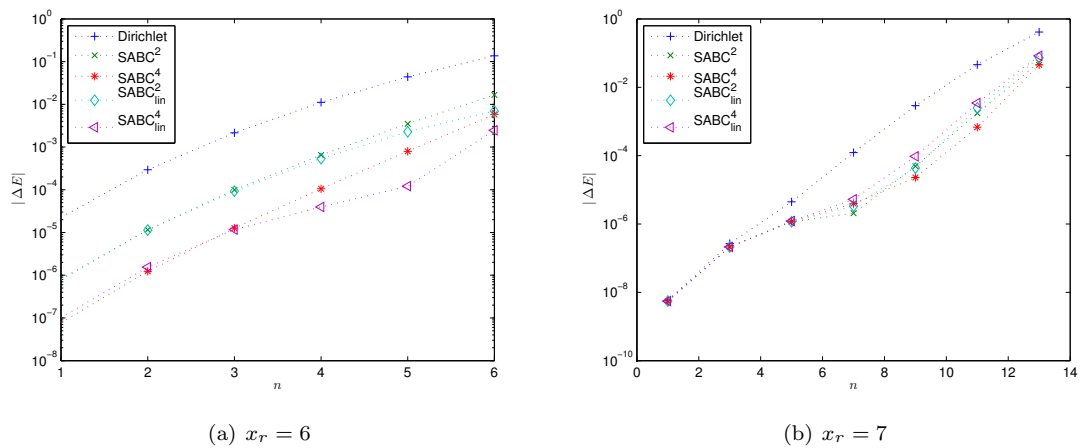


FIGURE 3.32 – L'étude du potentiel de Woods-Saxon en fonction de n , à x_r fixé (boucle).

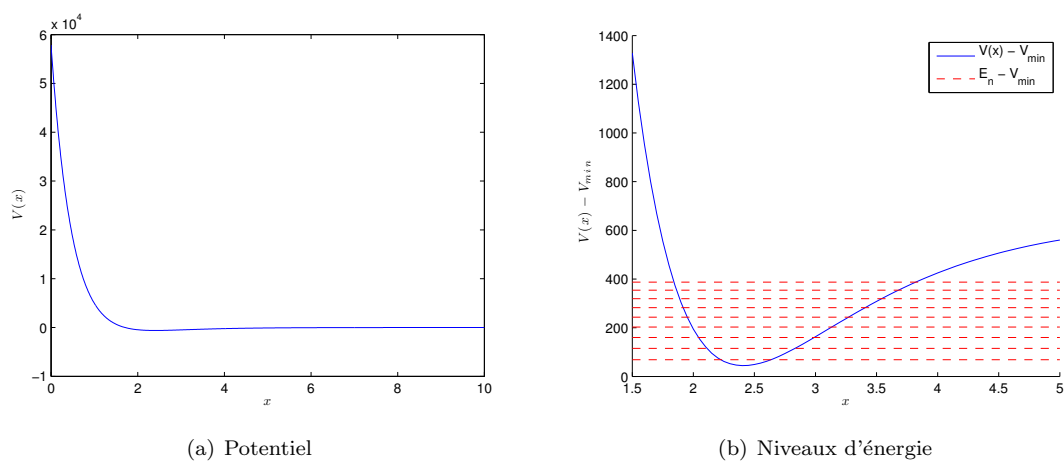
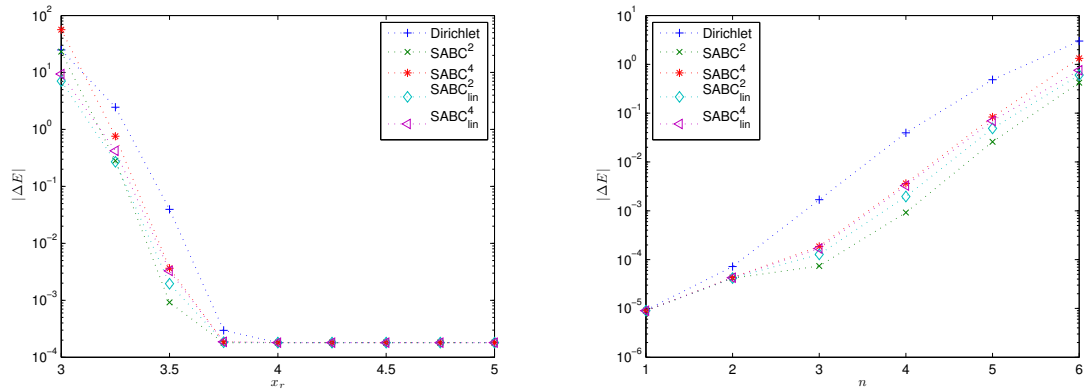


FIGURE 3.33 – Le potentiel de Morse et ses niveaux d'énergie.



(a) Etude en fonction de x_r , pour $n = 4$

(b) Etude en fonction de n , pour $x_r = 3,5$ (boucle)

FIGURE 3.34 – L'étude du potentiel de Morse.

Pour l'étude numérique, on choisit $h = 5 \cdot 10^{-4}$ et on trace les courbes d'erreur en fonction de x_r (figure 3.34(a)) ou en fonction de n (figure 3.34(b)). Pour ce potentiel, les écarts sont moins marqués que dans d'autres exemples, l'approche étant l'approche « boucle » pour les CLA SABC^{2,4}. Néanmoins les CLA restent toujours plus précises que la condition de Dirichlet, d'un facteur 10 voire 100 dans les zones où elles se démarquent bien. On peut remarquer que ceci est vrai notamment pour les CLA linéarisées. La visualisation des niveaux d'énergie figure 3.33 permet à nouveau de savoir quelle est la taille minimale du domaine de calcul à considérer.

3.5 Application au calcul d'états stationnaires : le cas non linéaire

3.5.1 Problème et schéma numérique

Nous nous intéressons à présent au calcul d'états stationnaires dans le cas non linéaire. Plus particulièrement, nous considérons un potentiel non linéaire qui est la somme d'une non linéarité cubique et d'un potentiel harmonique. Ce type de non linéarité intervient notamment dans l'étude des condensats de Bose-Einstein. Après adimensionnement, l'équation dite de Gross-Pitaevskii unidimensionnelle s'écrit [21, 22]

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\partial_x^2\psi + V\psi + \beta|\psi|^2\psi, \quad (3.63)$$

avec $V(x) = \frac{1}{2}x^2$ et où la constante β de la non linéarité peut prendre des valeurs positives ou négatives. Nous nous restreignons ici à ce type de non linéarité et potentiel mais la théorie développée précédemment s'adapte directement à d'autres potentiels et/ou non linéarités. En vue de la recherche des solutions stationnaires, on écrit

$$\psi(x, t) = e^{-iEt}\phi_E(x), \quad (3.64)$$

où E est le potentiel chimique du condensat et ϕ_E une fonction réelle indépendante du temps. La fonction ϕ_E est alors solution de l'équation

$$-\alpha\partial_x^2\phi_E + V\phi_E + \beta|\phi_E|^2\phi_E = E\phi_E, \quad (3.65)$$

dans laquelle $\alpha = \frac{1}{2}$, sous la contrainte de normalisation

$$\|\phi_E\|_{L^2(\mathbb{R})} = 1. \quad (3.66)$$

Enfin, la fonction ϕ_E du problème (3.65)–(3.66) vérifie les conditions aux limites $\phi_E'(0) = 0$ et $\phi_E(\pm x) \rightarrow 0$ quand $x \rightarrow +\infty$. Le système résultant est un problème aux valeurs propres non linéaire sous contrainte. La fonction propre ϕ_E étant connue, on peut déterminer la valeur propre associée E par la relation

$$E = \int_{\mathbb{R}} \alpha|\partial_x\phi_E|^2 + V\phi_E^2 + \beta\phi_E^4 dx. \quad (3.67)$$

Le problème (3.65)–(3.66) est résolu sur un domaine borné symétrique $\Omega =]-R; R[$, avec $R > 0$ et $\Sigma = \{-R; R\}$. Nous continuons à noter ce domaine $\Omega =]-x_\ell; x_r[$ par commodité. On note (E^0, ϕ^0) un couple solution du problème en domaine borné avec condition aux limites de Dirichlet

$$\begin{cases} -\alpha\partial_x^2\phi_E + V\phi_E + \beta|\phi_E|^2\phi_E = E\phi_E, & \text{dans } \Omega, \\ \phi_E = 0, & \text{sur } \Sigma, \\ \|\phi_E\|_{L^2(\Omega)} = 1. \end{cases} \quad (3.68)$$

De manière analogue, on note (E^M, ϕ^M) une solution calculée avec une CLA non linéaire d'ordre M obtenue à partir des conditions aux limites du stationnaire décrites en (3.6)–(3.7). Pour cela, on remplace le potentiel V par le nouveau potentiel avec non linéarité $V + \beta|\phi|^2$ pour obtenir à l'ordre deux

$$\partial_n\phi_E = \frac{i}{\sqrt{\alpha}}\sqrt{E - V - \beta|\phi_E|^2}\phi_E, \quad \text{sur } \Sigma, \quad (3.69)$$

et à l'ordre quatre

$$\partial_{\mathbf{n}}\phi_E = \frac{i}{\sqrt{\alpha}}\sqrt{E - V - \beta|\phi_E|^2}\phi_E + \frac{1}{4}\frac{\partial_{\mathbf{n}}(V + \beta|\phi_E|^2)}{E - V - \beta|\phi_E|^2}\phi_E, \quad \text{sur } \Sigma. \quad (3.70)$$

Pour ne pas noyer le lecteur dans des notations trop lourdes, nous désignons par SABC^M la condition d'ordre M ci-dessus.

L'équation intérieure est discrétisée par le schéma semi-implicite en temps

$$-\alpha\partial_x^2\phi^{M,j+1} + V\phi^{M,j+1} + \beta|\phi^{M,j}|^2\phi^{M,j+1} = E^{M,j+1}\phi^{M,j+1}, \quad (3.71)$$

pour $j \geq 0$ et $M = 0, 2, 4$. Cette fois, indépendamment de la condition aux limites, l'algorithme est itératif puisque le schéma intérieur est non linéaire. On utilisera donc systématiquement l'algorithme de point fixe sur la n -ième valeur propre E_n^M et fonction propre ϕ_n^M pour résoudre le problème aux valeurs propres. La formulation variationnelle s'écrit alors

$$\begin{aligned} -\alpha[\partial_{\mathbf{n}}\phi_n^{M,j+1}\psi]_{x_\ell}^{x_r} + \alpha \int_{\Omega} \partial_x \phi_n^{M,j+1} \partial_x \psi dx + \int_{\Omega} V \phi_n^{M,j+1} \psi dx + \beta \int_{\Omega} |\phi_n^{M,j}|^2 \phi_n^{M,j+1} \psi dx \\ = E_n^{M,j+1} \int_{\Omega} \phi_n^{M,j+1} \psi dx, \end{aligned} \quad (3.72)$$

pour une fonction-test ψ donnée. Dans le cas du problème de Dirichlet, en choisissant $\psi \in H_0^1(\Omega)$, ce qui annule le premier terme de l'équation ci-dessus, le problème discret s'écrit alors, pour $M = 0$,

$$\begin{cases} \left(\alpha \mathbb{S}^0 + \mathbb{M}_V^0 + \beta \mathbb{M}_{|\phi_n^{M,j}|^2}^0 \right) \phi_n^{M,j+1} = E_n^{M,j+1} \mathbb{M}^0 \phi_n^{M,j+1}, \\ \left\| \mathbb{M}^0 \phi_n^{M,j+1} \right\|_2 = 1 \end{cases} \quad (3.73)$$

où $\|\cdot\|_2$ désigne ici la norme euclidienne dans \mathbb{C}^{n_h+1} . Pour les CLA, on utilise pour $\partial_{\mathbf{n}}\phi_n^{M,j+1}$ la version de type point fixe

$$\partial_{\mathbf{n}}\phi_n^{M,j+1} = \frac{i}{\sqrt{\alpha}}\sqrt{E_n^{M,j} - V - \beta|\phi_n^{M,j}|^2}\phi_n^{M,j+1} \quad (3.74)$$

pour la condition d'ordre deux, et

$$\partial_{\mathbf{n}}\phi_n^{M,j+1} = \left(\frac{i}{\sqrt{\alpha}}\sqrt{E_n^{M,j} - V - \beta|\phi_n^{M,j}|^2} + \frac{1}{4}\frac{\partial_{\mathbf{n}}(V + \beta|\phi_n^{M,j}|^2)}{E_n^{M,j} - V - \beta|\phi_n^{M,j}|^2} \right) \phi_n^{M,j+1} \quad (3.75)$$

pour la condition d'ordre quatre. Ainsi, le terme $-\alpha[\partial_{\mathbf{n}}\phi_n^{M,j+1}\psi]_{x_\ell}^{x_r}$ conduit, d'un point de vue discret, à une contribution matricielle $\mathbb{B}_M^j \phi_n^{M,j+1}$ pour la condition d'ordre M , où les coefficients de la matrice \mathbb{B}_M^j ne dépendent que des valeurs de $\phi_n^{M,j}$ et $E_n^{M,j}$. Le schéma itératif s'écrit par itération du point fixe sur la n -ième valeur propre E_n^M et vecteur propre ϕ_n^M

$$\begin{cases} \left(\alpha \mathbb{S} - \alpha \mathbb{B}^{M,j} + \mathbb{M}_V + \beta \mathbb{M}_{|\phi_n^{M,j}|^2} \right) \phi_n^{M,j+1} = E_n^{M,j+1} \mathbb{M} \phi_n^{M,j+1} \\ \left\| \mathbb{M} \phi_n^{M,j+1} \right\|_2 = 1. \end{cases} \quad (3.76)$$

Les coefficients de la matrice $\mathbb{B}^{M,j}$ sont donnés par

$$(\mathbb{B}^{M,j})_{1,1} = \frac{i}{\sqrt{\alpha}}\sqrt{E_n^{M,j} - V_\ell - \beta|\phi_{n,\ell}^{M,j}|^2} + \frac{1}{4}\frac{\partial_{\mathbf{n}}(V + \beta|\phi_n^{M,j}|^2)|_{x=x_\ell}}{E_n^{M,j} - V_\ell - \beta|\phi_{n,\ell}^{M,j}|^2} \quad (3.77)$$

et

$$(\mathbb{B}^{M,j})_{n_h+1, n_h+1} = \frac{i}{\sqrt{\alpha}} \sqrt{E_n^{M,j} - V_r - \beta |\phi_{n,r}^{M,j}|^2} + \frac{1}{4} \frac{\partial_{\mathbf{n}}(V + \beta |\phi_n^{M,j}|^2)|_{x=x_r}}{E_n^{M,j} - V_r - \beta |\phi_{n,r}^{M,j}|^2} \quad (3.78)$$

pour SABC⁴ ($M = 4$). Pour SABC² ($M = 2$), il suffit de ne retenir que le premier terme de chacune des deux expressions précédentes. Nous avons noté ci-dessus : $\phi_{n,\ell}^{M,j} = \phi_{n,|x=x_\ell}^{M,j}$ et $\phi_{n,r}^{M,j} = \phi_{n,|x=x_r}^{M,j}$.

Comme dans le cas linéaire, on peut aussi écrire les versions linéarisées des conditions aux limites d'ordres deux et quatre. Ces conditions sont alors notées SABC_{lin}^{2,4}. Nous avons

$$\partial_{\mathbf{n}} \phi_n^{M,j+1} = -\frac{\sqrt{V}}{\sqrt{\alpha}} \phi_n^{M,j+1} - \frac{\beta}{2} \frac{1}{\sqrt{\alpha}\sqrt{V}} |\phi_n^{M,j}|^2 \phi_n^{M,j+1} + \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\alpha}\sqrt{V}} E_n^{M,j+1} \phi_n^{M,j+1} \quad (3.79)$$

pour la condition d'ordre deux et

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}} \phi_n^{M,j+1} &= -\frac{\sqrt{V}}{\sqrt{\alpha}} \phi_n^{M,j+1} - \frac{\beta}{2} \frac{1}{\sqrt{\alpha}\sqrt{V}} |\phi_n^{M,j}|^2 \phi_n^{M,j+1} + \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\alpha}\sqrt{V}} E_n^{M,j+1} \phi_n^{M,j+1} \\ &+ \left(-\frac{1}{4} \frac{\partial_{\mathbf{n}}(V + \beta |\phi_n^{M,j}|^2)}{V} + \frac{\beta}{4} \frac{|\phi_n^{M,j}|^2 \partial_{\mathbf{n}}(V + \beta |\phi_n^{M,j}|^2)}{V^2} \right) \phi_n^{M,j+1} - E_n^{M,j+1} \frac{\partial_{\mathbf{n}}(V + \beta |\phi_n^{M,j}|^2)}{V^2} \phi_n^{M,j+1} \end{aligned} \quad (3.80)$$

pour la condition d'ordre quatre. Le schéma itératif s'écrit alors

$$\begin{cases} \left(\alpha \mathbb{S} - \alpha \mathbb{B}^{M,j} + \mathbb{M}_V + \beta \mathbb{M}_{|\phi_n^{M,j}|^2} \right) \phi_n^{M,j+1} = E_n^{M,j+1} \left(\mathbb{M} + \alpha \mathbb{B}_{E,M}^j \right) \phi_n^{M,j+1} \\ \left\| \mathbb{M} \phi_n^{M,j+1} \right\|_2 = 1. \end{cases} \quad (3.81)$$

Les coefficients des matrices $\mathbb{B}^{M,j}$ et $\mathbb{B}_E^{M,j}$ sont donnés par

$$(\mathbb{B}^{M,j})_{1,1} = -\frac{\sqrt{V_\ell}}{\sqrt{\alpha}} - \frac{\beta}{2} \frac{1}{\sqrt{\alpha}\sqrt{V_\ell}} |\phi_{n,\ell}^{M,j}|^2 - \frac{1}{4} \frac{\partial_{\mathbf{n}}(V_\ell + \beta |\phi_{n,\ell}^{M,j}|^2)}{V_\ell} + \frac{\beta}{4} \frac{|\phi_{n,\ell}^{M,j}|^2 \partial_{\mathbf{n}}(V_\ell + \beta |\phi_{n,\ell}^{M,j}|^2)}{V_\ell^2} \quad (3.82)$$

et

$$(\mathbb{B}_E^{M,j})_{1,1} = \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\alpha}\sqrt{V_\ell}} - \frac{\partial_{\mathbf{n}}(V_\ell + \beta |\phi_{n,\ell}^{M,j}|^2)}{V_\ell^2} \quad (3.83)$$

pour la condition d'ordre quatre. L'expression des coefficients d'indice $(n_h + 1, n_h + 1)$ est tout à fait analogue en prenant les valeurs en $x = x_r$. Enfin, on en extrait aisément les coefficients associés à la condition d'ordre deux en ne gardant que le premier terme de chaque expression.

Cette fois cependant, le bénéfice en terme de temps de calculs est moindre, puisque l'algorithme, même avec une condition aux limites de Dirichlet, est non linéaire par nature et donc résolu par un point fixe (boucle). La non linéarité des conditions aux limites SABC^M n'ajoutant pas de complexité supplémentaire, leur linéarisation ne simplifie donc pas l'algorithme. Néanmoins, nous mettons par la suite les résultats issus de ces conditions car elles peuvent conduire dans certains cas à une bonne précision, même comparativement à SABC^M.

Remarque 3.3. La condition de normalisation (3.66)

$$\int_{\mathbb{R}} |\phi_n|^2 dx = 1$$

est en fait prise en compte dans l'algorithme sous la forme

$$\int_{\Omega} |\phi_n|^2 dx = 1,$$

dont la valeur peut être sensiblement différente si ϕ_n ne décroît pas très lentement ou si on restreint beaucoup le domaine de calcul Ω . Si cette différence de normalisation n'avait pas d'influence dans le cas linéaire, la fonction propre pouvant être renormalisée sans perturber le problème, ce n'est plus le cas en non linéaire car le potentiel s'en trouve modifié, et par conséquent la solution. Pour pallier ce problème, une idée consisterait à obtenir un développement asymptotique de la fonction propre ϕ_n , de manière à estimer au plus près la valeur θ de l'intégrale

$$\theta = \left(\int_{\Omega} |\phi_n|^2 dx \right)^{1/2},$$

et à transformer alors la contrainte de masse de l'algorithme sous la forme

$$\left\| \mathbb{M}\phi_n^{M,j+1} \right\|_2 = \theta.$$

3.5.2 Résultats numériques

Nous considérons l'équation (3.65) pour différents paramètres β . Pour chaque valeur, nous cherchons à déterminer uniquement l'état fondamental $n = 0$. L'allure des fonctions propres en fonction de β est donnée sur la figure 3.35.

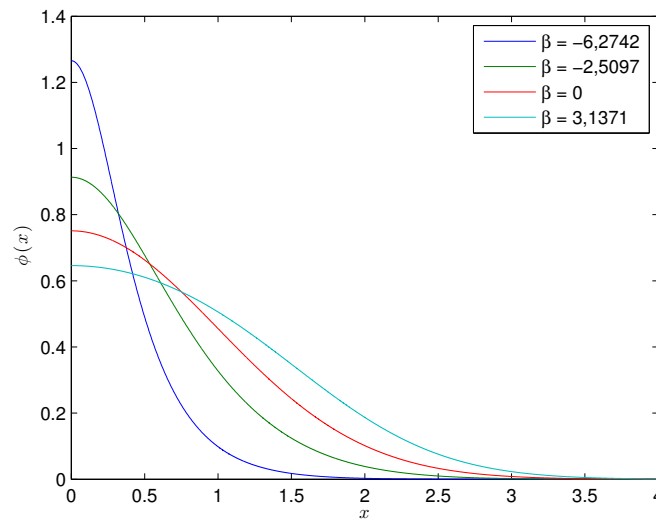


FIGURE 3.35 – Allure des fonctions propres (pour $x_r = 4$).

D'après [22], nous avons les références reportées dans la table 3.1. Toutefois, la précision de ces valeurs étant limitée, il est nécessaire d'obtenir des valeurs de référence plus précises. Pour cela, on les recalcule numériquement sur le domaine $] -30; 30[$, avec un pas de discrétisation égal à $h = 10^{-4}$ et la condition aux limites SABC² (3.70). Cette méthode fournit de nouvelles références numériques reportées dans le tableau 3.2 (après troncature à 15 chiffres) et conformes à celles de la table 3.1. Il est à noter que nous ne donnons aucun résultat pour des valeurs de β plus grandes. En effet, l'algorithme de point fixe ne converge plus alors. Il est ainsi nécessaire dans ce type de situation de trouver un autre algorithme numérique (par exemple Newton ou une méthode de continuation) pour résoudre le problème avec CLA. Enfin, par la suite, nous représentons les erreurs absolues : $\Delta E = |E^{\text{num}} - E^{\text{ref}}|$

et $\Delta\phi(0) = |\phi^{\text{num}}(0) - \phi^{\text{ref}}(0)|$, où ref fait référence aux valeurs de la table 3.2 et num à celles calculées avec une méthode numérique.

β	$\phi_E(0)$	E
-12.5484	1.7718	-19.669
-6.2742	1.2654	-4.9553
-2.5097	0.9132	-0.8061
0	0.7511	0.5000
3.1371	0.6459	1.5265

TABLE 3.1 – Valeurs numériques de référence E^{ref} et $\phi_E^{\text{ref}}(0)$ données par [22] selon différentes valeurs de β .

β	$\phi_E(0)$	E
-12.5484	1.772437368515101	-19.693047803006280
-6.2742	1.265512713848083	-4.956873352670034
-2.5097	0.913230941756339	-0.806257128073956
0	0.751125544464943	0.500000000000000
3.1371	0.645961493829006	1.526594842533555

TABLE 3.2 – Valeurs numériques de référence pour E^{ref} et $\phi_E^{\text{ref}}(0)$ calculées sur un grand domaine selon différentes valeurs de β .

Pour les simulations, l'initialisation de l'algorithme de point fixe est effectuée avec la solution exacte du cas linéaire ($\beta = 0$), c'est-à-dire la première fonction propre du potentiel harmonique, qui vaut

$$\phi_0^{M,0}(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-x^2/2}.$$

La tolérance du point fixe est $\varepsilon = 10^{-12}$. Le pas d'espace de la méthode d'éléments finis linéaires est $h = 10^{-3}$. Les figures 3.36, 3.37 et 3.38 représentent l'évolution de l'erreur commise sur la valeur propre et sur la valeur de la fonction propre à l'origine en fonction de x_r , pour $\beta = -6.2742$, $\beta = -2.5097$ et $\beta = 3.1371$ respectivement.

De manière générale, on note que, pour un cas test donné, tous les algorithmes convergent avec pratiquement le même nombre d'itérations, indépendamment de la condition aux limites choisie. On observe parfois une variation d'une itération en plus ou en moins sur le tout premier point de calcul ($x_r = 1.5$ par exemple pour $\beta < 0$). On remarque également que, pour les valeurs négatives de β , les conditions linéarisées n'apportent rien par rapport aux conditions non linéarisées (non reportées). Elles convergent avec le même nombre d'itérations, et les conditions linéarisées d'ordre M conduisent à la même précision que les conditions non linéarisées d'ordre M . Sur les figures 3.36 et 3.37, on ne représente donc que la condition de Dirichlet et les conditions SABC^{2,4}. En revanche, pour le seul exemple de $\beta > 0$ dans lequel le calcul aboutisse (figure 3.38), les conditions linéarisées semblent au moins égales aux conditions non linéarisées, voire meilleures. Dans ce cas, on les compare donc avec les autres conditions. Nous n'avons jusqu'à présent aucune explication sur le fait que la linéarisation améliore *a priori* la précision.

Pour $\beta = -6.2742$ (figure 3.36), tous les algorithmes convergent en 23 itérations. Sur le calcul de la première valeur propre, les CLA améliorent la condition de Dirichlet d'un facteur 10 lorsqu'on choisit $x_r = 1.5$, et presque 100 lorsque $x_r = 2$, puis pour $x_r \geq 2.5$, toutes les conditions saturent à

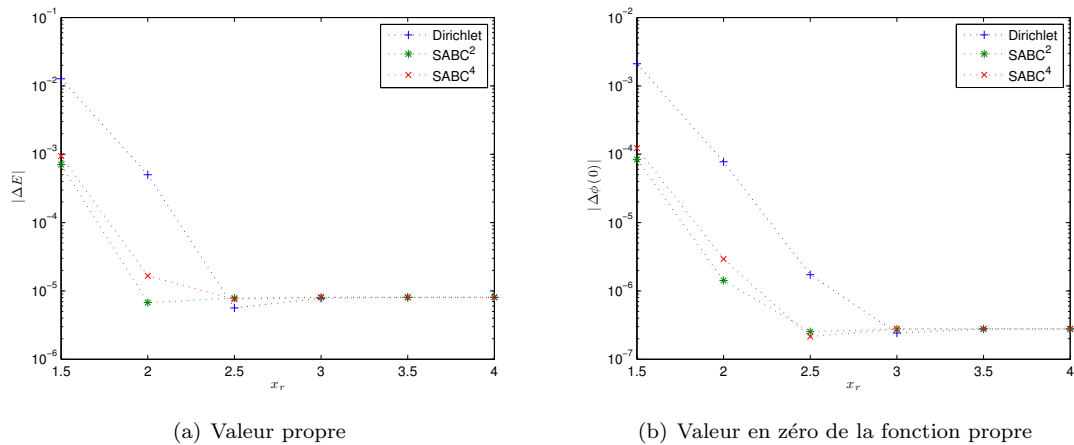


FIGURE 3.36 – Erreurs sur ΔE et $\Delta\phi(0)$ pour $\beta = -6.2742$.

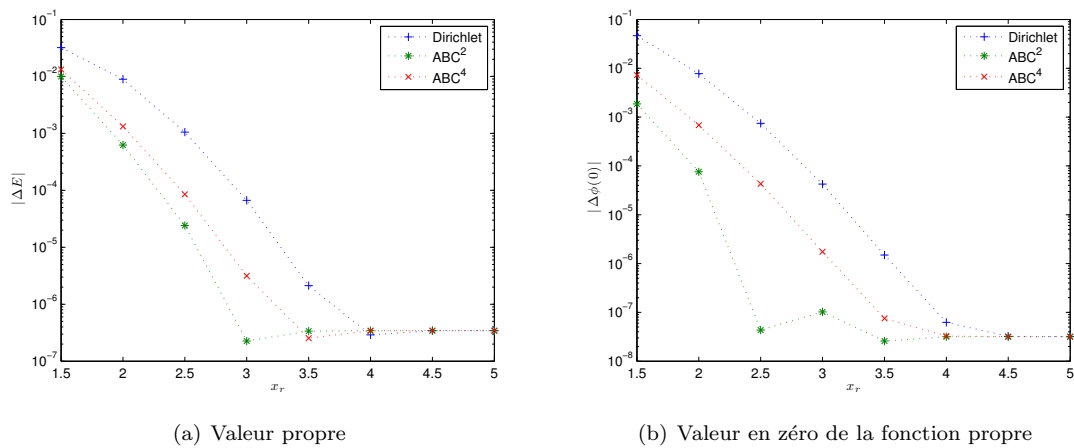
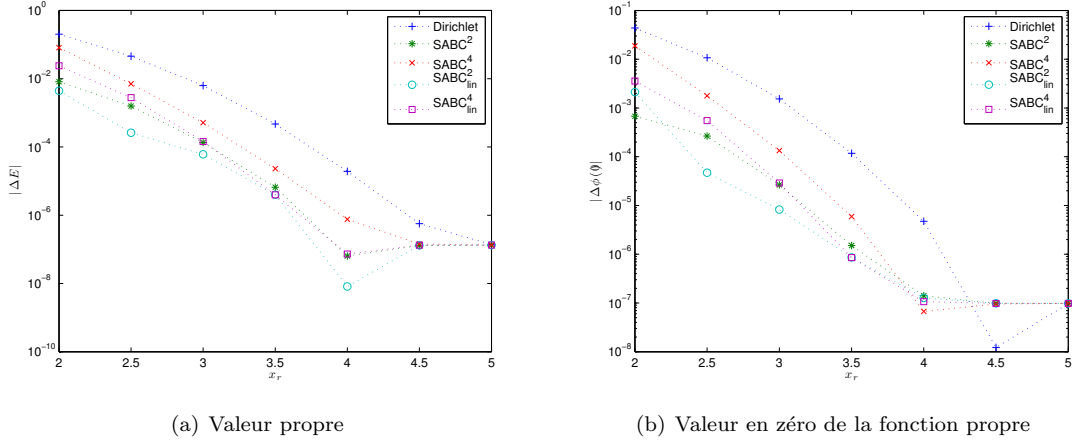


FIGURE 3.37 – Erreurs sur ΔE et $\Delta\phi(0)$ pour $\beta = -2.5097$.

la même précision, 10^{-5} . Les conditions d'ordres deux et quatre donnent des précisions à peu près équivalentes, mais la condition d'ordre deux semble un peu meilleure que celle d'ordre quatre. Ceci peut s'expliquer par le fait que la construction des CLA non linéaires est quand même formelle.

Pour $\beta = -2.5097$ (figure 3.36), tous les algorithmes convergent en 14 itérations. Les CLA améliorent la condition de Dirichlet d'un facteur au moins 10 pour toutes les valeurs de x_r comprises entre 1.5 et 3.5. Concernant les conditions d'ordres deux et quatre, la tendance observée pour $\beta = -6.2742$ semble se confirmer, tout particulièrement pour le calcul de la fonction propre. La condition d'ordre deux donne de meilleurs résultats que celle d'ordre quatre, avec des écarts allant jusqu'à un facteur 10 pour la valeur propre (en $x_r = 3$) et plus de 1000 pour la fonction propre (en $x_r = 2.5$).

Pour $\beta = 3.13712$, la situation est similaire aux deux cas précédents, mais l'algorithme met cette fois 77 itérations pour converger. Les conditions aux limites linéarisées sont proches des conditions non linéarisées dont elles sont issues, avec des résultats légèrement meilleurs cependant.

FIGURE 3.38 – Erreurs sur ΔE et $\Delta\phi(0)$ pour $\beta = 3.1371$.

3.6 Conclusion

Les conditions aux limites du chapitre 1 ont été transposées dans le domaine du stationnaire, ce qui a donné une famille de CLA précises et adaptées à l'équation de Schrödinger stationnaire, linéaire ou non linéaire, et avec un potentiel variable. En s'appuyant sur des schémas numériques, ces conditions aux limites ont été validées pour différentes configurations comme des problèmes de scattering linéaire, et des calculs d'états propres linéaires et non linéaires. Pour le calcul d'états propres, nous avons également dérivé une famille de conditions aux limites linéarisées par rapport à l'énergie E . Dans le cas d'un potentiel linéaire, cette linéarisation permet une simplification algorithmique importante pour une précision équivalente à celle donnée par les conditions aux limites classiques.

Des extensions futures viseront à traiter des problèmes en dimensions supérieures ainsi que des équations de Schrödinger à masse variable, du type

$$-\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{2m(x)} \frac{d\varphi}{dx} \right) + V(x)\varphi = \rho(x)\varphi.$$

Le travail effectué pourra aussi être étendu à des systèmes d'équations de Schrödinger qui interviennent dans l'approximation effective de la masse multibande (MEMA) pour modéliser des états électroniques dans les nanostructures modernes à semiconducteurs [97, 59, 76]. Enfin, remarquons que des applications à des équations de Schrödinger généralisées peuvent également être développées en adaptant les méthodes explicitées dans [13, 15].

Deuxième partie

**Conditions aux limites artificielles
en dimension deux**

Chapitre 4

L'équation de Schrödinger en dimension deux avec potentiel variable

Sommaire

4.1	Ce que l'on sait faire ou ce qui reste vrai par rapport au cas unidimensionnel	184
4.1.1	Cas du demi-espace et d'un potentiel identiquement nul	184
4.1.2	Cas d'un potentiel ne dépendant que du temps	185
4.2	Les spécificités de la dimension deux	185
4.2.1	Choix de la frontière et paramétrisation locale	185
4.2.2	Discussion sur l'équivalence des stratégies	187
4.2.3	Calcul pseudodifférentiel utile en dimension deux	188
4.3	Les deux stratégies	190
4.3.1	Stratégie une ou méthode par changement de jauge	190
4.3.2	Stratégie deux ou méthode directe	190
4.3.3	Unification des stratégies	191
4.3.4	Obtention du système symbolique	191
4.3.5	Ajout de termes dans le symbole principal	194
4.4	La stratégie une : changement de jauge	195
4.4.1	Choix du symbole principal	195
4.4.2	Calcul des symboles	196
4.4.3	Interprétation des CLA et approche par développement de Taylor	198
4.4.4	Interprétation des CLA et approche par approximants de Padé	201
4.5	La stratégie deux : méthode directe	202
4.5.1	Calcul des symboles	202
4.5.2	Interprétation des CLA et approche par développement de Taylor	204
4.5.3	Interprétation des CLA et approche par approximants de Padé	205
4.6	Les conditions aux limites sans potentiel	208
4.7	Obtention d'estimations <i>a priori</i>	209
4.7.1	Principe	209
4.7.2	Estimations <i>a priori</i> pour les conditions $ABC_{2,T}^M$	211
4.7.3	Estimations <i>a priori</i> pour les conditions $ABC_{1,T}^M$	215
4.8	Semi-discrétisation des conditions aux limites	216
4.8.1	Schéma intérieur et formulation variationnelle	217
4.8.2	Discrétisation des conditions $ABC_{1,T}^M$ et $ABC_{2,T}^M$	217

4.8.3	Résultats de stabilité pour les conditions discrétisées $ABC_{1,T}^M$ et $ABC_{2,T}^M$. . .	220
4.8.4	Discrétisation des conditions $ABC_{1,P}^M$ et $ABC_{2,P}^M$	228
4.9	Implémentation des CLA discrétisées dans un environnement éléments finis 2D	231
4.9.1	Implémentation des conditions $ABC_{2,T}^M$	232
4.9.2	Implémentation des conditions $ABC_{1,T}^M$	234
4.9.3	Implémentation des conditions $ABC_{1,P}^M$ et $ABC_{2,P}^M$	238
4.9.4	Calcul de la courbure	246
4.10	Résultats numériques	248
4.10.1	Etude préalable	248
4.10.2	Etude de potentiel radiaux	257
4.10.3	Etude de potentiels non radiaux	271
4.10.4	Calcul sur un domaine non circulaire : le médiateur	276
4.10.5	Un potentiel dépendant du temps : $V(r, t) = 5r^2(1 + \cos(4\pi t))$	278
4.11	Conclusion	282

Nous souhaitons maintenant étendre les méthodes et résultats des sections précédentes à la dimension deux. Il est à noter ici que nous restreignons la construction et l'analyse au cas bidimensionnel mais l'extension à des dimensions supérieures est également possible. Les calculs seraient plus longs à gérer mais notre approche s'adapte assez facilement.

Pour commencer, nous étudions le cas avec potentiel. L'extension à des non linéarités fera l'objet du chapitre suivant. Le problème d'évolution auquel nous nous intéressons est donc le suivant

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + V(x, y, t)u = 0, & (x, y) \in \mathbb{R}^2, t > 0 \\ u(x, y, 0) = u_0(x, y), & (x, y) \in \mathbb{R}^2, \end{cases} \quad (4.1)$$

où $u_0 \in L^2(\mathbb{R}^2)$ et, comme en dimension une, dans le but de simplifier la présentation, on fait l'hypothèse que u_0 est à support compact dans le futur domaine de calcul spatial borné Ω , de frontière fictive Σ . Le potentiel est une fonction C^∞ de l'espace et du temps et à valeurs réelles. On suppose que cette régularité est satisfaite au moins en-dehors du domaine $\Sigma_T := \Sigma \times]0; T[$, T étant le temps de calcul final. De façon similaire à la dimension une, nous notons le domaine de calcul $\Omega_T = \Omega \times]0; T[$. Sous des conditions identiques au théorème 1.1, le problème (4.1) est bien posé [36, 39]. De plus, en espace libre, la norme L^2 de la solution est conservée

$$\forall t > 0, \quad \|u(t)\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 = \int_{\mathbb{R}^2} |u(x, y, t)|^2 dx dy = \|u_0\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}^2 \quad (4.2)$$

où $\|\cdot\|_{L^2(\mathbb{R}^2)}$ désigne la norme $L^2(\mathbb{R}^2)$ spatiale. Enfin, on note \mathbf{n} la normale unitaire sortante à Σ .

4.1 Ce que l'on sait faire ou ce qui reste vrai par rapport au cas unidimensionnel

4.1.1 Cas du demi-espace et d'un potentiel identiquement nul

Considérons le demi-espace négatif $\{x < 0\}$. On pose $\Omega := \{x < 0\}$ de frontière $\Sigma = \{x = 0\}$. Supposons également que le potentiel V est identiquement nul dans le demi-espace droit. On peut alors montrer que la condition transparente pour le problème

$$i\partial_t u + \partial_x^2 u + \partial_y^2 u + Vu = 0, \quad (x, y) \in \mathbb{R}^2, t > 0,$$

est donnée par

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\sqrt{i\partial_t + \Delta_{\Sigma}}u = 0, \quad (x, y, t) \in \Sigma_T. \quad (4.3)$$

L'obtention de cette condition transparente se fait par transformée de Fourier en temps t et espace y . Ensuite, l'équation différentielle en x résultante est résolue explicitement, donnant lieu à une combinaison linéaire de deux ondes. Il suffit alors d'annuler l'onde rentrante, puis de dériver l'expression de l'onde sortante selon x (dérivation normale $\partial_{\mathbf{n}} := \partial_x$) pour obtenir la relation (4.3) dans l'espace de Fourier en (y, t) . Une transformée de Fourier inverse donne alors le résultat. Dans notre cas, l'opérateur de Laplace-Beltrami Δ_{Σ} est ∂_y^2 . L'opérateur transparent est donné par un opérateur de type racine carrée d'un opérateur de Schrödinger sur le bord Σ . L'opérateur est notamment non local en temps et en espace. Nous verrons plus tard dans le cas de géométries générales que l'on peut localiser en espace et rester global en temps (par exemple par un développement de Taylor) ou localiser globalement en espace et temps (approche de type Padé).

4.1.2 Cas d'un potentiel ne dépendant que du temps

En dimension une, lorsque le potentiel ne dépend que du temps $V(x, t) = V(t)$ en dehors de Ω , le changement de jauge permet de se ramener à l'équation de Schrödinger sans potentiel. Si u est solution de

$$i\partial_t u + \partial_x^2 u + V(t)u = 0$$

et v est définie par

$$v(x, t) = u(x, t)e^{-i\int_0^t V(s)ds},$$

alors v est solution de l'équation sans potentiel

$$i\partial_t v + \partial_x^2 v = 0,$$

pour laquelle on a la condition transparente (1.6).

En dimension deux, comme d'ailleurs en dimension supérieure, cette propriété reste vraie. Si $V(x, y, t) = V(t)$ et u est solution de l'équation de Schrödinger

$$i\partial_t u + \partial_x^2 u + \partial_y^2 u + V(t)u = 0,$$

alors, en définissant

$$v(x, y, t) = u(x, y, t)e^{-i\int_0^t V(s)ds}, \quad (4.4)$$

v est solution de l'équation sans potentiel

$$i\partial_t v + \partial_x^2 v + \partial_y^2 v = 0.$$

Ce résultat est indépendant du système de coordonnées (x, y) .

4.2 Les spécificités de la dimension deux

4.2.1 Choix de la frontière et paramétrisation locale

Considérons un domaine rectangulaire Ω paramétré en coordonnées cartésiennes (x, y) . La frontière est constituée de quatre segments dont les extrémités sont les points de coordonnées (x_1, y_1) ,

$(x_1, y_2), (x_2, y_2), (x_2, y_1)$. Pour la frontière verticale droite $\Sigma_d = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 / x = x_2, y \in [y_1; y_2]\}$, on utilise le calcul pseudodifférentiel associé à la transformée de Fourier partielle en (y, t) pour écrire l'opérateur DtN selon ∂_x en considérant le demi-espace droit. On obtient une condition aux limites valable sur Σ_d . Le problème est que cette condition est singulière en (x_2, y_2) et ne se raccorde pas de manière régulière avec la condition aux limites qu'on obtiendrait sur $\Sigma_h := [x_1; x_2] \times \{y_2\}$ en considérant une transformée de Fourier partielle en (x, t) . Autrement dit, les coins sont singuliers. En pratique, ceux-ci génèrent de la réflexion parasite si des conditions de continuité ne sont pas ajoutées (cf. par exemple [90] pour le cas de l'équation des ondes). A notre connaissance, ce point n'a pas encore été étudié pour l'équation de Schrödinger. Pour remédier à ce problème, nous considérons une frontière régulière (sans singularité). Par ailleurs, il est nécessaire de prendre un domaine convexe puisque l'onde doit être globalement sortante au domaine de calcul Ω . Nous cherchons donc à écrire une condition aux limites pour une frontière convexe régulière Σ paramétrée par son abscisse curviligne $s \in [a; b]$. L'hypothèse selon laquelle le domaine est convexe se traduit par le fait que la courbure $\kappa = \kappa(s)$ est positive.

Soit donc un domaine convexe Ω de frontière régulière Σ . Nous ne détaillons pas ici tous les calculs mais renvoyons à [8] pour des détails concernant le changement de variables. L'idée principale du changement de repère consiste à se ramener à la construction de l'opérateur DtN pour une équation de Schrödinger à coefficients variables mais posée dans un demi-espace (localement) en redressant la frontière par le changement de variable. Ceci nous permet alors d'effectuer une factorisation de l'opérateur par le calcul pseudodifférentiel. Notamment, l'inclusion d'un potentiel variable ne change pas fondamentalement la difficulté mais complique juste le calcul symbolique.

Pour un point M de Σ de coordonnées (x, y) , on note $\boldsymbol{\tau}$ le vecteur tangent à Σ en M et \mathbf{n} le vecteur unitaire normal sortant. Dans le repère local associé à M , un point M' proche de la frontière est repéré par ses coordonnées r et s . Compte tenu de la convexité de Ω , nous savons que le point M' se projette sur la frontière Σ de façon unique, indiquant son abscisse curviligne s . La coordonnée r désigne la distance du point M' à sa projection selon la normale unitaire sortante. Ainsi, la surface Σ peut être notée Σ_0 , si Σ_r désigne la surface parallèle à Σ pour la distance r . Du fait de la convexité de Σ , on peut se restreindre à r positif, borné par un petit paramètre ε , d'où $r \in [0; \varepsilon]$. Le laplacien en coordonnées locales (r, s) s'écrit [10, 4]

$$\Delta_r = \partial_r^2 + \kappa_r \partial_r + h^{-1} \partial_s (h^{-1} \partial_s), \quad (4.5)$$

avec h le paramètre d'échelle : $h = 1 + r\kappa$ et κ_r la courbure en M' sur la surface parallèle Σ_r : $\kappa_r = h^{-1}\kappa$. Pour des raisons de commodité, on note \tilde{u} la fonction u exprimée dans le repère local

$$u(x, y, t) = \tilde{u}(r, s, t), \quad (x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad (r, s) \in [0; \varepsilon] \times [a; b], \quad t > 0, \quad (4.6)$$

et V_r la fonction potentiel exprimée dans le repère local

$$V(x, y, t) = V_r(r, s, t), \quad (x, y) \in \mathbb{R}^2, \quad (r, s) \in [0; \varepsilon] \times [a; b], \quad t > 0. \quad (4.7)$$

L'équation de Schrödinger pour le système (4.1) devient alors

$$i\partial_t \tilde{u} + \partial_r^2 \tilde{u} + \kappa_r \partial_r \tilde{u} + h^{-1} \partial_s (h^{-1} \partial_s) \tilde{u} + V_r \tilde{u} = 0, \quad (r, s, t) \in [0; \varepsilon] \times [a; b] \times]0; T], \quad (4.8)$$

où r et s paramètrent le domaine Ω et $t > 0$. Dans la suite, nous identifions désormais u et \tilde{u} .

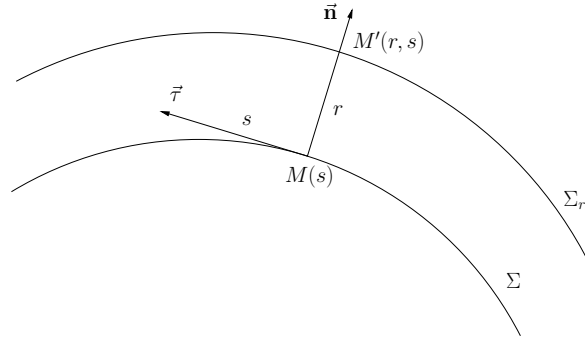


FIGURE 4.1 – Repère local et coordonnées généralisées.

4.2.2 Discussion sur l'équivalence des stratégies

En dimension une, lorsque V ne dépend que de x et qu'on applique une transformée de Fourier partielle en temps, on a l'équivalence des deux stratégies grâce au lemme 1.15 par le biais de

$$Op(a(\tau - V(x)))u = e^{itV} Op(a(\tau)) (e^{-itV}u(x, t))$$

En dimension deux, si on considère la résolution du problème de Schrödinger dans le demi-espace $\{x > 0\}$, on applique une transformée de Fourier par rapport aux variables y et t . Pour conserver une propriété similaire, il faudrait supposer que V ne dépend que d'une seule variable d'espace $V(x, y, t) = V(x)$, ce qui est assez peu réaliste. En fait, comme on prend la transformée de Fourier sur t et y , on aura équivalence lorsque V ne dépend ni de t ni de y . Or, le cas d'un potentiel qui ne dépendrait que d'une seule coordonnée cartésienne semble plutôt marginal.

Si en revanche on travaille dans le repère local, avec les coordonnées locales r et s , il semble raisonnable d'envisager que le potentiel ait des propriétés se définissant à partir de la géométrie du domaine. Par exemple, un potentiel radial sur un domaine circulaire est caractérisé par une variation tangentielle nulle. Dans le repère local, le potentiel s'exprime sous la forme $V(r, s, t)$, et on travaille avec la transformée de Fourier sur les variables s et t . Obtenir une telle propriété d'équivalence des deux stratégies reviendrait à supposer V indépendant de s et de t , c'est-à-dire ne dépendant que de r . Ceci correspond au cas d'un potentiel à symétrie radiale, indépendant du temps, ce qui est cette fois une hypothèse pouvant être réalisée de manière non anecdotique. Le résultat est alors le suivant :

Lemme 4.32. *Si a est un symbole de S^m indépendant de t et de s , et $V(r, s, t) = V(r)$, alors on a l'égalité :*

$$Op(a(\tau - V(r), \xi))u(r, s, t) = e^{itV} Op(a(\tau, \xi)) (e^{-itV}u(r, s, t)), \quad (4.9)$$

où ξ désigne la covariable de Fourier selon s .

Démonstration. Par définition, l'opérateur pseudodifférentiel associé au symbole $a(\tau - V(r), \xi)$ est donné par transformée de Fourier inverse partielle

$$\begin{aligned} Op(a(\tau - V(r), \xi))u &= \mathcal{F}_{(s,t)}^{-1}(a(\tau - V(r), \xi)\hat{u}(r, \xi, \tau)) \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} a(\tau - V(r), \xi) (\mathcal{F}_{(s,t)}u)(r, \xi, \tau) e^{it\tau} e^{is\xi} d\tau d\xi. \end{aligned}$$

En effectuant dans l'intégrale le changement de variable temporelle $\rho = \tau - V(r)$, on obtient

$$Op(a(\tau - V(r), \xi))u = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} a(\rho, \xi) (\mathcal{F}_{(s,t)}u)(r, \xi, \rho + V(r)) e^{it\rho} e^{itV(r)} e^{is\xi} d\rho d\xi.$$

En utilisant les propriétés de translation de la transformée de Fourier, on simplifie cette expression

$$Op(a(\tau - V(r), \xi))u = e^{itV(r)} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} a(\rho, \xi) \mathcal{F}_{(s,t)}((r, s, t) \mapsto e^{-itV(r)}u(r, s, t))(r, \xi, \rho) e^{it\rho} e^{is\xi} d\rho d\xi.$$

On reconnaît alors l'opérateur associé au symbole $a(\rho, \xi)$, et qui est appliqué à la fonction $(r, s, t) \mapsto e^{-itV(r)}u(r, s, t)$, c'est-à-dire

$$Op(a(\tau - V(r), \xi))u = e^{itV(r)}Op(a(\tau), \xi)\left(e^{-itV(r)}u(r, s, t)\right),$$

ce qui démontre l'égalité (4.9). \square

4.2.3 Opérateurs pseudodifférentiels utiles pour la dimension deux et calcul symbolique associé

Les fonctions considérées dans ce chapitre dépendent de deux variables d'espace, les coordonnées locales r et s , ainsi que du temps t . Dans ce cadre, le calcul pseudodifférentiel bidimensionnel s'effectue en considérant la transformée de Fourier partielle en (s, t) d'une fonction $f(r, s, t)$. On note ξ la covariable de s , et toujours τ la covariable de t . On a

$$\mathcal{F}_{(s,t)}(f(r, s, t))(r, \xi, \tau) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} f(r, s, t) e^{-it\tau} e^{-is\xi} dt ds \quad (4.10)$$

et on note usuellement $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{(s,t)}$ dans cette partie. Un opérateur pseudodifférentiel $P(r, s, t, \partial_s, \partial_t)$ de symbole $p(r, s, t, \xi, \tau)$ est donc défini par

$$P(r, s, t, \partial_s, \partial_t)u(r, s, t) = \mathcal{F}_{(s,t)}^{-1}(p(r, s, t, \xi, \tau)\hat{u}(r, \xi, \tau)), \quad (4.11)$$

soit

$$P(r, s, t, \partial_s, \partial_t)u(r, s, t) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} p(r, s, t, \xi, \tau)\hat{u}(r, \xi, \tau) e^{it\tau} e^{is\xi} d\tau d\xi \quad (4.12)$$

où $\hat{u} = \mathcal{F}u$.

L'homogénéité d'un opérateur pseudodifférentiel se lit désormais comme l'homogénéité de son symbole par rapport au couple (ξ^2, τ) . Ainsi, ξ^2 et τ sont considérés comme homogènes. Notons $E = (1, 2)$ le couple des degrés d'homogénéité associé. Ceci nous conduit à la définition suivante.

Définition 4.1. Une fonction $f(r, s, t, \xi, \tau)$ est dite E -quasi homogène d'ordre m si et seulement si, pour tout $\mu > 0$ et pour $(\xi^2, \tau) \neq (0, 0)$, on a

$$f(r, s, t, \mu\xi, \mu^2\tau) = \mu^m f(r, s, t, \xi, \tau). \quad (4.13)$$

Par exemple, l'opérateur dont le symbole est $\lambda = \sqrt{-\tau - \xi^2}$ est E -quasi homogène d'ordre 1 (par rapport au couple (ξ^2, τ)). On voit que la manière de considérer les ordres est légèrement différente du cas unidimensionnel. Si l'homogénéité entre τ et ξ^2 est respectée, alors l'ordre en espace du symbole correspond à l'ordre d'homogénéité en ξ et à celui de τ en temps. Le calcul pseudodifférentiel développé en ce sens a été introduit par R. Lascar [62] et notamment utilisé par A. Boutet de Monvel et collaborateurs [32].

Désormais, un opérateur pseudodifférentiel E -quasi homogène d'ordre $m \in \mathbb{Z}$, noté $A \in \text{OPS}_E^m$ est défini comme un opérateur dont le symbole total $a(r, s, t, \xi, \tau)$ admet un développement asymptotique en symboles E -quasi homogènes :

$$a(r, s, t, \xi, \tau) \sim \sum_{j=0}^{+\infty} a_{m-j}(r, s, t, \xi, \tau), \quad (4.14)$$

où les fonctions a_{m-j} , $j \in \mathbb{N}$, sont E -quasi homogènes de degré $m - j$. La signification du symbole \sim dans (4.14) est ici

$$\forall \tilde{m} \in \mathbb{N}, \quad a - \sum_{j=0}^{\tilde{m}} p_{m-j} \in S_E^{m-(\tilde{m}+1)}. \quad (4.15)$$

Un symbole a satisfaisant la propriété (4.14) est noté $a \in S_E^m$ et l'opérateur associé $A = \text{Op}(a)$ est noté $A \in \text{OPS}_E^m$. Enfin, on note $\text{OPS}_E^{-\infty}$ l'intersection de toutes les classes OPS_E^m , $m \in \mathbb{Z}$.

Pour P et Q deux opérateurs pseudodifférentiels de symboles respectifs p et q , et $m \in \mathbb{Z}$, on notera

$$P = Q \quad \text{mod } \text{OPS}_E^m \quad (4.16)$$

ou de manière équivalente

$$p = q \quad \text{mod } S_E^m \quad (4.17)$$

si la différence des symboles vérifie

$$p - q \in S_E^m.$$

Enfin, la formule de composition de deux opérateurs A et B de symboles respectifs $\sigma(A)$ et $\sigma(B)$ s'écrit en dimension deux

$$\sigma(AB) = \sum_{|\alpha|=0}^{+\infty} \frac{(-i)^{|\alpha|}}{\alpha!} \partial_{(\xi, \tau)}^\alpha \sigma(A) \partial_{(s, t)}^\alpha \sigma(B). \quad (4.18)$$

De plus, si $\sigma(A) \in S_E^m$ et $\sigma(B) \in S_E^n$, on a alors $\sigma(AB) \in S_E^{m+n}$. Dans (4.18), α est un multi-indice (α_1, α_2) . On utilise les conventions d'écriture classiques pour les multi-indices. En particulier, la longueur $|\alpha|$ du multi-indice est définie comme la somme de ses composantes :

$$|\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2.$$

On étend également la définition de la factorielle à un multi-indice de la façon suivante :

$$\alpha! = \alpha_1! \alpha_2!,$$

et on définit la dérivée par rapport au couple (ξ, τ) :

$$\partial_{(\xi, \tau)}^\alpha \lambda = \partial_\xi^{\alpha_1} \partial_\tau^{\alpha_2} \lambda(r, s, t, \xi, \tau).$$

Ces classes d'opérateurs permettent de définir un calcul symbolique associé. Pour les opérateurs ne dépendant que de la dérivée en temps, leur symbole au sens de ce calcul symbolique est le même que celui qu'on avait déjà obtenu dans les classes associées en dimension une. Quant aux opérateurs usuels faisant intervenir les dérivées partielles selon la variable s , ils ont pour symbole

$$\sigma(\partial_s) = i\xi \quad (4.19)$$

$$\sigma(\partial_s^2) = -\xi^2. \quad (4.20)$$

4.3 Les deux stratégies

En vue de construire le développement asymptotique de l'opérateur de DtN sur Σ , nous effectuons une factorisation de Nirenberg de l'opérateur de Schrödinger en coordonnées généralisées (r, s) , donné par (4.8). Ceci permet alors, comme dans le cas unidimensionnel, de séparer les opérateurs pseudodifférentiels Λ^- et Λ^+ de type DtN qui caractérisent respectivement les parties rentrante et sortante de l'onde. Deux stratégies se présentent selon qu'on effectue ou non un changement de jauge. Nous allons déterminer dans chacun des deux cas l'opérateur de Schrödinger sur lequel s'effectuera la factorisation.

4.3.1 Stratégie une ou méthode par changement de jauge

La première stratégie que nous envisageons consiste à effectuer le changement de jauge avant de chercher une condition aux limites. Rappelons que le changement d'inconnue (4.4) permet d'obtenir la CLT pour un potentiel $V = V(t)$. On introduit la fonction de phase \mathcal{V}

$$\mathcal{V}(r, s, t) = \int_0^t V_r(r, s, \sigma) d\sigma, \quad (4.21)$$

et on pose le changement de fonction inconnue

$$v(r, s, t) = e^{-i\mathcal{V}(r, s, t)} \tilde{u}(r, s, t). \quad (4.22)$$

Alors, la nouvelle fonction v est solution de l'équation de Schrödinger à coefficients variables

$$i\partial_t v + \partial_r^2 v + (\kappa_r + 2i(\partial_r \mathcal{V}))\partial_r v + h^{-1}\partial_s(h^{-1}\partial_s) + 2i(\partial_s \mathcal{V})\partial_s v + Gv = 0, \quad (4.23)$$

où G est l'opérateur d'ordre 0 égal à

$$G = i\kappa_r(\partial_r \mathcal{V}) + i\partial_r^2 \mathcal{V} - (\partial_r \mathcal{V})^2 + i\partial_s^2 \mathcal{V} - (\partial_s \mathcal{V})^2 + ih^{-1}(\partial_s h^{-1})(\partial_s \mathcal{V}). \quad (4.24)$$

Ainsi, après changement de jauge, la nouvelle fonction v est solution de l'équation de Schrödinger à coefficients variables

$$L(r, s, t, \partial_s, \partial_t)v = 0, \quad \text{sur } \Omega_T,$$

où l'opérateur L est égal à

$$L = i\partial_t + \partial_r^2 + (\kappa_r + 2i(\partial_r \mathcal{V}))\partial_r + h^{-1}\partial_s(h^{-1}\partial_s) + 2i(\partial_s \mathcal{V})\partial_s + G. \quad (4.25)$$

4.3.2 Stratégie deux ou méthode directe

La seconde stratégie considérée consiste à ne pas effectuer de changement de jauge. Dans ce cas, on travaille tout simplement sur l'opérateur associé à l'équation (4.8), c'est-à-dire

$$L = i\partial_t + \partial_r^2 + \kappa_r \partial_r + h^{-1}\partial_s(h^{-1}\partial_s) + V_r. \quad (4.26)$$

En contrepartie, on prendra en compte un terme lié au potentiel à l'intérieur du symbole principal de l'opérateur Λ^+ .

Remarque 4.1. Comme dans le cas unidimensionnel, la stratégie une et la stratégie deux diffèrent en réalité sur deux critères. D'une part, le changement de jauge (4.22) n'est effectué que dans la stratégie une, alors que dans la stratégie deux on travaille directement sur l'équation en u . Mais une autre différence porte sur le choix du symbole principal. Dans la stratégie de la méthode directe, et contrairement au cas du changement de jauge, on inclut dans le symbole principal des termes d'ordre 0 provenant du potentiel. Cette prise en compte du potentiel dès le symbole principal est censée compenser l'absence de changement de jauge.

Suivant cette philosophie, on peut considérer une autre stratégie que l'on appelle stratégie zéro, car il s'agit *a priori* d'une stratégie plus basique. Celle-ci consiste à ne faire ni changement de jauge, ni inclusion du potentiel dans le symbole principal. Dans le cas de la dimension une, cette stratégie n'avait pas été étudiée en détail car on avait montré qu'elle correspondait à une approximation de la méthode directe, dans le cas $|\tau|$ grand, *via* un développement de Taylor. Dans le cas bidimensionnel, nous verrons plus loin que ce sera encore le cas. C'est la raison pour laquelle nous ne nous attarderons pas outre mesure sur cette stratégie. Néanmoins, c'est cette méthode qui est employée dans [10] et [15].

4.3.3 Unification des stratégies

De manière unifiée, nous sommes donc amenés à chercher une condition aux limites approchée pour l'équation de Schrödinger avec des coefficients variables A et B

$$(i\partial_t + \partial_r^2 + (\kappa_r + A)\partial_r + h^{-1}\partial_s(h^{-1}\partial_s) + B)w = 0, \quad \text{sur } \Omega_T, \quad (4.27)$$

où les coefficients A et B et l'inconnue w diffèrent selon qu'on se trouve dans la stratégie une ou deux. Pour le changement de jauge, l'inconnue est $w = v = e^{-i\mathcal{V}}u$ et les coefficients sont

$$\begin{aligned} A &= 2i(\partial_r\mathcal{V}) \\ B &= 2i(\partial_s\mathcal{V})\partial_s + G. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Pour la méthode directe, l'inconnue est $w = u$ et les coefficients sont

$$\begin{aligned} A &= 0 \\ B &= V_r. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Nous pouvons maintenant nous intéresser à déterminer l'asymptotique de l'opérateur correspondant à l'onde rentrante associée à cette équation générique.

4.3.4 Obtention du système symbolique

L'opérateur L associé à l'équation générale (4.27) s'écrit

$$L = i\partial_t + \partial_r^2 + (\kappa_r + A)\partial_r + h^{-1}\partial_s(h^{-1}\partial_s) + B \quad (4.30)$$

où les opérateurs A et B sont donnés soit par (4.28), soit par (4.29). Nous avons le théorème de factorisation suivant.

Théorème 4.33. *Soit L l'opérateur de Schrödinger à coefficients variables défini par la relation (4.30). Il existe deux opérateurs pseudodifférentiels classiques homogènes $\Lambda^\pm = \Lambda^\pm(r, s, t, \partial_s, \partial_t) \in OPS_E^1$, réguliers par rapport à la variable d'espace r , et tels que*

$$L(r, s, t, \partial_s, \partial_t) = (\partial_r + i\Lambda^-)(\partial_r + i\Lambda^+) + R \quad (4.31)$$

où $R = R(r, s, t, \partial_s, \partial_t)$ est un opérateur régularisant de $OPS_E^{-\infty}$. De plus, le symbole total $\lambda^\pm = \sigma(\Lambda^\pm)$ de Λ^\pm admet un développement asymptotique en symboles E -quasi homogènes

$$\sigma(\Lambda^\pm) = \lambda^\pm \sim \sum_{j=0}^{+\infty} \lambda_{1-j}^\pm \quad (4.32)$$

où $\lambda_{1-j}^\pm \in S_E^{1-j}$ pour $j \in \mathbb{N}$. Ces développements asymptotiques sont uniques une fois fixés les symboles principaux respectifs λ_1^\pm .

Démonstration. Pour démontrer ce théorème, on développe l'expression (4.31) de L et on regroupe les termes en puissances décroissantes de ∂_r

$$L = \partial_r^2 + i\Lambda^- \partial_r + i\partial_r \Lambda^+ - \Lambda^- \Lambda^+ + R.$$

En utilisant l'identité $\partial_r \Lambda^+ = \Lambda^+ \partial_r + Op(\partial_r \lambda^+)$, on en déduit

$$L = \partial_r^2 + i(\Lambda^+ + \Lambda^-) \partial_r + iOp(\partial_r \lambda^+) - \Lambda^- \Lambda^+ + R. \quad (4.33)$$

On peut alors comparer (4.30) et (4.33) et identifier les termes de même ordre en ∂_r dans les deux expressions, modulo l'opérateur régularisant R d'ordre $-\infty$. On obtient le système

$$\begin{aligned} i(\Lambda^+ + \Lambda^-) &= \kappa_r + A \\ iOp(\partial_r \lambda^+) - \Lambda^- \Lambda^+ &= i\partial_t + h^{-1} \partial_s (h^{-1} \partial_s) + B. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Or, le terme $h^{-1} \partial_s (h^{-1} \partial_s)$ peut être développé de la façon suivante

$$h^{-1} \partial_s (h^{-1} \partial_s) = h^{-1} h^{-1} \partial_s^2 + h^{-1} \partial_s (h^{-1}) \partial_s \quad (4.35)$$

ce qui implique que le symbole de cet opérateur est

$$\sigma(h^{-1} \partial_s (h^{-1} \partial_s)) = -h^{-2} \xi^2 + ih^{-1} \partial_s (h^{-1}) \xi.$$

Par ailleurs, le symbole de la composée $\Lambda^- \Lambda^+$ étant donné par (4.18), le système (4.34) se traduit finalement sur le plan symbolique par

$$\begin{aligned} i(\lambda^+ + \lambda^-) &= \kappa_r + a \\ i\partial_r \lambda^+ - \sum_{|\alpha|=0}^{+\infty} \frac{(-i)^\alpha}{\alpha!} \partial_{(\xi, \tau)}^\alpha \lambda^- \partial_{(s, t)}^\alpha \lambda^+ &\sim -\tau - h^{-2} \xi^2 + ih^{-1} (\partial_s h^{-1}) \xi + b \end{aligned} \quad (4.36)$$

où $a = A$ et $b = B$ désignent respectivement les symboles des opérateurs A et B . Dans le cas du changement de jauge, on a

$$\begin{aligned} a &= 2i(\partial_r \mathcal{V}) \\ b &= -2(\partial_s \mathcal{V}) \xi + g \end{aligned} \quad (4.37)$$

où $g = G$ est l'opérateur d'ordre 0 défini par (4.24); pour la méthode directe, les symboles sont donnés par

$$\begin{aligned} a &= 0 \\ b &= V_r. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Il s'agit maintenant de déterminer le développement asymptotique en symboles E -quasi homogènes du symbole total λ^+ . Ce développement asymptotique s'obtient en identifiant dans le système (4.36)

les termes de même ordre d'homogénéité. Avant cela, il est possible de réduire le système (4.36) à une seule inconnue, λ^+ . En effet, le terme a ne dépend que de r , s et t , mais ni de ξ , ni de τ . On commence par extraire λ^- de la première équation

$$\lambda^- = -\lambda^+ - i\kappa_r - ia. \quad (4.39)$$

Cette expression est ensuite réinjectée dans la deuxième équation. Or, comme les termes κ_r et a ne dépendent ni de τ ni de ξ , on a

$$\partial_{(\xi,\tau)}^\alpha \lambda^- = \begin{cases} -\lambda^+ - i\kappa_r - ia & \text{si } \alpha = 0 \\ -\partial_{(\xi,\tau)}^\alpha \lambda^+ & \text{si } |\alpha| > 1. \end{cases}$$

Dans la somme infinie de la deuxième équation de (4.36), les termes s'écrivent donc

$$\partial_{(\xi,\tau)}^\alpha \lambda^- \partial_{(s,t)}^\alpha \lambda^+ = \begin{cases} -\lambda^+ \lambda^+ - i\kappa_r \lambda^+ - ia \lambda^+ & \text{si } \alpha = 0 \\ -\partial_{(\xi,\tau)}^\alpha \lambda^+ \partial_{(s,t)}^\alpha \lambda^+ & \text{si } |\alpha| > 1. \end{cases}$$

Ainsi, la deuxième équation de (4.36) devient

$$i\partial_r \lambda^+ + i\kappa_r \lambda^+ + ia \lambda^+ + \sum_{|\alpha|=0}^{+\infty} \frac{(-i)^{|\alpha|}}{\alpha!} \partial_{(\xi,\tau)}^\alpha \lambda^+ \partial_{(t,r)}^\alpha \lambda^+ \sim -\tau - h^{-2} \xi^2 + ih^{-1} (\partial_s h^{-1}) \xi + b. \quad (4.40)$$

C'est à cette équation unique que l'on fera désormais référence dans chaque stratégie pour le calcul des λ_{1-j}^+ , $j \in \mathbb{Z}$, et dans le but de déterminer une condition aux limites approchée.

Nous avons ici démontré que si les opérateurs Λ^- et Λ^+ existent vérifiant (4.31), alors le développement asymptotique en symboles homogènes de $\lambda^+ = \sigma(\Lambda^+)$ est donné par (4.40), et celui de λ^- s'en déduit *via* l'équation (4.39). La preuve de l'existence de ces opérateurs est alors constructive, et fait l'objet des paragraphes suivants : en se basant sur l'équation (4.40), on peut effectivement déterminer le développement asymptotique de λ^+ jusqu'à un ordre arbitraire. \square

La factorisation (4.31) indique que la partie réfléchie de la solution est donnée par $w^+ = (\partial_{\mathbf{n}} + i\Lambda^+)w$. La condition aux limites transparente s'écrit alors

$$w^+ = (\partial_{\mathbf{n}} + i\widetilde{\Lambda}^+)w = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T, \quad (4.41)$$

où l'opérateur pseudodifférentiel $\widetilde{\Lambda}^+$ est défini par

$$\widetilde{\Lambda}^+ = \Lambda_{|r=0}^+. \quad (4.42)$$

Tout comme Λ^+ , l'opérateur $\widetilde{\Lambda}^+$ est développable en symboles homogènes, et son développement est donné par

$$\sigma(\widetilde{\Lambda}^+) \sim \sum_{j=0}^{+\infty} \widetilde{\lambda}_{1-j} \quad (4.43)$$

où on a noté

$$\widetilde{\lambda}_{1-j} = (\lambda_{1-j}^+)_{|r=0} \quad (4.44)$$

le symbole évalué sur la frontière fictive. Par conséquent, déterminer l'opérateur $\widetilde{\Lambda}^+$ passe par le calcul des symboles sur la frontière $(\lambda_{1-j}^+)_{|r=0}$. On approche $\widetilde{\Lambda}^+$ en tronquant son développement

asymptotique (4.43). Si on ne garde que les M premiers termes $(\tilde{\lambda}_{1-j})_{0 \leq j \leq M-1}$, la condition approchée d'ordre M s'écrit

$$\partial_{\mathbf{n}} w_M + i \sum_{j=0}^{M-1} Op(\tilde{\lambda}_{1-j}) w_M = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T,$$

où w_M est alors solution approchée du problème (4.27). Dans le cas du changement de jauge, on effectue ensuite le changement de variable inverse $w = e^{-i\mathcal{V}} u$ pour exprimer la condition approchée sur u_M . Il s'agit donc de calculer les M premiers symboles du développement asymptotique de λ^+ , pour chacune des deux stratégies, puis de se ramener sur la frontière en évaluant ces symboles en $r = 0$.

La première étape, cruciale, consiste à déterminer le symbole principal, les autres symboles s'en déduisant alors en suivant les règles du calcul symbolique.

4.3.5 Ajout de termes dans le symbole principal

Les termes apparaissant dans le membre de droite de (4.40) sont de trois types : les termes d'ordre deux, qui figureront obligatoirement dans le symbole principal ; le ou les termes d'ordre 0, de type potentiel, qui ne figureront dans le symbole principal que pour la stratégie deux ; et des termes intermédiaires d'ordre 1, dont on peut se demander s'il faut les inclure ou non dans le symbole principal (qu'on soit dans une stratégie de type une ou dans une stratégie de type deux). L'argument-clé permettant de déterminer quels termes peuvent être inclus ou non dans le symbole principal est le fait qu'il faut savoir quel signe sur λ_1^+ garantit que l'onde soit sortante. De manière analogue au cas 1D, nous avons le lemme suivant :

Lemme 4.34. *Le symbole principal $\lambda_1^+(s, t, \xi, \tau)$ de Λ^+ doit vérifier la condition :*

$$\text{Im}(\lambda_1^+(s, t, \xi, \tau)) \leq 0, \quad \text{pour } |\tau| \gg 1. \quad (4.45)$$

Démonstration. Le principe de la preuve est le même que dans le cas unidimensionnel. Considérons d'abord le cas d'un symbole total de la forme $\lambda^+ = \lambda^+(\xi, \tau)$, correspondant au cas de l'approximation par le plan tangent. La condition aux limites artificielle en un point (x, y) de Γ , décrit par ses coordonnées locales (r, s) , s'écrit

$$\partial_r w(r, s, t) + iOp(\lambda^+) w(r, s, t) = 0, \quad \text{pour } t \in [0; T].$$

La transformée de Fourier partielle en (s, t) de cette équation conduit, par définition du symbole d'un opérateur, à

$$\partial_r \hat{w}(r, \xi, \tau) + i\lambda^+(\xi, \tau) \hat{w}(r, \xi, \tau) = 0, \quad (\xi, \tau) \in \mathbb{R}^2. \quad (4.46)$$

L'intégration de cette équation différentielle en r mène à :

$$\hat{w}(r, \xi, \tau) = Ae^{-i\lambda^+(\xi, \tau)r} \quad \text{pour } (\xi, \tau) \in \mathbb{R}^2.$$

Une condition d'intégrabilité L^2 sur Ω , pour les fréquences dans la zone hyperbolique \mathcal{H} (cf. page 211), entraîne que $\text{Re}(-i\lambda^+) \leq 0$. Or le premier terme étant prépondérant dans l'asymptotique de λ^+ , cette condition entraîne en première approximation que $\text{Re}(-i\lambda_1^+) \leq 0$. Comme $\text{Re}(-i\lambda_1^+) = \text{Im}(\lambda_1^+)$, on en déduit la condition (4.45).

Si maintenant $\lambda^+ = \lambda^+(r, s, t, \xi, \tau)$ dépend aussi de r , s et t , on raisonne à τ grand et on a, asymptotiquement

$$\lambda^+(r, s, t, \xi, \tau) \sim_{|\tau| \rightarrow \infty} \lambda^+(r_0, s_0, t_0, \xi, \tau),$$

où les points r_0 , s_0 et t_0 sont quelconques. De la même manière, on obtient sur $\lambda^+(x_0, t_0, \tau)$, puis sur $\lambda_1^+(x_0, t_0, \tau)$ la condition nécessaire $\text{Im}(\lambda_1^+(r_0, s_0, t_0, \xi, \tau)) \leq 0$ pour $|\tau|$ grand. On en déduit (4.45). \square

Remarque 4.2. Cette preuve est naturelle lorsque le symbole total ne dépend que de ξ et de τ , mais le passage à un symbole général est assez formel. En fait, une façon rigoureuse d'écrire les choses serait d'adapter les notions présentées dans [8] sur la propagation de singularités pour des opérateurs quasi homogènes, en utilisant les bicaractéristiques sortantes pour un domaine convexe. Mais formellement, les conclusions sont les mêmes.

Dès lors, on peut ajouter dans λ_1^+ :

- des termes réels (comme par exemple le potentiel), sans restriction de signe ;
- des termes complexes à condition qu'ils soient de partie imaginaire signée : un terme complexe de partie imaginaire positive conduira à choisir pour λ_1^+ le signe moins devant la racine carrée, alors qu'un terme de partie imaginaire négative conduira à choisir le signe plus. Si, en revanche, la partie imaginaire du terme complexe ajouté n'a pas de signe fixé, alors aucun des deux choix de signe sur la racine carrée ne permet de distinguer l'onde sortante. Cette possibilité est donc écartée.

4.4 La stratégie une : changement de jauge

Dans cette stratégie, on a effectué le changement d'inconnue (4.22) et on doit résoudre l'équation (4.40) :

$$i\partial_r \lambda^+ + i\kappa_r \lambda^+ - 2(\partial_r \mathcal{V}) \lambda^+ + \sum_{|\alpha|=0}^{+\infty} \frac{(-i)^{|\alpha|}}{\alpha!} \partial_{(\xi, \tau)}^\alpha \lambda^+ + \partial_{(t, r)}^\alpha \lambda^+ \sim -\tau - h^{-2} \xi^2 + ih^{-1} (\partial_s h^{-1}) \xi - 2(\partial_s \mathcal{V}) \xi + g, \quad (4.47)$$

avec

$$g = i\kappa_r \partial_r \mathcal{V} + i\partial_r^2 \mathcal{V} - (\partial_r \mathcal{V})^2 + i\partial_s^2 \mathcal{V} - (\partial_s \mathcal{V})^2 + ih^{-1} \partial_s h^{-1} \partial_s \mathcal{V}.$$

4.4.1 Choix du symbole principal

La première question qui se pose concerne le choix du symbole principal. Comme on l'a dit, cela conditionne la suite du calcul symbolique. On obtient le symbole principal en résolvant l'équation portant sur les termes d'ordre deux de (4.47). Dans le membre de gauche, l'unique terme d'ordre deux est

$$(\lambda_1^+)^2.$$

Cependant, divers points de vue existent pour considérer le terme d'ordre deux du membre de droite. Au sens strict, le terme d'ordre deux est constitué de

$$-\tau - h^{-2} \xi^2,$$

ce qui conduit à un symbole principal égal à

$$\lambda_1^+ = \pm \sqrt{-\tau - h^{-2}\xi^2}.$$

La caractérisation de l'onde sortante permet ensuite de choisir le bon signe. Néanmoins, une approche non homogène permet d'englober dans la lecture des termes d'ordre deux, et donc dans le symbole principal λ_1^+ , tout ou partie des termes d'ordre inférieur, comme cela a été effectué dans le cas de la méthode directe en dimension une en choisissant le symbole principal $\lambda_{1/2}^+ = -\sqrt{-\tau + V}$. Initialement, il y a donc de nombreuses possibilités pour choisir le symbole principal, selon qu'on y inclut ou non les termes $ih^{-1}(\partial_s h^{-1})\xi$ et/ou $-2(\partial_s \mathcal{V})\xi$ et/ou g . Or, pour garantir que λ_1^+ corresponde à l'onde sortant du domaine, il faut s'assurer que la condition (4.45) soit vérifiée, ce qui interdit d'introduire sous la racine carrée des termes complexes dont la partie imaginaire n'est pas signée. Ce critère permet d'éliminer la possibilité d'inclure les premier et troisième termes mentionnés ci-dessus, qui sont complexes et dont la partie imaginaire n'a pas un signe fixé. En revanche, on peut envisager d'ajouter $-2\partial_s \mathcal{V}\xi$, puisque ce terme est réel. Il reste finalement deux possibilités pertinentes :

$$\lambda_1^+ = -\sqrt{-\tau - h^{-2}\xi^2} \quad (4.48)$$

et

$$\lambda_1^+ = -\sqrt{-\tau - h^{-2}\xi^2 - 2\partial_s \mathcal{V}\xi}. \quad (4.49)$$

La différence notable entre le symbole (4.49) et tous les autres symboles qui seront envisagés, est que le symbole (4.49) évalué en $r = 0$ comprend toujours un terme en ξ :

$$\tilde{\lambda}_1 = -\sqrt{-\tau - \xi^2 - 2(\partial_s \mathcal{V})\xi}.$$

Or, ce terme est porté par une dérivée tangentielle de la fonction de phase \mathcal{V} . Ce terme est donc *a priori* d'amplitude relativement faible, car dans la plupart des cas étudiés, les variations du potentiel sont plus importantes dans la direction normale que dans la direction tangentielle. Le cas extrême est celui du potentiel radial $V(r, t)$, pour lequel on a $\partial_s \mathcal{V} = 0$. Ainsi, l'information contenue dans le terme $2(\partial_s \mathcal{V})\xi$ est assez limitée. Sans supprimer ce terme, on peut toutefois raisonnablement envisager de repousser sa prise en compte au symbole suivant. Ce faisant, on ne l'inclut pas dans le symbole principal, mais il interviendra dans l'expression de λ_0^+ , lorsqu'on identifiera dans l'équation les termes d'ordre 1. Ceci correspond précisément au choix effectué en prenant (4.48) comme symbole principal.

Une seule asymptotique sera donc considérée pour la méthode de changement de jauge, celle donnée par (4.48). Deux approches sont ensuite dérivées pour chaque stratégie, l'une basée sur un développement de Taylor des symboles à haute fréquence $|\tau|$, l'autre basée sur les racines carrées d'opérateurs et leur approximation par approximants de Padé.

4.4.2 Calcul des symboles

Le symbole principal λ_1^+ étant fixé par (4.48), on calcule successivement les symboles suivants en se basant sur les règles du calcul symbolique en dimension deux. Tous les calculs sont effectués formellement. Pour déterminer λ_0^+ , on lit les termes d'ordre 1 dans l'équation (4.47)

$$i\partial_r \lambda_1^+ + i\kappa_r \lambda_1^+ - 2(\partial_r \mathcal{V})\lambda_1^+ + 2\lambda_1^+ \lambda_0^+ - i\partial_\xi \lambda_1^+ \partial_s \lambda_1^+ = ih^{-1} \partial_s h^{-1} \xi$$

d'où on extrait λ_0^+

$$\lambda_0^+ = -\frac{i}{2}\kappa_r + \partial_r \mathcal{V} + \frac{1}{2\lambda_1^+} \left(-i\partial_r \lambda_1^+ + i\partial_\xi \lambda_1^+ \partial_s \lambda_1^+ + ih^{-1} \partial_s h^{-1} \xi - 2\partial_s \mathcal{V} \xi \right),$$

ce qui conduit à

$$\lambda_0^+ = -\frac{i}{2}\kappa_r + \partial_r \mathcal{V} - \frac{i}{2} \frac{h^{-1}(\partial_s h^{-1})\xi}{\sqrt{-\tau - h^{-2}\xi^2}} + \frac{(\partial_s \mathcal{V})\xi}{\sqrt{-\tau - h^{-2}\xi^2}} - \frac{i}{2} \frac{h^{-3}(\partial_r h)\xi^2}{-\tau - h^{-2}\xi^2} + \frac{i}{2} \frac{h^{-5}(\partial_s h)\xi^3}{\sqrt{-\tau - h^{-2}\xi^2}}. \quad (4.50)$$

On poursuit en calculant λ_{-1}^+ puis λ_{-2}^+ . La longueur des calculs étant croissante, nous ne détaillons pas ici les expressions de ces symboles. Nous donnons seulement l'expression des $\tilde{\lambda}_j$, qui sont l'évaluation en $r = 0$ des λ_j^+ , et constituent l'asymptotique de $\tilde{\Lambda}^+$

$$\tilde{\lambda}_1 = -\sqrt{-\tau - \xi^2}, \quad (4.51)$$

$$\tilde{\lambda}_0 = -\frac{i}{2}\kappa + \partial_n \mathcal{V} + \frac{(\partial_s \mathcal{V})\xi}{\sqrt{-\tau - \xi^2}} - \frac{i}{2} \frac{\kappa \xi^2}{-\tau - \xi^2} \quad (4.52)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}_{-1} = & -\frac{1}{8} \frac{\kappa^2}{\sqrt{-\tau - \xi^2}} - \frac{1}{2} \frac{(\partial_s \kappa)\xi}{\sqrt{-\tau - \xi^2}} - \frac{1}{2} \frac{i\partial_s^2 \mathcal{V} - (\partial_s \mathcal{V})^2}{\sqrt{-\tau - \xi^2}} - \frac{1}{2} \frac{(i\partial_s^2 \mathcal{V} - (\partial_s \mathcal{V})^2)\xi^2}{\sqrt{-\tau - \xi^2}^3}, \\ & - \frac{3}{4} \frac{\xi^2 \kappa^2}{\sqrt{-\tau - \xi^2}^3} - i \frac{\kappa(\partial_s \mathcal{V})\xi^3}{(-\tau - \xi^2)^2} - \frac{1}{2} \frac{(\partial_s \kappa)\xi^3}{(-\tau - \xi^2)^2} - \frac{5}{8} \frac{\kappa^2 \xi^4}{\sqrt{-\tau - \xi^2}^5}, \end{aligned} \quad (4.53)$$

$$\tilde{\lambda}_{-2} = \frac{i}{8} \frac{\kappa^3}{-\tau - \xi^2} + \frac{i}{8} \frac{\partial_s^2 \kappa}{-\tau - \xi^2} - \frac{i}{4} \frac{\partial_n \mathcal{V}}{-\tau - \xi^2} - \frac{1}{2} \frac{(\partial_s \kappa)(\partial_s \mathcal{V})}{-\tau - \xi^2} + \dots \quad (4.54)$$

Remarque 4.3. Compte tenu du nombre important de termes qui constituent $\tilde{\lambda}_{-2}$, nous ne les avons pas tous indiqués. Les termes qui composent le symbole $\tilde{\lambda}_{-2}$ sont tous E -quasi homogènes d'ordre -2 , mais ils peuvent s'exprimer aussi bien comme le ratio d'un symbole d'ordre 0 par un symbole d'ordre -2 , ou le ratio d'un symbole d'ordre 1 par un symbole d'ordre -3 , etc. En revanche, leur point commun est que les termes contenant τ n'interviennent qu'au dénominateur. Dans l'approche Taylor qui suivra, on effectue un développement de Taylor à $|\tau|$ grand des symboles, et pour la condition d'ordre quatre (ordre le plus élevé considéré ici), on ne garde que les termes d'ordre τ^{-1} et supérieurs. Or, les termes non écrits dans l'expression de $\tilde{\lambda}_{-2}$ ont un dénominateur de la forme $\sqrt{-\tau - \xi^2}^3$, $(-\tau - \xi^2)^2$, etc, qui conduit donc à des termes d'ordre $\tau^{-3/2}$, τ^{-2} , etc, dans le développement de Taylor en τ , et qui ne seront donc pas pris en compte pour la condition d'ordre quatre. Finalement, les termes non explicités n'interviennent pas pour l'écriture des conditions aux limites jusqu'à l'ordre quatre, dans l'approche Taylor. Ces termes sont également inutiles pour l'approche Padé, car cette dernière étant plus précise que l'approche Taylor (puisque l'on n'effectue pas d'approximation asymptotique sur le symbole), nous écrirons des conditions aux limites d'ordre moins élevé qui ne feront intervenir que $\tilde{\lambda}_1$ et $\tilde{\lambda}_0$.

Les symboles étant donnés par (4.51)–(4.54), on obtient la condition aux limites d'ordre M , $M \in \{1, 2, 3, 4\}$, pour v , donnée par

$$\partial_n v + i \sum_{j=0}^{M-1} Op\left(\tilde{\lambda}_{1-j}\right) v = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T.$$

En revenant à u , on obtient la CLA d'ordre M

$$\partial_n u - i\partial_n \mathcal{V} u + ie^{i\mathcal{V}} \sum_{j=0}^{M-1} Op\left(\tilde{\lambda}_{1-j}\right) (e^{-i\mathcal{V}} u) = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T, \quad (4.55)$$

où \mathcal{V} est la fonction de phase. L'étape suivante consiste à interpréter les opérateurs $Op\left(\tilde{\lambda}_j\right)$ de manière à traduire la condition aux limites (4.55) sur le plan symbolique en une condition aux limites explicite en termes d'opérateurs.

Nous effectuons cette interprétation dans le cadre de deux approches différentes, l'une basée sur un développement de Taylor à $|\tau|$ grand des symboles, l'autre basée sur les racines carrées d'opérateurs, et leur approximation par approximants de Padé.

4.4.3 Interprétation des CLA et approche par développement de Taylor

Dans cette approche, qui est celle considérée dans [10, 15], on vise à obtenir des opérateurs qui resteront non locaux en temps, mais seront localisés en espace. Pour cela, on effectue un développement asymptotique des symboles pour $|\tau| \gg \xi^2$. On note

$$\tilde{\lambda}_{1-j} = \left(\tilde{\lambda}_{1-j}\right)_{(\alpha)} + O\left(|\tau|^{\alpha-1/2}\right), \quad (4.56)$$

où $\left(\tilde{\lambda}_{1-j}\right)_{(\alpha)}$ désigne la troncature du développement de Taylor de $\tilde{\lambda}_{1-j}$ en se limitant aux termes d'ordres supérieurs ou égaux à α . De manière générale, on appellera condition d'ordre M la condition aux limites

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\partial_{\mathbf{n}}\mathcal{V}u + ie^{i\mathcal{V}} \sum_{j=0}^{+\infty} Op\left(\left(\tilde{\lambda}_{1-j}\right)_{(1-M/2)}\right) (e^{-i\mathcal{V}}u) \sim 0, \quad \text{sur } \Sigma_T.$$

En réalité, la somme est une somme finie, puisque les termes d'ordre $1 - M/2$ ne se retrouvent que dans les $\tilde{\lambda}_j$, avec $1 \leq j \leq 2 - M$. La condition d'ordre M s'écrit donc

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\partial_{\mathbf{n}}\mathcal{V}u + ie^{i\mathcal{V}} \sum_{j=0}^{M-1} Op\left(\left(\tilde{\lambda}_{1-j}\right)_{(1-M/2)}\right) (e^{-i\mathcal{V}}u) = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T. \quad (4.57)$$

On la note $ABC_{1,T}^M$ dans la suite, l'indice 1 faisant référence à la première stratégie, et l'indice T à l'approche par développement de Taylor. En utilisant les symboles $\tilde{\lambda}_1$, $\tilde{\lambda}_0$, $\tilde{\lambda}_{-1}$ et $\tilde{\lambda}_{-2}$, on peut donc écrire quatre conditions aux limites, de la condition d'ordre un

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\partial_{\mathbf{n}}\mathcal{V}u + ie^{i\mathcal{V}} Op\left(\left(\tilde{\lambda}_1\right)_{(1/2)}\right) (e^{-i\mathcal{V}}u) = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T,$$

à la condition d'ordre quatre

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\partial_{\mathbf{n}}\mathcal{V}u + ie^{i\mathcal{V}} Op\left(\left(\tilde{\lambda}_1\right)_{(-1)} + \left(\tilde{\lambda}_0\right)_{(-1)} + \left(\tilde{\lambda}_{-1}\right)_{(-1)} + \left(\tilde{\lambda}_{-2}\right)_{(-1)}\right) (e^{-i\mathcal{V}}u) = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T.$$

Puisque nous avons les développements asymptotiques suivants

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}_1 &= -\sqrt{-\tau} + \frac{\xi^2}{2\sqrt{-\tau}} + O\left(\frac{1}{\tau^{3/2}}\right), \\ \tilde{\lambda}_0 &= -\frac{i}{2}\kappa + \partial_{\mathbf{n}}\mathcal{V} + \frac{\partial_s\mathcal{V}\xi}{\sqrt{-\tau}} + \frac{i}{2}\frac{\kappa\xi^2}{\tau} + O\left(\frac{1}{\tau^2}\right), \\ \tilde{\lambda}_{-1} &= -\frac{\kappa^2}{8}\frac{1}{\sqrt{-\tau}} - \frac{1}{2}\frac{i\partial_s^2\mathcal{V} - (\partial_s\mathcal{V})^2}{\sqrt{-\tau}} + \frac{1}{2}\frac{\partial_s\kappa\xi}{\tau} + O\left(\frac{1}{\tau^{3/2}}\right), \\ \tilde{\lambda}_{-2} &= \frac{i}{4}\frac{\partial_{\mathbf{n}}\mathcal{V}}{\tau} - \frac{i}{8}\frac{\partial_s^2\kappa}{\tau} - \frac{i}{8}\frac{\kappa^3}{\tau} + \frac{1}{2}\frac{\partial_s\kappa\partial_s\mathcal{V}}{\tau} + O\left(\frac{1}{\tau^{3/2}}\right), \end{aligned}$$

on en déduit les symboles tronqués

$$\begin{aligned} (\tilde{\lambda}_1)_{(-1)} &= -\sqrt{-\tau} + \frac{\xi^2}{2\sqrt{-\tau}}, \\ (\tilde{\lambda}_0)_{(-1)} &= -\frac{i}{2}\kappa + \partial_{\mathbf{n}}\mathcal{V} + \frac{\partial_s\mathcal{V}\xi}{\sqrt{-\tau}} + \frac{i}{2}\frac{\kappa\xi^2}{\tau}, \\ (\tilde{\lambda}_{-1})_{(-1)} &= -\frac{\kappa^2}{8}\frac{1}{\sqrt{-\tau}} - \frac{1}{2}\frac{i\partial_s^2\mathcal{V} - (\partial_s\mathcal{V})^2}{\sqrt{-\tau}} + \frac{1}{2}\frac{\partial_s\kappa\xi}{\tau}, \\ (\tilde{\lambda}_{-2})_{(-1)} &= \frac{i}{4}\frac{\partial_{\mathbf{n}}V}{\tau} - \frac{i}{8}\frac{\partial_s^2\kappa}{\tau} - \frac{i}{8}\frac{\kappa^3}{\tau} + \frac{1}{2}\frac{\partial_s\kappa\partial_s\mathcal{V}}{\tau}. \end{aligned}$$

Ecrivons à présent la condition d'ordre quatre (les conditions d'ordres inférieurs s'en déduisent aisément) pour la fonction v

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}}v - iOp(\sqrt{-\tau})v + \frac{\kappa}{2}v + i\partial_{\mathbf{n}}\mathcal{V}v - iOp\left(\left(\frac{\kappa^2}{8} - \frac{\xi^2}{2} - \partial_s\mathcal{V}\xi + \frac{1}{2}(i\partial_s^2\mathcal{V} - (\partial_s\mathcal{V})^2)\right)\frac{1}{\sqrt{-\tau}}\right)v \\ + Op\left(\left(-\frac{\kappa\xi^2}{2} + \frac{i\partial_s\kappa\xi}{2} + \frac{\kappa^3}{8} + \frac{\partial_s^2\kappa}{8} - \frac{\partial_{\mathbf{n}}V}{4} + \frac{i\partial_s\kappa\partial_s\mathcal{V}}{2}\right)\frac{1}{\tau}\right)v = 0 \quad (4.58) \end{aligned}$$

On revient ensuite à u en utilisant le changement d'inconnue $v = e^{-i\mathcal{V}}u$ (et notamment $e^{i\mathcal{V}}\partial_{\mathbf{n}}v = \partial_{\mathbf{n}}u - i\partial_{\mathbf{n}}\mathcal{V}u$) pour obtenir

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}}u - ie^{i\mathcal{V}}Op(\sqrt{-\tau})(e^{-i\mathcal{V}}u) + \frac{\kappa}{2}u \\ - ie^{i\mathcal{V}}Op\left(\left(\frac{\kappa^2}{8} - \frac{\xi^2}{2} - \partial_s\mathcal{V}\xi + \frac{1}{2}(i\partial_s^2\mathcal{V} - (\partial_s\mathcal{V})^2)\right)\frac{1}{\sqrt{-\tau}}\right)(e^{-i\mathcal{V}}u) \\ + e^{i\mathcal{V}}Op\left(\left(-\frac{\kappa\xi^2}{2} + \frac{i\partial_s\kappa\xi}{2} + \frac{\kappa^3}{8} + \frac{\partial_s^2\kappa}{8} - \frac{\partial_{\mathbf{n}}V}{4} + \frac{i\partial_s\kappa\partial_s\mathcal{V}}{2}\right)\frac{1}{\tau}\right)(e^{-i\mathcal{V}}u) = 0 \quad (4.59) \end{aligned}$$

Il reste à interpréter les opérateurs dont les symboles interviennent ci-dessus. Ici, le laplacien surfacique Δ_{Σ} est un opérateur à coefficients constants sur la surface Σ , puisque $\Delta_{\Sigma} = (\Delta_r)_{|r=0}$ (le laplacien surfacique correspond à l'évaluation sur la frontière du laplacien exprimé dans le repère local). Comme on travaille en deux dimensions, et qu'on peut utiliser un paramétrage global de la surface, il reste uniquement $\Delta_{\Sigma} = \partial_s^2$. Ceci ne serait plus vrai en dimension trois. Nous avons donc finalement les correspondances

$$\begin{aligned} Op(-\xi^2) &= \Delta_{\Sigma}, \\ Op(-\xi) &= i\partial_s, \\ Op(-\kappa\xi^2 + i\partial_s\kappa\xi) &= \kappa\partial_s^2 + \partial_s\kappa\partial_s = \partial_s(\kappa\partial_s). \end{aligned}$$

Par ailleurs, les symboles en τ s'interprètent comme dans le cas de la dimension une

$$\begin{aligned} Op(-i\sqrt{-\tau}) &= e^{-i\pi/4}\partial_t^{1/2}, \\ Op\left(\frac{-i}{\sqrt{-\tau}}\right) &= -e^{i\pi/4}I_t^{1/2}, \\ Op\left(\frac{1}{\tau}\right) &= iI_t. \end{aligned}$$

Ceci nous permet d'expliciter la condition d'ordre quatre donnée par

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4}e^{i\mathcal{V}}\partial_t^{1/2}(e^{-i\mathcal{V}}u) + \frac{\kappa}{2}u \\ - e^{i\pi/4}e^{i\mathcal{V}}\left(\frac{\kappa^2}{8} + \frac{\Delta_\Sigma}{2} + i\partial_s\mathcal{V}\partial_s + \frac{1}{2}(i\partial_s^2\mathcal{V} - (\partial_s\mathcal{V})^2)\right)I_t^{1/2}(e^{-i\mathcal{V}}u) \\ + ie^{i\mathcal{V}}\left(\frac{\partial_s(\kappa\partial_s)}{2} + \frac{\kappa^3 + \partial_s^2\kappa}{8} - \frac{\partial_{\mathbf{n}}V}{4} + \frac{i\partial_s\kappa\partial_s\mathcal{V}}{2}\right)I_t(e^{-i\mathcal{V}}u) = 0 \end{aligned}$$

Cependant, en vue de l'étude du caractère bien posé du problème avec cette condition aux limites, on recherche la forme la plus symétrique possible pour la condition aux limites. Ceci nous amène à symétriser le terme dépendant du potentiel

$$\frac{\partial_{\mathbf{n}}V}{4},$$

en écrivant comme dans le cas unidimensionnel

$$\partial_{\mathbf{n}}V = \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}}V)\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}.$$

On retiendra donc la condition d'ordre quatre, notée $ABC_{1,T}^4$, donnée par

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4}e^{i\mathcal{V}}\partial_t^{1/2}(e^{-i\mathcal{V}}u) + \frac{\kappa}{2}u \\ - e^{i\pi/4}e^{i\mathcal{V}}\left(\frac{\kappa^2}{8} + \frac{\Delta_\Sigma}{2} + i\partial_s\mathcal{V}\partial_s + \frac{1}{2}(i\partial_s^2\mathcal{V} - (\partial_s\mathcal{V})^2)\right)I_t^{1/2}(e^{-i\mathcal{V}}u) \\ + ie^{i\mathcal{V}}\left(\frac{\partial_s(\kappa\partial_s)}{2} + \frac{\kappa^3 + \partial_s^2\kappa}{8} + \frac{i\partial_s\kappa\partial_s\mathcal{V}}{2}\right)I_t(e^{-i\mathcal{V}}u) \\ - i\frac{\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}}V)}{4}\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}e^{i\mathcal{V}}I_t\left(\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}e^{-i\mathcal{V}}u\right) = 0. \quad (4.60) \end{aligned}$$

On peut évidemment en extraire les conditions d'ordres inférieurs. Ces conditions seront discrétisées en utilisant les convolutions discrètes associées aux opérateurs $\partial_t^{1/2}$, $I_t^{1/2}$ et I_t . L'ensemble des conditions aux limites est rappelé dans la proposition 4.35.

Proposition 4.35. *Dans la stratégie une ou changement de jauge, et suivant l'approche par développement de Taylor, les conditions aux limites d'ordre M sont données par*

$$\partial_{\mathbf{n}}u + \Lambda_{1,T}^M u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T, \quad (4.61)$$

où les opérateurs $\Lambda_{1,T}^M$ sont définis sur Σ_T par

$$\Lambda_{1,T}^2 u = e^{-i\pi/4}e^{i\mathcal{V}}\partial_t^{1/2}(e^{-i\mathcal{V}}u) + \frac{\kappa}{2}u, \quad (4.62)$$

$$\Lambda_{1,T}^3 u = \Lambda_{1,T}^2 u - e^{i\pi/4}e^{i\mathcal{V}}\left(\frac{\kappa^2}{8} + \frac{\Delta_\Sigma}{2} + i\partial_s\mathcal{V}\partial_s + \frac{1}{2}(i\partial_s^2\mathcal{V} - (\partial_s\mathcal{V})^2)\right)I_t^{1/2}(e^{-i\mathcal{V}}u), \quad (4.63)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_{1,T}^4 u = \Lambda_{1,T}^3 u + ie^{i\mathcal{V}}\left(\frac{\partial_s(\kappa\partial_s)}{2} + \frac{\kappa^3 + \partial_s^2\kappa}{8} + \frac{i\partial_s\kappa\partial_s\mathcal{V}}{2}\right)I_t(e^{-i\mathcal{V}}u) \\ - i\frac{\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}}V)}{4}\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}e^{i\mathcal{V}}I_t\left(\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|}e^{-i\mathcal{V}}u\right), \quad (4.64) \end{aligned}$$

et où la fonction de phase \mathcal{V} est donnée par

$$\mathcal{V}(x, y, t) = \int_0^t V(x, y, \sigma) d\sigma.$$

Ces conditions sont nommées $ABC_{1,T}^M$ dans la suite.

4.4.4 Interprétation des CLA et approche par approximants de Padé

On peut également écrire la condition aux limites en gardant les symboles exacts et en suivant une approche par approximants de type Padé. Ici, on appellera simplement condition aux limites d'ordre M la condition obtenue en retenant les M premiers symboles :

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\partial_{\mathbf{n}}\mathcal{V} + ie^{i\mathcal{V}} \sum_{j=0}^{M-1} Op\left(\tilde{\lambda}_{1-j}\right) (e^{-i\mathcal{V}}u) = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T.$$

On note cette condition $ABC_{1,P}^M$. Comme les symboles contiennent plus d'information que dans l'approche Taylor, puisqu'on les garde intacts, on pourra se permettre (arbitrairement ici) en contrepartie d'en retenir moins. On utilisera donc dans cette stratégie des conditions d'ordre moins élevé. La condition d'ordre deux prenant en compte les deux premiers symboles $\tilde{\lambda}_1$ et $\tilde{\lambda}_0$ s'écrit

$$\partial_{\mathbf{n}}v - iOp\left(\sqrt{-\tau - \xi^2}\right)v + \frac{\kappa}{2}v - \partial_{\mathbf{n}}\mathcal{V}v + iOp\left(\frac{\partial_s\mathcal{V}\xi}{\sqrt{-\tau - \xi^2}}\right)v + \frac{1}{2}Op\left(\frac{\kappa\xi^2}{-\tau - \xi^2}\right)v = 0. \quad (4.65)$$

On revient à u en effectuant le changement de variable inverse

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}}u - ie^{i\mathcal{V}}Op\left(\sqrt{-\tau - \xi^2}\right) (e^{-i\mathcal{V}}u) + \frac{\kappa}{2}u \\ + e^{i\mathcal{V}}Op\left(\frac{i\partial_s\mathcal{V}\xi}{\sqrt{-\tau - \xi^2}}\right) (e^{-i\mathcal{V}}u) + \frac{1}{2}e^{i\mathcal{V}}Op\left(\frac{\kappa\xi^2}{-\tau - \xi^2}\right) (e^{-i\mathcal{V}}u) = 0 \end{aligned} \quad (4.66)$$

On a les correspondances symboles/opérateurs suivantes, sur l'intersection de leurs domaines de définition respectifs :

$$\begin{aligned} Op\left(\sqrt{-\tau - \xi^2}\right) &= \sqrt{i\partial_t + \Delta_\Sigma}, \\ Op\left(\frac{i\xi}{\sqrt{-\tau - \xi^2}}\right) &= \partial_s (i\partial_t + \Delta_\Sigma)^{-1/2} = (i\partial_t + \Delta_\Sigma)^{-1/2} \partial_s, \\ Op\left(\frac{\xi^2}{-\tau - \xi^2}\right) &= -\Delta_\Sigma (i\partial_t + \Delta_\Sigma)^{-1} = -(i\partial_t + \Delta_\Sigma)^{-1} \Delta_\Sigma. \end{aligned} \quad (4.67)$$

Ici, comme les symboles des opérateurs à identifier ne dépendent ni de s , ni de t , ces correspondances sont exactes, contrairement à ce qu'on observera pour la stratégie deux. Ainsi, nous avons la condition aux limites d'ordre deux

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}}u - ie^{i\mathcal{V}}\sqrt{i\partial_t + \Delta_\Sigma} (e^{-i\mathcal{V}}u) + \frac{\kappa}{2}u + \partial_s\mathcal{V}e^{i\mathcal{V}}\partial_s (i\partial_t + \Delta_\Sigma)^{-1/2} (e^{-i\mathcal{V}}u) \\ - \frac{\kappa}{2}e^{i\mathcal{V}}(i\partial_t + \Delta_\Sigma)^{-1} \Delta_\Sigma (e^{-i\mathcal{V}}u) = 0. \end{aligned} \quad (4.68)$$

On en déduit bien sûr la condition d'ordre un par troncature. Compte tenu de la complexité des termes mis en jeu, et de leur précision supposée, nous ne développerons pas ici les conditions d'ordre supérieur pour l'approche Padé. Ces conditions aux limites sont résumées dans la proposition 4.36.

Proposition 4.36. *Dans la stratégie une ou changement de jauge, et suivant l'approche Padé, les conditions aux limites d'ordre M sont données par*

$$\partial_{\mathbf{n}}u + \Lambda_{1,P}^M u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T \quad (4.69)$$

où les opérateurs $\Lambda_{1,P}^M$ sont définis sur Σ_T par

$$\Lambda_{1,P}^1 u = -ie^{i\mathcal{V}} \sqrt{i\partial_t + \Delta_\Sigma} (e^{-i\mathcal{V}} u), \quad (4.70)$$

$$\Lambda_{1,P}^2 u = \Lambda_{1,P}^1 u + \frac{\kappa}{2} u + \partial_s \mathcal{V} e^{i\mathcal{V}} \partial_s (i\partial_t + \Delta_\Sigma)^{-1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u) - \frac{\kappa}{2} e^{i\mathcal{V}} (i\partial_t + \Delta_\Sigma)^{-1} \Delta_\Sigma (e^{-i\mathcal{V}} u). \quad (4.71)$$

Ces conditions sont nommées $ABC_{1,P}^M$ dans la suite.

Remarque 4.4. Compte tenu de (4.67), deux formulations équivalentes sont possibles pour le symbole λ_{-2}^+ , soit $\Delta_\Sigma (i\partial_t + \Delta_\Sigma)^{-1}$, soit $(i\partial_t + \Delta_\Sigma)^{-1} \Delta_\Sigma$. Cependant, si ces expressions correspondent bien au même opérateur, nous faisons le choix d'utiliser la deuxième formulation pour des raisons d'implémentation numérique. Nous verrons au paragraphe 4.9.3 que, compte tenu de la présence de la courbure dans les opérateurs, cette deuxième écriture s'adapte beaucoup mieux à la définition des fonctions auxiliaires et à la formulation variationnelle éléments finis pour les approximants de Padé. C'est ce critère qui nous permet de faire ici le choix de la formulation à retenir.

4.5 La stratégie deux : méthode directe

Dans cette stratégie, on travaille directement sur l'équation (4.8) et on doit résoudre l'équation en λ^+ donnée par (4.40)

$$i\partial_r \lambda^+ + i\kappa_r \lambda^+ + \sum_{|\alpha|=0}^{+\infty} \frac{(-i)^{|\alpha|}}{\alpha!} \partial_{(\xi,\tau)}^\alpha \lambda^+ \partial_{(t,r)}^\alpha \lambda^+ \sim -\tau - h^{-2} \xi^2 + ih^{-1} (\partial_s h^{-1}) \xi + V_r. \quad (4.72)$$

4.5.1 Calcul des symboles

Commençons par déterminer le symbole principal. Ceci se fait en lisant les termes d'ordre deux de (4.72). Comme pour le changement de jauge, se pose la question de savoir quels termes d'ordre deux du membre de droite de (4.72) doivent être retenus. Le principe de la méthode directe est de compenser l'absence de changement de jauge par la prise en compte du potentiel dès le symbole principal. On exclut donc *de facto* le choix $\lambda_1^+ = \pm \sqrt{-\tau - h^{-2} \xi^2}$ (qui correspond à ce qu'on a appelé la stratégie zéro dans la remarque 4.1, et conduirait à des conditions aux limites moins précises). Par ailleurs, l'inclusion du terme $ih^{-1} \partial_s h^{-1} \xi$ reste exclue pour des questions de signe. Il ne reste pour le symbole principal que la possibilité

$$\lambda_1^+ = \mp \sqrt{-\tau - h^{-2} \xi^2 + V_r}. \quad (4.73)$$

Le signe de λ_1^+ est déterminé pour correspondre à l'onde sortante. Le radicande $-\tau - h^{-2} \xi^2 + V_r$ est un réel, donc sa racine carrée est un complexe de partie imaginaire soit nulle (si le radicande est positif), soit positive (si le radicande est négatif). Ceci assure qu'il faut choisir le signe moins pour que λ_1^+ ait une partie imaginaire négative. Le symbole principal est donc

$$\lambda_1^+ = -\sqrt{-\tau - h^{-2} \xi^2 + V_r}. \quad (4.74)$$

On accède ensuite à λ_0^+ en lisant les termes d'ordre 1 dans (4.72). Ceux-ci sont, *a priori*, solutions de l'équation

$$i\partial_r \lambda_1^+ + i\kappa_r \lambda_1^+ + 2\lambda_1^+ \lambda_0^+ = ih^{-1} (\partial_s h^{-1}) \xi.$$

Or, compte tenu de la forme non homogène de λ_1^+ , le terme $\partial_r \lambda_1^+$ est lui-même somme de deux termes d'homogénéités différentes, respectivement 1 et -1

$$\partial_r \lambda_1^+ = \frac{\partial_r (h^{-1}) \xi^2}{2\sqrt{-\tau - h^{-2} \xi^2 + V_r}} - \frac{\partial_r V_r}{2\sqrt{-\tau - h^{-2} \xi^2 + V_r}}.$$

On utilisera la notation

$$(\partial_r \lambda_1^+)_1$$

pour repérer la partie de $\partial_r \lambda_1^+$ qui est d'ordre 1, et de même avec la partie d'ordre -1 . Avec ces notations, l'équation portant sur les termes d'ordre 1 s'écrit

$$i (\partial_r \lambda_1^+)_1 + i \kappa_r \lambda_1^+ + 2 \lambda_1^+ \lambda_0^+ = i h^{-1} (\partial_s h^{-1}) \xi.$$

Quant au terme $(\partial_r \lambda_1^+)_{-1}$ d'ordre -1 qui n'a pas été utilisé ici, il faudra bien sûr le prendre en compte dans l'équation concernant les termes d'ordre -1 , lors du calcul de λ_{-2}^+ . Ainsi, il faut étudier en détail tous les termes de chaque équation pour sélectionner ceux qui correspondent réellement à un ordre donné. Cette procédure ne peut évidemment pas être automatisée, c'est le point délicat de cette méthode. Finalement, on obtient pour λ_0^+

$$\lambda_0^+ = -\frac{i}{2} \kappa_r + \frac{i}{4} \frac{(\partial_r h^{-2}) \xi^2}{-\tau - h^{-2} \xi^2 + i h^{-1} (\partial_s h^{-1}) \xi + V_r} - \frac{i}{4} \frac{h^{-2} (\partial_s h^{-2}) \xi^3}{\sqrt{-\tau - h^{-2} \xi^2 + i h^{-1} (\partial_s h^{-1}) \xi + V_r}^3}.$$

On calcule ainsi λ_{-1}^+ et λ_{-2}^+ , puis on évalue les symboles λ_j^+ en $r = 0$ pour obtenir les symboles associés à $\tilde{\Lambda}^+$. On obtient

$$\tilde{\lambda}_1 = -\sqrt{-\tau - \xi^2 + V}, \quad (4.75)$$

$$\tilde{\lambda}_0 = -\frac{i}{2} \kappa - \frac{i}{2} \frac{\kappa \xi^2}{-\tau - \xi^2 + V}, \quad (4.76)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}_{-1} = & -\frac{1}{8} \frac{\kappa^2}{\sqrt{-\tau - \xi^2 + V}} - \frac{1}{2} \frac{\partial_s \kappa \xi}{-\tau - \xi^2 + V} - \frac{3}{4} \frac{\kappa^2 \xi^2}{\sqrt{-\tau - \xi^2 + V}^3} - \frac{1}{2} \frac{\partial_s \kappa \xi^3}{(-\tau - \xi^2 + V)^2} \\ & - \frac{5}{8} \frac{\kappa^2 \xi^4}{\sqrt{-\tau - \xi^2 + V}^5}, \end{aligned} \quad (4.77)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}_{-2} = & \frac{-i}{4} \frac{\partial_n V}{-\tau - \xi^2 + V} + \frac{i}{8} \frac{\partial_s^2 \kappa}{\tau - \xi^2 + V} + \frac{i}{8} \frac{\kappa^3}{\tau - \xi^2 + V} + \frac{13i}{8} \frac{\kappa \partial_s \kappa \xi}{\sqrt{\tau - \xi^2 + V}^3} + \frac{i \partial_s V \xi}{\sqrt{\tau - \xi^2 + V}^3} \\ & + \frac{13i}{8} \frac{\kappa^3 \xi^2}{(\tau - \xi^2 + V)^2} + \frac{3i \partial_s^2 \kappa \xi^2}{(\tau - \xi^2 + V)^2} + \frac{19i \kappa \partial_s \kappa \xi^3}{\sqrt{\tau - \xi^2 + V}^5} + \frac{5i \partial_s^2 \kappa \xi^4}{(\tau - \xi^2 + V)^3} \\ & + \frac{27i}{8} \frac{\kappa^3 \xi^4}{(\tau - \xi^2 + V)^3} + \frac{25i \kappa \partial_s \kappa \xi^5}{\sqrt{\tau - \xi^2 + V}^7} + \frac{15i}{8} \frac{\kappa^3 \xi^6}{(\tau - \xi^2 + V)^4}. \end{aligned} \quad (4.78)$$

Les symboles étant donnés par (4.75)–(4.78), on obtient la condition aux limites d'ordre M , $M \in \{1, 2, 3, 4\}$ par

$$\partial_n u + i \sum_{j=0}^{M-1} Op(\tilde{\lambda}_{1-j}) u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T. \quad (4.79)$$

L'étape suivante consiste à interpréter les opérateurs $Op(\tilde{\lambda}_j)$ de manière à expliciter la condition aux limites (4.55) sur le plan symbolique en une condition aux limites explicite en termes d'opérateurs. Comme auparavant, deux approches sont considérées, selon qu'on effectue un développement asymptotique à $|\tau|$ grand des symboles ou que les opérateurs sont calculés par approximants de Padé formels.

4.5.2 Interprétation des CLA et approche par développement de Taylor

Dans cette approche, on effectue un développement asymptotique à $|\tau|$ grand des symboles $\tilde{\lambda}_1, \tilde{\lambda}_0, \tilde{\lambda}_{-1}$ et $\tilde{\lambda}_{-2}$. En reprenant les notations (4.56), on obtient les développements asymptotiques tronqués à l'ordre -1 en τ

$$\left(\tilde{\lambda}_1\right)_{(-1)} = -\sqrt{-\tau} + \left(\frac{\xi^2}{2} - \frac{V}{2}\right) \frac{1}{\sqrt{-\tau}}, \quad (4.80)$$

$$\left(\tilde{\lambda}_0\right)_{(-1)} = -\frac{i}{2}\kappa + \frac{i}{2} \frac{\kappa\xi^2}{\tau}, \quad (4.81)$$

$$\left(\tilde{\lambda}_{-1}\right)_{(-1)} = -\frac{1}{8} \frac{\kappa^2}{\sqrt{-\tau}} + \frac{1}{2} \frac{\partial_s \kappa \xi}{\tau}, \quad (4.82)$$

$$\left(\tilde{\lambda}_{-2}\right)_{(-1)} = \frac{i}{4} \frac{\partial_{\mathbf{n}} V}{\tau} - \frac{i}{8} \frac{\partial_s^2 \kappa}{\tau} - \frac{i}{8} \frac{\kappa^3}{\tau}. \quad (4.83)$$

On peut alors écrire la condition aux limites d'ordre quatre, en termes de symboles

$$\partial_{\mathbf{n}} u + i \sum_{j=0}^3 Op \left(\left(\tilde{\lambda}_{1-j} \right)_{(-1)} \right) u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T,$$

soit

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}} u - i Op(\sqrt{-\tau}) u + \frac{\kappa}{2} u - i Op \left(\left(\frac{\kappa^2}{8} + \frac{-\xi^2}{2} + \frac{V}{2} \right) \frac{1}{\sqrt{-\tau}} \right) u \\ + Op \left(\left(-\frac{\kappa\xi^2}{2} + \frac{i\partial_s \kappa \xi}{2} + \frac{\kappa^3}{8} + \frac{\partial_s^2 \kappa}{8} - \frac{\partial_{\mathbf{n}} V}{4} \right) \frac{1}{\tau} \right) u = 0 \end{aligned}$$

En utilisant les mêmes correspondances que dans la stratégie une, cette condition s'interprète

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} u + \frac{\kappa}{2} u - e^{i\pi/4} \left(\frac{\kappa^2}{8} + \frac{\Delta_{\Sigma}}{2} + \frac{V}{2} \right) I_t^{1/2} u \\ + i \left(\frac{\partial_s(\kappa\partial_s)}{2} + \frac{\kappa^3}{8} + \frac{\partial_s^2 \kappa}{8} - \frac{\partial_{\mathbf{n}} V}{4} \right) I_t u = 0 \end{aligned}$$

Comme pour la stratégie du changement de jauge, il importe d'avoir une condition aux limites la plus symétrique possible. Pour s'assurer du caractère bien posé de l'équation, on prend soin de symétriser les deux termes dépendant du potentiel, $\frac{V}{2}$ et $\frac{\partial_{\mathbf{n}} V}{4}$, en écrivant

$$V = \text{sg}(V) \sqrt{|V|} \sqrt{|V|}$$

et

$$\partial_{\mathbf{n}} V = \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V) \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|} \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|}$$

La condition aux limites qui en résulte est notée $ABC_{2,T}^4$. On peut évidemment en extraire les conditions d'ordre inférieur. L'ensemble des conditions aux limites est résumé dans la proposition 4.37.

Proposition 4.37. *Dans la stratégie deux ou méthode directe, et suivant l'approche par développement de Taylor, les conditions aux limites d'ordre M sont données par*

$$\partial_{\mathbf{n}} u + \Lambda_{2,T}^M u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T, \quad (4.84)$$

où les opérateurs $\Lambda_{2,T}^M$ sont définis sur Σ_T par

$$\Lambda_{2,T}^1 u = e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} u, \quad (4.85)$$

$$\Lambda_{2,T}^2 u = \Lambda_{2,T}^1 u + \frac{\kappa}{2} u, \quad (4.86)$$

$$\Lambda_{2,T}^3 u = \Lambda_{2,T}^2 u - e^{i\pi/4} \left(\frac{\kappa^2}{8} + \frac{\Delta_\Sigma}{2} \right) I_t^{1/2} u - e^{i\pi/4} \frac{\text{sg}(V)}{2} \sqrt{|V|} I_t^{1/2} \left(\sqrt{|V|} u \right), \quad (4.87)$$

$$\Lambda_{2,T}^4 u = \Lambda_{2,T}^3 u + i \left(\frac{\partial_s(\kappa \partial_s)}{2} + \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} \right) I_t u - i \frac{\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V)}{4} \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|} I_t \left(\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|} u \right). \quad (4.88)$$

Ces conditions sont nommées $ABC_{2,T}^M$ dans la suite.

On remarquera la forme symétrique des opérateurs $\Lambda_{2,T}^3$ et $\Lambda_{2,T}^4$.

Remarque 4.5. On retrouve ici les mêmes conditions aux limites que celles auxquelles on aboutit dans la stratégie zéro, ce qui justifie que l'on n'ait pas détaillé cette stratégie. Comme dans le cas unidimensionnel, on observe que la stratégie zéro n'est qu'un sous-cas de la méthode directe puisque ses symboles coïncident avec ceux obtenus en effectuant un développement de Taylor à $|\tau|$ grand des symboles de la stratégie deux (pour laquelle on a incorporé le potentiel dans le symbole principal). La stratégie deux est donc plus précise sur le plan symbolique tandis que les conditions aux limites de la stratégie zéro coïncident avec les conditions issues de la combinaison de la stratégie deux avec l'approche Taylor.

4.5.3 Interprétation des CLA et approche par approximants de Padé

Si on effectue une approche Padé des conditions aux limites, on obtient la condition d'ordre une en prenant en compte seulement $\tilde{\lambda}_1$

$$\partial_{\mathbf{n}} u - iOp \left(\sqrt{-\tau - \xi^2 + V} \right) u = 0 \quad (4.89)$$

et la condition d'ordre deux prenant en compte $\tilde{\lambda}_1$ et $\tilde{\lambda}_0$

$$\partial_{\mathbf{n}} u - iOp \left(\sqrt{-\tau - \xi^2 + V} \right) u + \frac{\kappa}{2} u + \frac{1}{2} Op \left(\frac{\kappa \xi^2}{-\tau - \xi^2 + V} \right) u = 0. \quad (4.90)$$

De même que dans le cas du changement de jauge, on retient ici moins de symboles que dans l'approche Taylor, ce qui est compensé par le fait que les symboles contiennent davantage d'information. En vue d'implémenter ces conditions aux limites, il est nécessaire d'interpréter les opérateurs mis en jeu. Le lemme suivant donne les équivalences nécessaires.

Lemme 4.38. *Nous avons les équivalences suivantes :*

$$Op \left(\sqrt{-\tau - \xi^2 + V} \right) \sim \sqrt{i\partial_t + \Delta_\Sigma + V} \quad \text{mod } OPS_E^{-1} \quad (4.91)$$

et

$$Op \left(\frac{\kappa \xi^2}{-\tau - \xi^2 + V} \right) \sim -\kappa (i\partial_t + \Delta_\Sigma + V)^{-1} \Delta_\Sigma \quad \text{mod } OPS_E^{-3}. \quad (4.92)$$

Démonstration. Considérons la première équivalence (4.91). On pose $A = \sqrt{i\partial_t + \Delta_\Sigma + V}$, qui est un opérateur d'ordre 1 en (ξ^2, τ) . Il admet donc un développement asymptotique sous la forme

$$\sigma(A) \sim \sum_{j=0}^{+\infty} \sigma_{1-j},$$

où les symboles σ_{1-j} sont asymptotiquement homogènes d'ordre $1-j$, $j \in \mathbb{Z}$. On va déterminer cette asymptotique grâce à la formule de composition puisque

$$A^2 = i\partial_t + \Delta_\Sigma + V = Op(-\tau - \xi^2 + V). \quad (4.93)$$

Par ailleurs, on a

$$\sigma(A^2) \sim \sum_{|\alpha|=0}^{+\infty} \frac{(-i)^{|\alpha|}}{\alpha!} \partial_{(\xi,\tau)}^\alpha \sigma(A) \partial_{(s,t)}^\alpha \sigma(A). \quad (4.94)$$

Par comparaison du symbole mis en jeu dans (4.93) et de l'expression (4.94), on détermine un à un les symboles σ_{1-j} , $j \in \mathbb{Z}$. L'identification des termes d'ordre deux conduit à $-\tau - \xi^2 + V = \sigma_1^2$, d'où le symbole principal

$$\sigma_1 = \sqrt{-\tau - \xi^2 + V}.$$

L'identification des termes d'ordre 1 conduit ensuite à $0 = \sigma_1\sigma_0 + \sigma_0\sigma_1$, d'où $\sigma_0 = 0$. De même, on a $0 = 2\sigma_1\sigma_{-1} + \sigma_0^2 - i\partial_\xi\sigma_1\partial_s\sigma_1$ et ainsi $\sigma_{-1} = 0$. Enfin, les termes d'ordre -1 conduisent à $2\sigma_1\sigma_{-2} = i\partial_\xi\sigma_1\partial_s\sigma_1$, ce qui donne

$$\sigma_{-2} = -\frac{i}{4} \frac{(\partial_s V)\xi}{\sqrt{-\tau - \xi^2 + V}^3}.$$

Finalement, le début de l'asymptotique de A est

$$\sigma(\sqrt{i\partial_t + \Delta_\Sigma + V}) \sim \sqrt{-\tau - \xi^2 + V} - \frac{i}{4} \frac{\xi\partial_s V}{\sqrt{-\tau - \xi^2 + V}^3} + \dots$$

On en déduit sans surprise que $\sqrt{-\tau - \xi^2 + V}$ est le symbole principal de A et on a de plus l'estimation

$$\sigma(\sqrt{i\partial_t + \Delta_\Sigma + V}) = \sqrt{-\tau - \xi^2 + V} \quad \text{mod } S_E^{-1}$$

et donc (4.91) au niveau des opérateurs.

On procède de la même manière pour montrer (4.92) en introduisant $B = (i\partial_t + \Delta_\Sigma + V)^{-1}$. C'est un opérateur d'ordre -2 , dont le symbole total admet le développement asymptotique

$$\sigma(B) = \sum_{j=0}^{+\infty} \sigma_{-2-j}$$

Par ailleurs, puisque l'on a $\sigma(B^{-1}) = \sigma(i\partial_t + \Delta_\Sigma + V) = -\tau - \xi^2 + V$, on a l'identité

$$1 = \sigma(BB^{-1}) = \sum_{|\alpha|=0}^{+\infty} \frac{(-i)^{|\alpha|}}{\alpha!} \partial_{(\xi,\tau)}^\alpha \sigma(B) \partial_{(s,t)}^\alpha \sigma(B^{-1}).$$

La lecture des termes d'ordre 0 conduit à $1 = \sigma_{-2}\sigma(B^{-1}) = \sigma_{-2}(-\tau - \xi^2 + V)$, d'où

$$\sigma_{-2} = \frac{1}{-\tau - \xi^2 + V}.$$

On obtient ensuite les équations $0 = \sigma_{-3}\sigma(B^{-1})$ d'où $\sigma_{-3} = 0$, puis $0 = \sigma_{-4}\sigma(B^{-1})$, d'où $\sigma_{-4} = 0$. Enfin, les termes d'ordre -3 conduisent à $\sigma_{-5}\sigma(B^{-1}) = i\partial_\xi\sigma_{-2}\partial_s\sigma(B^{-1})$, d'où

$$\sigma_{-5} = \frac{2i\partial_s V\xi}{(-\tau - \xi^2 + V)^3}.$$

On en déduit l'asymptotique de l'opérateur inverse

$$\sigma\left((i\partial_t + \Delta_\Sigma + V)^{-1}\right) \sim \frac{1}{-\tau - \xi^2 + V} + \frac{2i\partial_s V \xi}{(-\tau - \xi^2 + V)^3} + \dots$$

Nous pouvons à présent déterminer l'asymptotique du symbole de l'opérateur $-\kappa(i\partial_t + \Delta_\Sigma + V)^{-1}\Delta_\Sigma$. La fonction κ ne dépendant que de s et t , on a dans un premier temps

$$\sigma\left(-\kappa(i\partial_t + \Delta_\Sigma + V)^{-1}\Delta_\Sigma\right) = -\kappa\sigma\left((i\partial_t + \Delta_\Sigma + V)^{-1}\Delta_\Sigma\right).$$

Puis, la formule de composition permet d'écrire

$$\begin{aligned} -\kappa\sigma\left((i\partial_t + \Delta_\Sigma + V)^{-1}\Delta_\Sigma\right) &= -\kappa\sum_{|\alpha|=0}^{+\infty} \frac{(-i)^{|\alpha|}}{\alpha!} \partial_{(\xi,\tau)}^\alpha \sigma\left((i\partial_t + \Delta_\Sigma + V)^{-1}\right) \partial_{(s,t)}^\alpha \sigma(\Delta_\Sigma) \\ &= \kappa\xi^2\sigma\left((i\partial_t + \Delta_\Sigma + V)^{-1}\right) \end{aligned}$$

puisque tous les termes de la somme sont nuls pour $|\alpha| \geq 1$. Ainsi, on a

$$\sigma\left(-\kappa(i\partial_t + \Delta_\Sigma + V)^{-1}\Delta_\Sigma\right) \sim \frac{\kappa\xi^2}{-\tau - \xi^2 + V} + \frac{2i\kappa\partial_s V \xi^3}{(-\tau - \xi^2 + V)^3} + \dots$$

Le symbole $\frac{\kappa\xi^2}{-\tau - \xi^2 + V}$ s'interprète finalement comme le symbole principal de l'opérateur $-\kappa(i\partial_t + \Delta_\Sigma + V)^{-1}\Delta_\Sigma$, ce qui permet d'écrire (4.92). \square

Du lemme 4.38, on déduit les nouvelles conditions aux limites de la stratégie deux, notées $ABC_{2,P}^M$, et résumées dans la proposition 4.39.

Proposition 4.39. *Dans la stratégie deux ou méthode directe, et suivant l'approche par approximants de Padé, les conditions aux limites d'ordre M sont données par*

$$\partial_{\mathbf{n}}u + \Lambda_{2,P}^M u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T, \quad (4.95)$$

où les opérateurs $\Lambda_{2,P}^M$ sont définis sur Σ_T par

$$\Lambda_{2,P}^1 u = -i\sqrt{i\partial_t + \Delta_\Sigma + V}u \quad (4.96)$$

$$\Lambda_{2,P}^2 u = \Lambda_{2,P}^1 u + \frac{\kappa}{2}u - \frac{\kappa}{2}(i\partial_t + \Delta_\Sigma + V)^{-1}\Delta_\Sigma u \quad (4.97)$$

Ces conditions sont nommées $ABC_{2,P}^M$ dans la suite.

Remarque 4.6. On pourrait vouloir encore écrire la condition d'ordre trois en prenant en compte le symbole $\tilde{\lambda}_{-1}$. Cependant, il faut prendre garde au fait que l'approximation (4.91) est faite à un opérateur d'ordre -1 près, soit du même ordre que $\tilde{\lambda}_{-1}$. On ne peut donc pas à la fois faire l'approximation (4.91) et ajouter $\tilde{\lambda}_{-1}$ sans prendre un minimum de précautions. En fait, il faudrait approcher $\tilde{\lambda}_1$ en utilisant non pas (4.91), mais une version plus détaillée de (4.91) incluant le terme d'ordre -1 . Comme nous avons calculé σ_{-1} , nous savons que

$$\sqrt{-\tau - \xi^2 + V} \sim \sigma\left(\sqrt{i\partial_t + \Delta_\Sigma + V}\right) + \frac{i}{4} \frac{\partial_s \xi}{\sqrt{-\tau - \xi^2 + V}}$$

et cette égalité est vraie à un symbole d'ordre au plus -2 près (pour avoir l'ordre exact, il faudrait poursuivre le calcul des termes pour connaître l'ordre du premier terme non nul). Il faudrait alors utiliser une égalité du type

$$Op\left(\sqrt{-\tau - \xi^2 + V}\right) \sim \sqrt{i\partial_t + \Delta_\Sigma + V} + \frac{i}{4} Op\left(\frac{\partial_s \xi}{\sqrt{-\tau - \xi^2 + V}}\right)$$

nécessitant d'explicitier le deuxième opérateur intervenant dans le second membre.

Comme nous considérons que les deux premiers symboles contiennent déjà beaucoup d'information du fait de la présence du potentiel, nous ne considérerons que la condition d'ordre deux $ABC_{2,P}^2$ et n'écrirons pas les conditions d'ordre supérieur dans le cadre de l'approche Padé, pour la méthode directe.

Remarque 4.7. Nous avons vu au paragraphe 4.2.2 que dans le cas d'un potentiel indépendant du temps et radial, on avait correspondance entre la méthode de changement de jauge et la méthode directe. Cela doit donc se retrouver entre les conditions $ABC_{1,P}^M$ et $ABC_{2,P}^M$ de l'approche Padé. C'est effectivement le cas, aussi bien pour les conditions d'ordre un que pour celles d'ordre deux. En effet, pour un potentiel $V = V(r)$, la condition $ABC_{2,P}^1$ reste donnée par (4.96), tandis que la condition $ABC_{1,P}^1$ est donnée par

$$\partial_{\mathbf{n}} u - ie^{itV(r)} \sqrt{i\partial_t + \Delta_\Sigma} \left(e^{-itV(r)} u \right) = 0 \quad \text{sur } \Sigma, \quad (4.98)$$

puisque $\mathcal{V}(r, t) = tV(r)$. Or, le symbole de l'opérateur $\sqrt{i\partial_t + \Delta_\Sigma}$ est $-\tau - \xi^2$, qui ne dépend ni de s ni de t . Le lemme 4.32 s'applique donc, et assure que la condition (4.98) est équivalente à $ABC_{2,P}^1$. Il en va de même pour l'ordre deux. En effet, étant donné que $\partial_s \mathcal{V} = 0$, la condition $ABC_{1,P}^2$ est dans ce cas donnée par

$$\partial_{\mathbf{n}} u - ie^{itV(r)} \sqrt{i\partial_t + \Delta_\Sigma} \left(e^{-itV(r)} u \right) + \frac{\kappa}{2} u - \frac{\kappa}{2} e^{itV(r)} (i\partial_t + \Delta_\Sigma)^{-1} \Delta_\Sigma \left(e^{-itV(r)} u \right) = 0,$$

et le lemme 4.32 s'applique encore puisque $\frac{-\xi^2}{-\tau - \xi^2}$ ne dépend ni de s ni de t . Du point de vue théorique, les conditions $ABC_{1,P}^M$ et $ABC_{2,P}^M$ sont donc équivalentes lorsque le potentiel est de la forme $V = V(r)$.

En ce qui concerne l'approche Taylor, le développement de Taylor et la troncature du développement sont susceptibles d'avoir brisé cette équivalence, c'est la raison pour laquelle on ne peut pas constater cette équivalence entre les conditions $ABC_{1,T}^M$ et $ABC_{2,T}^M$ pour un potentiel radial.

4.6 Les conditions aux limites sans potentiel

Des deux sections précédentes, on extrait les conditions sans potentiel, qui sont les conditions qu'on obtiendrait pour résoudre l'équation en l'absence de potentiel. On remarque que pour $V = 0$, les conditions $ABC_{1,T}^M$ et $ABC_{2,T}^M$ coïncident pour $M \in \{2, 3, 4\}$. De manière analogue, les conditions $ABC_{1,P}^M$ et $ABC_{2,P}^M$ coïncident pour $M = 1$ et $M = 2$ (ce qui n'est qu'un cas particulier du potentiel radial). Finalement, le changement de jauge et la méthode directe coïncident. On obtient donc deux familles de CLA sans potentiel, celles approchées par développement de Taylor, notées $ABC_{0,T}^M$ et

données par

$$\text{ABC}_{0,T}^2 : \partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4}\partial_t^{1/2}u + \frac{\kappa}{2}u = 0, \quad (4.99)$$

$$\text{ABC}_{0,T}^3 : \partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4}\partial_t^{1/2}u + \frac{\kappa}{2}u - e^{i\pi/4}\left(\frac{\kappa^2}{8} + \frac{\Delta_{\Sigma}}{2}\right)I_t^{1/2}u = 0, \quad (4.100)$$

$$\text{ABC}_{0,T}^4 : \partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4}\partial_t^{1/2}u + \frac{\kappa}{2}u - e^{i\pi/4}\left(\frac{\kappa^2}{8} + \frac{\Delta_{\Sigma}}{2}\right)I_t^{1/2}u + i\left(\frac{\partial_s(\kappa\partial_s)}{2} + \frac{\kappa^3 + \partial_s^2\kappa}{8}\right)I_tu = 0, \quad (4.101)$$

et celles approchées par approximants de Padé, notées $\text{ABC}_{0,P}^M$ et données par

$$\text{ABC}_{0,P}^1 : \partial_{\mathbf{n}}u - i\sqrt{i\partial_t + \Delta_{\Sigma}}u = 0, \quad (4.102)$$

$$\text{ABC}_{0,P}^2 : \partial_{\mathbf{n}}u - i\sqrt{i\partial_t + \Delta_{\Sigma}}u + \frac{\kappa}{2}u - \frac{\kappa}{2}(i\partial_t + \Delta_{\Sigma})^{-1}\Delta_{\Sigma}u = 0. \quad (4.103)$$

Les conditions $\text{ABC}_{0,T}^M$ obtenues à l'aide de l'approche Taylor coïncident avec les conditions aux limites développées dans [15] pour l'équation sans potentiel. Avant d'étudier le cas des conditions artificielles avec potentiel, ces conditions sans potentiel seront testées au paragraphe 4.10.1.

4.7 Obtention d'estimations *a priori*

4.7.1 Principe

Nous disposons de plusieurs familles de conditions aux limites, celles issues du changement de jauge, et celles issues de la méthode directe, avec à chaque fois une formulation de type Taylor et une formulation de type Padé. Toutes ces conditions sont résumées dans les propositions 4.35, 4.36, 4.37 et 4.39 pour les conditions $\text{ABC}_{1,T}^M$, $\text{ABC}_{1,P}^M$, $\text{ABC}_{2,T}^M$ et $\text{ABC}_{2,P}^M$ respectivement.

Dans [15], pour l'équation sans potentiel, des conditions aux limites ont été construites suivant une approche qui correspond, dans le cas d'un potentiel nul, à la stratégie deux développée ici. Les symboles ont ensuite été approchés suivant un développement de Taylor à $|\tau|$ grand, comme pour l'obtention des conditions $\text{ABC}_{2,T}^M$. Pour les conditions ainsi obtenues, le résultat suivant est démontré dans [15].

Proposition 4.40. *On considère $u_0 \in L^2(\Omega)$ et u la solution du problème*

$$\begin{cases} (i\partial_t + \Delta u) = 0, & \text{dans } \Omega \times \mathbb{R}^{+*} \\ \partial_{\mathbf{n}}u + T^M u = 0, & \text{sur } \Sigma \times \mathbb{R}^{+*} \\ u(x, 0) = u_0(x), & \text{dans } \Omega \end{cases} \quad (4.104)$$

où les opérateurs T^M sont définis sur $\Sigma \times \mathbb{R}^{+*}$ par

$$\begin{aligned} T^1u &= e^{-i\pi/4}\partial_t^{1/2}u, & T^2u &= T^1u + \frac{\kappa}{2}u, \\ T^3u &= T^2u - e^{i\pi/4}\left(\frac{\kappa^2}{8} + \frac{\Delta_{\Sigma}}{2}\right)I_t^{1/2}u, \\ T^4u &= T^3u + i\left(\frac{\kappa^3}{8} + \frac{1}{2}\partial_s(\kappa\partial_s) + \frac{\partial_s^2\kappa}{8}\right)I_tu. \end{aligned}$$

Alors, u est unique et définie sur $C([0; T], L^2(\Omega))$. De plus, u vérifie l'inégalité d'énergie

$$\forall t \in [0; T], \quad \|u(t)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u_0\|_{L^2(\Omega)}. \quad (4.105)$$

L'idée est de généraliser cette proposition aux conditions aux limites de même type incluant un potentiel, c'est-à-dire les conditions $ABC_{1,T}^M$ ou $ABC_{2,T}^M$. Si on observe la forme des opérateurs $\Lambda_{1,T}^M$ et $\Lambda_{2,T}^M$, il semble relativement facile de généraliser la proposition 4.40 à $\Lambda_{1,T}^2$, compte tenu de la symétrie de cet opérateur, mais le problème semble plus compliqué pour $\Lambda_{1,T}^3$ compte tenu du terme $i\partial_s^2\mathcal{V} - (\partial_s\mathcal{V})^2$ qui n'a pas de signe particulier, ce qui peut être un obstacle important dans la preuve. Le sort de $\Lambda_{1,T}^4$ est lié à celui de $\Lambda_{1,T}^3$.

Les opérateurs liés à la deuxième stratégie sont plus proches encore des opérateurs T^M , puisqu'il n'y a pas de changement de variable. Il s'agit d'étudier dans quelle mesure les termes ajoutés par le potentiel ne perturbent pas la preuve d'unicité. Comme $\Lambda_{2,T}^1 = T^1$ et $\Lambda_{2,T}^2 = T^2$, le résultat pour ces opérateurs est immédiat (cela montre à quel point cette condition semble peu précise, puisqu'elle ne tient pas du tout compte du potentiel). Les opérateurs $\Lambda_{2,T}^3$ et $\Lambda_{2,T}^4$ sont modifiés respectivement d'un terme V et d'un terme $\partial_n V$ par rapport à T^3 et T^4 . Notre étude portera surtout sur l'influence de ces deux termes.

Nous aurons besoin du lemme suivant, basé sur [25].

Lemme 4.41. *Soient $\varphi \in H^{1/4}([0; t], L^2(\Sigma))$ et $\psi \in L^2([0; t], L^2(\Sigma))$ et des fonctions étendues à 0 sur $\mathbb{R} \setminus [0; t]$. Alors on a*

$$\int_{\mathbb{R} \times \Sigma} \overline{\varphi(s, t')} \partial_{t'}^{1/2} \varphi(s, t') dt' d\Sigma \in e^{i\pi/4} \mathbb{R}^+ \cup e^{-i\pi/4} \mathbb{R}^+, \quad (4.106)$$

$$\int_{\mathbb{R} \times \Sigma} \overline{\psi(s, t')} I_{t'}^{1/2} \psi(s, t') dt' d\Sigma \in e^{i\pi/4} \mathbb{R}^+ \cup e^{-i\pi/4} \mathbb{R}^+, \quad (4.107)$$

$$\int_{\mathbb{R} \times \Sigma} \overline{\psi(s, t')} I_{t'} \psi(s, t') dt' d\Sigma \in i\mathbb{R}. \quad (4.108)$$

Démonstration. On rappelle que τ et ξ désignent respectivement les covariables de Fourier de t' et s . Notons \hat{u} la transformée de Fourier de u . Remarquons tout d'abord que pour un opérateur pseudodifférentiel général $P(s, t', \partial_s, \partial_t)$ de symbole $p(s, t', \xi, \tau)$, on a l'identité suivante

$$\int_{\mathbb{R} \times \Sigma} \overline{\varphi(s, t')} P(s, t', \partial_s, \partial_t) \varphi(s, t') dt' d\Sigma = \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} p(s, t', \xi, \tau) |\hat{\varphi}(\xi, \tau)|^2 d\tau d\xi. \quad (4.109)$$

En effet, le théorème de Plancherel permet d'écrire

$$\int_{\mathbb{R} \times \Sigma} \overline{\varphi(s, t')} P \varphi(s, t') dt' d\Sigma = \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} \overline{\mathcal{F}(\varphi)(\xi, \tau)} \mathcal{F}(P \varphi(s, t'))(\xi, \tau) d\tau d\xi.$$

Or par définition du symbole d'un opérateur, on a

$$\mathcal{F}(P \varphi(s, t'))(\xi, \tau) = \sigma(P) \hat{\varphi}(\xi, \tau) = p(s, t', \xi, \tau) \hat{\varphi}(\xi, \tau),$$

d'où l'égalité (4.109)

$$\int_{\mathbb{R} \times \Sigma} \overline{\varphi(s, t')} P \varphi(s, t') dt' d\Sigma = \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} \overline{\hat{\varphi}(\xi, \tau)} p(s, t', \xi, \tau) \hat{\varphi}(\xi, \tau) dt' d\Sigma = \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} p(s, t', \xi, \tau) |\hat{\varphi}(\xi, \tau)|^2 d\tau d\xi.$$

On applique ensuite ce résultat à $\partial_{t'}^{1/2}$ dont le symbole est $\sqrt{i\tau}$. Il faut déterminer la partie du plan complexe dans laquelle varie ce symbole. Or, pour τ positif on a $\sqrt{i\tau} = e^{i\pi/4} \sqrt{\tau}$, et pour τ négatif, $\sqrt{i\tau} = e^{-i\pi/4} \sqrt{-\tau}$, d'où la propriété (4.106) annoncée.

On procède de même pour les opérateurs $I_{t'}^{1/2}$ et $I_{t'}$, dont les symboles (formels) sont respectivement

$$\sigma\left(I_{t'}^{1/2}\right) = \frac{1}{\sqrt{i\tau}}$$

qui varie dans le même domaine que $\sqrt{i\tau}$, d'où le résultat (4.107), et

$$\sigma\left(I_{t'}\right) = \frac{1}{i\tau}$$

qui varie dans $i\mathbb{R}$. D'où le dernier résultat (4.108). \square

Le lemme 4.41 est l'élément de base qui nous permettra d'établir des estimations *a priori* pour les conditions aux limites $ABC_{1,T}^M$ et $ABC_{2,T}^M$.

Rappelons également que les conditions aux limites ont été construites dans un régime haute-fréquence. Nous considérons la définition suivante (E représente toujours le couple $(1, 2)$).

Définition 4.2. On définit la zone E -quasi hyperbolique comme l'ensemble \mathcal{H} des points (s, t, ξ, τ) tels que

$$\mathcal{H} = \{(s, t, \xi, \tau), -\tau - \xi^2 > 0\} \quad (4.110)$$

La construction des conditions aux limites artificielles est alors effectuée sous l'hypothèse micro-locale que les points (s, t, ξ, τ) se trouvent dans \mathcal{H} . Cette hypothèse caractérise la partie propagative de l'onde. Elle assure également que les symboles manipulés jusqu'ici, de la forme $\frac{1}{\sqrt{-\tau - \xi^2}}$ notamment, ne sont pas singuliers en-dehors de l'origine, puisque la parabole définie par $\tau = -\xi^2$ ne fait pas partie du domaine de travail \mathcal{H} . Deux autres régions peuvent également être définies : la zone E -quasi elliptique \mathcal{E} donnée par

$$\mathcal{E} = \{(s, t, \xi, \tau), -\tau - \xi^2 < 0\},$$

qui correspond à la partie évanescence de l'onde (exponentiellement décroissante), et la zone E -quasi glancing qui est l'ensemble complémentaire \mathcal{G} de $\mathcal{E} \cup \mathcal{H}$. Cette dernière région est réduite à $\{0\}$ si l'onde u n'est pas tangentiellement incidente à Σ . Dans ce travail, nous supposons toujours que les fréquences sont définies dans la zone E -quasi hyperbolique \mathcal{H} . Cette hypothèse n'est pas toujours valide, mais elle est vérifiée si nous supposons que la partie évanescence de l'onde est nulle et que \mathcal{E} est en conséquence réduite à $\{0\}$.

Remarque 4.8. Les conditions aux limites de l'approche Padé sont exclues de cette étude car de telles estimations ne peuvent être obtenues par la même méthode. A l'heure actuelle, on ne sait pas obtenir de telles estimations pour les CLA approchées par approximants de Padé, mais comme mentionné dans le cas unidimensionnel, des pistes se trouvent peut-être dans [93].

4.7.2 Estimations *a priori* pour les conditions $ABC_{2,T}^M$

Pour les conditions de la famille $ABC_{2,T}^M$, on a le résultat suivant.

Théorème 4.42. Soit $u_0 \in L^2(\Omega)$ une donnée initiale à support compact dans Ω . Soit $V \in C^\infty(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^+, \mathbb{R})$ un potentiel à valeurs réelles. On note $u \in C([0; T], H^1(\Omega))$ une solution du problème avec donnée initiale et condition aux limites

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + Vu = 0, & \text{dans } \Omega_T, \\ \partial_{\mathbf{n}} u + \Lambda_{2,T}^M u = 0, & \text{sur } \Sigma_T, \\ u(x, 0) = u_0(x), & \text{sur } \Omega \end{cases} \quad (4.111)$$

où les opérateurs $\Lambda_{2,T}^M$, $M \in \{1, 2, 3, 4\}$, sont définis dans la proposition 4.37. Alors, u satisfait l'inégalité d'énergie suivante :

$$\forall t > 0, \quad \|u(t)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u_0\|_{L^2(\Omega)} \quad (4.112)$$

pour $M = 1$ et $M = 2$. De plus, cette inégalité est également satisfaite pour $M = 3$ sous réserve que V reste positif sur Σ , et pour $M = 4$ sous l'hypothèse supplémentaire que $\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}}V)$ est constant sur Σ au cours du temps. En particulier, ceci implique l'unicité de la solution u du problème avec donnée initiale et condition aux limites (4.111).

Démonstration. Soit $\tilde{T} \in]0; T]$. Notons $\mathbf{x} = (x, y) \in \mathbb{R}^2$. On commence par étendre u à une fonction \tilde{u} définie sur \mathbb{R} de la façon suivante

$$\tilde{u}(\cdot, t) = \begin{cases} u(\cdot, t) & \text{pour } t \in [0; \tilde{T}] \\ 0 & \text{pour } t \in]-\infty; 0[\cup]\tilde{T}; +\infty[. \end{cases}$$

Au sens des distributions, on obtient :

$$\begin{aligned} \partial_t \tilde{u}(\mathbf{x}, t) &= \begin{cases} \partial_t u(\mathbf{x}, t) - u(\mathbf{x}, \tilde{T})\delta_{\tilde{T}}(t) + u_0(\mathbf{x})\delta_0(t), & t \in [0; \tilde{T}] \\ 0, & t \in]-\infty; 0[\cup]\tilde{T}; +\infty[\end{cases} \\ \Delta \tilde{u}(\mathbf{x}, t) &= \begin{cases} \Delta u(\mathbf{x}, t), & t \in [0; \tilde{T}] \\ 0, & t \in]-\infty; 0[\cup]\tilde{T}; +\infty[\end{cases} \\ \partial_{\mathbf{n}} \tilde{u} + \Lambda_{2,T}^M \tilde{u} &= 0. \end{aligned}$$

La fonction \tilde{u} vérifie alors l'équation

$$i\partial_t \tilde{u} + \Delta \tilde{u} + V\tilde{u} = -iu(\mathbf{x}, \tilde{T})\delta_{\tilde{T}} + iu_0(\mathbf{x})\delta_0(t), \quad \text{sur } \Omega \times \mathbb{R}$$

En multipliant cette équation par $-i\overline{\tilde{u}(\mathbf{x}, t)}$, on obtient

$$\overline{\tilde{u}}\partial_t \tilde{u} - i\overline{\tilde{u}}\Delta \tilde{u} - i\overline{\tilde{u}}V\tilde{u} = -u(\mathbf{x}, \tilde{T})\overline{\tilde{u}}\delta_{\tilde{T}}(t) + u_0(\mathbf{x})\overline{\tilde{u}}\delta_0(t).$$

On intègre par parties sur Ω

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \overline{\tilde{u}}\partial_t \tilde{u} d\Omega - i \int_{\Sigma} \overline{\tilde{u}} \partial_{\mathbf{n}} \tilde{u} d\Sigma + i \int_{\Omega} |\nabla \tilde{u}|^2 d\Omega - i \int_{\Omega} V|\tilde{u}|^2 d\Omega \\ = - \int_{\Omega} u(\mathbf{x}, \tilde{T})\overline{\tilde{u}}\delta_{\tilde{T}}(t) d\Omega + \int_{\Omega} u_0(\mathbf{x})\overline{\tilde{u}}\delta_0(t) d\Omega \end{aligned} \quad (4.113)$$

puis on prend la partie réelle de cette expression en tenant compte du fait que V est un potentiel réel

$$\int_{\Omega} \partial_t \frac{|\tilde{u}|^2}{2} d\Omega - \text{Re} \left(i \int_{\Sigma} \partial_{\mathbf{n}} \tilde{u} \overline{\tilde{u}} d\Sigma \right) = - \text{Re} \left(\int_{\Omega} u(\mathbf{x}, \tilde{T})\overline{\tilde{u}}\delta_{\tilde{T}}(t) d\Omega \right) + \text{Re} \left(\int_{\Omega} u_0(\mathbf{x})\overline{\tilde{u}}\delta_0(t) d\Omega \right) \quad (4.114)$$

On intègre ensuite pour $t \in \mathbb{R}$. Les termes du second membre deviennent

$$\int_{\mathbb{R}} \int_{\Omega} u(\mathbf{x}, \tilde{T})\overline{\tilde{u}(\mathbf{x}, t)}\delta_{\tilde{T}}(t) d\Omega dt = \int_{\Omega} u(\mathbf{x}, \tilde{T}) \int_{\mathbb{R}} \overline{\tilde{u}(\mathbf{x}, t)}\delta_{\tilde{T}}(t) dt d\Omega = \int_{\Omega} u(\mathbf{x}, \tilde{T})\overline{\tilde{u}(\mathbf{x}, \tilde{T})} d\Omega = \|u(\tilde{T})\|_{L^2(\Omega)}^2$$

puisque $\tilde{u}(\mathbf{x}, \tilde{T}) = u(\mathbf{x}, \tilde{T})$, et

$$\int_{\mathbb{R}} \int_{\Omega} u_0(\mathbf{x})\overline{\tilde{u}(\mathbf{x}, t)}\delta_0(t) d\Omega dt = \int_{\Omega} u_0(\mathbf{x})\overline{\tilde{u}(\mathbf{x}, 0)} d\Omega = \|u_0\|_{L^2(\Omega)}^2,$$

car $\tilde{u}(\mathbf{x}, 0) = u(\mathbf{x}, 0) = u_0(\mathbf{x})$. Par ailleurs, puisque \tilde{u} est nulle en $\pm\infty$, nous avons

$$\int_{\Omega} \int_{\mathbb{R}} \partial_t \frac{|\tilde{u}|^2}{2} dt d\Omega = \int_{\Omega} \left[\frac{|\tilde{u}(\mathbf{x}, t)|^2}{2} \right]_{-\infty}^{+\infty} = 0.$$

Finalement, après intégration en temps de (4.114), il reste

$$\operatorname{Re} \left(i \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \bar{u} \partial_{\mathbf{n}} \tilde{u} d\Sigma dt \right) = \|u(\tilde{T})\|^2 - \|u_0\|^2 \quad (4.115)$$

pour tout $\tilde{T} \in [0; T]$, et où $\partial_{\mathbf{n}} \tilde{u}$ est donné par la condition aux limites choisie. Par abus de notation, on notera désormais u à la place de \tilde{u} , tout en gardant à l'esprit que u est nulle en-dehors de $[0; \tilde{T}]$.

Considérons pour commencer la condition d'ordre deux $ABC_{2,T}^2$ donnée par l'opérateur (4.86). La condition aux limites est constituée de deux termes :

$$\int_{\Sigma \times \mathbb{R}} i \bar{u} \partial_{\mathbf{n}} u d\Sigma dt = -ie^{-i\pi/4} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \bar{u} \partial_t^{1/2} u d\Sigma dt - \frac{i}{2} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \kappa |u|^2 d\Sigma dt \quad (4.116)$$

dont il faut étudier le signe de la partie réelle. Pour cela, on utilise le résultat (4.106) du lemme 4.41. Ainsi, le premier terme de (4.116) varie dans $\mathbb{R}^- \cup i\mathbb{R}^-$, donc est de partie réelle négative. Comme le deuxième terme est imaginaire pur, le résultat (4.112) est prouvé pour la condition d'ordre deux.

Considérons maintenant la condition d'ordre quatre $ABC_{2,T}^4$ donnée par l'opérateur (4.88). La condition aux limites se décompose en sept termes A_j , $1 \leq j \leq 7$, ordonnés de la manière suivante

$$\begin{aligned} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} i \bar{u} \partial_{\mathbf{n}} u d\Sigma dt &= \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \left(-ie^{-i\pi/4} \bar{u} \partial_t^{1/2} u + ie^{i\pi/4} \bar{u} \frac{\Delta_{\Sigma}}{2} I_t^{1/2} u \right) d\Sigma dt - \frac{i}{2} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \kappa |u|^2 d\Sigma dt \\ &\quad + ie^{i\pi/4} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \frac{\kappa^2}{8} \bar{u} I_t^{1/2} u d\Sigma dt + ie^{i\pi/4} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \frac{\operatorname{sg}(V)}{2} \sqrt{|V|} \bar{u} I_t^{1/2} \left(\sqrt{|V|} u \right) d\Sigma dt \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \bar{u} \partial_s (\kappa \partial_s) I_t u dt d\Sigma dt + \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} \bar{u} I_t u d\Sigma dt \\ &\quad - \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \frac{\operatorname{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V)}{4} \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|} \bar{u} I_t \left(\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|} u \right) d\Sigma dt \\ &= \sum_{j=1}^7 A_j. \end{aligned} \quad (4.117)$$

Il faut donc étudier le signe de la partie réelle des termes A_j . Pour cela, on utilisera à plusieurs reprises l'identité (4.109). Nous avons

$$A_1 = \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} |\hat{u}(\xi, \tau)|^2 \sigma \left(-ie^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} + ie^{i\pi/4} \frac{\Delta_{\Sigma}}{2} I_t^{1/2} \right) d\xi d\tau.$$

Or, on a également

$$a_1(\xi, \tau) := \sigma \left(-ie^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} + ie^{i\pi/4} \frac{\Delta_{\Sigma}}{2} I_t^{1/2} \right) = \frac{-i}{2} \left(2e^{-i\pi/4} \sqrt{i\tau} + e^{i\pi/4} \frac{\xi^2}{\sqrt{i\tau}} \right).$$

Pour $\tau > 0$, on a $\sqrt{i\tau} = e^{i\pi/4} \sqrt{\tau}$ et donc

$$a_1(\xi, \tau) = \frac{-i}{2} \left(2\sqrt{\tau} + \frac{\xi^2}{\sqrt{\tau}} \right).$$

Le symbole $a_1(\xi, \tau)$ est ainsi imaginaire pur dans ce cas. Pour $\tau < 0$, on écrit $\sqrt{i\tau} = e^{-i\pi/4}\sqrt{-\tau}$ et on a

$$a_1(\xi, \tau) = \frac{-i}{2} \left(-2i\sqrt{-\tau} + i \frac{\xi^2}{\sqrt{-\tau}} \right) = -\sqrt{-\tau} + \frac{1}{2} \frac{\xi^2}{\sqrt{-\tau}} = \frac{1}{2\sqrt{-\tau}} (\tau + \tau + \xi^2).$$

Or, nous travaillons dans la zone de fréquences E -quasi hyperbolique \mathcal{H} , dans laquelle $\tau + \xi^2 < 0$. En conséquence, le réel $a_1(\xi, \tau)$ vérifie $a_1(\xi, \tau) < \frac{\tau}{2\sqrt{-\tau}} < 0$ et sa partie réelle est donc bien négative. Finalement, on a $\text{Re}(A_1) \leq 0$. Le terme A_2 est imaginaire pur. Le terme A_3 vérifie

$$A_3 = ie^{i\pi/4} \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} |\hat{u}(\xi, \tau)|^2 a_3(\xi, \tau) d\xi d\tau,$$

où

$$a_3(\xi, \tau) = \sigma \left(\frac{\kappa^2}{8} I_t^{1/2} \right) = \frac{\kappa^2}{8} \frac{1}{\sqrt{i\tau}} \in e^{i\pi/4}\mathbb{R}^+ \cup e^{-i\pi/4}\mathbb{R}^+.$$

On en déduit que A_3 varie dans $\mathbb{R}^- \cup i\mathbb{R}^+$, et est donc bien de partie réelle négative. Comme on fait l'hypothèse que V reste positif sur Σ , donc $\text{sg}(V)$ est constant égal à 1, on peut réécrire A_4 en appliquant l'identité de Plancherel en temps

$$\begin{aligned} A_4 &= ie^{i\pi/4} \int_{\Sigma} \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} \sqrt{|V|} \bar{u} I_t^{1/2} \left(\sqrt{|V|} u \right) dt d\Sigma, \\ &= ie^{i\pi/4} \int_{\Sigma} \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} \left| \mathcal{F}_t(\sqrt{|V|} u) \right|^2 (s, \tau) \frac{1}{\sqrt{i\tau}} d\tau d\Sigma. \end{aligned}$$

Ici, on a appliqué le lemme 4.41 mais en travaillant uniquement sur l'intégrale en temps, et en prenant la transformée de Fourier seulement en temps. L'intégrale sur τ varie dans $e^{i\pi/4}\mathbb{R}^+ \cup e^{-i\pi/4}\mathbb{R}^+$, donc $A_4 \in \mathbb{R}^- \cup i\mathbb{R}^+$ et A_4 est bien de partie réelle négative.

Les trois termes suivants proviennent de l'ajout de la condition d'ordre quatre. On va montrer que sous l'hypothèse faite sur le signe de $\partial_{\mathbf{n}}V$, ils sont tous imaginaires purs. Le premier d'entre eux, A_5 , est traité en effectuant une intégration par parties sur la courbe fermée Σ et en utilisant la commutativité de I_t et de ∂_s .

$$\int_{\Sigma} \bar{u} \partial_s (\kappa \partial_s I_t u) d\Sigma = - \int_{\Sigma} \partial_s \bar{u} \kappa \partial_s I_t u d\Sigma = - \int_{\Sigma} \partial_s \bar{u} \kappa I_t (\partial_s u) d\Sigma$$

d'où

$$A_5 = \frac{1}{2} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \overline{\partial_s u} \kappa I_t (\partial_s u) d\Sigma dt = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} \left| \widehat{\partial_s u}(\xi, \tau) \right|^2 \frac{\kappa}{i\tau} d\xi d\tau.$$

Comme κ est réel, le terme A_5 est imaginaire pur. Le terme A_6 est imaginaire pur également puisque

$$A_6 = \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} |\hat{u}(\xi, \tau)|^2 \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} \frac{1}{i\tau} d\xi d\tau.$$

Enfin, pour A_7 on considère l'intégrale en temps

$$\begin{aligned} A_7 &= - \int_{\Sigma} \frac{\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}}V)}{4} \int_{\mathbb{R}} \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|} \bar{u} I_t \left(\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|} u \right) dt d\Sigma \\ &= - \int_{\Sigma} \frac{\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}}V)}{4} \int_{\mathbb{R}} \left| \mathcal{F}_t(\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}V|} u) \right|^2 \frac{1}{i\tau} d\tau d\Sigma \end{aligned}$$

qui est imaginaire pure. Finalement, on a

$$\text{Re} \left(i \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \bar{u} \partial_{\mathbf{n}} \tilde{u} d\Sigma dt \right) \leq 0,$$

et donc, pour tout temps $\tilde{T} \in [0; T]$, $\|u(\tilde{T})\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u_0\|_{L^2(\Omega)}$, ce qui achève la preuve pour $M = 4$.

Enfin, pour obtenir la preuve à l'ordre trois, il suffit de supprimer les termes A_5 , A_6 et A_7 provenant de l'ordre quatre. \square

4.7.3 Estimations *a priori* pour les conditions $ABC_{1,T}^M$

Pour les conditions de la famille $ABC_{1,T}^M$, on a le théorème suivant.

Théorème 4.43. *Soit $u_0 \in L^2(\Omega)$ une donnée initiale à support compact dans Ω . Soit $V \in C^\infty(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^+, \mathbb{R})$ un potentiel à valeurs réelles. On note $u \in C([0; T], H^1(\Omega))$ une solution du problème avec donnée initiale et condition aux limites*

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + Vu = 0, & \text{dans } \Omega_T, \\ \partial_{\mathbf{n}} u + \Lambda_{1,T}^M u = 0, & \text{sur } \Sigma_T, \\ u(x, 0) = u_0(x), & \text{sur } \Omega \end{cases} \quad (4.118)$$

où les opérateurs $\Lambda_{1,T}^M$, $M \in \{2, 3, 4\}$ sont définis dans la proposition 4.35. Alors, u satisfait l'inégalité d'énergie suivante :

$$\forall t > 0, \quad \|u(t)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u_0\|_{L^2(\Omega)} \quad (4.119)$$

pour $M = 2$. De plus, si le potentiel V est radial : $V(r, s, t) = V(r, t)$, et que le domaine de calcul est radial également, alors l'inégalité d'énergie (4.119) est satisfaite également pour $M = 3$, et $M = 4$ si on suppose également que $\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V)$ ne dépend pas du temps sur Σ . En particulier, ceci implique l'unicité de la solution u du problème avec donnée initiale et condition aux limites (4.118).

Démonstration. On considère tout d'abord la condition d'ordre deux pour un potentiel général $V(r, s, t)$. Le début de la preuve est exactement le même que celui de la preuve du théorème 4.43, jusqu'à l'égalité (4.115). On considère maintenant pour condition aux limites la condition d'ordre deux $ABC_{1,T}^2$ décrite par l'opérateur (4.62). On obtient

$$\int_{\Sigma \times \mathbb{R}} i\bar{u}\partial_{\mathbf{n}} u \, d\Sigma dt = -ie^{-i\pi/4} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} e^{i\mathcal{V}} \bar{u} \partial_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u) \, d\Sigma dt - \frac{i}{2} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \kappa |u|^2 \, d\Sigma dt. \quad (4.120)$$

Le deuxième terme est clairement imaginaire pur. Quant au premier, le résultat (4.106) assure qu'il varie dans $\mathbb{R}^- \cup i\mathbb{R}^-$, ce qui achève la preuve pour $M = 2$.

Supposons à présent que le potentiel $V = V(r, t)$ est radial. Alors la fonction de phase \mathcal{V} est radiale aussi. Comme le domaine de calcul est également supposé radial, la frontière Σ de Ω coïncide avec une ligne de niveau de \mathcal{V} , ce qui implique que la dérivée curviligne $\partial_s \mathcal{V}$ est nulle. L'opérateur $\Lambda_{1,T}^2$ est inchangé, mais comme $\partial_s \mathcal{V} = 0$, les opérateurs $\Lambda_{1,T}^3$ et $\Lambda_{1,T}^4$ deviennent respectivement

$$\Lambda_{1,T}^3 u = \Lambda_{1,T}^2 u - e^{i\pi/4} e^{i\mathcal{V}} \left(\frac{\kappa^2}{8} + \frac{\Delta_\Sigma}{2} \right) I_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u),$$

$$\Lambda_{1,T}^4 u = \Lambda_{1,T}^3 u + ie^{i\mathcal{V}} \left(\frac{\partial_s(\kappa \partial_s)}{2} + \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} \right) I_t (e^{-i\mathcal{V}} u) - \frac{i}{4} \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V) \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|} e^{i\mathcal{V}} I_t \left(\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|} e^{-i\mathcal{V}} u \right),$$

en prenant soin d'écrire $\Lambda_{1,T}^4$ sous sa forme symétrique. La condition d'ordre trois conduit à l'étude des termes

$$\begin{aligned} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} i\bar{u}\partial_{\mathbf{n}} u \, d\Sigma dt &= \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \left(-ie^{-i\pi/4} e^{i\mathcal{V}} \bar{u} \partial_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u) + ie^{i\pi/4} e^{i\mathcal{V}} \bar{u} \frac{\Delta_\Sigma}{2} I_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u) \right) d\Sigma dt \\ &\quad - \frac{i}{2} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \kappa |u|^2 \, d\Sigma dt + ie^{i\pi/4} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \frac{\kappa^2}{8} e^{i\mathcal{V}} \bar{u} I_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u) \, d\Sigma dt. \end{aligned} \quad (4.121)$$

Le premier terme se traite de la même manière que dans le cas des conditions $ABC_{2,T}^M$ et le deuxième est imaginaire pur. Enfin, le troisième terme ne pose pas de difficulté et se traite comme auparavant. On obtient donc uniquement des termes de partie réelle négative ou nulle, ce qui clôt le cas de la condition d'ordre trois. Considérons maintenant la condition d'ordre quatre, toujours dans le cas radial. Il faut étudier le signe de la partie réelle des termes additionnels

$$\begin{aligned} & - \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \frac{1}{2} e^{i\mathcal{V}} \bar{u} \partial_s (\kappa \partial_s) I_t (e^{-i\mathcal{V}} u) d\Sigma dt - \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} e^{i\mathcal{V}} \bar{u} \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} I_t (e^{-i\mathcal{V}} u) d\Sigma dt \\ & + \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \frac{1}{4} \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V) e^{i\mathcal{V}} \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|} \bar{u} I_t (e^{-i\mathcal{V}} \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} V|} u) d\Sigma dt \end{aligned} \quad (4.122)$$

Ces trois termes se traitent exactement de la même manière que pour la condition $ABC_{2,T}^4$: le premier d'abord par intégration par partie sur Σ , puis on applique à chaque terme l'identité (4.109) après avoir utilisé l'hypothèse que $\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} V)$ ne dépend pas du temps pour sortir ce terme de l'intégrale en temps. Ceci achève la preuve pour $M = 4$. \square

Remarque 4.9. Remarquons qu'il n'est pas possible d'élargir les résultats précédents pour $M \geq 3$ lorsque le potentiel V n'est pas radial. En effet, on a alors à étudier le signe de la partie réelle des termes

$$-e^{i\pi/4} \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} |\mathcal{F}(e^{-i\mathcal{V}} u)(\xi, \tau)|^2 (\partial_s \mathcal{V}) \frac{i\xi}{\sqrt{i\tau}} d\xi d\tau$$

et

$$ie^{i\pi/4} \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} |\mathcal{F}(e^{-i\mathcal{V}} u)(\xi, \tau)|^2 (i\partial_s^2 \mathcal{V} - (\partial_s \mathcal{V})^2) \frac{1}{\sqrt{i\tau}} d\xi d\tau.$$

Or, le symbole $(\partial_s \mathcal{V}) \frac{i\xi}{\sqrt{i\tau}}$ varie dans $e^{i\pi/4} \mathbb{R} \cup e^{-i\pi/4} \mathbb{R}$ sans qu'il soit possible de restreindre les droites à des demi-droites, puisque ξ décrit \mathbb{R} entier et n'a pas de signe. En conséquence, la première intégrale varie dans $\mathbb{R} \times i\mathbb{R}$ et sa partie réelle peut être aussi bien négative que positive. Le même problème se pose pour la deuxième intégrale, car le terme $(i\partial_s^2 \mathcal{V} - (\partial_s \mathcal{V})^2)$ est complexe sans autre précision. On ne peut donc obtenir des résultats de stabilité pour les conditions d'ordre supérieur ou égal à 3 que dans le cas d'un potentiel radial, pour lequel ces deux intégrales disparaissent.

4.8 Semi-discrétisation des conditions aux limites

Nous avons obtenu jusqu'ici quatre familles de conditions aux limites, $ABC_{1,T}^M$, $ABC_{1,P}^M$, $ABC_{2,T}^M$ et $ABC_{2,P}^M$ pour différents ordres $M \in \{1, 2, 3, 4\}$. Les opérateurs associés à ces conditions aux limites sont donnés par les propositions 4.35, 4.36, 4.37 et 4.39. Le but de cette section est d'écrire les schémas semi-discrétisés en temps pour ces différentes conditions aux limites artificielles. Dans un premier temps, on s'intéresse à la discrétisation de l'équation intérieure ainsi qu'à la formulation variationnelle éléments finis. La discrétisation en temps des conditions aux limites, adaptée à cette environnement, sera ensuite étudiée stratégie par stratégie.

4.8.1 Schéma intérieur et formulation variationnelle

Le problème avec donnée initiale et condition aux limites, pour un temps final de calcul T , est le suivant

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + V u = 0, & \text{dans } \Omega_T, \\ \partial_{\mathbf{n}} u + \Lambda^M u = 0, & \text{sur } \Sigma_T, \\ u(\cdot, 0) = u_0, & \text{dans } \Omega, \end{cases} \quad (4.123)$$

où Λ^M désigne l'un des opérateurs d'ordre M , $M \in \{1, 2, 3, 4\}$ parmi les quatre familles d'opérateurs considérées. On note N le nombre d'itérations en temps à effectuer et $\Delta t = T/N$ le pas de temps uniforme. On note également $t_n = n\Delta t$, pour $0 \leq n \leq N$, u^n représente une approximation de $u(t_n)$ et $V^n = V(\mathbf{x}, t_n)$. Conformément à la première partie, la discrétisation de l'équation intérieure est, en utilisant un schéma de Crank-Nicolson en temps

$$i \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \Delta \frac{u^{n+1} + u^n}{2} + \frac{V^{n+1} + V^n}{2} \frac{u^{n+1} + u^n}{2} = 0, \quad 0 \leq n \leq N. \quad (4.124)$$

Comme pour le cas 1D, on utilise les nouvelles variables $v^{n+1} = u^{n+1/2} = \frac{u^{n+1} + u^n}{2}$ et $W^{n+1} = V^{n+1/2} = \frac{V^{n+1} + V^n}{2}$, avec $v^0 = u^0$ et $W^0 = V^0$. Le schéma devient

$$\frac{2i}{\Delta t} v^{n+1} + \Delta v^{n+1} + W^{n+1} v^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t} u^n, \quad 0 \leq n \leq N. \quad (4.125)$$

La formulation variationnelle de cette équation s'écrit, pour une fonction-test $\psi \in H^1(\Omega)$ et après intégration par parties sur Ω :

$$\int_{\Omega} \frac{2i}{\Delta t} v^{n+1} \psi d\Omega + \int_{\Sigma} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} \psi d\Sigma - \int_{\Omega} \nabla v^{n+1} \nabla \psi d\Omega + \int_{\Omega} W^{n+1} v^{n+1} \psi d\Omega = \int_{\Omega} \frac{2i}{\Delta t} u^n \psi d\Omega \quad (4.126)$$

D'un point de vue matriciel, on obtiendra \mathbf{v}^{n+1} comme solution du système linéaire de la forme

$$\left(\frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} - \mathbb{B}^{\Sigma, n+1} - \mathbb{S} + \mathbb{M}_{W^{n+1}} \right) \mathbf{v}^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} \mathbf{u}^n + \mathbf{b}^n, \quad (4.127)$$

où \mathbb{M} désigne la matrice de masse éléments finis en dimension deux sur Ω , \mathbb{S} la matrice de raideur et $\mathbb{M}_{W^{n+1}}$ la matrice de masse généralisée associée au potentiel W^{n+1} . La matrice $\mathbb{B}^{\Sigma, n+1}$ est une matrice d'éléments finis sur le bord Σ du domaine, qui contient les coefficients des termes en \mathbf{v}^{n+1} issus de la condition aux limites. Enfin, le second membre \mathbf{b}^n contient les contributions des autres termes de la condition aux limites. L'objectif sera donc d'écrire la discrétisation en temps de la condition aux limites sous la forme

$$\partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} = B^{n+1} v^{n+1} - b^n(v^0, v^1, \dots, v^n). \quad (4.128)$$

Dans un premier temps, nous étudions la discrétisation des conditions basées sur un développement de Taylor des symboles. Nous étudierons ensuite la discrétisation des conditions approchées par approximants de Padé.

4.8.2 Discrétisation des conditions $\text{ABC}_{1,T}^M$ et $\text{ABC}_{2,T}^M$

Au sein des conditions basées sur un développement de Taylor, nous commençons par étudier les conditions du type $\text{ABC}_{2,T}^M$. Etant donné qu'on n'effectue pas de changement de jauge dans ce cas, elles sont un peu plus faciles à discrétiser et peuvent servir d'exemples. Ces conditions s'écrivent

$$\partial_{\mathbf{n}} u + \Lambda_{2,T}^M u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T,$$

où les opérateurs $\Lambda_{2,T}^M$ sont définis dans la proposition 4.37. Les opérateurs $\partial_t^{1/2}$, $I_t^{1/2}$ et I_t sont discrétisés selon la proposition 1.19, à l'aide des convolutions discrètes, de coefficients respectifs (β_k) , (α_k) et (δ_k) . Prenons l'exemple de l'opérateur $\Lambda_{2,T}^1$. Il est égal à

$$\Lambda_{2,T}^1 u = e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} u.$$

En faisant appel aux coefficients de convolution β_k , sa discrétisation par convolution discrète est donc

$$\Lambda_{2,T}^{1,n+1} v^{n+1} = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} (\beta_k \star v^k)_{n+1} = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{k=0}^{n+1} \beta_{n+1-k} v^k$$

On notera b^{n+1} le produit de convolution $(\beta_k \star v^k)_{n+1}$, aussi noté $\beta_{n+1} \star v^{n+1}$. De manière générale, la discrétisation des conditions $ABC_{2,T}^M$ est décrite dans la proposition suivante.

Proposition 4.44. *Le schéma semi-discret de Crank-Nicolson pour le problème initial avec condition aux limites de type $ABC_{2,T}^M$ est donné par*

$$\begin{cases} \frac{2i}{\Delta t} v^{n+1} + \Delta v^{n+1} + W^{n+1} v^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t} u^n, & \text{sur } \Omega, \\ \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} + \Lambda_{2,T}^{M,n+1} v^{n+1} = 0, & \text{sur } \Sigma, \\ u^0 = u_0, & \text{dans } \Omega, \end{cases} \quad (4.129)$$

pour $n = 0, \dots, N-1$, où les opérateurs semi-discrets $\Lambda_{2,T}^{M,n+1}$, $M \in \{1, 2, 3, 4\}$ sont donnés par

$$\Lambda_{2,T}^{1,n+1} v^{n+1} = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} b^{n+1}, \quad (4.130)$$

$$\Lambda_{2,T}^{2,n+1} v^{n+1} = \Lambda_{2,T}^{1,n+1} v^{n+1} + \frac{\kappa}{2} v^{n+1}, \quad (4.131)$$

$$\Lambda_{2,T}^{3,n+1} v^{n+1} = \Lambda_{2,T}^{2,n+1} v^{n+1} - e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \left(\frac{\kappa^2}{8} a_0^{n+1} + \frac{1}{2} a_2^{n+1} + \frac{1}{2} \text{sg}(W^{n+1}) \sqrt{|W^{n+1}|} a_V^{n+1} \right), \quad (4.132)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_{2,T}^{4,n+1} v^{n+1} = & \Lambda_{2,T}^{3,n+1} v^{n+1} + i \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{1}{2} \partial_s (\kappa d_1^{n+1}) + \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} d_0^{n+1} \right. \\ & \left. - \frac{1}{4} \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}) \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}|} d_V^{n+1} \right), \end{aligned} \quad (4.133)$$

avec les notations suivantes :

$$b^{n+1} = \beta_{n+1} \star v^{n+1}, \quad (4.134)$$

$$a_{\gamma}^{n+1} = \alpha_{n+1} \star (\partial_s^{\gamma} v^{n+1}), \quad \gamma \in \{0, 1, 2\}, \quad (4.135)$$

$$a_V^{n+1} = \alpha_{n+1} \star \left(\sqrt{|W^{n+1}|} v^{n+1} \right), \quad (4.136)$$

$$d_{\gamma}^{n+1} = \delta_{n+1} \star (\partial_s^{\gamma} v^{n+1}), \quad \gamma \in \{0, 1\}, \quad (4.137)$$

$$d_V^{n+1} = \delta_{n+1} \star \left(\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}|} v^{n+1} \right). \quad (4.138)$$

Démonstration. On utilise toujours une discrétisation de Crank-Nicolson consistant à évaluer les différents termes au point $v^{n+1} = u^{n+1/2}$, et à discrétiser les produits $f(t)g(t)$ en $f^{n+1/2}g^{n+1/2}$. Les termes a_V^{n+1} et d_V^{n+1} permettent de respecter la symétrisation du potentiel. \square

Etudions à présent la discrétisation des conditions $ABC_{1,T}^M$. Elle s'effectue suivant le même principe tout en tenant compte des termes de déphasage. Pour discrétiser la fonction de phase, nous notons

$$\mathscr{V}^{n+1} = \mathcal{V}^{n+1/2} = \frac{\mathcal{V}^{n+1} + \mathcal{V}^n}{2}.$$

Proposition 4.45. *Le schéma de Crank-Nicolson semi-discret pour le système avec condition aux limites $ABC_{1,T}^M$ s'écrit*

$$\begin{cases} \frac{2i}{\Delta t}v^{n+1} + \Delta v^{n+1} + W^{n+1}v^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t}u^n, & \text{sur } \Omega, \\ \partial_{\mathbf{n}}v^{n+1} + \Lambda_{1,T}^{M,n+1}v^{n+1} = 0, & \text{sur } \Sigma, \\ u^0 = u_0, & \text{dans } \Omega, \end{cases} \quad (4.139)$$

pour $n = 0, \dots, N-1$, où les opérateurs semi-discrets $\Lambda_{1,T}^{M,n+1}$, $M \in \{2, 3, 4\}$ sont donnés par

$$\Lambda_{1,T}^{2,n+1}v^{n+1} = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \tilde{b}^{n+1} + \frac{\kappa}{2}v^{n+1}, \quad (4.140)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_{1,T}^{3,n+1}v^{n+1} = & \Lambda_{1,T}^{2,n+1}v^{n+1} - e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \left(\frac{\kappa^2}{8} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \tilde{a}_0^{n+1} + \frac{1}{2} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \tilde{a}_2^{n+1} \right. \\ & \left. + i(\partial_s \mathcal{W}^{n+1}) e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \tilde{a}_1^{n+1} + \frac{1}{2} (i\partial_s^2 \mathcal{W}^{n+1} - (\partial_s \mathcal{W}^{n+1})^2) e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \tilde{a}_0^{n+1} \right), \end{aligned} \quad (4.141)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_{1,T}^{4,n+1}v^{n+1} = & \Lambda_{1,T}^{3,n+1}v^{n+1} + i \left(\frac{1}{2} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \partial_s (\kappa \tilde{d}_1^{n+1}) + \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \tilde{d}_0^{n+1} \right. \\ & \left. + \frac{i}{2} (\partial_s \kappa) (\partial_s \mathcal{W}^{n+1}) e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \tilde{d}_0^{n+1} - \frac{i}{4} \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}) \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}|} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \tilde{d}_V^{n+1} \right), \end{aligned} \quad (4.142)$$

avec les notations

$$\tilde{b}^{n+1} = \beta_{n+1} \star \left(e^{-i\mathcal{W}^{n+1}} v^{n+1} \right), \quad (4.143)$$

$$\tilde{a}_\gamma^{n+1} = \alpha_{n+1} \star \left(\partial_s^\gamma \left(e^{-i\mathcal{W}^{n+1}} v^{n+1} \right) \right), \quad \gamma \in \{0, 1, 2\}, \quad (4.144)$$

$$\tilde{d}_\gamma^{n+1} = \delta_{n+1} \star \left(\partial_s^\gamma \left(e^{-i\mathcal{W}^{n+1}} v^{n+1} \right) \right), \quad \gamma \in \{0, 1\}, \quad (4.145)$$

$$\tilde{d}_V^{n+1} = \delta_{n+1} \star \left(e^{-i\mathcal{W}^{n+1}} \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}|} v^{n+1} \right). \quad (4.146)$$

Remarque 4.10. Pour un potentiel $V = V(r, t)$ radial, les opérateurs $\Lambda_{1,T}^{3,n+1}$ et $\Lambda_{1,T}^{4,n+1}$ ont une forme simplifiée

$$\Lambda_{1,T}^{3,n+1}v^{n+1} = \Lambda_{1,T}^{2,n+1}v^{n+1} - e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \left(\frac{\kappa^2}{8} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \tilde{a}_0^{n+1} + \frac{1}{2} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \tilde{a}_2^{n+1} \right), \quad (4.147)$$

$$\begin{aligned} \Lambda_{1,T}^{4,n+1}v^{n+1} = & \Lambda_{1,T}^{3,n+1}v^{n+1} + i \left(\frac{1}{2} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \partial_s (\kappa \tilde{d}_1^{n+1}) + \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \tilde{d}_0^{n+1} \right. \\ & \left. - \frac{i}{4} \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}) \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}|} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \tilde{d}_V^{n+1} \right), \end{aligned} \quad (4.148)$$

avec les coefficients \tilde{a}_γ^{n+1} et \tilde{d}_γ^{n+1} modifiés

$$\tilde{b}_\gamma^{n+1} = \alpha_{n+1} \star \left(e^{-i\mathcal{W}^{n+1}} \partial_s^\gamma v^{n+1} \right), \quad \gamma \in \{0, 1, 2\}, \quad (4.149)$$

$$\tilde{d}_\gamma^{n+1} = \delta_{n+1} \star \left(e^{-i\mathcal{W}^{n+1}} \partial_s^\gamma v^{n+1} \right), \quad \gamma \in \{0, 1\} \quad (4.150)$$

puisque $\partial_s \mathcal{W}^{n+1} = 0$.

Comme dans la première partie, la discrétisation par convolutions discrètes des conditions aux limites permet de préserver la stabilité inconditionnelle du schéma intérieur, grâce à l'inégalité d'énergie de type (1.157).

4.8.3 Résultats de stabilité pour les conditions discrétisées $\text{ABC}_{1,T}^M$ et $\text{ABC}_{2,T}^M$

Nous nous intéressons dans cette section à démontrer des estimations *a priori* pour les systèmes (4.129) et (4.139). Considérons pour commencer le cas du système discrétisé avec une condition de type $\text{ABC}_{2,T}^M$. Nous avons le résultat suivant.

Théorème 4.46. *Soit $(u^n)_{0 \leq n \leq N}$ une solution du système*

$$\begin{cases} i \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \Delta v^{n+1} + W^{n+1} v^{n+1} = 0, & \text{dans } \Omega, \\ \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} + \Lambda_{2,T}^{M,n+1} v^{n+1} = 0, & \text{sur } \Sigma, \text{ pour } M \in \{2, 3, 4\}, \\ u^0 = u_0, & \text{dans } \Omega. \end{cases} \quad (4.151)$$

Pour $M = 2$, on a l'inégalité d'énergie suivante :

$$\forall n \in \{0, \dots, N\}, \quad \|u^n\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u^0\|_{L^2(\Omega)}. \quad (4.152)$$

De plus, si $\text{sg}(W^k) = 1$ sur Σ indépendamment du temps t_k , alors l'inégalité (4.152) reste vérifiée pour $M = 3$. De plus, si κ est positif, $\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa$ est négatif, et $\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} W^k) = 1$ sur Σ , alors cette inégalité est également vérifiée pour $M = 4$.

Cette proposition est la version semi-discrète du théorème 4.42, sous les hypothèses semi-discrètes équivalentes, auxquelles on a ajouté des conditions pour l'ordre quatre.

Démonstration. Soit $P \in \{0, \dots, N\}$ et soit $n \in \{0, \dots, P-1\}$. On multiplie l'équation intérieure de (4.151) par $-iv^{n+1} = -i \frac{u^{n+1} + u^n}{2}$. On obtient

$$\frac{1}{2\Delta t} (u^{n+1} - u^n)(u^{n+1} + u^n) - iv^{n+1} \Delta v^{n+1} - iW^{n+1} v^{n+1} = 0.$$

Or, le premier terme s'écrit

$$\begin{aligned} (u^{n+1} - u^n)(u^{n+1} + u^n) &= |u^{n+1}|^2 - |u^n|^2 + u^{n+1} \overline{u^n} - \overline{u^{n+1}} u^n \\ &= |u^{n+1}|^2 - |u^n|^2 + u^{n+1} \overline{u^n} - \overline{u^{n+1}} u^n \\ &= |u^{n+1}|^2 - |u^n|^2 + 2i \operatorname{Im} (u^{n+1} \overline{u^n}). \end{aligned}$$

On intègre ensuite par parties sur Ω

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\Delta t} \int_{\Omega} (|u^{n+1}|^2 - |u^n|^2 + 2i \operatorname{Im} (u^{n+1} \overline{u^n})) d\Omega - i \int_{\Sigma} \overline{v^{n+1}} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} d\Sigma + i \int_{\Omega} |\nabla v^{n+1}|^2 d\Omega \\ - i \int_{\Omega} W^{n+1} |v^{n+1}|^2 d\Omega = 0, \end{aligned}$$

puis on considère la partie réelle de cette équation. Il reste

$$\frac{1}{2\Delta t} \left(\|u^{n+1}\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|u^n\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) = \operatorname{Re} \left(i \int_{\Sigma} \overline{v^{n+1}} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} d\Sigma \right).$$

Enfin, cette identité étant vérifiée pour tout n entre 0 et $P-1$, on somme pour n allant de 0 à $P-1$

$$\frac{1}{2\Delta t} \left(\|u^P\|_{L^2(\Omega)}^2 - \|u^0\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) = \operatorname{Re} \left(\sum_{n=0}^{P-1} \int_{\Sigma} i \overline{v^{n+1}} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} d\Sigma \right) = \operatorname{Re} \left(\sum_{n=0}^{P-1} A^n \right), \quad (4.153)$$

et on définit la notation A^n pour les termes

$$\int_{\Sigma} i\overline{v^{n+1}} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} d\Sigma.$$

Afin de prouver (4.152), il faut montrer que le second membre de (4.153) est négatif. On introduit alors la condition aux limites choisie pour montrer la stabilité du schéma. Nous considérons la condition d'ordre quatre $\text{ABC}_{2,T}^{4,n+1}$ donnée par la proposition 4.44, et nous faisons sur le potentiel les hypothèses mentionnées ci-dessus. Dans ce cas, pour $n \in \{0, \dots, P-1\}$, le terme A^n se décompose en

$$\begin{aligned} A^n &= \int_{\Sigma} i\overline{v^{n+1}} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} d\Sigma = \int_{\Sigma} -ie^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} b^{n+1} \overline{v^{n+1}} d\Sigma + \int_{\Sigma} -i\frac{\kappa}{2} |v^{n+1}|^2 d\Sigma \\ &\quad + \int_{\Sigma} ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \left(\frac{\kappa^2}{8} a_0^{n+1} \overline{v^{n+1}} + \frac{1}{2} a_2^{n+1} \overline{v^{n+1}} + \frac{1}{2} \text{sg}(W^{n+1}) \sqrt{|W^{n+1}|} a_V^{n+1} \overline{v^{n+1}} \right) d\Sigma \\ &\quad + \int_{\Sigma} \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{1}{2} \partial_s (\kappa d_1^{n+1}) \overline{v^{n+1}} + \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} d_0^{n+1} \overline{v^{n+1}} - \frac{1}{4} \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}) \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}|} d_V^{n+1} \overline{v^{n+1}} \right) d\Sigma. \end{aligned}$$

Cependant, par intégration par parties sur la courbe fermée Σ , on remarque que l'on a

$$\int_{\Sigma} \frac{1}{2} \partial_s (\kappa d_1^{n+1}) \overline{v^{n+1}} d\Sigma = - \int_{\Sigma} \frac{1}{2} \kappa d_1^{n+1} \partial_s (\overline{v^{n+1}}) d\Sigma.$$

De plus, on observe que le deuxième terme est imaginaire pur, et on écrit la somme des premier et quatrième termes de la manière suivante

$$\begin{aligned} -ie^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} b^{n+1} \overline{v^{n+1}} + ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \frac{1}{2} a_2^{n+1} \overline{v^{n+1}} \\ = ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \left(\frac{i}{\Delta t} b^{n+1} + \frac{1}{2} a_2^{n+1} \right) \overline{v^{n+1}} - e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{1}{2\Delta t}} b^{n+1} \overline{v^{n+1}}. \end{aligned}$$

Finalement, le second membre de (4.153) se met sous la forme

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{P-1} \int_{\Sigma} i\overline{v^{n+1}} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} d\Sigma &= -e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{1}{2\Delta t}} \int_{\Sigma} \sum_{n=0}^{P-1} b^{n+1} \overline{v^{n+1}} d\Sigma \\ &\quad - \frac{i}{2} \int_{\Sigma} \kappa \sum_{n=0}^{P-1} |v^{n+1}|^2 d\Sigma \\ &\quad + ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \int_{\Sigma} \sum_{n=0}^{P-1} \left(\frac{i}{\Delta t} b^{n+1} + \frac{1}{2} a_2^{n+1} \right) \overline{v^{n+1}} d\Sigma \\ &\quad + ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \int_{\Sigma} \frac{\kappa^2}{8} \sum_{n=0}^{P-1} a_0^{n+1} \overline{v^{n+1}} d\Sigma \\ &\quad + ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \int_{\Sigma} \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{P-1} a_V^{n+1} \sqrt{|W^{n+1}|} \overline{v^{n+1}} d\Sigma \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} \int_{\Sigma} \frac{\kappa}{2} \sum_{n=0}^{P-1} d_1^{n+1} \partial_s \overline{v^{n+1}} d\Sigma \\ &\quad + \frac{\Delta t}{2} \int_{\Sigma} \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} \sum_{n=0}^{P-1} d_0^{n+1} \overline{v^{n+1}} d\Sigma \\ &\quad - \frac{\Delta t}{2} \int_{\Sigma} \frac{1}{4} \sum_{n=0}^{P-1} d_V^{n+1} \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}|} \overline{v^{n+1}} d\Sigma, \end{aligned}$$

en exploitant notamment le fait que $\text{sg}(W^{n+1}) = \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}}W^{n+1}) = 1$ sur Σ pour tout temps t_{n+1} . En utilisant le fait que v^0 est à support compact dans Ω , on peut également réindicer toutes les sommes de (4.154) entre 0 et P tout en travaillant avec les indices n à l'intérieur des sommes. On obtient alors

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{P-1} \int_{\Sigma} i \overline{v^{n+1}} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} d\Sigma &= -e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{1}{2\Delta t}} \int_{\Sigma} \sum_{n=0}^P b^n \overline{v^n} d\Sigma \\
&\quad - \frac{i}{2} \int_{\Sigma} \kappa \sum_{n=0}^P |v^n|^2 d\Sigma \\
&\quad + ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \int_{\Sigma} \sum_{n=0}^P \left(\frac{i}{\Delta t} b^n + \frac{1}{2} a_2^n \right) \overline{v^n} d\Sigma \\
&\quad + ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \int_{\Sigma} \frac{\kappa^2}{8} \sum_{n=0}^P a_0^n \overline{v^n} d\Sigma \\
&\quad + ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \int_{\Sigma} \frac{1}{2} \sum_{n=0}^P a_v^n \sqrt{|W^n|} \overline{v^n} d\Sigma \\
&\quad - \frac{\Delta t}{2} \int_{\Sigma} \frac{\kappa}{2} \sum_{n=0}^P d_1^n \partial_s \overline{v^n} d\Sigma \\
&\quad + \frac{\Delta t}{2} \int_{\Sigma} \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} \sum_{n=0}^P d_0^n \overline{v^n} d\Sigma \\
&\quad - \frac{\Delta t}{2} \int_{\Sigma} \frac{1}{4} \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}}W^0) \sum_{n=0}^P d_v^n \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}W^n|} \overline{v^n} d\Sigma,
\end{aligned} \tag{4.154}$$

Il faut étudier le signe de la partie réelle de chacun des termes de (4.154). Pour cela, nous nous baserons encore sur le lemme 1.22 du chapitre 1. Etudions pour commencer le premier terme. Il contient la somme

$$\sum_{n=0}^P \overline{v^n} b^n = \sum_{n=0}^P \overline{v^n} (\beta_n \star v^n).$$

Ce terme a déjà été étudié en dimension une dans la preuve du lemme 1.22, et on sait qu'il varie dans $e^{i\pi/4}\mathbb{R}^+ \cup e^{-i\pi/4}\mathbb{R}^+$. En conséquence, on a

$$-e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{1}{2\Delta t}} \int_{\Sigma} \sum_{n=0}^P \overline{v^n} b^n d\Sigma \in \mathbb{R}^- \cup i\mathbb{R}^-,$$

et le premier terme de (4.154) est donc de partie réelle négative.

Le deuxième terme de (4.154) est imaginaire pur.

L'étude du troisième terme est la partie la plus délicate de la preuve. On étudie la partie réelle de la quantité

$$B_3 = ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \int_{\Sigma} \sum_{n=0}^P \left(\frac{i}{\Delta t} b^n + \frac{1}{2} a_2^n \right) \overline{v^n} d\Sigma.$$

Par une double intégration par parties sur Σ , on remarque que

$$\int_{\Sigma} a_2^n \overline{v^n} d\Sigma = \int_{\Sigma} \alpha_n \star (\partial_s^2 v^n) \overline{v^n} d\Sigma = \int_{\Sigma} (\alpha_n \star v^n) \partial_s^2 \overline{v^n} d\Sigma = \int_{\Sigma} a_0^n \overline{\partial_s^2 v^n} d\Sigma.$$

On doit donc étudier la partie réelle de

$$B_3 = ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \int_{\Sigma} \sum_{n=0}^P \left(\frac{i}{\Delta t} b^n \overline{v^n} + \frac{1}{2} a_0^n \overline{\partial_s^2 v^n} \right) d\Sigma.$$

Par application du théorème de Plancherel pour la transformée de Fourier selon l'abscisse curviligne s (de covariable ξ), on obtient

$$B_3 = ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \int_{\mathbb{R}} \sum_{n=0}^P \left(\frac{i}{\Delta t} \widehat{b^n v^n} + \frac{1}{2} \widehat{a_0^n \partial_s^2 v^n} \right) d\xi,$$

donc

$$B_3 = ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \int_{\mathbb{R}} \sum_{n=0}^P \left(\frac{i}{\Delta t} \widehat{b^n v^n} - \frac{\xi^2}{2} \widehat{a_0^n v^n} \right) d\xi. \quad (4.155)$$

Or, par application de la démarche du lemme 1.22 à l'entrée $\widehat{v^n}$ et respectivement pour les filtres discrets (β_p) et (α_p) , on a

$$\sum_{n=0}^P \widehat{b^n v^n} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \mathcal{H}_{\beta}(e^{i\omega}) \left| \sum_{n=0}^P \widehat{v^n} e^{-i\omega n} \right|^2 d\omega$$

et

$$\sum_{n=0}^P \widehat{a_0^n v^n} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \mathcal{H}_{\alpha}(e^{i\omega}) \left| \sum_{n=0}^P \widehat{v^n} e^{-i\omega n} \right|^2 d\omega.$$

La quantité B_3 devient donc

$$B_3 = ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[\frac{i}{\Delta t} \mathcal{H}_{\beta}(e^{i\omega}) - \frac{\xi^2}{2} \mathcal{H}_{\alpha}(e^{i\omega}) \right] \left| \sum_{n=0}^P \widehat{v^n} e^{-i\omega n} \right|^2 d\omega, \quad (4.156)$$

puis, en remplaçant \mathcal{H}_{β} et \mathcal{H}_{α} par l'expression (1.150) des transformées en \mathcal{Z} de (β_p) et (α_p) :

$$B_3 = ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left[\frac{i}{\Delta t} \sqrt{\frac{e^{i\omega} - 1}{e^{i\omega} + 1}} - \frac{\xi^2}{2} \sqrt{\frac{e^{i\omega} + 1}{e^{i\omega} - 1}} \right] \left| \sum_{n=0}^P \widehat{v^n} e^{-i\omega n} \right|^2 d\omega, \quad (4.157)$$

L'étude du signe de la partie réelle de B_3 se résume alors à l'étude du signe de la fonction complexe $R(z)$ définie par

$$R(z) = ie^{i\pi/4} \left(\frac{i}{\Delta t} \sqrt{\frac{z-1}{z+1}} - \frac{\xi^2}{2} \sqrt{\frac{z+1}{z-1}} \right) \quad (4.158)$$

sur le cercle unité.

Faisons une pause, et étudions l'opérateur de Schrödinger sur le bord

$$P_{\Sigma} : f \mapsto P_{\Sigma}(f) = i\partial_t f + \Delta_{\Sigma} f.$$

Son symbole $\sigma(P_{\Sigma})$ est obtenu en écrivant

$$\mathcal{F}_{(s,t)}(P_{\Sigma}(f)) = \sigma(P_{\Sigma}) \mathcal{F}_{(s,t)}(f),$$

et on a, classiquement, $\sigma(P_{\Sigma}) = -\tau - \xi^2$. Par ailleurs, étant donné qu'on travaille dans la zone E -quasi hyperbolique \mathcal{H} , on sait qu'on a $-\tau - \xi^2 > 0$, ce qui se traduit encore par $\text{Re}(-\tau - \xi^2) > 0$ et

$\text{Im}(-\tau - \xi^2) = 0$. Etudions à présent le symbole semi-discret de l'opérateur semi-discret associé, \widetilde{P}_Σ , en accord avec le schéma de Crank-Nicolson :

$$\widetilde{P}_\Sigma : f \mapsto \left(i \frac{f(t_{n+1}) - f(t_n)}{\Delta t} + \Delta_\Sigma \frac{f(t_{n+1}) + f(t_n)}{2} \right)_{n \in \mathbb{N}}.$$

On identifie son symbole en remplaçant la transformée de Fourier en temps par la transformée en \mathcal{Z}

$$\mathcal{F}_s \mathcal{Z} \left(\widetilde{P}_\Sigma(f) \right) = \sigma_{\text{sd}}(\widetilde{P}_\Sigma) \mathcal{F}_s \mathcal{Z}(f(t_n))(z).$$

Or, en utilisant les règles de décalage pour la transformée en \mathcal{Z} , et sachant que $f(t_0) = 0$ car on applique l'opérateur \widetilde{P}_Σ uniquement à des fonctions multipliées par v^{n+1} , laquelle est nulle au temps t_0 , on a

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} \left(\widetilde{P}_\Sigma(f) \right) &= \frac{i}{\Delta t} \mathcal{Z}(f(t_{n+1}) - f(t_n))(z) + \frac{\Delta_\Sigma}{2} \mathcal{Z}(f(t_{n+1}) + f(t_n))(z) \\ &= \frac{i}{\Delta t} (z-1) \mathcal{Z}(f(t_n))(z) + \frac{\Delta_\Sigma}{2} (z+1) \mathcal{Z}(f(t_n))(z), \end{aligned}$$

d'où, en considérant la transformée de Fourier selon s

$$\mathcal{F}_s \mathcal{Z} \left(\widetilde{P}_\Sigma(f) \right) = \frac{i}{\Delta t} (z-1) \mathcal{F}_s \mathcal{Z}(f(t_n)) - \frac{\xi^2}{2} (z+1) \mathcal{F}_s \mathcal{Z}(f(t_n)).$$

Ainsi, le symbole semi-discret de \widetilde{P}_Σ est donné par

$$\sigma_{\text{sd}} \left(\widetilde{P}_\Sigma \right) = \frac{i}{\Delta t} (z-1) - \frac{\xi^2}{2} (z+1) = (z+1) \left(\frac{i}{\Delta t} \frac{z-1}{z+1} - \frac{\xi^2}{2} \right). \quad (4.159)$$

L'appartenance d'un quadruplet (s, t, ξ, τ) à la zone E -quasi hyperbolique \mathcal{H} est caractérisée par la propriété $-\tau - \xi^2 > 0$, c'est-à-dire $\text{Re}(\sigma(P_\Sigma)) > 0$ et $\text{Im}(\sigma(P_\Sigma)) = 0$. De manière analogue, on définit la zone E -quasi hyperbolique semi-discrete, notée \mathcal{H}_{sd} , dont la caractérisation est liée au symbole semi-discret de \widetilde{P}_Σ .

Définition 4.3. *La zone semi-discrete E -quasi hyperbolique \mathcal{H}_{sd} est l'ensemble des quadruplets $(s, n, \xi, z) \in \mathbb{R} \times \mathbb{N} \times \mathbb{R} \times \mathbb{C}$ vérifiant*

$$\text{Re} \left(\frac{2i}{\Delta t} \frac{z-1}{z+1} - \xi^2 \right) > 0 \quad \text{et} \quad \text{Im} \left(\frac{2i}{\Delta t} \frac{z-1}{z+1} - \xi^2 \right) = 0.$$

Ainsi, la caractérisation $-\tau - \xi^2 \in \mathbb{R}^{+*}$ est transposée dans le domaine semi-discret en $\frac{2i}{\Delta t} \frac{z-1}{z+1} - \xi^2 \in \mathbb{R}^{+*}$. Or, on peut mettre en évidence dans la fonction $R(z)$ définie en (4.158) un terme lié à la caractérisation de la zone hyperbolique semi-discrete. En effet, on a

$$R(z) = \frac{i}{2} e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{z+1}{z-1}} \left(\frac{2i}{\Delta t} \frac{z-1}{z+1} - \xi^2 \right). \quad (4.160)$$

La fonction $R(z)$ s'écrit alors comme

$$R(z) = \sigma(z) \left(\frac{2i}{\Delta t} \frac{z-1}{z+1} - \xi^2 \right),$$

où la fonction $\sigma(z)$ est définie par

$$\sigma(z) = \frac{i}{2} e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{z+1}{z-1}}.$$

Comme le terme $\frac{2i}{\Delta t} \frac{z-1}{z+1} - \xi^2$ est un réel positif du fait de l'appartenance à la zone quasi hyperbolique semi-discrète, le problème se ramène à étudier la partie réelle de la fonction $\sigma(z)$ sur le cercle unité. Or, comme on l'a déjà vu, l'image du cercle unité par l'application $z \mapsto \sqrt{\frac{z+1}{z-1}}$ est $e^{-i\pi/4}\mathbb{R}^+ \cup e^{-i\pi/4}\mathbb{R}^+$, et donc $\operatorname{Re}(\sigma(z)) \leq 0$ lorsque $z = e^{i\omega}$ appartient au cercle unité. Ceci assure finalement que le terme B_3 donné par (4.157) est de partie réelle négative sur le cercle unité.

Étudions à présent le quatrième terme de (4.154). Le résultat (1.161) du lemme 1.22 assure que la somme

$$\sum_{n=0}^P a_0^n \overline{v^n}$$

varie dans $e^{i\pi/4}\mathbb{R}^+ \cup e^{-i\pi/4}\mathbb{R}^+$. Comme la fonction κ^2 est positive en tout point de Σ , on en déduit directement que

$$ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \int_{\Sigma} \frac{\kappa^2}{8} \sum_{n=0}^P a_0^n \overline{v^n} d\Sigma \in \mathbb{R}^- \cup i\mathbb{R}^+,$$

donc ce quatrième terme est de partie réelle négative ou nulle.

Dans le cinquième terme de (4.154) intervient la somme

$$\sum_{n=0}^P a_V^n \sqrt{|W^n|} \overline{v^n} = \sum_{n=0}^P \alpha_n \star \left(\sqrt{|W^n|} v^n \right) \overline{\sqrt{|W^n|} v^n}.$$

Encore une fois, le résultat (1.161) assure que cette somme est dans $e^{i\pi/4}\mathbb{R}^+ \cup e^{-i\pi/4}\mathbb{R}^+$, et donc ce cinquième terme est bien de partie réelle négative.

Les trois derniers termes de (4.154) sont basés sur une convolution avec les coefficients γ_p . Or, le lemme 1.22 assure que pour (φ^n) complexe, la somme

$$\sum_{n=0}^P (\gamma_n \star \varphi^n) \overline{\varphi^n}$$

est de partie réelle positive. Or,

$$\sum_{n=0}^P d_1^n \partial_s \overline{v^n} = \sum_{n=0}^P (\gamma_n \star (\partial_s v^n)) \overline{\partial_s v^n},$$

$$\sum_{n=0}^P d_0^n \overline{v^n} = \sum_{n=0}^P (\gamma_n \star v^n) \overline{v^n},$$

et

$$\sum_{n=0}^P d_V^n \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^n|} \overline{v^n} = \sum_{n=0}^P \left(\gamma_n \star (\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^n|} v^n) \right) \overline{\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^n|} v^n},$$

ce qui montre, en appliquant le lemme 1.22 aux suites $\partial_s v^n$, v^n et $\sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^n|} v^n$ respectivement, que chacun des trois derniers termes de (4.154) est de partie réelle négative, à la condition que κ soit positif (c'est-à-dire que la courbe Σ est convexe), que la fonction $\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa$ soit négative, et que la dérivée normale $\partial_{\mathbf{n}} W^n$ du potentiel soit positive sur Σ . Sous ces conditions, les trois derniers termes de (4.154) sont de partie réelle négative, ce qui achève la preuve du théorème 4.46 pour la condition d'ordre quatre.

Finalement, tous les termes de l'expression (4.154) sont de partie réelle négative ou nulle, donc le membre de droite dans (4.153) est bien négatif, ce qui prouve que pour tout $P \in \{0, \dots, N\}$, on a l'inégalité d'énergie

$$\|u^P\|_{L^2(\Omega)}^2 \leq \|u^0\|_{L^2(\Omega)}^2,$$

ce qui est bien l'inégalité (4.152).

Remarquons que pour prouver le résultat pour $M = 2$, il suffisait de montrer que le terme

$$-e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \int_{\Sigma} \sum_{n=0}^P b^n \overline{v^n} d\Sigma$$

est de partie réelle négative. Il s'agit en fait du premier terme traité dans (4.154) à un facteur 2 près. Il est donc bien de partie réelle négative, et la preuve ne nécessite aucune hypothèse sur V . \square

Pour les conditions obtenues par changement de jauge, nous avons un théorème équivalent, sous des hypothèses un peu plus fortes sur le potentiel et sur le domaine de calcul. En effet, comme dans le cas continu, on se place dans la situation où la dérivée curviligne $\partial_s \mathcal{V}$ de la fonction de phase est nulle, ce qui est en particulier le cas lorsque \mathcal{V} et Ω sont à symétrie radiale.

Théorème 4.47. *Soit $(u^n)_{0 \leq n \leq N}$ une solution du système*

$$\begin{cases} i \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \Delta v^{n+1} + W^{n+1} v^{n+1} = 0, & \text{dans } \Omega, \\ \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} + \Lambda_{1,T}^{M,n+1} v^{n+1} = 0, & \text{sur } \Sigma, \text{ pour } M \in \{2, 3, 4\}, \\ u^0 = u_0, & \text{dans } \Omega. \end{cases} \quad (4.161)$$

Pour $M = 2$, on a l'inégalité d'énergie suivante :

$$\forall n \in \{0, \dots, N\}, \quad \|u^n\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u^0\|_{L^2(\Omega)}. \quad (4.162)$$

De plus, si le potentiel V est radial ainsi que le domaine de calcul Ω , alors l'inégalité (4.162) reste vérifiée pour $M = 3$. Si en outre $\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} W^k) = 1$ sur Σ , κ est positive, et $\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa$ est négative, alors cette inégalité est aussi vérifiée pour $M = 4$.

Démonstration. La preuve est basée sur les mêmes techniques que la preuve du théorème 4.46. On reprend l'identité (4.153) dans laquelle on remplace $\partial_{\mathbf{n}} v^{n+1}$ en utilisant la discrétisation de la condition

discrétisée d'ordre quatre $ABC_{1,T}^4$. Le second membre se met alors sous la forme

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{P-1} \int_{\Sigma} i \overline{v^{n+1}} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} d\Sigma &= -e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{1}{2\Delta t}} \int_{\Sigma} \sum_{n=0}^P \tilde{b}^n e^{i\mathcal{W}^n} \overline{v^n} d\Sigma \\
&- \frac{i}{2} \int_{\Sigma} \kappa \sum_{n=0}^P |v^n|^2 d\Sigma \\
&+ ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \int_{\Sigma} \sum_{n=0}^P \left(\frac{i}{\Delta t} \tilde{b}^n + \frac{1}{2} \tilde{a}_2^n \right) e^{i\mathcal{W}^n} \overline{v^n} d\Sigma \\
&+ ie^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \int_{\Sigma} \frac{\kappa^2}{8} \sum_{n=0}^P \tilde{a}_0^n e^{i\mathcal{W}^n} \overline{v^n} d\Sigma \\
&- \frac{\Delta t}{2} \int_{\Sigma} \frac{\kappa}{2} \sum_{n=0}^P \tilde{d}_1^n \partial_s \left(e^{i\mathcal{W}^n} \overline{v^n} \right) d\Sigma \\
&+ \frac{\Delta t}{2} \int_{\Sigma} \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} \sum_{n=0}^P \tilde{d}_0^n e^{i\mathcal{W}^n} \overline{v^n} d\Sigma \\
&- \frac{\Delta t}{2} \int_{\Sigma} \frac{1}{4} \sum_{n=0}^P \tilde{d}_v^n \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^n|} e^{i\mathcal{W}^n} \overline{v^n} d\Sigma.
\end{aligned} \tag{4.163}$$

Ces termes sont étudiés les uns après les autres comme dans le cas de la méthode directe. Or, si on considère par exemple le premier terme, on a

$$\sum_{n=0}^P \tilde{b}^n e^{i\mathcal{W}^n} \overline{v^n} = \sum_{n=0}^P \left(\beta_n \star (e^{-i\mathcal{W}^n} v^n) \right) \overline{e^{-i\mathcal{W}^n} v^n}.$$

Il suffit donc d'appliquer une fois encore les résultats du lemme 1.22 en considérant la suite $e^{-i\mathcal{W}^n} v^n$ au lieu de la suite v^n . La démonstration est ainsi rigoureusement analogue à celle du théorème 4.46. \square

Remarque 4.11. Pour les conditions aux limites d'ordre deux et trois, les hypothèses faites pour obtenir les estimations *a priori* pour le problème semi-discret correspondent exactement à la version semi-discrète des hypothèses faites dans le cas du problème continu (pas d'hypothèse pour l'ordre deux, V de signe constant positif sur Σ). Pour l'ordre quatre en revanche, le passage au problème semi-discret nécessite des hypothèses supplémentaires, puisque $\partial_{\mathbf{n}} V$ doit non seulement être de signe constant sur Σ , mais également positif, et on doit avoir κ positif et $\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa$ négatif. Il faut noter que plusieurs raisons portent à croire que ces hypothèses ne sont pas optimales. D'une part, le cas pourtant très simple d'un domaine circulaire ne permet pas de vérifier ces conditions pour l'ordre quatre, puisque $\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa = \kappa^3$ est positif dans cette situation. Or il y a de grandes raisons de penser que le disque ne pose pas de problème particulier pour la stabilité. D'autre part, le raisonnement est effectué terme à terme, en s'assurant que tous les termes de la somme soient négatifs afin que la somme soit négative. Ces conditions sont donc suffisantes mais pas forcément nécessaires. Or, si des termes interviennent avec des coefficients numériquement très petits, on peut évidemment se contenter de contraintes plus faibles pour ces termes. Ceci est d'autant plus vrai que les termes concernés sont des termes correcteurs associés à l'ordre quatre. Ce genre de problème peut également être rencontré dans le cadre des conditions d'impédances pour l'équation de Helmholtz [5]. Dans ce cas, certains termes en fréquence sont négligés compte tenu de leur faible ordre de grandeur, et on s'intéresse alors seulement au signe des autres termes.

Remarque 4.12. Toutes les preuves de stabilité, que ce soit sur le plan continu (théorèmes 4.42 et 4.43) ou sur le plan semi-discret (théorèmes 4.46 et 4.47) ont été obtenues sous l'hypothèse que l'on se place dans la zone hyperbolique, ou dans la zone hyperbolique semi-discrète. En pratique, il est impossible de vérifier si un potentiel donné permet de vérifier cette hypothèse ou non, c'est pourquoi cet argument reste assez formel. Cependant, l'appartenance à la zone hyperbolique est requise pour traiter un seul terme, à savoir un des termes provenant de la condition d'ordre trois. Même sans cette hypothèse, tous les autres termes peuvent être traités normalement, et en particulier tous les termes liés à la condition d'ordre deux. Le résultat est donc valable pour les conditions $ABC_{1,T}^2$ et $ABC_{2,T}^2$, sur le plan continu comme sur le plan semi-discret, sans utiliser l'hypothèse de la zone hyperbolique.

4.8.4 Discrétisation des conditions $ABC_{1,P}^M$ et $ABC_{2,P}^M$

Nous nous intéressons à présent à la semi-discrétisation en temps des conditions aux limites issues d'une approche de type Padé : les conditions $ABC_{1,P}^M$ issues du changement de jauge, et les conditions $ABC_{2,P}^M$ de la méthode directe. Leur traitement sera similaire, mais comme dans l'approche Taylor, les conditions de la méthode directe sont plus faciles à étudier car elles ne font pas intervenir le déphasage $e^{i\nu}$. Commençons donc, pour étudier le problème, en considérant la condition d'ordre un de la méthode directe, c'est-à-dire $ABC_{2,P}^1$:

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\sqrt{i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + V}u = 0, \quad \text{sur } \Sigma.$$

Dans cette CLA, on remplace la racine carrée par son approximant de Padé d'ordre m

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\left(\sum_{k=0}^m a_k^m - \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m (i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + V + d_k^m)^{-1}\right)u = 0.$$

En développant, on a

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\sum_{k=0}^m a_k^m u + i\sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m (i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + V + d_k^m)^{-1}u = 0.$$

On introduit alors la suite de fonctions auxiliaires $(\varphi_k)_{1 \leq k \leq m}$ définies par

$$\varphi_k = (i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + V + d_k^m)^{-1}u.$$

On obtient ainsi un système associé à la condition $ABC_{2,P}^1$

$$\begin{cases} \partial_{\mathbf{n}}u - i\sum_{k=0}^m a_k^m u + i\sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k = 0, & \text{sur } \Sigma_T, \\ i\partial_t \varphi_k + \Delta_{\Sigma} \varphi_k + V \varphi_k + d_k^m \varphi_k = u, & \text{sur } \Sigma_T, \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ \varphi_k(\mathbf{x}, 0) = 0, & \text{pour } \mathbf{x} \in \Sigma \text{ et } 1 \leq k \leq m, \end{cases} \quad (4.164)$$

où $\mathbf{x} = (x, y)$.

Remarquons que l'équation de définition des fonctions auxiliaires φ_k est ici une équation aux dérivées partielles sur le bord du domaine Σ (qui est une courbe fermée), alors qu'en dimension une il s'agissait simplement d'une équation différentielle ordinaire. Ce système est ensuite discrétisé en

v^{n+1} et $\varphi_k^{n+1/2} = \frac{\varphi_k^{n+1} + \varphi_k^n}{2}$. On a, pour $0 \leq n \leq N$,

$$\begin{cases} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} - i \sum_{k=0}^m a_k^m v^{n+1} + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k^{n+1/2} = 0, & \text{sur } \Sigma, \\ \frac{2i}{\Delta t} \varphi_k^{n+1/2} + \Delta_{\Sigma} \varphi_k^{n+1/2} + V^{n+1/2} \varphi_k^{n+1/2} + d_k^m \varphi_k^{n+1/2} = v^{n+1} + \frac{2i}{\Delta t} \varphi_k^n, & \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ \varphi_k(\mathbf{x}, 0) = 0, & \text{pour } \mathbf{x} \in \Sigma \text{ et } 1 \leq k \leq m. \end{cases}$$

Il s'agit d'un système couplé dont les inconnues sont $v^{n+1} = u^{n+1/2}$ et $\varphi_k^{n+1/2}$. Contrairement au cas de la dimension une, il n'est plus possible de découpler le système. On met en évidence le couplage en écrivant le système sous la forme

$$\begin{cases} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} - i \sum_{k=0}^m a_k^m v^{n+1} + \frac{i}{2} \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k^{n+1} = -\frac{i}{2} \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k^n, \\ \left(\frac{2i}{\Delta t} + \Delta_{\Sigma} + W^{n+1} + d_k^m \right) \varphi_k^{n+1/2} - v^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t} \varphi_k^n, & 1 \leq k \leq m, \\ \varphi_k(\mathbf{x}, 0) = 0, & \text{pour } \mathbf{x} \in \Sigma \text{ et } 1 \leq k \leq m. \end{cases} \quad (4.165)$$

Étudions à présent l'ajout du terme lié à la condition d'ordre deux. Celle-ci s'écrit

$$\partial_{\mathbf{n}} u - i\sqrt{i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + V} u + \frac{\kappa}{2} u - \frac{\kappa}{2} (i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + V)^{-1} \Delta_{\Sigma} u = 0, \quad \text{sur } \Sigma.$$

On introduit une nouvelle fonction auxiliaire ψ , définie par

$$\psi = (i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + V)^{-1} \Delta_{\Sigma} u.$$

La discrétisation de la condition aux limites s'écrit alors

$$\partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} - i \sum_{k=0}^m a_k^m v^{n+1} + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k^{n+1/2} + \frac{\kappa}{2} v^{n+1} - \frac{\kappa}{2} \psi^{n+1/2} = 0,$$

associée à l'équation de mise à jour de ψ^n

$$\left(\frac{2i}{\Delta t} + \Delta_{\Sigma} + W^{n+1} \right) \psi^{n+1/2} = \Delta_{\Sigma} v^{n+1} + \frac{2i}{\Delta t} \psi^n$$

et à la condition initiale $\psi(\mathbf{x}, 0) = 0$ sur Σ . Finalement, pour la condition d'ordre deux $ABC_{2,P}^2$, on a le système discrétisé suivant

$$\begin{cases} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} - i \sum_{k=0}^m a_k^m v^{n+1} + \frac{\kappa}{2} v^{n+1} + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k^{n+1/2} - \frac{\kappa}{2} \psi^{n+1} = 0, \\ \left(\frac{2i}{\Delta t} + \Delta_{\Sigma} + W^{n+1} + d_k^m \right) \varphi_k^{n+1/2} - v^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t} \varphi_k^n, & 1 \leq k \leq m, \\ \left(\frac{2i}{\Delta t} + \Delta_{\Sigma} + W^{n+1} \right) \psi^{n+1/2} - \Delta_{\Sigma} v^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t} \psi^n, \\ \varphi_k(\mathbf{x}, 0) = 0 \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m, \quad \psi^0(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{sur } \Sigma. \end{cases} \quad (4.166)$$

Dans ce système, ψ est définie sur la courbe fermée Σ , tout comme les fonctions φ_k .

Nous pouvons à présent en faire autant avec les conditions issues du changement de jauge. La condition d'ordre un peut être traitée pour un potentiel tout à fait général, mais pour la condition

d'ordre deux, nous ne traiterons essentiellement que son expression dans le cas d'un potentiel radial. En effet, pour un potentiel général, la condition d'ordre deux s'écrit

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}} u - i e^{i\mathcal{V}} \sqrt{i\partial_t + \Delta_\Sigma} (e^{-i\mathcal{V}} u) + \frac{\kappa}{2} u \\ + (\partial_s \mathcal{V}) e^{i\mathcal{V}} (i\partial_t + \Delta_\Sigma)^{-1/2} \partial_s (e^{-i\mathcal{V}} u) - \frac{\kappa}{2} e^{i\mathcal{V}} (i\partial_t + \Delta_\Sigma)^{-1} \Delta_\Sigma (e^{-i\mathcal{V}} u) = 0. \end{aligned}$$

Le terme d'ordre $-1/2$ se traite en deux temps, en introduisant d'abord une nouvelle fonction auxiliaire η définie sur Σ_T par

$$(i\partial_t + \Delta_\Sigma)^{1/2} \eta = \partial_s (e^{-i\mathcal{V}} u),$$

puis en approchant l'opérateur racine carrée par les approximants de Padé d'ordre m

$$\left(\sum_{k=1}^m a_k^m \right) \eta - \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m (i\partial_t + \Delta_\Sigma + d_k^m)^{-1} \eta = \partial_s (e^{-i\mathcal{V}} u).$$

On introduit ensuite m nouvelles fonctions auxiliaires $(\theta_k)_{1 \leq k \leq m}$ définies classiquement sur Σ_T par

$$(i\partial_t + \Delta_\Sigma + d_k^m)^{-1} \eta = \theta_k.$$

Finalement, le terme d'ordre $-1/2$ dans la condition $ABC_{1,P}^2$ s'écrit

$$(\partial_s \mathcal{V}) e^{i\mathcal{V}} \eta,$$

avec l'ajout des $m + 1$ équations auxiliaires, couplées à la condition aux limites et entre elles

$$\begin{cases} \left(\sum_{k=1}^m a_k^m \right) \eta - \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \theta_k = \partial_s (e^{-i\mathcal{V}} u), \\ (i\partial_t + \Delta_\Sigma + d_k^m) \theta_k = \eta. \end{cases} \quad (4.167)$$

La résolution du problème avec la condition aux limites $ABC_{1,P}^2$ conduirait alors à la résolution d'un grand système linéaire couplé impliquant u , ainsi que les $2m + 2$ fonctions auxiliaires $(\varphi_k)_{1 \leq k \leq m}$, η , $(\theta_k)_{1 \leq k \leq m}$ et ψ . Ceci ne présenterait pas de difficulté particulière, hormis un agrandissement supplémentaire de la taille du système à résoudre, si la première équation de (4.167) ne faisait pas intervenir la dérivée curviligne d'une fonction non linéaire, $\partial_s (e^{-i\mathcal{V}} u)$. Pour des raisons dont nous reparlerons plus loin à propos des conditions $ABC_{1,T}^M$ (paragraphe 4.9.2), ce terme est délicat à approcher précisément, lorsque la fonction de phase \mathcal{V} n'est pas connue sous une forme analytique.

D'autre part, même en négligeant le terme d'ordre $-1/2$, et sans en connaître les effets, la formulation éléments finis liée au terme suivant $-\frac{\kappa}{2} e^{i\mathcal{V}} (i\partial_t + \Delta_\Sigma)^{-1} \Delta_\Sigma (e^{-i\mathcal{V}} u)$ fait intervenir

$$-\int_{\Sigma} \Delta_\Sigma \left(e^{-i\mathcal{W}^{n+1}} v^{n+1} \right) g d\Sigma = \int_{\Sigma} \partial_s \left(e^{-i\mathcal{W}^{n+1}} \right) v^{n+1} \partial_s g d\Sigma + \int_{\Sigma} e^{-i\mathcal{W}^{n+1}} \partial_s v^{n+1} \partial_s g d\Sigma$$

pour une fonction-test g . Si le deuxième terme se traite sans difficulté, le premier demande d'approcher numériquement la fonction non linéaire $e^{-i\mathcal{W}^{n+1}}$ sur Σ , ce qui demande d'interpoler sur les points du bord afin de calculer la dérivée curviligne sur Σ le long de cette courbe interpolante, suivant le même principe que le calcul de la courbure. Compte tenu du cumul de ces difficultés, on négligera les termes mentionnés dans les cas où le potentiel n'est pas radial, et on limitera autant que possible l'utilisation de la condition d'ordre deux à l'étude de problèmes à symétrie radiale.

En fin de compte, la condition $ABC_{1,P}^2$ sera utilisée essentiellement lorsque le potentiel et le domaine de calcul sont à symétrie radiale, auquel cas la condition devient

$$\partial_{\mathbf{n}} u - ie^{i\nu} \sqrt{i\partial_t + \Delta_{\Sigma}} (e^{-i\nu} u) + \frac{\kappa}{2} u - \frac{\kappa}{2} e^{i\nu} (i\partial_t + \Delta_{\Sigma})^{-1} \Delta_{\Sigma} (e^{-i\nu} u) = 0, \quad \text{sur } \Sigma. \quad (4.168)$$

Pour traiter, de manière approchée, le cas d'un potentiel ou d'un domaine non radial, on utilisera également la condition (4.168), tout en gardant à l'esprit que des termes, numériquement non négligeables, ont été supprimés dans cette expression.

Étudions maintenant la discrétisation de la condition (4.168). En introduisant les approximations de Padé et en définissant comme auparavant des fonctions auxiliaires $(\varphi_k)_{1 \leq k \leq m}$ et ψ , on obtient le système

$$\begin{cases} \partial_{\mathbf{n}} u - i \sum_{k=0}^m a_k^m u + \frac{\kappa}{2} u + ie^{i\nu} \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k - \frac{\kappa}{2} e^{i\nu} \psi = 0, & \text{sur } \Sigma_T, \\ (i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + d_k^m) \varphi_k = e^{-i\nu} u, & \text{sur } \Sigma_T, \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ (i\partial_t + \Delta_{\Sigma}) \psi = \Delta_{\Sigma} (e^{-i\nu} u), & \text{sur } \Sigma_T, \\ \varphi_k(\mathbf{x}, 0) = 0 \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m, \quad \psi(\mathbf{x}, 0) = 0 & \text{sur } \Sigma. \end{cases}$$

La discrétisation de ce système conduit à

$$\begin{cases} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} - i \sum_{k=0}^m a_k^m v^{n+1} + \frac{\kappa}{2} v^{n+1} + ie^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k^{n+1/2} - \frac{\kappa}{2} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \psi^{n+1/2} = 0, \\ \left(\frac{2i}{\Delta t} + \Delta_{\Sigma} + W^{n+1} + d_k^m \right) \varphi_k^{n+1/2} - e^{-i\mathcal{W}^{n+1}} v^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t} \varphi_k^n, & 1 \leq k \leq m, \\ \left(\frac{2i}{\Delta t} + \Delta_{\Sigma} + W^{n+1} \right) \psi^{n+1/2} - \Delta_{\Sigma} (e^{-i\mathcal{W}^{n+1}} v^{n+1}) = \frac{2i}{\Delta t} \psi^n, \\ \varphi_k(\mathbf{x}, 0) = 0 \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m, \quad \psi^0(\mathbf{x}) = 0 & \text{sur } \Sigma. \end{cases} \quad (4.169)$$

On en déduit la discrétisation de la condition du premier ordre $ABC_{1,P}^1$:

$$\begin{cases} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} - i \sum_{k=0}^m a_k^m v^{n+1} + ie^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k^{n+1/2} = 0, \\ \left(\frac{2i}{\Delta t} + \Delta_{\Sigma} + W^{n+1} + d_k^m \right) \varphi_k^{n+1/2} - e^{-i\mathcal{W}^{n+1}} v^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t} \varphi_k^n, & 1 \leq k \leq m, \\ \varphi_k(\mathbf{x}, 0) = 0 \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m & \text{sur } \Sigma. \end{cases} \quad (4.170)$$

Comme en 1D, on ne procède pas à l'analyse de stabilité pour les conditions issues de l'approche Padé.

4.9 Implémentation des CLA discrétisées dans un environnement éléments finis 2D

Les quatre familles de conditions aux limites ayant été discrétisées dans la section précédente, il s'agit maintenant de détailler comment ces conditions discrétisées s'intègrent dans la formulation éléments finis, donnée par (4.126). On considère ici des éléments finis \mathbb{P}_1 . Les intégrations numériques

sur le bord sont effectuées en utilisant la formule de Simpson :

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{(b-a)}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)$$

qui est exacte sur \mathbb{P}_1 . Nous aurons donc besoin de connaître les différentes fonctions intervenant dans les matrices d'éléments finis (potentiel, fonction de phase, courbure...) non seulement aux points du bord, mais aussi aux milieux des points du bord. Nous verrons au paragraphe 4.9.4 comment est calculée numériquement la courbure. Pour calculer des matrices généralisées associées à des fonctions qui ne sont connues que sur les nœuds du maillage, et non pas de manière analytique, on approche $f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ par $\frac{f(a)+f(b)}{2}$. C'est le cas notamment en non linéaire, pour assembler une matrice de masse du type $\mathbb{M}_{f(\mathbf{v}^{n+1})}$.

4.9.1 Implémentation des conditions $ABC_{2,T}^M$

Commençons par étudier la famille de CLA obtenues dans l'approche par développement de Taylor. Comme pour la discrétisation, on commence par les CLA issues de la méthode directe, plus faciles à traiter en l'absence de déphasage.

Considérons la condition d'ordre quatre $ABC_{2,T}^4$, dont la discrétisation est donnée en utilisant les convolutions discrètes

$$\begin{aligned} & \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} + e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{k=0}^{n+1} \beta_{n+1-k} v^k + \frac{\kappa}{2} v^{n+1} \\ & - e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \left(\frac{\kappa^2}{8} \sum_{k=0}^{n+1} \alpha_{n+1-k} v^k + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{n+1} \alpha_{n+1-k} \partial_s^2 v^k + \frac{1}{2} \text{sg}(W^{n+1}) \sqrt{|W^{n+1}|} \sum_{k=0}^{n+1} \alpha_{n+1-k} \sqrt{|W^k|} v^k \right) \\ & + i \frac{\Delta t}{2} \left(\frac{1}{2} \partial_s \left(\kappa \sum_{k=0}^{n+1} \delta_{n+1-k} \partial_s v^k \right) + \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} \sum_{k=0}^{n+1} \delta_{n+1-k} v^k \right. \\ & \quad \left. - \frac{1}{4} \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}) \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}|} \sum_{k=0}^{n+1} \delta_{n+1-k} \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^k|} v^k \right) = 0 \end{aligned}$$

Remarquons que comme $v^0 = u^0$ est nulle sur le bord, les sommes ci-dessus commencent en réalité à $k = 1$. Afin de mieux se focaliser sur la structure de la condition aux limites, on introduit les coefficients

$$\begin{aligned} \mu_1 &= e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \\ \mu_2 &= \frac{1}{2} \\ \mu_3 &= -e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \\ \mu_4 &= i \frac{\Delta t}{2} \end{aligned} \tag{4.171}$$

On s'intéresse alors particulièrement aux termes en v^{n+1} . L'intégrale sur le bord de la dérivée normale

contre une fonction test $g \in H^1(\Omega)$ se réécrit

$$\begin{aligned} \int_{\Sigma} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} g = & \\ & - \mu_1 \int_{\Sigma} v^{n+1} g - \mu_2 \int_{\Sigma} \kappa v^{n+1} g - \mu_3 \left(\int_{\Sigma} \frac{\kappa^2}{8} v^{n+1} g - \frac{1}{2} \int_{\Sigma} \partial_s v^{n+1} \partial_s g + \frac{1}{2} \int_{\Sigma} W^{n+1} v^{n+1} g \right) \\ & - \mu_4 \left(-\frac{1}{2} \int_{\Sigma} \kappa \partial_s v^{n+1} \partial_s g + \int_{\Sigma} \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} v^{n+1} g - \frac{1}{4} \int_{\Sigma} \partial_{\mathbf{n}} W^{n+1} v^{n+1} g \right) \\ & - SM^n(v^0, \dots, v^n) \end{aligned}$$

où SM^n désigne le restant des termes, ne dépendant plus que des termes v^1 jusqu'à v^n , et égal à

$$\begin{aligned} \mu_1 \sum_{k=1}^n \beta_{n+1-k} \int_{\Sigma} v^k g + \mu_3 \left(\sum_{k=1}^n \alpha_{n+1-k} \int_{\Sigma} \frac{\kappa^2}{8} v^k g - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \alpha_{n+1-k} \int_{\Sigma} \partial_s v^k \partial_s g \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \alpha_{n+1-k} \int_{\Sigma} \text{sg}(W^{n+1}) \sqrt{|W^{n+1}|} \sqrt{|W^k|} v^k g \right) \\ + \mu_4 \left(-\frac{1}{2} \sum_{k=1}^n \delta_{n+1-k} \int_{\Sigma} \kappa \partial_s v^k \partial_s g + \sum_{k=1}^n \delta_{n+1-k} \int_{\Sigma} \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} v^k g \right. \\ \left. - \frac{1}{4} \sum_{k=1}^n \delta_{n+1-k} \int_{\Sigma} \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}) \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}|} \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^k|} v^k g \right). \end{aligned}$$

Ici, et lorsqu'il n'y aura aucune ambiguïté sur le domaine d'intégration, les intégrales sur le bord sont notées

$$\int_{\Sigma} fg$$

au lieu de

$$\int_{\Sigma} fg d\Sigma.$$

Finalement, la matrice des termes de bord \mathbb{B}^{n+1} s'écrit

$$\mathbb{B}^{n+1} = \mu_1 \mathbb{M}^{\Sigma} + \mu_2 \mathbb{M}_{\kappa}^{\Sigma} + \mu_3 \left(\frac{1}{8} \mathbb{M}_{\kappa^2}^{\Sigma} - \frac{1}{2} \mathbb{S}^{\Sigma} + \frac{1}{2} \mathbb{M}_{W^{n+1}}^{\Sigma} \right) + \mu_4 \left(-\frac{1}{2} \mathbb{S}_{\kappa}^{\Sigma} + \frac{1}{8} \mathbb{M}_{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}^{\Sigma} - \frac{1}{4} \mathbb{M}_{\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}}^{\Sigma} \right)$$

où \mathbb{M}^{Σ} désigne la matrice de masse des éléments du bord, \mathbb{M}_f^{Σ} la matrice de masse généralisée associée à la fonction f , toujours sur le bord, \mathbb{S}^{Σ} la matrice de raideur sur le bord, et \mathbb{S}_f^{Σ} la matrice de raideur généralisée associée à la fonction f . Quant au second membre, il s'écrit matriciellement \mathbf{b}^n

$$\begin{aligned} \mathbf{b}^n = \mu_1 \sum_{k=1}^n \beta_{n+1-k} \mathbb{M}^{\Sigma} \mathbf{v}^k + \mu_3 \sum_{k=1}^n \alpha_{n+1-k} \left(\frac{1}{8} \mathbb{M}_{\kappa^2}^{\Sigma} - \frac{1}{2} \mathbb{S}^{\Sigma} + \frac{1}{2} \mathbb{M}_{\text{sg}(W^{n+1}) \sqrt{|W^{n+1}|} \sqrt{|W^k|}}^{\Sigma} \right) \mathbf{v}^k \\ + \mu_4 \sum_{k=1}^n \delta_{n+1-k} \left(-\frac{1}{2} \mathbb{S}_{\kappa}^{\Sigma} + \frac{1}{8} \mathbb{M}_{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}^{\Sigma} - \frac{1}{4} \mathbb{M}_{\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}) \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}|} \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^k|}}^{\Sigma} \right) \mathbf{v}^k, \end{aligned}$$

où l'on note \mathbf{v}^k le vecteur nodal associé à v^k . Les nouvelles matrices éléments finis du bord intervenant ici sont donc les matrices de masse généralisées associées aux formes bilinéaires

$$\int_{\Sigma} \text{sg}(W^{n+1}) \sqrt{|W^{n+1}|} \sqrt{|W^k|} v^k g d\Sigma$$

et

$$\int_{\Sigma} \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}) \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}|} \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^k|} v^k g \, d\Sigma,$$

notées respectivement $\widetilde{\mathbb{M}}_{W^{n+1}}^{\Sigma,k}$ et $\widetilde{\mathbb{M}}_{\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}}^{\Sigma,k}$ pour abrégier les notations. En toute généralité, W^{n+1} et $\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}$ dépendent de l'abscisse curviligne s , ce qui ne permet pas de simplifier davantage l'expression de ces matrices pour se ramener aux matrices déjà calculées pour la partie linéaire en v^{n+1} . Avec ces notations, on peut écrire \mathbf{b}^n

$$\begin{aligned} \mathbf{b}^n = & \mu_1 \sum_{k=1}^n \beta_{n+1-k} \mathbb{M}^{\Sigma} \mathbf{v}^k + \mu_3 \sum_{k=1}^n \alpha_{n+1-k} \left(\frac{1}{8} \mathbb{M}_{\kappa^2}^{\Sigma} - \frac{1}{2} \mathbb{S}^{\Sigma} + \frac{1}{2} \widetilde{\mathbb{M}}_{W^{n+1}}^k \right) \mathbf{v}^k \\ & + \mu_4 \sum_{k=1}^n \delta_{n+1-k} \left(-\frac{1}{2} \mathbb{S}_{\kappa}^{\Sigma} + \frac{1}{8} \mathbb{M}_{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}^{\Sigma} - \frac{1}{4} \mathbb{M}_{\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}}^{\Sigma,k} \right) \mathbf{v}^k. \end{aligned}$$

Remarque 4.13. Dans le cas où le potentiel V est à symétrie radiale, et le domaine de calcul est un disque centré sur l'origine, les quantités W^{n+1} et $\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}$ sont constantes, à chaque itération n , sur le bord Σ . On a alors

$$\widetilde{\mathbb{M}}_{W^{n+1}}^{\Sigma,k} = \text{sg}(W^{n+1}) \sqrt{|W^{n+1}|} \sqrt{|W^k|} \mathbb{M}^{\Sigma}$$

et

$$\widetilde{\mathbb{M}}_{\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}}^{\Sigma,k} = \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}) \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^{n+1}|} \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}} W^k|} \mathbb{M}^{\Sigma}.$$

4.9.2 Implémentation des conditions $\text{ABC}_{1,T}^M$

Nous passons maintenant à l'implémentation des conditions $\text{ABC}_{1,T}^M$, dont la discrétisation est donnée par la proposition 4.45. En toute généralité, nous considérons d'abord la condition d'ordre deux $\text{ABC}_{1,T}^2$. On exprime l'intégrale de $\partial_{\mathbf{n}} v^{n+1}$ sur le bord en regroupant les termes en v^{n+1}

$$\int_{\Sigma} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} g = -e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \int_{\Sigma} v^{n+1} g - \frac{1}{2} \int_{\Sigma} \kappa v^{n+1} g - e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{k=1}^n \beta_{n+1-k} \int_{\Sigma} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} e^{-i\mathcal{W}^k} v^k g.$$

Ainsi, l'écriture matricielle donne pour la matrice des termes de bord \mathbb{B}^{n+1}

$$\mathbb{B}^{n+1} = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \mathbb{M}^{\Sigma} + \frac{1}{2} \mathbb{M}_{\kappa}^{\Sigma}, \quad (4.172)$$

avec les mêmes notations qu'auparavant, et le second membre \mathbf{b}^n s'écrit

$$\mathbf{b}^n = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{k=1}^n \beta_{n+1-k} \mathbb{M}_{e^{i(\mathcal{W}^{n+1} - \mathcal{W}^k)}}^{\Sigma} \mathbf{v}^k. \quad (4.173)$$

On aimerait à présent poursuivre avec les condition d'ordres trois et quatre, mais on s'aperçoit vite que la généralisation n'est pas aisée, et ce pour plusieurs raisons. Lorsque le potentiel V n'est pas radial, les conditions d'ordres trois et quatre incluent deux termes supplémentaires

$$(i\partial_s^2 \mathcal{V} - (\partial_s \mathcal{V})^2) I_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u) \quad \text{et} \quad i(\partial_s \kappa)(\partial_s \mathcal{V}) I_t (e^{-i\mathcal{V}} u),$$

qui sont particulièrement difficiles à prendre en compte dans un environnement éléments finis, à cause des fonctions $\partial_s \mathcal{V}$. Si le potentiel est connu de manière analytique, on peut obtenir une expression analytique de cette dérivée curviligne, puis construire les matrices généralisées associées. Mais lorsque

le potentiel n'est connu que sur les nœuds du maillage, comme c'est le cas par exemple en non linéaire, ou lors de la résolution de l'équation de Schrödinger-Poisson, l'évaluation précise de la dérivée curviligne est beaucoup plus compliquée. On pourrait, pour traiter numériquement des exemples de potentiels non radiaux avec les conditions $ABC_{1,T}^M$, négliger ces termes, bien qu'ils ne semblent numériquement pas petits. Cependant, même avec ces simplifications, d'autres difficultés se présentent. En effet, les exponentielles $e^{i\mathcal{W}^{n+1}}$ et $e^{-i\mathcal{W}^k}$ ne sont plus constantes sur Σ . Une des difficultés qui en résulte est le traitement du terme du troisième ordre lié à $\partial_s^2(e^{-i\mathcal{V}}u)$. Après intégration par parties sur la courbe fermée Σ on obtient

$$-\int_{\Sigma} \partial_s^2 \left(e^{-i\mathcal{W}^k} v^k \right) e^{i\mathcal{W}^{n+1}} g d\Sigma = \int_{\Sigma} \partial_s \left(e^{-i\mathcal{W}^k} v^k \right) \partial_s \left(e^{i\mathcal{W}^{n+1}} g \right) d\Sigma.$$

On développe alors chacune des deux dérivées curvilignes, ce qui conduit à quatre termes

$$\begin{aligned} \int_{\Sigma} (\partial_s e^{-i\mathcal{W}^k}) (\partial_s e^{i\mathcal{W}^{n+1}}) v^k g + \int_{\Sigma} (\partial_s e^{-i\mathcal{W}^k}) e^{i\mathcal{W}^{n+1}} v^k \partial_s g \\ + \int_{\Sigma} e^{-i\mathcal{W}^k} (\partial_s e^{i\mathcal{W}^{n+1}}) (\partial_s v^k) g + \int_{\Sigma} e^{-i\mathcal{W}^k} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} (\partial_s v^k) (\partial_s g). \end{aligned}$$

De ces quatre termes, seul le dernier est facile à implémenter, puisqu'il s'agit d'une matrice de raideur généralisée associée au potentiel $e^{-i\mathcal{W}^k} e^{i\mathcal{W}^{n+1}}$, auquel on a directement accès. En revanche, les trois autres termes font intervenir la dérivée curviligne de la fonction $e^{\pm i\mathcal{W}^k}$ sur le bord. Toute la difficulté consiste à approcher convenablement la dérivée de cette fonction non linéaire. Or, on ne sait pas quelle est la bonne méthode pour approcher ces termes de manière cohérente avec les éléments finis. Par exemple, on ignore si on peut se contenter d'une approche par différences finies. Il faut souligner que même si l'on disposait des éléments nécessaires pour travailler de façon analytique, le code ne serait pas généralisable à un potentiel non linéaire, puisqu'il faudrait alors estimer numériquement ces dérivées curvilignes. Compte tenu de ces difficultés et par manque de temps, nous ne traiterons pas le cas non radial pour les conditions $ABC_{1,T}^M$ d'ordres trois et supérieur. Pour travailler avec un potentiel non radial, on aura alors à disposition la condition d'ordre deux décrite ci-dessus, ainsi que des conditions d'ordres trois et quatre approchées par rapport aux conditions $ABC_{1,T}^3$ et $ABC_{1,T}^4$, qui consisteront à utiliser la même expression que lorsque le potentiel est radial. Dans le cas d'un potentiel non linéaire, on ne retiendra que la condition d'ordre deux.

Nous poursuivons donc avec l'étude des conditions d'ordres trois et quatre, mais uniquement dans le cas où le domaine de calcul et le potentiel sont à symétrie radiale. Dans ce cas, les opérateurs $\Lambda_{1,T}^{3,n+1}$ et $\Lambda_{1,T}^{4,n+1}$ ont une expression simplifiée, et la condition d'ordre quatre s'écrit, en tenant compte cette fois du fait que $\partial_s e^{\pm i\mathcal{W}^k} = 0$,

$$\begin{aligned} \partial_n v^{n+1} + e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^{n+1} \beta_{n+1-k} e^{-i\mathcal{W}^k} v^k + \frac{\kappa}{2} v^{n+1} \\ - e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^{n+1} \alpha_{n+1-k} \frac{\kappa^2}{8} e^{-i\mathcal{W}^k} v^k - e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^{n+1} \alpha_{n+1-k} \frac{1}{2} e^{-i\mathcal{W}^k} \partial_s^2 v^k \\ + i \frac{\Delta t}{2} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^{n+1} \delta_{n+1-k} \frac{1}{2} e^{-i\mathcal{W}^k} \partial_s (\kappa v^k) + i \frac{\Delta t}{2} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^{n+1} \delta_{n+1-k} \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} e^{-i\mathcal{W}^k} v^k \\ - i \frac{\Delta t}{2} \frac{\text{sg}(\partial_n W^{n+1})}{4} \sqrt{|\partial_n W^{n+1}|} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^{n+1} \delta_{n+1-k} \sqrt{|\partial_n W^k|} e^{-i\mathcal{W}^k} v^k = 0. \end{aligned}$$

On réutilise les coefficients définis par (4.171). En regroupant les termes en v^{n+1} dans l'intégrale de $\partial_{\mathbf{n}}v^{n+1}$ sur le bord, on a

$$\begin{aligned} \int_{\Sigma} \partial_{\mathbf{n}}v^{n+1}g &= -\mu_1 \int_{\Sigma} v^{n+1}g - \mu_2 \int_{\Sigma} \kappa v^{n+1}g - \mu_3 \left(\int_{\Sigma} \frac{\kappa^2}{8} v^{n+1}g - \frac{1}{2} \int_{\Sigma} \partial_s v^{n+1} \partial_s g \right) \\ &\quad - \mu_4 \left(-\frac{1}{2} \int_{\Sigma} \kappa \partial_s v^{n+1} \partial_s g + \int_{\Sigma} \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} v^{n+1}g - \frac{1}{4} \int_{\Sigma} \partial_{\mathbf{n}}W^{n+1} v^{n+1}g \right) - SM^n(v^1, \dots, v^n) \end{aligned}$$

où SM^n désigne l'ensemble des termes restants, ne dépendant plus que de v^1 jusqu'à v^n . Le potentiel et le domaine de calcul étant à symétrie radiale, les quantités \mathcal{W}^{n+1} et $\partial_{\mathbf{n}}W^{n+1}$ sont constantes sur Σ , ce qui fait que ce second membre SM^n devient

$$\begin{aligned} \mu_1 e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^n \beta_{n+1-k} e^{-i\mathcal{W}^k} \int_{\Sigma} v^k g + \mu_3 e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^n \alpha_{n+1-k} e^{-i\mathcal{W}^k} \left(\int_{\Sigma} \frac{\kappa^2}{8} v^k g - \frac{1}{2} \int_{\Sigma} \partial_s v^k \partial_s g \right) \\ + \mu_4 e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^n \delta_{n+1-k} e^{-i\mathcal{W}^k} \left(-\frac{1}{2} \int_{\Sigma} \kappa \partial_s v^k \partial_s g + \int_{\Sigma} \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} v^k g \right) \\ - \frac{\mu_4}{4} \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}}W^{n+1}) \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}W^{n+1}|} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^n \delta_{n+1-k} \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}W^k|} e^{-i\mathcal{W}^k} \int_{\Sigma} v^k g. \end{aligned}$$

Matriciellement, on peut alors écrire les termes de bord comme \mathbb{B}^{n+1}

$$\mathbb{B}^{n+1} = \mu_1 \mathbb{M}^{\Sigma} + \mu_2 \mathbb{M}_{\kappa}^{\Sigma} + \mu_3 \left(\frac{1}{8} \mathbb{M}_{\kappa^2}^{\Sigma} - \frac{1}{2} \mathbb{S}^{\Sigma} \right) + \mu_4 \left(-\frac{1}{2} \mathbb{S}_{\kappa}^{\Sigma} + \frac{1}{8} \mathbb{M}_{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}^{\Sigma} - \frac{1}{4} \mathbb{M}_{W^{n+1}}^{\Sigma} \right) \quad (4.174)$$

et le second membre \mathbf{b}^n comme

$$\begin{aligned} \mathbf{b}^n &= \mu_1 e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^n \beta_{n+1-k} \mathbb{M}^{\Sigma} \left(e^{-i\mathcal{W}^k} v^k \right) + \mu_3 e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^n \alpha_{n+1-k} \left(\frac{1}{8} \mathbb{M}_{\kappa^2}^{\Sigma} - \frac{1}{2} \mathbb{S}^{\Sigma} \right) \left(e^{-i\mathcal{W}^k} v^k \right) \\ &\quad + \mu_4 e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^n \delta_{n+1-k} \left(-\frac{1}{2} \mathbb{S}_{\kappa}^{\Sigma} + \frac{1}{8} \mathbb{M}_{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}^{\Sigma} \right) \left(e^{-i\mathcal{W}^k} v^k \right) \\ &\quad - \frac{\mu_4}{4} \text{sg}(\partial_{\mathbf{n}}W^{n+1}) \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}W^{n+1}|} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^n \delta_{n+1-k} \sqrt{|\partial_{\mathbf{n}}W^k|} \mathbb{M}^{\Sigma} \left(e^{-i\mathcal{W}^k} v^k \right). \quad (4.175) \end{aligned}$$

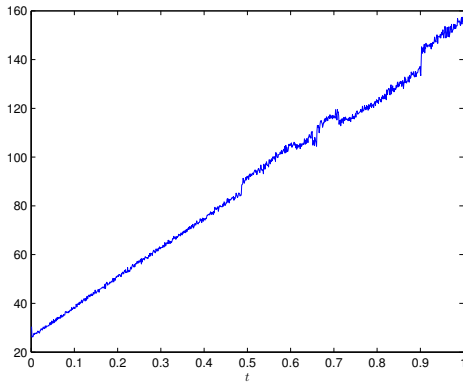
Si de plus le potentiel ne dépend pas du temps (ce qui dispense de la symétrisation du terme $\partial_{\mathbf{n}}V$), alors le second membre SM^n est de la forme

$$\begin{aligned} \mu_1 \sum_{k=1}^n \beta_{n+1-k} \int_{\Sigma} e^{i(\mathcal{W}^{n+1} - \mathcal{W}^k)} v^k g \\ + \mu_3 \sum_{k=1}^n \alpha_{n+1-k} \left(\int_{\Sigma} \frac{\kappa^2}{8} e^{i(\mathcal{W}^{n+1} - \mathcal{W}^k)} v^k g - \frac{1}{2} \int_{\Sigma} e^{i(\mathcal{W}^{n+1} - \mathcal{W}^k)} \partial_s v^k \partial_s g \right) \\ + \mu_4 \sum_{k=1}^n \delta_{n+1-k} \left(-\frac{1}{2} \int_{\Sigma} \kappa e^{i(\mathcal{W}^{n+1} - \mathcal{W}^k)} \partial_s v^k \partial_s g + \int_{\Sigma} \frac{\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa}{8} e^{i(\mathcal{W}^{n+1} - \mathcal{W}^k)} v^k g \right. \\ \left. - \frac{1}{4} \int_{\Sigma} \partial_{\mathbf{n}}V e^{i(\mathcal{W}^{n+1} - \mathcal{W}^k)} v^k g \right). \end{aligned}$$

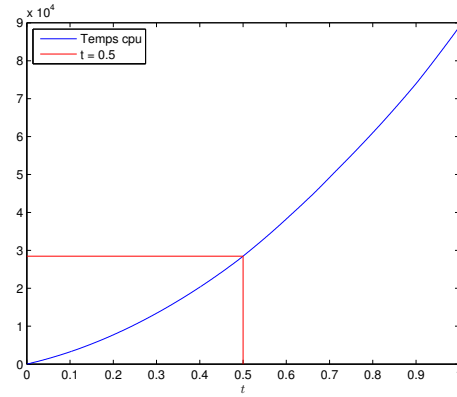
La matrice de bord est inchangée par rapport à (4.174), et le second membre s'écrit matriciellement

$$\begin{aligned} \mathbf{b}^n = & \mu_1 \sum_{k=1}^n \beta_{n+1-k} \mathbb{M}_{e^{i(\mathcal{W}^{n+1}-\mathcal{W}^k)}}^\Sigma \mathbf{v}^k + \mu_3 \sum_{k=1}^n \alpha_{n+1-k} \left(\frac{1}{8} \mathbb{M}_{\kappa^2 e^{i(\mathcal{W}^{n+1}-\mathcal{W}^k)}}^\Sigma - \frac{1}{2} \mathbb{S}_{e^{i(\mathcal{W}^{n+1}-\mathcal{W}^k)}}^\Sigma \right) \mathbf{v}^k \\ & + \mu_4 \sum_{k=1}^n \delta_{n+1-k} \left(-\frac{1}{2} \mathbb{S}_{\kappa e^{i(\mathcal{W}^{n+1}-\mathcal{W}^k)}}^\Sigma + \frac{1}{8} \mathbb{M}_{(\kappa^3 + \partial_x^2 \kappa) e^{i(\mathcal{W}^{n+1}-\mathcal{W}^k)}}^\Sigma - \frac{1}{4} \mathbb{M}_{\partial_n V e^{i(\mathcal{W}^{n+1}-\mathcal{W}^k)}}^\Sigma \right) \mathbf{v}^k. \end{aligned} \quad (4.176)$$

Toutes les matrices d'éléments finis intervenant sont des matrices généralisées et dépendent du temps. Plus précisément, à chaque itération en temps, il faut réassembler *pour chaque entier k de 1 à n* les six matrices d'éléments finis ci-dessus. Algorithmiquement, ceci est relativement coûteux puisqu'à chaque temps t_n , il faut faire $6n$ assemblages de matrices d'éléments finis sur le bord, pour N itérations en temps. Au total, cela fait de l'ordre de $3N^2$ assemblages, qui viennent s'ajouter aux $\frac{3N^2}{2}$ produits matrices-vecteurs. Ceci représente une augmentation considérable du temps de calcul, les itérations étant de plus en plus longues à effectuer. Sur la figure 4.2(a), on a représenté l'évolution en fonction de l'itération n du temps cpu associé à l'itération du temps t_n , lorsqu'on utilise la condition aux limites $ABC_{1,T}^4$ pour un potentiel non radial. On considère pour cela le potentiel $V(x, y) = x^2 + 5y^2$ du paragraphe 4.10.3, pour la discrétisation $n_T = 423\,000$ et $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$. Le temps final de calcul est $T = 1$. On voit que l'augmentation est affine par rapport à n . Si on représente le temps de calcul cpu cumulé depuis l'instant initial jusqu'à l'itération n (figure 4.2(b)), on voit que doubler le temps final de calcul conduit à tripler le coût total cpu du calcul associé à la condition $ABC_{1,T}^4$. En ce qui concerne le temps de calcul effectivement constaté, la progression est encore plus importante. Alors qu'il faut $4^{\text{h}}30$ pour effectuer le calcul lorsque le pas de temps vaut $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$, diminuer ce pas de temps par deux conduit à un calcul effectif de $17^{\text{h}}15$.



(a) Temps cpu par itération



(b) Temps cpu cumulé

FIGURE 4.2 – Coût cpu (en secondes) d'une itération en temps pour la condition $ABC_{1,T}^4$ lorsque le potentiel est non radial.

Il est à noter que pour la méthode directe en revanche, que les conditions aux limites soient interprétées par approximants de Padé ou par développement de Taylor, la résolution dans le cas d'un potentiel non radial est exactement la même que dans le cas d'un potentiel radial. En particulier, le fait de traiter un potentiel non radial ne constitue aucun surcoût algorithmique. De ce point de vue, on aura tendance à se restreindre aux CLA issues de la méthode directe pour résoudre un problème

dans lequel le potentiel n'est pas radial, alors que pour un potentiel radial, les critères de choix de la CLA peuvent être tout autres. Remarquons enfin que dans le cas de l'équation non linéaire, la solution n'est la plupart du temps pas radiale, à moins de considérer une donnée initiale avec impulsion nulle, ou certaines situations correspondant à un mode respiratoire, mais nous ne traitons pas ces cas ici. Algorithmiquement, il sera donc plus intéressant de considérer les conditions de la deuxième stratégie, car celles de la première stratégie, en plus d'être limitées à l'ordre deux, seront certainement bien plus coûteuses.

4.9.3 Implémentation des conditions $ABC_{1,P}^M$ et $ABC_{2,P}^M$

Nous nous intéressons maintenant à l'implémentation des conditions aux limites approchées par approximants de Padé. On part de la formulation variationnelle (4.126) dans laquelle on remplace $\partial_{\mathbf{n}}v^{n+1}$ en se basant sur la première équation des systèmes (4.166) ou (4.169). Commençons, comme d'habitude, par les conditions $ABC_{2,P}^M$ issues de la méthode directe. La discrétisation de la condition d'ordre deux étant donnée par le système (4.166), on a pour une fonction-test $g \in H^1(\Omega)$

$$\int_{\Sigma} \partial_{\mathbf{n}}v^{n+1}g = i \left(\sum_{k=0}^m a_k^m \right) \int_{\Sigma} v^{n+1}g - \int_{\Sigma} \frac{\kappa}{2} v^{n+1}g - i \int_{\Sigma} \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k^{n+1/2}g + \int_{\Sigma} \frac{\kappa}{2} \psi^{n+1/2}g.$$

En remplaçant dans la formulation variationnelle de l'équation intérieure, et en notant φ_k (resp. ψ) le vecteur nodal associé à φ_k (resp. ψ), on obtient matriciellement

$$\begin{aligned} \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} \mathbf{v}^{n+1} - \mathbb{S} \mathbf{v}^{n+1} + \mathbb{M}_{W^{n+1}} \mathbf{v}^{n+1} + i \left(\sum_{k=0}^m a_k^m \right) \mathbb{M}^{\Sigma} \mathbf{v}^{n+1} - \frac{1}{2} \mathbb{M}_{\kappa}^{\Sigma} \mathbf{v}^{n+1} \\ - i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \mathbb{M}^{\Sigma} \varphi_k^{n+1/2} - \frac{1}{2} \mathbb{S}_{\kappa}^{\Sigma} \psi^{n+1/2} = \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} \mathbf{u}^n. \end{aligned}$$

Par ailleurs, la deuxième ligne de (4.166) conduit à l'équation de mise à jour de φ_k^{n+1} sur la courbe fermée Σ

$$-\mathbb{M}^{\Sigma} \mathbf{v}^{n+1} + \left(\frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^{\Sigma} - \mathbb{S}^{\Sigma} + \mathbb{M}_{W^{n+1}}^{\Sigma} + d_k^m \mathbb{M}^{\Sigma} \right) \varphi_k^{n+1/2} = \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^{\Sigma} \varphi_k^n,$$

pour $1 \leq k \leq m$. Enfin, la troisième ligne de (4.166) conduit, pour la mise à jour de ψ^{n+1} , à la résolution de l'équation sur Σ

$$-\mathbb{M}^{\Sigma} \mathbf{v}^{n+1} + \left(\frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^{\Sigma} - \mathbb{S}^{\Sigma} + \mathbb{M}_{W^{n+1}}^{\Sigma} \right) \psi^{n+1/2} = \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^{\Sigma} \psi^n.$$

Finalement, il apparaît qu'on a à résoudre un système couplé en $m + 2$ inconnues $(\mathbf{v}^{n+1}, \boldsymbol{\varphi}_1^{n+1/2}, \dots, \boldsymbol{\varphi}_m^{n+1/2}, \boldsymbol{\psi}^{n+1/2})$, qui s'écrit sous la forme

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} - \mathbb{S} + \mathbb{M}_{W^{n+1}} + i \left(\sum_{k=0}^m a_k^m \right) \mathbb{M}^\Sigma - \frac{1}{2} \mathbb{M}_\kappa^\Sigma \right) \mathbf{v}^{n+1} \\ \quad - i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \mathbb{M}^\Sigma \boldsymbol{\varphi}_k^{n+1/2} + \frac{1}{2} \mathbb{M}_\kappa^\Sigma \boldsymbol{\psi}^{n+1/2} = \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} \mathbf{u}^n, \\ - \mathbb{M}^\Sigma \mathbf{v}^{n+1} + \left(\frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma - \mathbb{S}^\Sigma + \mathbb{M}_{W^{n+1}}^\Sigma + d_k^m \mathbb{M}^\Sigma \right) \boldsymbol{\varphi}_k^{n+1/2} = \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma \boldsymbol{\varphi}_k^n, \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ \mathbb{S}^\Sigma \mathbf{v}^{n+1} + \left(\frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma - \mathbb{S}^\Sigma + \mathbb{M}_{W^{n+1}}^\Sigma \right) \boldsymbol{\psi}^{n+1/2} = \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma \boldsymbol{\psi}^n, \\ \boldsymbol{\varphi}_k^0(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m, \quad \boldsymbol{\psi}^0(\mathbf{x}) = 0 \quad \text{sur } \Sigma. \end{array} \right. \quad (4.177)$$

Matriciellement, on peut également écrire ce système

$$\left\{ \begin{array}{l} A \mathbf{v}^{n+1} + \sum_{k=1}^m B_k \boldsymbol{\varphi}_k^{n+1/2} + \tilde{B} \boldsymbol{\psi}^{n+1/2} = \mathbf{E}, \\ C_k \mathbf{v}^{n+1} + D_k \boldsymbol{\varphi}_k^{n+1/2} = \mathbf{F}_k, \quad 1 \leq k \leq m, \\ \tilde{C} \mathbf{v}^{n+1} + \tilde{D} \boldsymbol{\psi}^{n+1/2} = \tilde{\mathbf{F}}. \end{array} \right. \quad (4.178)$$

dans lequel, formellement, A est une matrice en volume sur Ω , mais toutes les autres matrices vivent uniquement sur le bord Σ . Afin de construire le système linéaire associé à ces $(m + 2)$ équations, il faut réordonner les nœuds du maillage en isolant les points du bord des points intérieurs. Notons n_P le nombre total de points du maillage, dont n_E points sur le bord et $n_O = n_P - n_E$ points intérieurs au domaine. Les points du maillage sont alors renumérotés

$$(p_1^\Omega, \dots, p_{n_O}^\Omega, p_1^\Sigma, \dots, p_{n_E}^\Sigma)$$

où les n_O premiers points correspondent aux points intérieurs, dont l'ordre n'importe pas, et les n_E points suivants correspondent aux points du bord, tels que les couples $(p_k^\Sigma, p_{k+1}^\Sigma)$ pour $k \in \{1, \dots, n_E - 1\}$ et $(p_{n_E}^\Sigma, p_1^\Sigma)$ constituent les arêtes consécutives du bord. On note alors $\mathbf{v}^{\Sigma, n+1}$ le vecteur des valeurs de v^{n+1} sur les points du bord $(p_1^\Sigma, \dots, p_{n_E}^\Sigma)$, et $\mathbf{v}^{\Omega, n+1}$ le vecteur des valeurs de v^{n+1} sur les points intérieurs $(p_1^\Omega, \dots, p_{n_O}^\Omega)$. Toutes les matrices d'éléments finis en volume intervenant dans le système sont réordonnées de cette façon. Les conséquences de ce réordonnement sur la matrice de masse \mathbb{M} sont détaillées sur la figure 4.3. Dans cette nouvelle organisation du maillage, étant donné que les éléments du bord sont ordonnés selon des arêtes consécutives, la sous-matrice associée à Σ est tridiagonale périodique. En réordonnant la matrice A conformément à ce maillage, le produit $A \mathbf{v}^{n+1}$ s'écrit

$$\begin{pmatrix} A^\Omega & A^\square \\ A^\square & A^\Sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}^{\Omega, n+1} \\ \mathbf{v}^{\Sigma, n+1} \end{pmatrix},$$

où les vecteurs $\mathbf{v}^{\Omega, n+1}$ et $\mathbf{v}^{\Sigma, n+1}$ sont respectivement de longueur n_O et n_E , et les matrices A^Ω , A^\square , A^\square et A^Σ de taille $n_O \times n_O$, $n_O \times n_E$, $n_E \times n_O$ et $n_E \times n_E$.

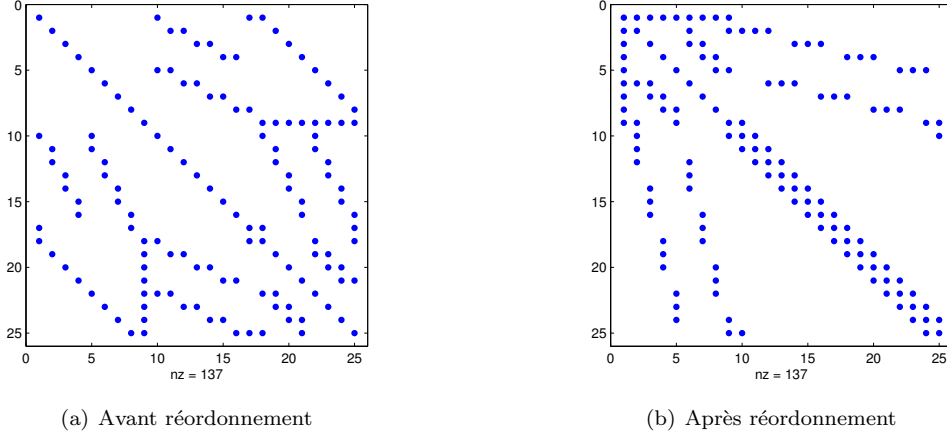


FIGURE 4.3 – Structure de la matrice de masse en volume \mathbb{M} , avant et après réordonnement des points, pour un maillage comportant $n_T = 32$ triangles, $n_P = 25$ points au total dont $n_E = 16$ sur le bord.

Matriciellement, le système (4.177) peut alors s'écrire

$$\begin{pmatrix} A^\Omega & A^\square & 0 & 0 \\ A^\square & A^\Sigma & B_1 & \dots & B_m & \tilde{B} \\ & C_1 & D_1 & & 0 & \\ 0 & \vdots & & \ddots & 0 & \\ & C_m & 0 & & D_m & \\ 0 & \tilde{C} & 0 & & \tilde{D} & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}^{\Omega, n+1} \\ \mathbf{v}^{\Sigma, n+1} \\ \varphi_1^{n+1/2} \\ \vdots \\ \varphi_m^{n+1/2} \\ \psi^{n+1/2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{E}^\Omega \\ \mathbf{E}^\Sigma \\ \mathbf{F}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{F}_m \\ \tilde{\mathbf{F}} \end{pmatrix} \quad (4.179)$$

où on a découpé convenablement la matrice A et le vecteur E selon les points intérieurs et extérieurs

$$A = \begin{pmatrix} A^\Omega & A^\square \\ A^\square & A^\Sigma \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E} = \begin{pmatrix} \mathbf{E}^\Omega \\ \mathbf{E}^\Sigma \end{pmatrix}, \quad (4.180)$$

et où les différents éléments sont donnés par

$$\begin{aligned} A &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} - \mathbb{S} + \mathbb{M}_{W^{n+1}} + i \left(\sum_{k=1}^m a_k^m \right) \mathbb{M}^\Sigma - \frac{1}{2} \mathbb{M}_\kappa^\Sigma, \\ B_k &= -i a_k^m d_k^m \mathbb{M}^\Sigma, & \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ \tilde{B} &= \frac{1}{2} \mathbb{M}_\kappa^\Sigma, \\ C_k &= -\mathbb{M}^\Sigma, & \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ \tilde{C} &= \mathbb{S}^\Sigma, \\ D_k &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma - \mathbb{S}^\Sigma + \mathbb{M}_{W^{n+1}}^\Sigma + d_k^m \mathbb{M}^\Sigma, & \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ \tilde{D} &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma - \mathbb{S}^\Sigma + \mathbb{M}_{W^{n+1}}^\Sigma, \end{aligned} \quad (4.181)$$

et

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} \mathbf{u}^n, \\ \mathbf{F}_k &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma \boldsymbol{\varphi}_k^n, \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ \tilde{\mathbf{F}} &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma \boldsymbol{\psi}^n. \end{aligned} \quad (4.182)$$

Dans cette écriture, toutes les matrices autres que A sont de taille $n_E \times n_E$, et tous les vecteurs autres que $\mathbf{v}^{\Omega, n+1}$ et \mathbf{E}^Ω sont de longueur n_E . La figure 4.4 donne la structure de ce système. On voit bien que le problème est couplé uniquement par le bord Σ .

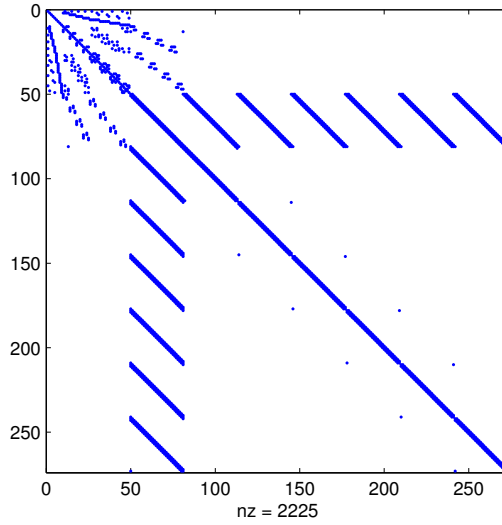


FIGURE 4.4 – Structure du système linéaire associé à la résolution du problème avec une CLA de type Padé. Exemple pour $m = 5$ fonctions de Padé, et un maillage comportant $n_T = 128$ triangles, $n_P = 81$ points dont $n_E = 32$ points de bord.

On remarque qu'en dimension deux, l'utilisation d'une condition de type Padé conduit à un accroissement de la taille du système à résoudre, et cet accroissement est proportionnel au nombre de fonctions de Padé considérées. Ce phénomène n'existait pas en dimension une. Ici, il est donc manifestement important de choisir judicieusement le nombre m de fonctions de Padé à considérer, afin de faire le meilleur compromis entre précision et efficacité numérique.

Cependant, cet accroissement de la taille du système ne porte que sur les points du bord. Ainsi, par rapport au système à résoudre pour une CLA de type Taylor (qui a la même taille que la matrice A), le système linéaire (4.179) est augmenté de $(m + 1)n_E$ lignes et autant de colonnes. Le système comporte donc au total $n_P + (m + 1)n_E$ lignes et colonnes, mais il faut noter que le nombre n_E de points sur le bord est vraiment petit devant le nombre total n_P de points du maillage, comme l'indique le tableau 4.1. Ce tableau donne la taille du système à résoudre pour 25 fonctions de Padé, en fonction de la taille du maillage, et l'accroissement relatif de la taille du système que cela représente par rapport à l'utilisation d'une condition de type Taylor (pour laquelle le système à résoudre comporte n_P points). La structure du système augmenté est visible figure 4.5. Il est à noter que dans les tests numériques à venir, pour mailler le disque de rayon 5, nous utiliserons uniquement les maillages les plus raffinés,

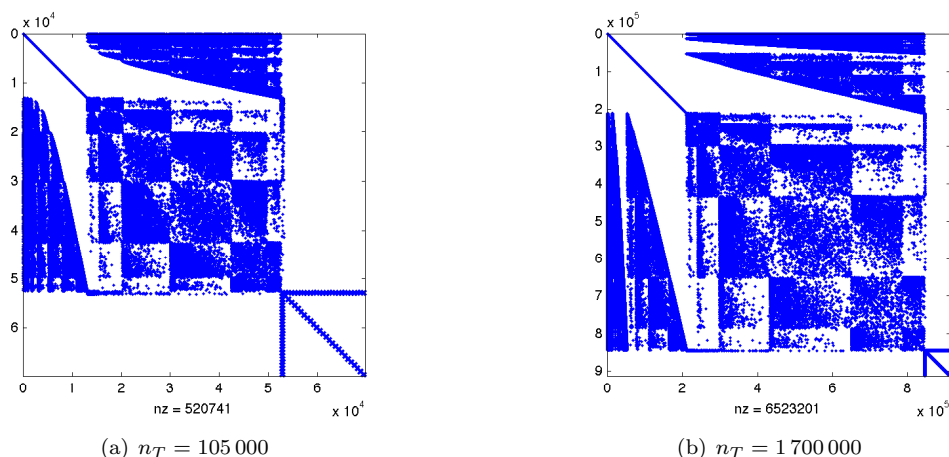


FIGURE 4.5 – Structure de la matrice du système augmenté pour $m = 25$ fonctions de Padé pour deux maillages différents.

comportant $n_T = 423\,000$ et $n_T = 1\,700\,000$ triangles. Pour ces maillages, on peut réellement dire que l'utilisation des approximants de Padé ne pénalise pas significativement le coût algorithmique.

A titre d'exemple, pour le maillage comportant $n_T = 1\,700\,000$ triangles, on a $n_P = 847\,000$ et $n_E = 2\,560$. Pour $m = 25$ fonctions de Padé, le système associé à la condition d'ordre deux $ABC_{2,P}^2$ est donc de taille $913\,000 \times 913\,000$, alors que le système associé à une condition de type Taylor sur le même maillage est de taille $847\,000 \times 847\,000$. Ainsi, l'utilisation d'une condition de type Padé avec 25 fonctions représente, pour un tel maillage, un accroissement de 8% de la taille du système à résoudre. On voit bien que, les équations auxiliaires ne portant que sur le bord du domaine, cette différence de taille n'est pas très significative.

Maillage (n_T)	n_P	n_E	m	Taille du système	Acc. rel. (taille)
1 700 000	847 000	2 560	25	913 000	+ 8 %
423 000	212 000	1 280	25	245 000	+ 16 %
105 000	53 000	640	25	70 000	+ 30 %

TABLE 4.1 – Taille du système augmenté à résoudre pour les conditions de Padé avec $m = 25$ fonctions, et accroissement relatif par rapport à une condition de type Taylor.

On étudie également l'influence des équations de bord sur le nombre de termes non nuls du système (voir tableau 4.2). On compare le nombre d'éléments non nuls du système associé à la condition $ABC_{2,P}^2$ avec 25 fonctions de Padé, au nombre d'éléments non nuls dans le système associé à $ABC_{2,T}^4$. Il faut savoir que la matrice A du problème intérieur associé à une condition de type Padé a la même structure, même nombre d'éléments non nuls et même conditionnement que la matrice du système associé à une condition de type Taylor. Les différences observées dans le tableau 4.2 correspondent donc bien à la modification du système suite à l'ajout des $m + 1$ fonctions auxiliaires. Pour le maillage le plus fin, on observe une augmentation relative de 10% des termes non nuls du système, ce qui reste acceptable.

Cependant, l'influence sur le conditionnement du système est désastreuse, comme l'indique le tableau 4.3, qui donne, pour différentes valeurs de m , une estimation du conditionnement du système linéaire, obtenue à l'aide de la fonction `condest` de matlab. Pour $m = 25$, le conditionnement passe

Maillage (n_T)	nz Taylor	m	nz Padé	Acc. rel. nz
1 700 000	5 924 161	25	6 523 201	+ 10 %
423 000	1 482 001	25	1 781 521	+ 20 %
105 000	370 981	25	520 741	+ 40 %

TABLE 4.2 – Nombre d'éléments non nuls du système linéaire pour les conditions de type Padé avec $m = 25$ fonctions et pour les conditions de type Taylor.

Maillage (n_T)	1 700 000		420 000		105 000	
	Taylor	Padé	Taylor	Padé	Taylor	Padé
m						
10	362	16 082	96	2 623	22	739
20		79 989		28 249		18 500
25		166 812		74 265		57 604
40		1 090 000		620 000		563 000
60		5 573 000		3 868 000		3 272 000

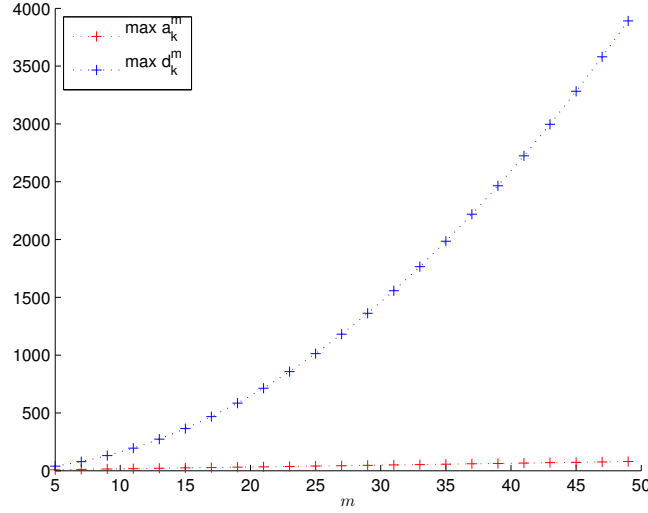
TABLE 4.3 – Conditionnement du système pour les conditions de type Padé pour différentes valeurs de m , et pour les conditions de type Taylor.

de 372 pour les CLA de type Taylor, à 166 812 pour les conditions de Padé. De fait, alors que l'ajout de fonctions de Padé semblait numériquement ne pas trop pénaliser la résolution du problème, nous verrons un peu plus loin que ce conditionnement élevé entraîne un coût supplémentaire dans la résolution du système linéaire. L'évolution du conditionnement avec m montre bien que c'est l'ajout des équations auxiliaires qui pénalise le conditionnement, ce qui révèle l'importance de ne pas prendre m inutilement grand. Pour comprendre cette augmentation du conditionnement avec m , on s'intéresse alors à l'ordre de grandeur des termes ajoutés par les conditions aux limites dans la matrice du système, et on remarque que ces termes peuvent être d'un ordre de grandeur relativement différent des termes de la matrice A . En fait, plus m augmente, et plus le maximum des termes $(d_k^m)_{1 \leq k \leq m}$ est grand. En effet, les coefficients de Padé étant donnés par (1.167), les coefficients a_k^m restent d'un ordre de grandeur raisonnable pour $m = 25$, mais le maximum des coefficients d_k^m est le dernier coefficient d_m^m qui est égal à

$$d_m^m = \tan^2 \left(\frac{(2m-1)\pi}{4m} \right)$$

et devient rapidement grand lorsque m augmente. L'évolution des coefficients a_m^m et d_k^m en fonction de m est représentée figure 4.6, et on voit que le coefficient d_m^m est de l'ordre de 10^3 à partir de $m = 25$. Ceci explique notamment que le conditionnement augmente avec m . Cependant, il n'est pas possible de renormaliser les équations auxiliaires portant sur φ_k et ψ , puisque le système est couplé et que les coefficients d_k^m interviennent également dans les matrices B_k .

On peut naturellement extraire des paragraphes précédents le traitement de la condition d'ordre un. Le système à résoudre est alors de taille $n_P + m n_E$, et il est obtenu à partir de (4.179) en supprimant la dernière ligne et la dernière colonne de la matrice, et le dernier bloc des vecteurs. Le

FIGURE 4.6 – Evolution des coefficients a_k^m et d_k^m en fonction de m .

système s'écrit

$$\begin{pmatrix} A^\Omega & A^\square & 0 & & \\ A^\square & A^\Sigma & B_1 & \dots & B_m \\ & C_1 & D_1 & & 0 \\ 0 & \vdots & & \ddots & \\ & C_m & 0 & & D_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}^{\Omega, n+1} \\ \mathbf{v}^{\Sigma, n+1} \\ \varphi_1^{n+1/2} \\ \vdots \\ \varphi_m^{n+1/2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{E}^\Omega \\ \mathbf{E}^\Sigma \\ \mathbf{F}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{F}_m \end{pmatrix} \quad (4.183)$$

où la matrice A est modifiée par rapport à (4.181) en retirant les termes relatifs à ψ , c'est-à-dire

$$A = \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} - \mathbb{S} + \mathbb{M}_{W^{n+1}} + i \left(\sum_{k=1}^m a_k^m \right) \mathbb{M}^\Sigma. \quad (4.184)$$

De la même manière, on peut écrire le système découlant de la condition $ABC_{1,P}^1$ obtenue par changement de jauge, dont la discrétisation est donnée par (4.170). Il s'agit de résoudre le système linéaire

$$\begin{pmatrix} A^\Omega & A^\square & 0 & & \\ A^\square & A^\Sigma & B_1 & \dots & B_m \\ & C_1 & D_1 & & 0 \\ 0 & \vdots & & \ddots & \\ & C_m & 0 & & D_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}^{\Omega, n+1} \\ \mathbf{v}^{\Sigma, n+1} \\ \varphi_1^{n+1/2} \\ \vdots \\ \varphi_m^{n+1/2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{E}^\Omega \\ \mathbf{E}^\Sigma \\ \mathbf{F}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{F}_m \end{pmatrix} \quad (4.185)$$

où les sous-matrices sont données par

$$\begin{aligned} A &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} - \mathbb{S} + \mathbb{M}_{W^{n+1}} + i \left(\sum_{k=1}^m a_k^m \right) \mathbb{M}^\Sigma, \\ B_k &= -i a_k^m d_k^m \mathbb{M}_{e^{i\psi^{n+1}}}^\Sigma, & \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ C_k &= -\mathbb{M}_{e^{-i\psi^{n+1}}}^\Sigma, & \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ D_k &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma - \mathbb{S}^\Sigma + d_k^m \mathbb{M}^\Sigma, & \text{pour } 1 \leq k \leq m, \end{aligned} \quad (4.186)$$

et les vecteurs du second membre par

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} \mathbf{u}^n, \\ \mathbf{F}_k &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma \boldsymbol{\varphi}_k^n, \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m. \end{aligned} \quad (4.187)$$

Remarque 4.14. Si le potentiel est radial et que le domaine de calcul est un disque, alors la quantité $e^{i\mathcal{W}^{n+1}}$ est constante sur la frontière Σ , et on peut écrire

$$\mathbb{M}_{e^{i\mathcal{W}^{n+1}}}^\Sigma = e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \mathbb{M}^\Sigma,$$

de manière à simplifier (4.186).

On souhaiterait à présent en déduire le système à résoudre pour la condition d'ordre deux $ABC_{1,P}^2$. Nous avons vu au paragraphe 4.8.4 que pour les conditions Padé issues du changement de jauge, la condition d'ordre deux n'était écrite que dans le cas d'un potentiel radial, même pour résoudre un problème associé à un potentiel non radial. Son expression est donc

$$\partial_{\mathbf{n}} u - ie^{i\mathcal{V}} \sqrt{i\partial_t + \Delta_\Sigma} (e^{-i\mathcal{V}} u) + \frac{\kappa}{2} u - \frac{\kappa}{2} e^{i\mathcal{V}} (i\partial_t + \Delta_\Sigma)^{-1} \Delta_\Sigma (e^{-i\mathcal{V}} u) = 0,$$

et le dernier terme sera manipulé en faisant, lorsque ce sera nécessaire, l'approximation $\partial_s e^{i\mathcal{V}} = 0$.

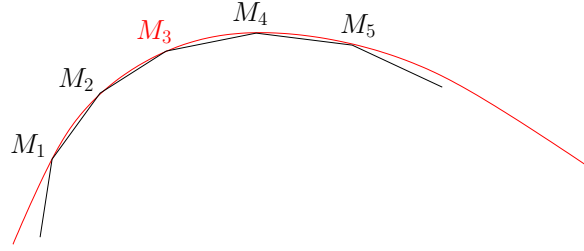
Cette condition $ABC_{1,P}^2$ conduit à la résolution du système linéaire (4.179) dans lequel les sous-matrices sont données par

$$\begin{aligned} A &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} - \mathbb{S} + \mathbb{M}_{W^{n+1}} + i \left(\sum_{k=1}^m a_k^m \right) \mathbb{M}^\Sigma - \frac{1}{2} \mathbb{M}_\kappa^\Sigma, \\ B_k &= -ie^{i\mathcal{W}^{n+1}} a_k^m d_k^m \mathbb{M}^\Sigma, \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ \tilde{B} &= \frac{1}{2} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \mathbb{M}_\kappa^\Sigma, \\ C_k &= -e^{-i\mathcal{W}^{n+1}} \mathbb{M}^\Sigma, \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ \tilde{C} &= e^{-i\mathcal{W}^{n+1}} \mathbb{S}^\Sigma, \\ D_k &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma - \mathbb{S}^\Sigma + d_k^m \mathbb{M}^\Sigma, \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ \tilde{D} &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma - \mathbb{S}^\Sigma, \end{aligned} \quad (4.188)$$

et les vecteurs du second membre valent

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} \mathbf{u}^n, \\ \mathbf{F}_k &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma \boldsymbol{\varphi}_k^n, \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ \tilde{\mathbf{F}} &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma \boldsymbol{\psi}^n. \end{aligned} \quad (4.189)$$

Si V n'est pas radial, une première approximation (sans aucune garantie) consiste à résoudre le

FIGURE 4.7 – Interpolation du bord par une courbe d'ordre quatre sur M_3 et ses quatre voisins.

système (4.179) où on a, pour les sous-matrices,

$$\begin{aligned}
 A &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} - \mathbb{S} + \mathbb{M}_{W^{n+1}} + i \left(\sum_{k=1}^m a_k^m \right) \mathbb{M}^\Sigma - \frac{1}{2} \mathbb{M}_\kappa^\Sigma, \\
 B_k &= -i a_k^m d_k^m \mathbb{M}_{e^{i\mathcal{W}^{n+1}}}^\Sigma, & \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\
 \tilde{B} &= \frac{1}{2} \mathbb{M}_{\kappa e^{i\mathcal{W}^{n+1}}}^\Sigma, \\
 C_k &= -\mathbb{M}_{e^{-i\mathcal{W}^{n+1}}}^\Sigma, & \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\
 \tilde{C} &= \mathbb{S}_{e^{-i\mathcal{W}^{n+1}}}^\Sigma, \\
 D_k &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma - \mathbb{S}^\Sigma + d_k^m \mathbb{M}^\Sigma, & \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\
 \tilde{D} &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma - \mathbb{S}^\Sigma,
 \end{aligned} \tag{4.190}$$

et les vecteurs du second membre sont identiques à (4.189).

4.9.4 Calcul de la courbure

L'implémentation de la plupart des conditions aux limites fait intervenir une matrice de masse généralisée associée à la courbure κ , notée \mathbb{M}_κ^Σ , voire une matrice de raideur généralisée notée \mathbb{S}_κ^Σ . Cela nécessite de déterminer, de manière approchée, la courbure en tout point du bord, selon le maillage utilisé. En fait, puisqu'on travaille avec des éléments finis \mathbb{P}_1 , les matrices d'éléments finis sont assemblées en utilisant la méthode de Simpson comme formule d'intégration numérique. Il faut donc connaître également la valeur de la courbure aux points milieux des arêtes du bord, pour obtenir un résultat aussi précis que possible. Pour ces deux ensembles de points (les sommets du bord, et les milieux des arêtes du bord), on utilise une interpolation du bord par une courbe d'ordre quatre passant par le point considéré et ses quatre plus proches voisins. La courbure au point cherché est alors approchée par la courbure de la courbe d'interpolation en ce point.

Plus précisément, soit M_3 un point du bord en lequel on souhaite évaluer la courbure $\kappa_\Sigma(M_3)$. On approche la courbure sur le bord au point M_3 par la courbure au point M_3 d'une courbe Γ qui interpole le bord sur M_3 et ses quatre voisins. Cette courbure mesurée le long de Γ est notée $\kappa_\Gamma(M_3)$. On note M_1, M_2, M_4 et M_5 les quatre voisins (deux à gauche, deux à droite) de M_3 sur Σ (voir figure 4.7). On construit une courbe interpolante Γ définie par

$$\Gamma(t) : \begin{cases} x(t) = at^4 + bt^3 + ct^2 + dt + e \\ y(t) = ft^4 + gt^3 + ht^2 + kt + l \end{cases} \tag{4.191}$$

telle que Γ passe par les points M_i , $1 \leq i \leq 5$, avec

$$\begin{aligned} M_1 &= \Gamma(t_1) \\ M_2 &= \Gamma(0) \\ M_3 &= \Gamma(t_2) \\ M_4 &= \Gamma(1) \\ M_5 &= \Gamma(t_3) \end{aligned} \tag{4.192}$$

où les paramètres t_1 , t_2 et t_3 sont des poids barycentriques correspondant aux distances à M_2 , relativement à la distance M_2M_4 (elle-même approchée par la somme des longueurs des arêtes M_2M_3 et M_3M_4) :

$$\begin{aligned} t_1 &= -\frac{M_1M_2}{M_2M_3 + M_3M_4} \\ t_2 &= \frac{M_2M_3}{M_2M_3 + M_3M_4} \\ t_3 &= 1 + \frac{M_4M_5}{M_2M_3 + M_3M_4}. \end{aligned}$$

L'expression de la courbure sur la courbe Γ est classiquement donnée par

$$\kappa_\Gamma(t) = \frac{x'y'' - x''y'}{\sqrt{x'^2 + y'^2}^3}.$$

On en déduit la courbure cherchée

$$\kappa_\Sigma(M_3) \approx \kappa_\Gamma(t_2) = \frac{x'(t_2)y''(t_2) - x''(t_2)y'(t_2)}{\sqrt{x'(t_2)^2 + y'(t_2)^2}^3}.$$

Cette technique permet également d'accéder à la dérivée seconde de la courbure $\partial_t^2 \kappa$, puis à son estimation au point M_3 en évaluant cette quantité en t_2 .

Pour obtenir l'expression des coefficients de la courbe d'interpolation, on procède de la manière suivante. L'explicitation du système (4.192) selon les deux coordonnées conduit à un système linéaire (4.193) de 10 équations, à 10 inconnues qui sont les paramètres a , b , c , d , e , f , g , h , k et l . Le second membre est constitué des coordonnées des points M_1 , M_2 , M_3 , M_4 et M_5 . On obtient les paramètres cherchés en résolvant le système linéaire, ou en inversant le système de manière à exprimer explicitement les coefficients cherchés en fonction des abscisses t_1 , t_2 et t_3 , et des coordonnées des points par lesquels passe la courbe. Cette dernière option permet de travailler vectoriellement

$$\begin{pmatrix} t_1^4 & t_1^3 & t_1^2 & t_1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_1^4 & t_1^3 & t_1^2 & t_1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ t_2^4 & t_2^3 & t_2^2 & t_2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_2^4 & t_2^3 & t_2^2 & t_2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ t_3^4 & t_3^3 & t_3^2 & t_3 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & t_3^4 & t_3^3 & t_3^2 & t_3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \\ f \\ g \\ h \\ k \\ l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ x_2 \\ y_2 \\ x_3 \\ y_3 \\ x_4 \\ y_4 \\ x_5 \\ y_5 \end{pmatrix}. \tag{4.193}$$

Lors de la construction des matrices d'éléments finis sur le bord, on est amenés à utiliser la valeur de la courbure (et de sa dérivée seconde) non seulement sur les points du bord, mais aussi sur les

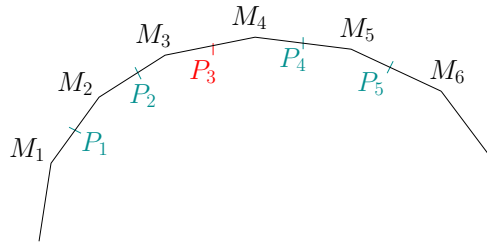


FIGURE 4.8 – Interpolation du point milieu P_3 bord par une courbe d'ordre quatre s'appuyant sur les quatre milieux voisins de P_3 .

milieux des arêtes du bord. En effet, l'intégration numérique est effectuée à l'aide d'une formule de Simpson faisant intervenir les deux extrémités de l'intervalle, et le milieu de celui-ci. On note P_3 le milieu du segment M_3M_4 en lequel on doit calculer la courbure. On considère M_1 et M_2 les deux voisins précédents de M_3 (points du maillage), ainsi que M_5 et M_6 les deux voisins suivants de M_4 . Les cinq points par lesquels passe la courbe d'interpolation sont P_3 , et ses quatre voisins en tant que milieux, c'est-à-dire P_1 milieu de M_1M_2 , P_2 milieu de M_2M_3 , P_4 milieu de M_4M_5 et P_5 milieu de M_5M_6 (voir figure 4.8). On répète le même travail que pour les points $(M_i)_{1 \leq i \leq 5}$, mais cette fois pour les points $(P_i)_{1 \leq i \leq 5}$. Ceci nous donne une estimation aux milieux des arêtes de la courbure et de la dérivée seconde de la courbure.

4.10 Résultats numériques

Les différentes conditions aux limites écrites et discrétisées sont testées ci-après. Il s'agit des conditions $ABC_{1,T}^M$ et $ABC_{2,T}^M$ pour $M \in \{2, 3, 4\}$, et des conditions $ABC_{1,P}^M$ et $ABC_{2,P}^M$ pour $M \in \{1, 2\}$. Dans le cas d'un potentiel non radial, on utilise une version approchée des conditions aux limites $ABC_{1,T}^3$, $ABC_{1,T}^4$ et $ABC_{1,P}^2$, tandis que les autres conditions s'appliquent sans modification.

Remarquons que dans ce chapitre, compte tenu des coûts de calcul, il est déraisonnable de construire des solutions numériques de référence, l'augmentation de la surface du domaine de calcul étant trop importante en dimension deux. Cependant, la proposition 1.3 s'applique encore, et on aurait pu utiliser ces résultats pour obtenir des solutions de référence analytiques pour les potentiels isotropes de la forme $V = \alpha r$ et $V = \alpha r^2$.

4.10.1 Etude préalable

Domaine et maillage

Nous considérons dans les tests qui suivent deux types de domaines Ω . Le premier est le disque centré en l'origine et de rayon $R = 5$. Le second sera le médiateur (défini au paragraphe 4.10.4). On a vu que pour des raisons théoriques, il est nécessaire de considérer un domaine convexe, et de frontière régulière. Les deux domaines utilisés vérifient tous les deux ces conditions. Dans le cas du disque, le fait de considérer un domaine à symétrie radiale simplifie l'implémentation des conditions aux limites issues du changement de jauge, $ABC_{1,T}^M$ et $ABC_{1,P}^M$, mais seulement dans le cas d'un potentiel qui est lui-même radial. Les conditions issues de la méthode directe s'appliquent de la même manière, que le problème soit à symétrie radiale ou non.

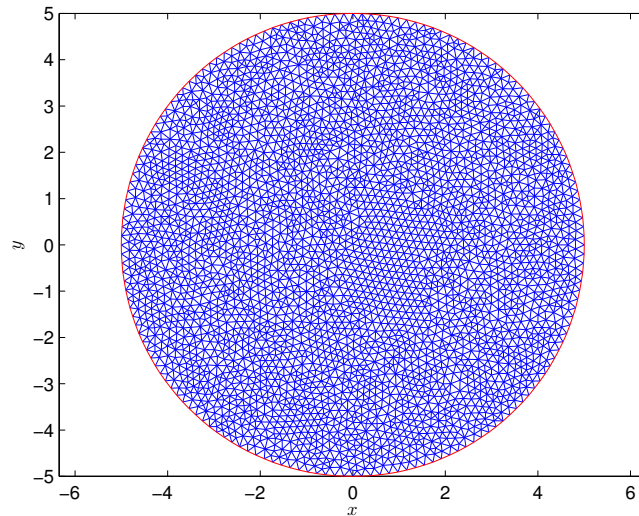


FIGURE 4.9 – Exemple de maillage obtenu avec Matlab. Il comporte $n_T = 6\,796$ triangles, $n_p = 3\,479$ points et $n_E = 160$ arêtes.

Le domaine de calcul est maillé comme sur la figure 4.9 en utilisant n_P points dont n_E points de bord, et n_T triangles. Ce maillage est réalisé à l'aide de la `pde toolbox` de Matlab. Pour le disque de rayon 5, le tableau 4.4 donne les valeurs de n_P , n_E et n_T ainsi que les surfaces minimales et maximales des triangles générés pour les trois maillages considérés dans cette étude. Dans la suite, chaque maillage sera repéré par son nombre de triangles n_T . Le temps final de calcul est $T = 1$.

On prend comme donnée initiale du problème la gaussienne

$$u_0(x, y) = e^{-x^2 - y^2 - ik_0 x}, \quad \text{pour } (x, y) \in \Omega, \quad (4.194)$$

dans laquelle on a choisi $k_0 = 10$ (figure 4.10). La donnée initiale ainsi définie a sa direction de propagation le long de l'axe des x , et plus précisément dans le sens des x négatifs. Ceci justifie qu'on privilégie particulièrement le plan $y = 0$ pour nos observations.

n_T	n_P	n_E	$\min T $	$\max T $
1 700 000	847 000	2 560	1×10^{-5}	1×10^{-4}
423 000	212 000	1 280	5×10^{-5}	4×10^{-4}
105 000	53 000	640	2×10^{-4}	1×10^{-3}
26 000	13 000	320	9×10^{-4}	6×10^{-3}

TABLE 4.4 – Paramètres des maillages du disque de rayon 5.

Nous considérerons quatre exemples de potentiels. Dans un premier temps, les CLA sont testées et comparées sur le potentiel $V(r) = 5r$. Nous nous intéresserons ensuite aux résultats liés à un autre potentiel radial, mais de plus grande amplitude puisqu'il s'agit du potentiel quadratique $V(r) = 5r^2$. Nous continuerons avec l'étude d'un potentiel non radial $V(x, y) = x^2 + 5y^2$. Enfin, nous terminerons par un potentiel dépendant également du temps, $V(r, t) = 5r^2 (1 + \cos(4\pi t))$.

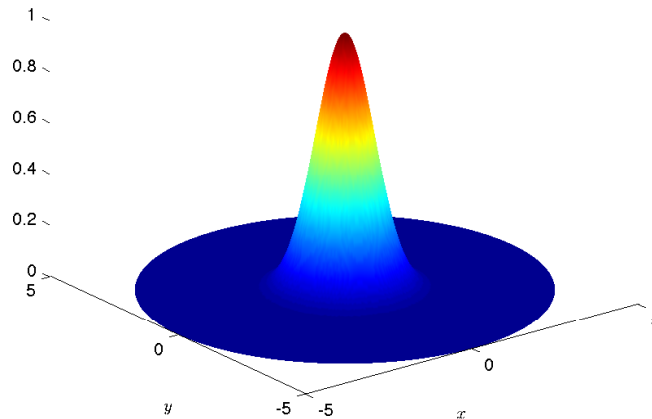


FIGURE 4.10 – Donnée initiale gaussienne sur le disque de rayon 5.

Maillage		Taylor		Padé $m = 25$	
		CMK	UMFPACK	CMK	UMFPACK
$n_T = 423\,000$	$n_P = 212\,000$	13	13	20	25
$n_T = 1\,700\,000$	$n_P = 847\,000$	87	90	210	151

TABLE 4.5 – Temps cpu de résolution (en secondes) du système linéaire pour les deux approches, et pour deux méthodes de résolution.

Résolution du système linéaire

La résolution du problème avec condition aux limites conduit à la résolution d'un système linéaire creux, mais non structuré. De plus, dans de nombreux cas-tests, la matrice du système linéaire ne dépend pas du temps. Pour le résoudre, une première piste a été envisagée : on réordonne la matrice du système linéaire selon le principe de Cuthill-McKee. Ce réordonnement permet de se ramener à une matrice bande (voir figure 4.11), dont la largeur de bande est seulement de l'ordre de 1000 pour une matrice carrée de taille 212 000 initialement (pour le maillage comportant $n_T = 423\,000$ triangles). Cette méthode permet de suppléer les méthodes itératives (gradient conjugué, GMRES, ...) qui ne convergent plus dès que la taille du système est trop grande. Par ailleurs, construire un préconditionneur robuste pour de tels problèmes est difficile et fait l'objet de recherches.

Cependant, après comparaison des temps de calcul (voir tableau 4.5), ce n'est finalement pas le réordonnement de Cuthill-McKee que nous retenons pour résoudre les systèmes linéaires. En effet, pour de gros maillages ($n_T = 1\,700\,000$), la résolution en utilisant directement la commande anti-slash de Matlab, basée sur UMFPACK et qui consiste également à réordonner le système de manière judicieuse avant de le résoudre, s'est avérée globalement plus rapide que la résolution du système préalablement réordonné par Cuthill-McKee. En fait, les deux méthodes sont tout à fait compétitives l'une par rapport à l'autre pour la résolution des systèmes issus des conditions aux limites de l'approche Taylor. C'est en revanche pour les conditions de l'approche Padé que les résultats deviennent très différents selon qu'on utilise Cuthill-McKee ou UMFPACK.

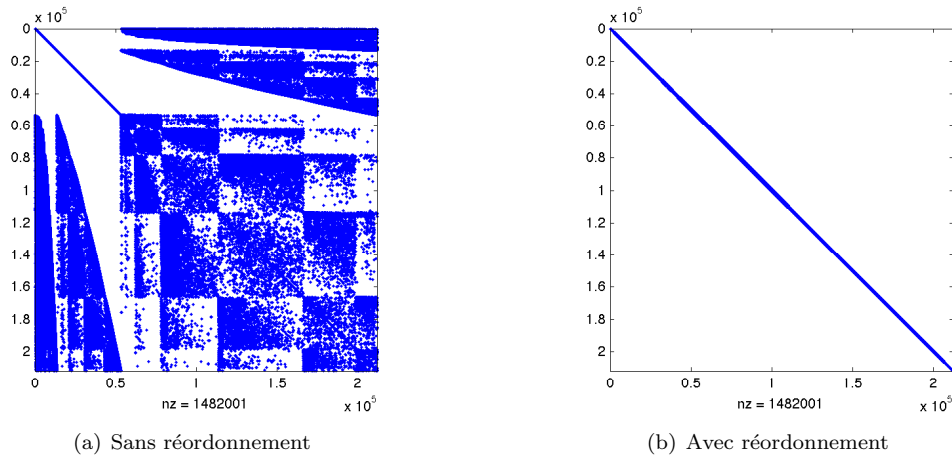


FIGURE 4.11 – Effet du réordonnement de Cuthill-McKee sur le système linéaire associé à la condition $ABC_{2,T}^4$, pour $n_T = 423\,000$.

Surtout, quelle que soit la méthode considérée, le temps de résolution du système avec approximations de Padé est significativement supérieur au temps de résolution du système obtenu avec l'approche Taylor. Le surcoût de calcul est de l'ordre de 66 % à 100 %, en temps cpu. L'approche Padé pâtit certainement du mauvais conditionnement du système augmenté, que nous avons pu constater au paragraphe 4.9.3. Enfin, il est à noter que le système en langage interprété Matlab engendre probablement des coûts de calculs relativement importants par rapports à un code en dur.

Différents types de présentation des résultats

On représente la solution numérique en trois dimensions dans l'espace (x, y, t) pour $x^2 + y^2 \leq 5^2$ et $t \in [0, 1]$. Comme dans le cas unidimensionnel, la précision des CLA se mesure à l'amplitude de la réflexion parasite observée lorsque la solution atteint le bord du disque de calcul. L'objectif est toujours de minimiser cette réflexion. Et comme dans les chapitres 1 et 2, on s'intéresse aux courbes de niveau de la réflexion. Cette fois encore, une représentation en échelle normale ne permet pas de comparer les conditions aux limites car la réflexion observée est souvent trop faible et n'est pas visible à l'œil nu. On considère donc une représentation en échelle logarithmique.

Une manière de représenter la solution dans l'espace est par exemple la figure 4.12. Pour cet exemple, comme pour les figures suivantes dans ce paragraphe, on considère le potentiel $V(r) = 5r^2$ et la condition aux limites $ABC_{1,T}^4$. Le disque Ω est discrétisé en utilisant $n_T = 1\,700\,000$ triangles et le pas de temps vaut $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$. La figure 4.12 consiste en une représentation tri-dimensionnelle de trois surfaces de niveau, associées aux niveaux 10^{-1} , 10^{-2} et 10^{-3} , permettant de visualiser la structure de la solution jusque dans les petites échelles. A cette représentation des isosurfaces, on superpose une représentation bi-dimensionnelle dans le plan $\{y = 0\}$ des lignes de niveau logarithmiques dans ce plan.

Sachant qu'à chaque instant, la solution est centrée sur l'axe des x et globalement symétrique par rapport au plan $\{y = 0\}$, on représente l'évolution des différentes courbes de niveaux de la solution en considérant la section suivant le plan $\{y = 0\}$. Le disque Ω est désormais discrétisé de façon plus grossière par $n_T = 423\,000$ triangles et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$. Cette représentation peut se faire sous la

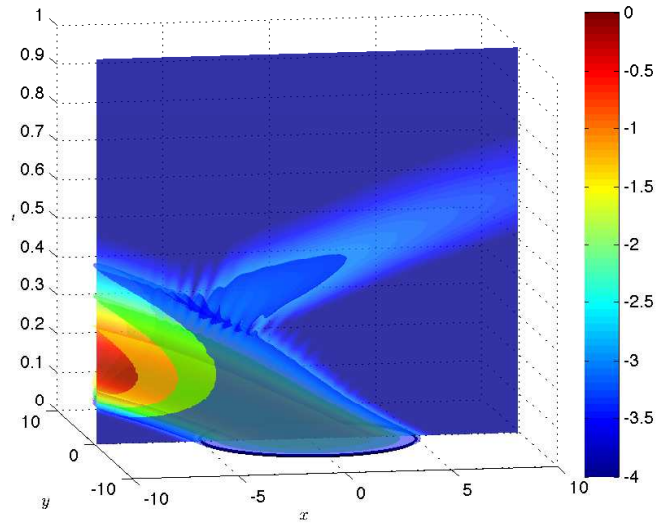


FIGURE 4.12 – Représentation 3D des enveloppes de niveau associées aux niveaux 10^{-1} , 10^{-2} et 10^{-3} , et des courbes de niveau de la section 2D selon le plan $y = 0$.

forme de la figure 4.13(a) ou de la figure 4.13(b). Dans les deux cas, les courbes de niveau vont de 10^0 à 10^{-4} . Cependant, bien que la première figure soit plus esthétique, elle ne donne qu'un aperçu global des niveaux de réflexion et elle ne permet pas de comparer précisément deux solutions pour lesquelles les ensembles de niveau seraient proches. La deuxième en revanche délimite les ensembles de niveau intermédiaires, quatre par unité logarithmique, ce qui permet de comparer plus facilement deux figures. Sur les figures du type de la figure 4.13(b), l'écart entre deux courbes de niveau correspond à un facteur $10^{0.25} \approx 1.8$. Afin d'étudier avec précision les différences entre les différentes méthodes, nous privilégierons le deuxième type de représentation.

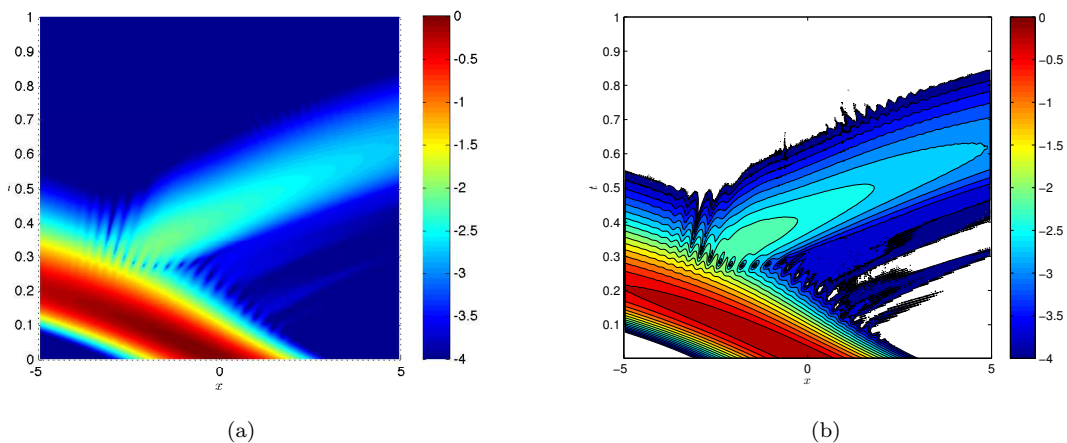


FIGURE 4.13 – Deux exemples de représentation logarithmique, suivant la section dans le plan $y = 0$, de la figure 4.12.

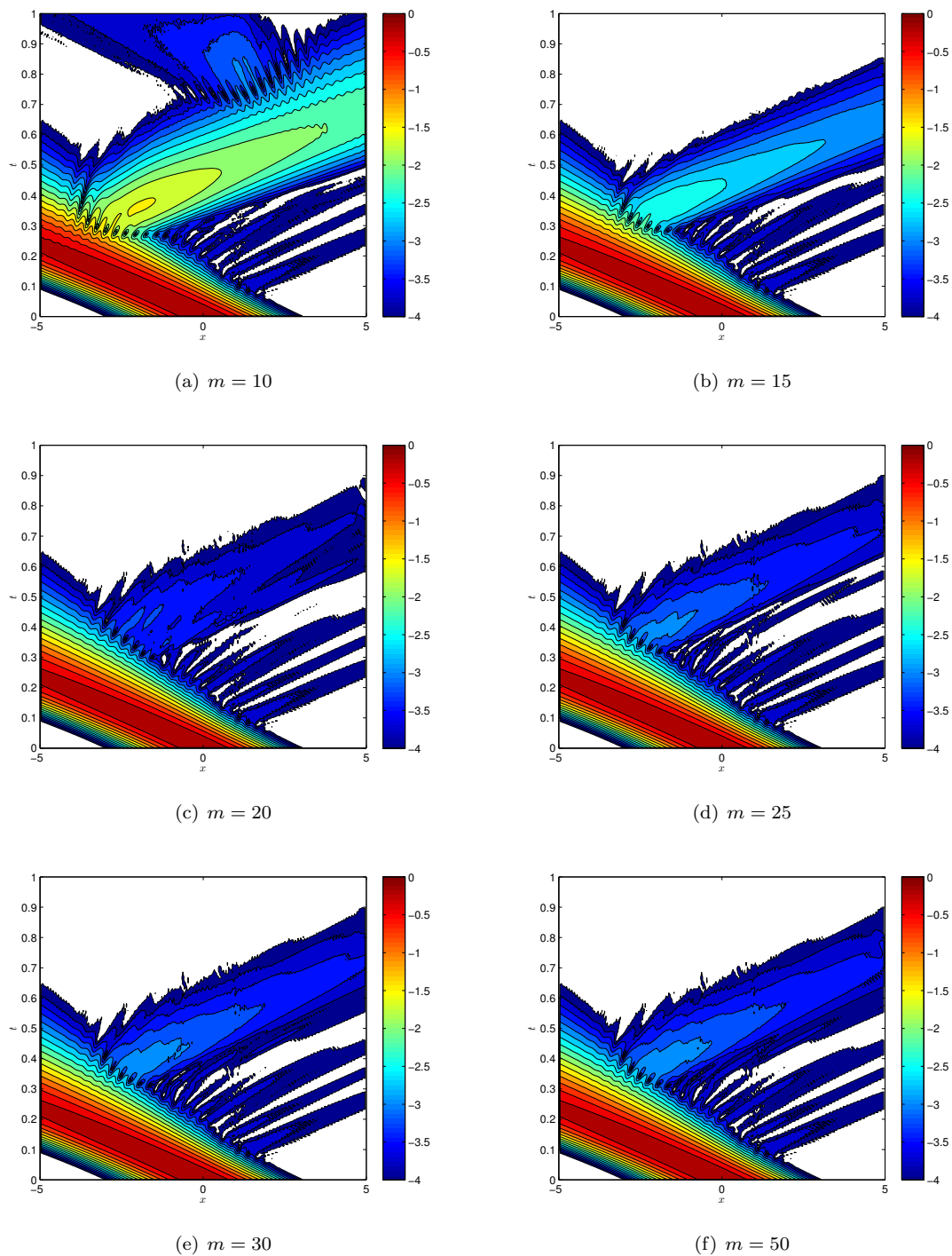
Sur les figures du type de 4.13(b), on peut observer certaines irrégularités sous formes de traces

au centre de la figure (proches de $x = 0$). En fait, il ne s'agit pas de réflexion liée aux conditions aux limites, mais d'artéfacts liés à la représentation graphique de la solution. A l'issue du calcul, on obtient la solution numérique à tout temps sur le maillage éléments finis. Afin de représenter la tranche correspondant à $y = 0$ dans le plan (x, t) , on souhaite obtenir la solution sur un maillage cartésien de Ω . Pour cela, on interpole u sur une grille cartésienne du domaine, et c'est ensuite cette interpolation qui est représentée. Des défauts peuvent en découler, notamment si la grille d'interpolation n'est pas suffisamment fine.

Choix du nombre m de fonctions de Padé

L'approche des CLA par approximants de Padé requiert de connaître une estimation aussi optimale que possible du nombre m de fonctions de Padé à utiliser. Contrairement au cas 1D, ce choix est important ici, puisque l'ajout de nouvelles fonctions auxiliaires se traduit par un agrandissement de la taille du système linéaire à résoudre, et une détérioration du conditionnement. Même si les matrices ajoutées ne sont que des matrices d'éléments finis sur le bord, de taille bien plus petite que les matrices en volume sur Ω , il est important de ne pas augmenter inutilement la taille du système à résoudre, ceux-ci étant déjà gros, et d'autant plus que le conditionnement du système linéaire à résoudre augmente avec m (voir tableau 4.3). D'un autre côté, il n'est évidemment pas question de prendre m trop petit au risque de ne pas atteindre la précision maximale de la CLA. Quelques tests sont donc réalisés sur le potentiel $V(r) = 5r$ pour déterminer une fourchette optimale pour m . Il est bien entendu que la valeur de m optimale peut varier en fonction du potentiel considéré, du domaine, ou même de la discrétisation, ce qui rend son choix délicat, et la recherche d'un m uniformément optimal, vaine.

La figure 4.14 présente des simulations avec la condition $ABC_{2,P}^2$ pour des valeurs de m allant de $m = 10$ à $m = 50$. La discrétisation est donnée par $n_T = 423\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$. On s'aperçoit qu'il ne faut pas prendre m plus petit que 15. A partir de $m = 20$, la précision obtenue stagne et le niveau de réflexion parasite ne diminue plus. Il est donc inutile d'aller jusqu'à 50 fonctions de Padé, d'autant plus que ceci affecte le conditionnement du système linéaire. Pour s'assurer une certaine marge, on prendra $m = 25$ par la suite. Toutes les conditions de type $ABC_{1,P}^M$ et $ABC_{2,P}^M$ utiliseront donc 25 fonctions de Padé.

FIGURE 4.14 – Choix du nombre m de fonctions de Padé pour les conditions $ABC_{2,P}^M$.

Comparaison des CLA sans potentiel en l'absence de potentiel

Afin de se faire une première idée de la hiérarchisation des différentes CLA, et de l'influence des différents ordres, on commence par étudier et comparer les CLA sans potentiel, d'abord pour un potentiel effectivement nul, puis pour un potentiel non nul. On a vu au paragraphe 4.6 qu'il n'y avait que deux familles de CLA sans potentiel : les conditions $ABC_{0,T}^M$ approchées par développement de Taylor, données par (4.99)–(4.101), et les conditions $ABC_{0,P}^M$ approchées par approximants de Padé, et données par (4.102)–(4.103).

Nous commençons par comparer l'efficacité des CLA sans potentiel en l'absence de potentiel. La figure 4.15 présente les résultats obtenus avec les différentes CLA pour $n_T = 423\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$. On observe nettement l'amélioration des résultats pour les ordres croissants des CLA. Si les conditions $ABC_{0,T}^2$ et $ABC_{0,P}^1$ donnent déjà de bons résultats, il est clair que les conditions d'ordres trois et quatre, pour l'approche Taylor, et d'ordre deux pour l'approche Padé, améliorent la précision du calcul. On s'attend donc à ce que la montée en ordre améliore les résultats également dans le cas d'un potentiel.

En ce qui concerne la précision optimale obtenue pour chacune des deux méthodes, elle est la même pour la condition $ABC_{0,T}^4$ et pour la condition $ABC_{0,P}^2$. La conclusion qu'il faut en tirer est que, dans la mesure où la généralisation des CLA au cas d'un potentiel tient correctement compte de ce potentiel, on peut s'attendre à observer des résultats similaires pour les deux approches.

En revanche, ceci ne préjuge en rien des résultats obtenus au sein d'une même approche (Padé ou Taylor) pour les deux stratégies différentes (changement de jauge ou méthode directe). En effet, les deux stratégies ne prennent pas en compte le potentiel de la même manière, ce qui est susceptible d'introduire des disparités par rapport aux résultats obtenus en l'absence de potentiel. C'est ce que nous nous attacherons à mettre en évidence. Par exemple, les conditions $ABC_{1,T}^M$ font intervenir le potentiel dès l'ordre deux, *via* le déphasage, tandis qu'il n'intervient qu'à partir de l'ordre trois pour les conditions $ABC_{2,T}^M$.

Application des conditions sans potentiel à un potentiel non nul

Avant d'étudier l'effet, pour différents types de potentiels, des conditions aux limites construites dans ce chapitre, on vérifie qu'il est nécessaire que les conditions aux limites tiennent compte du potentiel. Pour cela, on choisit comme potentiel $V(r) = 5r$, et on résout le problème associé à ce potentiel en utilisant les conditions aux limites sans potentiel $ABC_{0,T}^M$ et $ABC_{0,P}^M$ données par (4.99)–(4.103).

La figure 4.16 présente les résultats obtenus pour les conditions $ABC_{0,T}^4$ et $ABC_{0,P}^2$, le domaine Ω étant maillé à l'aide de $n_T = 423\,000$ triangles, pour un pas de temps $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$ et $m = 25$ fonctions de Padé. On voit clairement que les conditions sans potentiel ne permettent pas d'approcher correctement la solution, l'amplitude de la réflexion ne descendant pas en-dessous de 10^{-1} .

On voit donc l'importance, en plus d'utiliser des conditions d'ordre élevé comme l'a montré le paragraphe précédent, d'incorporer le potentiel dans la condition aux limites.

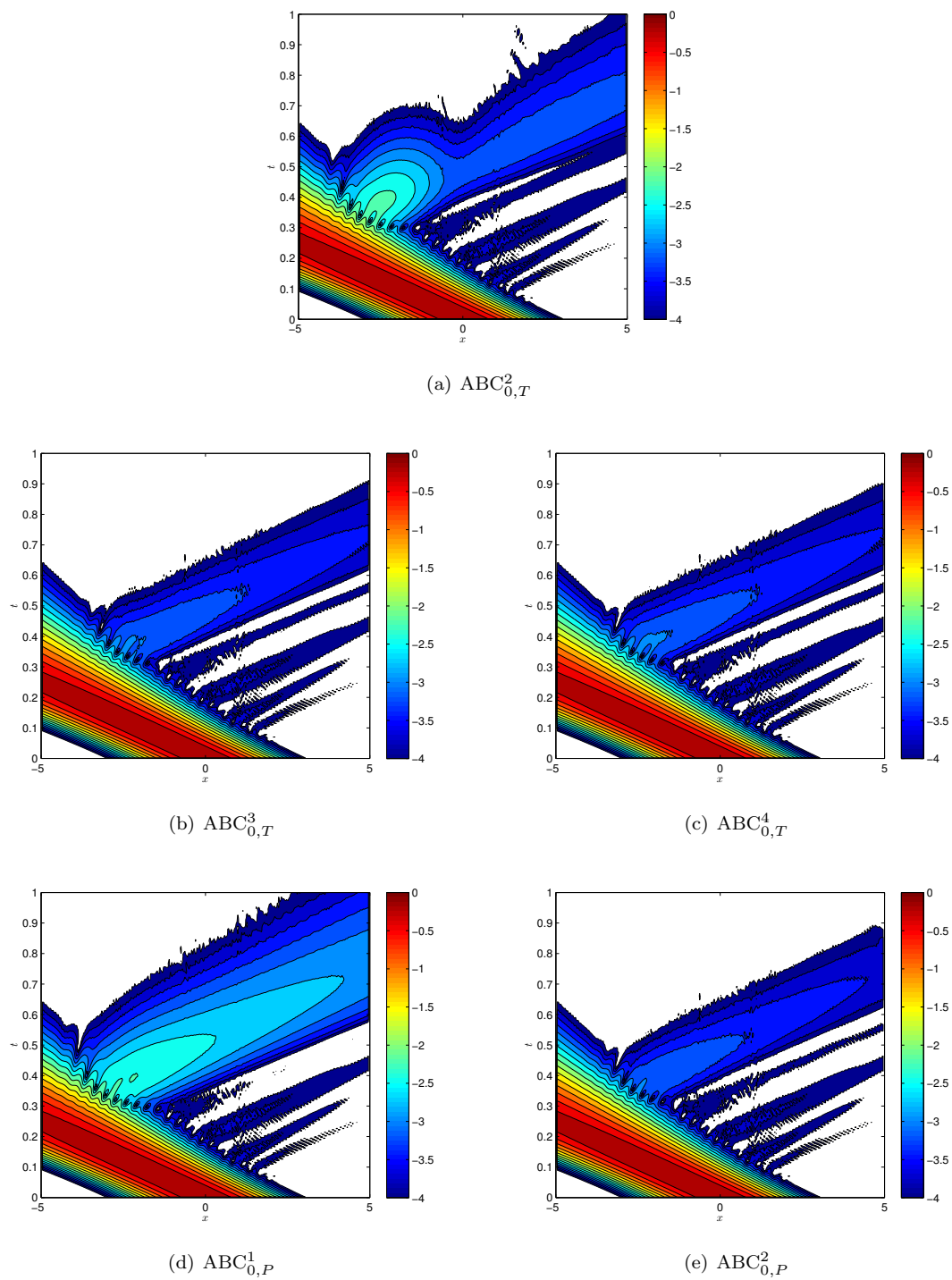


FIGURE 4.15 – Comparaison des CLA $ABC_{0,T}^M$ et $ABC_{0,P}^M$ pour le potentiel nul, pour $n_T = 423\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

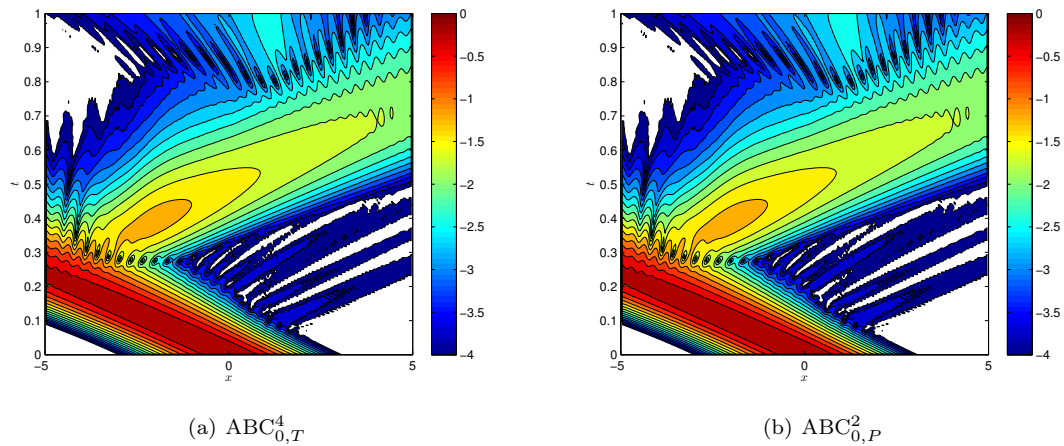


FIGURE 4.16 – Utilisation des CLA sans potentiel $ABC_{0,T}^4$ et $ABC_{0,P}^2$ pour le potentiel non nul $V(r) = 5r$.

4.10.2 Etude de potentiel radiaux

Le potentiel $V(r) = 5r$

Nous allons à présent nous intéresser à comparer entre elles les CLA provenant des quatre familles différentes. Pour cette comparaison, nous considérons pour commencer le potentiel $V(r) = 5r$. La figure 4.17(a) donne le profil de ce potentiel sur Ω , tandis que la figure 4.17(b) représente l'allure de la solution numérique associée.

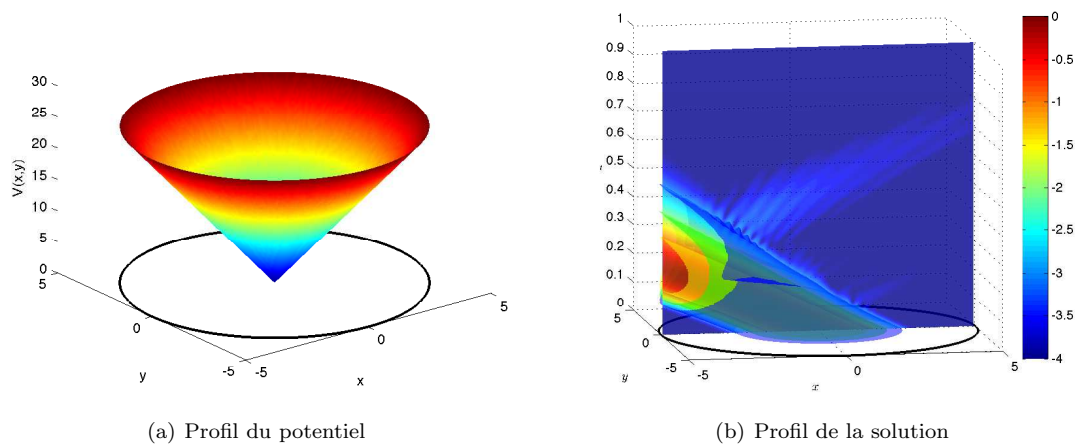


FIGURE 4.17 – Profil du potentiel $V(r) = 5r$ et de la solution (numérique) associée, sur le disque de rayon 5.

On commence par observer la précision que l'on peut obtenir pour chacune des conditions aux limites, en raffinant suffisamment. Pour cela, on prend un maillage à $n_T = 1\,700\,000$ triangles, et un pas de temps $\Delta t = 10^{-3}$. Les solutions obtenues en utilisant les CLA $ABC_{1,T}^M$ et $ABC_{2,T}^M$ basées sur l'approche Taylor sont représentées figure 4.18, et celles obtenues en utilisant les CLA $ABC_{1,P}^M$ et $ABC_{2,P}^M$ se trouvent figure 4.19.

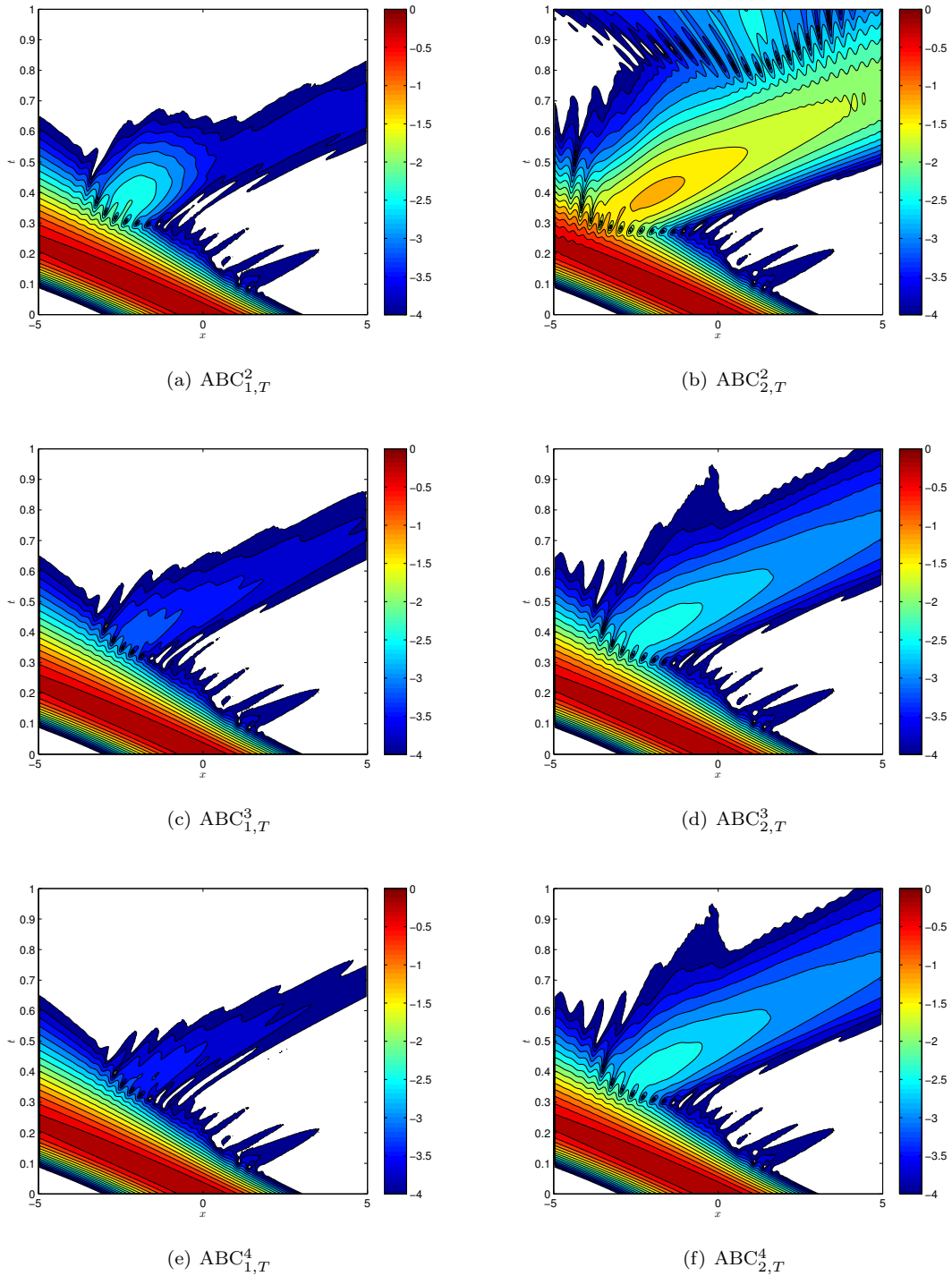


FIGURE 4.18 – Les CLA de type $ABC_{1,T}^M$ et $ABC_{2,T}^M$ (approche Taylor) pour le potentiel $V(r) = 5r$ et la discrétisation la plus fine ($n_T = 1\,700\,000$, $\Delta t = 10^{-3}$).

Intéressons-nous d'abord à l'influence de l'ordre des conditions aux limites. Comme dans les simulations à potentiel nul, on observe l'amélioration des résultats lorsque l'ordre augmente, et plus particulièrement, pour les conditions de type Taylor, lors du passage de l'ordre deux à l'ordre trois. Le cas le plus flagrant concerne la différence entre $ABC_{2,T}^2$ et $ABC_{2,T}^3$: la première ne convient pas du tout, conduisant à une réflexion d'amplitude 10^{-1} , alors que la deuxième est correcte, l'amplitude de la réflexion ne dépassant pas $10^{-2.5}$. En fait, ceci s'explique par l'absence totale de termes de potentiel dans la condition d'ordre deux $ABC_{2,T}^2$: si on se réfère à la proposition 4.37, ceux-ci n'apparaissent en effet qu'à partir de l'ordre trois. Ce phénomène ne se produit pas pour les conditions $ABC_{1,T}^M$, du fait du changement de jauge, puisqu'à tous les ordres, le potentiel intervient au minimum *via* les exponentielles $e^{i\mathcal{V}}$ et $e^{-i\mathcal{V}}$. Les résultats le confirment, puisque la condition d'ordre deux $ABC_{1,T}^2$ est déjà plutôt satisfaisante : elle égale les conditions $ABC_{2,T}^3$ et $ABC_{2,T}^4$. Malgré cela, les conditions d'ordres supérieurs $ABC_{1,T}^3$ et $ABC_{1,T}^4$ améliorent successivement ce résultat pour gagner au final un facteur 15 : entre l'ordre deux et l'ordre quatre, l'amplitude maximale observée pour la réflexion passe de $10^{-2.5}$ à moins de $10^{-3.5}$. L'amélioration due à l'ordre est également visible, et de manière aussi spectaculaire, pour les conditions aux limites basées sur l'approche Padé. Même si le résultat donné par l'ordre un n'est pas mauvais, la condition d'ordre deux diminue la réflexion d'un facteur 10 environ.

A présent, comparons entre elles les familles de CLA. La première remarque à faire est que, globalement, les conditions $ABC_{2,T}^M$, pour $M \geq 3$, sont moins précises que les conditions $ABC_{1,T}^M$ issues du changement de jauge. Cela peut s'expliquer de la façon suivante. Il faut remarquer que la troncature de Taylor a moins d'effets négatifs dans le cas du changement de jauge, car elle est compensée par le déphasage par la fonction de phase \mathcal{V} , qui fait intervenir le potentiel dès les premiers ordres des CLA. De même, le fait de ne pas avoir inclu le potentiel dans le symbole principal est moins pénalisant dans le cas de l'approche Padé, car les symboles exacts sont préservés. Tout cela joue en la défaveur des conditions de type $ABC_{2,T}^M$. Elles tiennent pourtant compte du potentiel mais, manifestement, la troncature réalisée en effectuant le développement de Taylor, arbitraire, a perdu trop d'information de premier rang sur le potentiel. Dans la suite, les conditions $ABC_{1,T}^M$ constitueront la référence en termes de CLA approchées par un développement de Taylor, et parmi elles, plus particulièrement la condition d'ordre quatre.

Les conditions $ABC_{2,P}^M$ quant à elles n'ont subi pratiquement aucune approximation. On avait vu en 1D que prendre le symbole exact était efficace. C'est encore le cas ici, et même si on ne garde que deux termes, on voit que ces deux termes contiennent suffisamment d'information pour rivaliser (et même mieux) avec les conditions sans potentiel dans le symbole principal, ou tronquées par Taylor. Par ailleurs, pour cette discrétisation, les CLA de l'approche Padé ne présentent pas de différence notable, ni entre elles (conditions $ABC_{1,P}^2$ et $ABC_{2,P}^2$), ni par rapport à la condition $ABC_{1,T}^4$. Nous avons donc, parmi les conditions d'ordre le plus élevé, trois conditions aux limites susceptibles de rivaliser. Dans les trois cas, l'amplitude de la réflexion parasite ne dépasse pas 10^{-3} , ce qui est tout à fait satisfaisant.

Pour terminer, on souhaite étudier l'influence de la discrétisation pour chacune des trois CLA les plus performantes : la figure 4.20 donne l'évolution des résultats pour $ABC_{1,T}^4$, la figure 4.21 pour $ABC_{1,P}^2$ et la figure 4.22 pour $ABC_{2,P}^2$. Le pas de temps varie de $\Delta t = 5 \times 10^{-3}$ à $\Delta t = 10^{-3}$, et le nombre de triangles du maillage de $n_T = 105\,000$ à $n_T = 1\,700\,000$. Si on choisit un Δt plus grand, par exemple $\Delta t = 10^{-2}$, on s'aperçoit que le profil même de la solution n'est pas correct, les rayons

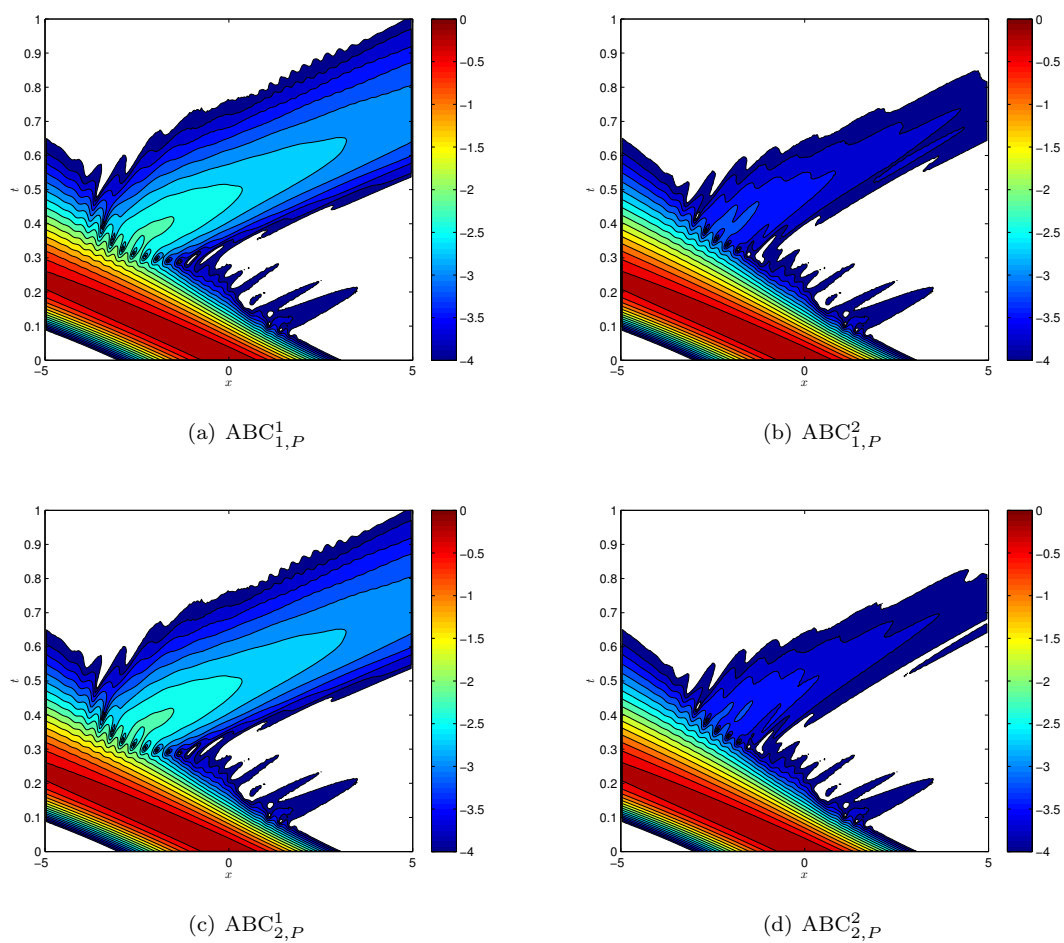


FIGURE 4.19 – Les CLA de type $ABC_{1,P}^M$ et $ABC_{2,P}^M$ (approche Padé) pour le potentiel $V(r) = 5r$ et la discrétisation la plus fine ($n_T = 1\,700\,000$, $\Delta t = 10^{-3}$).

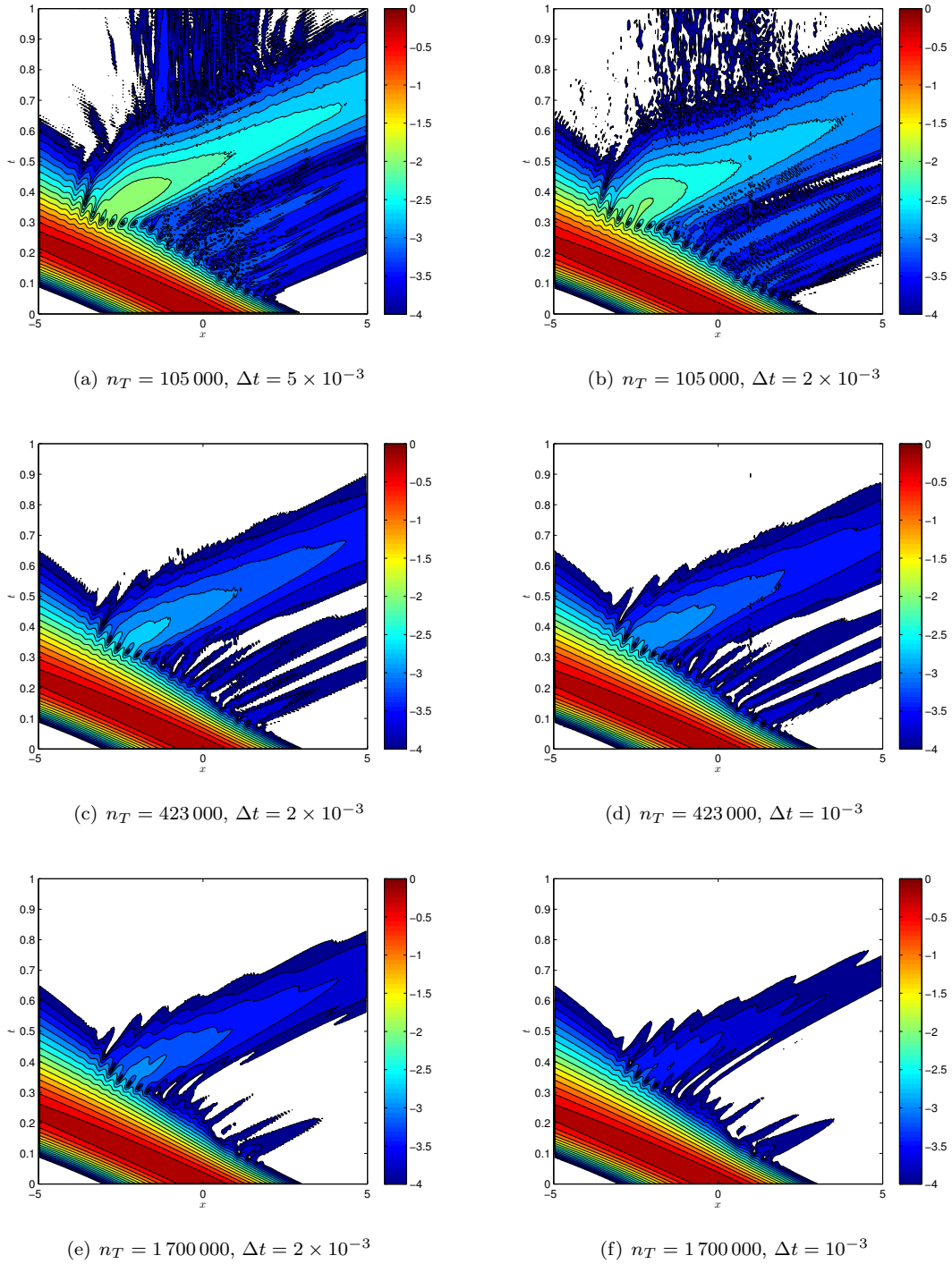


FIGURE 4.20 – Evolution pour $ABC_{1,T}^4$ selon la discrétisation, pour le potentiel $V(r) = 5r$.

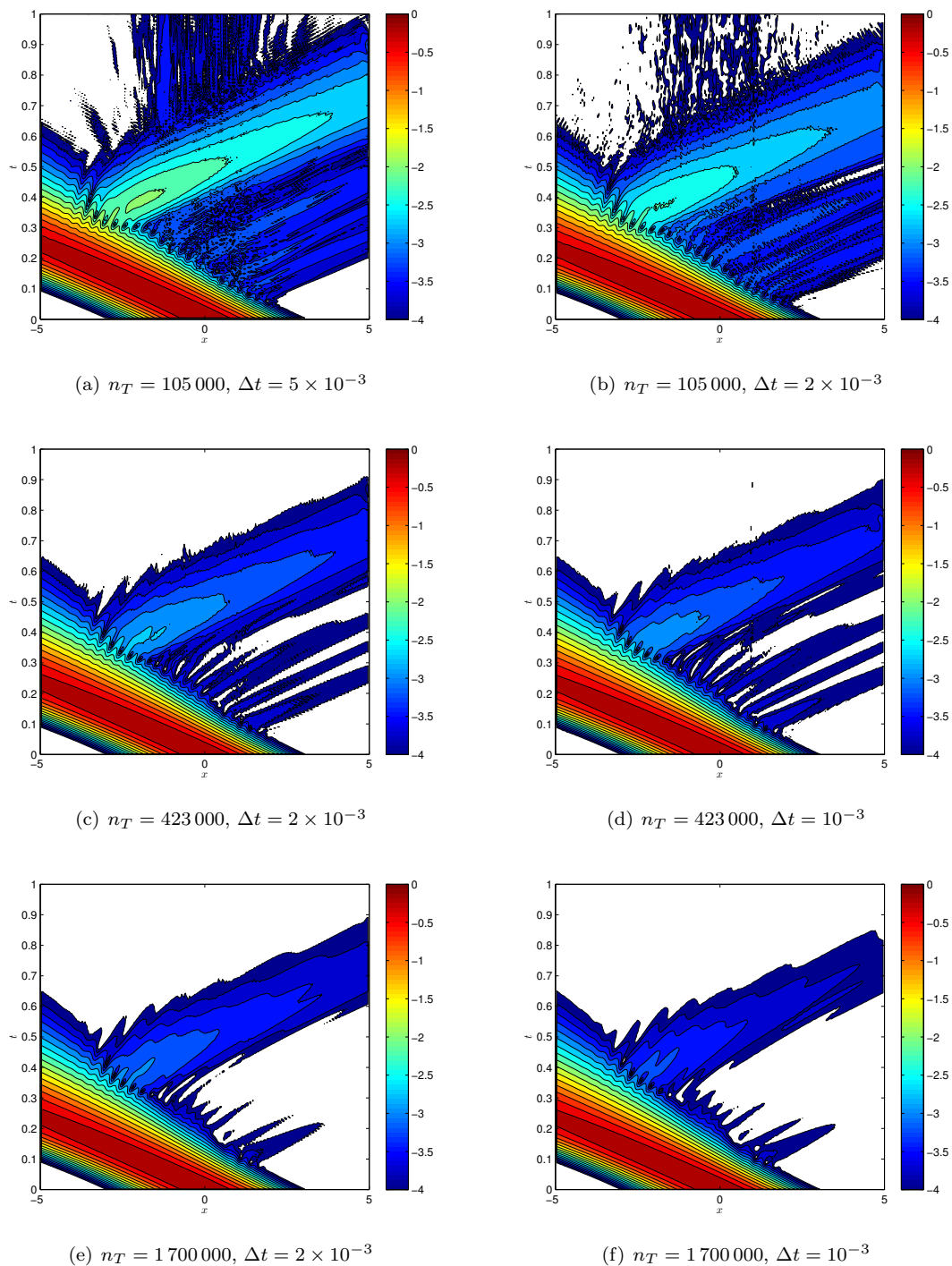
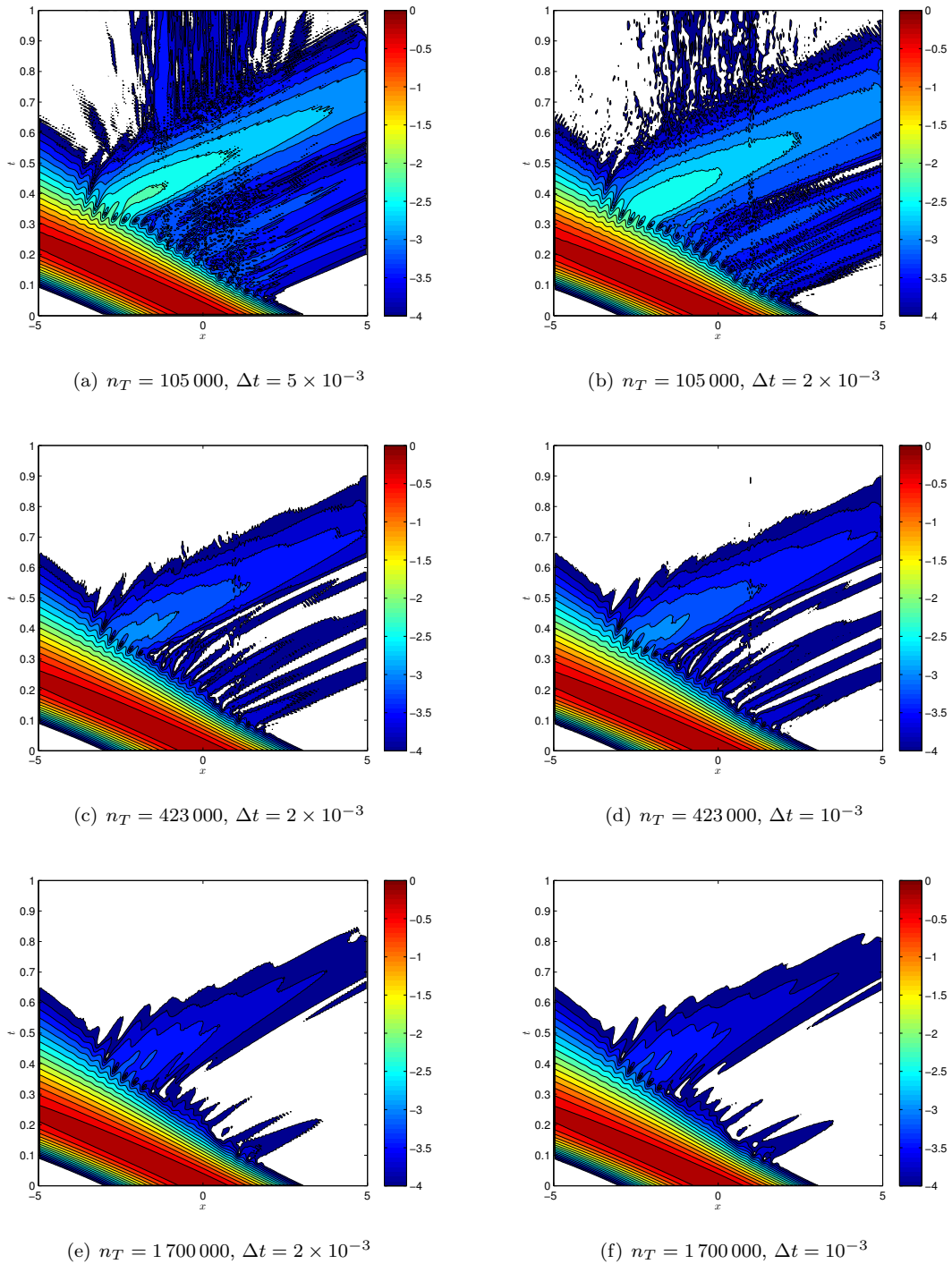


FIGURE 4.21 – Evolution pour $ABC_{1,P}^2$ selon la discrétisation, pour le potentiel $V(r) = 5r$.

FIGURE 4.22 – Evolution pour $ABC_{2,P}^2$ selon la discrétisation, pour le potentiel $V(r) = 5r$.

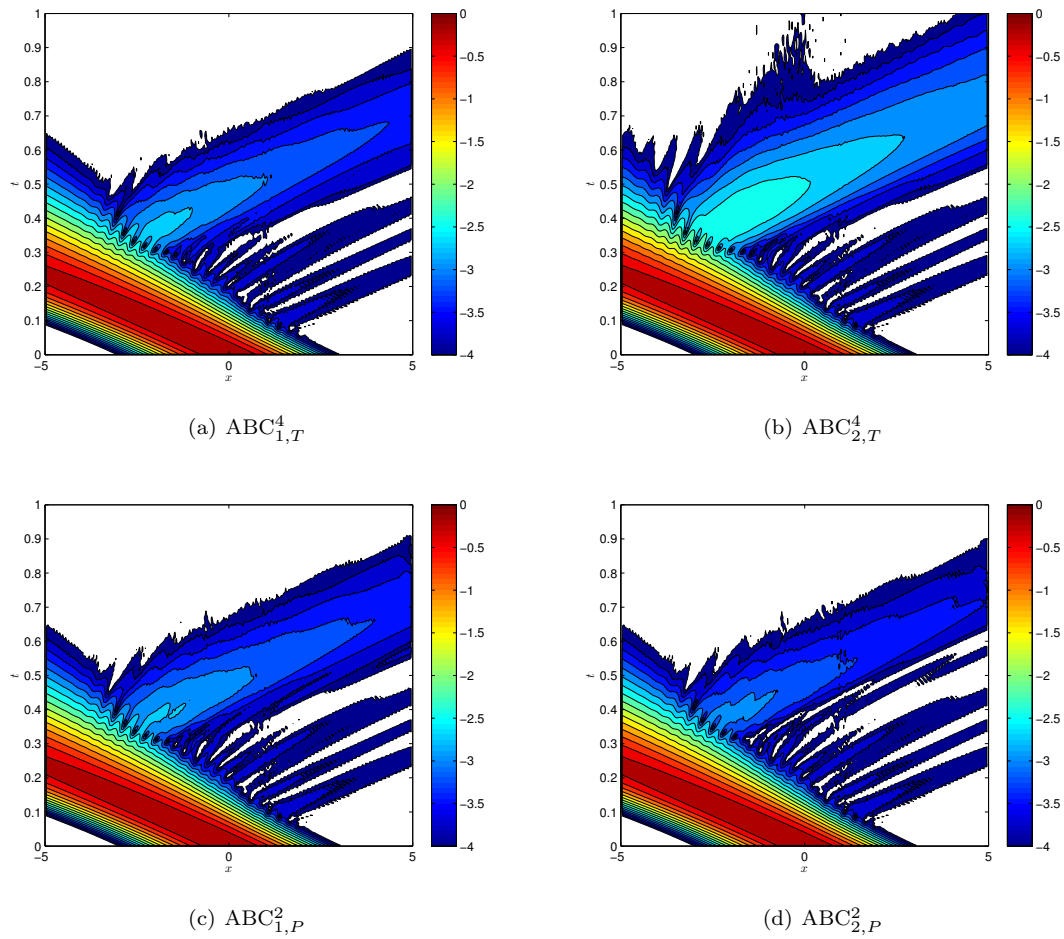


FIGURE 4.23 – Les CLA d’ordre maximal pour le potentiel $V(r) = 5r$, $n_T = 423\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

n’étant pas suffisamment courbés. Il sera donc indispensable de prendre Δt au moins inférieur ou égal à 5×10^{-3} dans tous les tests. Il est également intéressant d’observer l’effet de dispersion numérique pour les conditions issues du changement de jauge $ABC_{1,T}^4$ et $ABC_{1,P}^2$. Ces deux CLA peuvent conduire à une précision aussi bonne que la condition $ABC_{2,P}^2$, mais il est pour cela nécessaire de raffiner suffisamment (en l’occurrence, $n_T = 1\,700\,000$ et $\Delta t = 10^{-3}$). Cette dispersion numérique sera particulièrement mise en évidence dans le cas du potentiel quadratique $V(r) = 5r^2$ (voir figure 4.28). A l’inverse, avec la condition $ABC_{2,P}^2$, la précision maximale obtenue dans les exemples présentés est déjà obtenue pour une discrétisation plus grossière, avec $n_T = 423\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

Enfin, on présente aussi figure 4.23 les simulations obtenues pour les conditions d’ordre le plus élevé, avec une discrétisation plus grossière : $n_T = 423\,000$ triangles et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$. On constate que les résultats sont déjà bons pour les conditions $ABC_{1,T}^4$, $ABC_{1,P}^2$ et $ABC_{2,P}^2$, même si cette dernière semble légèrement plus précise que les deux autres.

Le potentiel $V(r) = 5r^2$

Nous passons maintenant à l'étude d'un autre potentiel, encore à symétrie radiale, mais d'amplitude nettement plus grande, $V(r) = 5r^2$. Ce nouveau potentiel est représenté figure 4.24, ainsi que l'allure de la solution numérique.

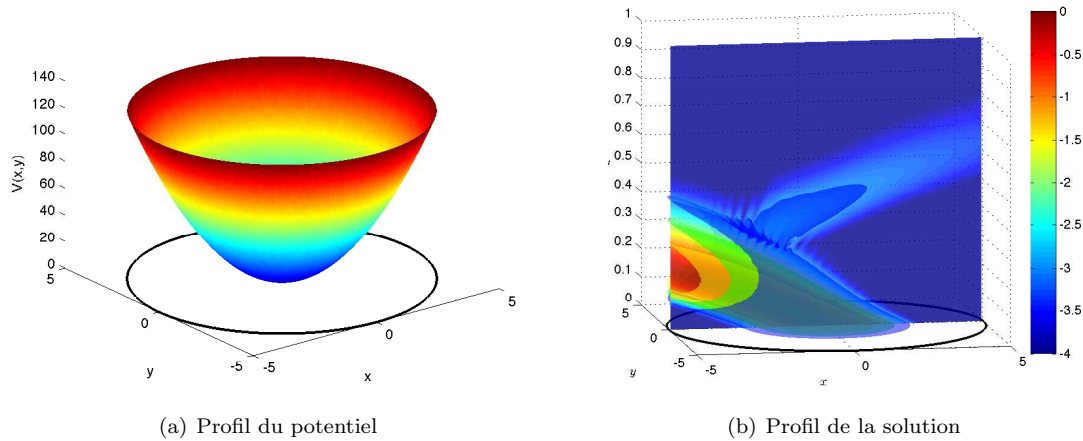


FIGURE 4.24 – Profil du potentiel $V(x, y) = 5r^2$ et de la solution (numérique) associée, sur le disque de rayon 5.

On représente figures 4.25 et 4.26 les solutions numériques obtenues avec chacune des conditions aux limites artificielles, pour $\Delta t = 10^{-3}$ et une discrétisation comportant $n_T = 1\,700\,000$ triangles. Ces résultats confirment que les conditions $ABC_{2,T}^M$ ne sont pas adaptées à un potentiel fort. En particulier, la condition d'ordre deux ne « voyant » pas le potentiel est catastrophique, et peut être oubliée. Les conditions $ABC_{1,T}^M$ sont plutôt satisfaisantes. Le niveau de réflexion est un peu plus élevé que dans le cas du potentiel $V(r) = 5r$, mais cela était prévisible compte tenu des amplitudes respectives du potentiel. L'effet de la montée en ordre reste visible, même s'il est moins flagrant ici que dans l'exemple précédent. Entre l'ordre deux et l'ordre quatre, le niveau maximal de la réflexion passe ainsi de 10^{-2} à 10^{-3} . L'effet de cette montée en ordre est également visible, dans les mêmes proportions, pour les conditions $ABC_{1,P}^M$ et $ABC_{2,P}^M$ approchées par approximants de Padé. On ne voit d'ailleurs pas de différence dans ce cas entre les stratégies une et deux. Enfin, pour cette discrétisation, on remarque aussi que les conditions $ABC_{1,T}^4$, $ABC_{1,P}^2$ et $ABC_{2,P}^2$ sont équivalentes. C'est très intéressant, car cela permettra, pour d'autres types de potentiel, de choisir la famille de CLA à utiliser en fonctions d'autres critères, comme l'efficacité numérique ou la simplicité du code associé, sans avoir à se soucier de la précision.

Pour étudier plus en détail les différences entre les conditions $ABC_{1,T}^4$, $ABC_{1,P}^2$ et $ABC_{2,P}^2$, on refait les simulations pour une grille moins fine, avec $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$ et $n_T = 423\,000$ (figure 4.27). Cette fois, des différences assez importantes apparaissent. Les conditions $ABC_{1,T}^4$ et $ABC_{1,P}^2$ issues du changement de jauge sont pratiquement équivalentes, mais ostensiblement moins bonnes que la condition $ABC_{2,P}^2$ (laquelle n'a en fait pas perdu en précision par rapport à la figure 4.26). La condition $ABC_{2,P}^2$ présente donc l'avantage de donner de bons résultats sans avoir besoin de prendre une grille très fine. En fait, les conditions venant du changement de jauge sont pénalisées par le comportement oscillant des exponentielles liées au déphasage $e^{i\nu}$. Il faut alors raffiner suffisamment pour contrer les

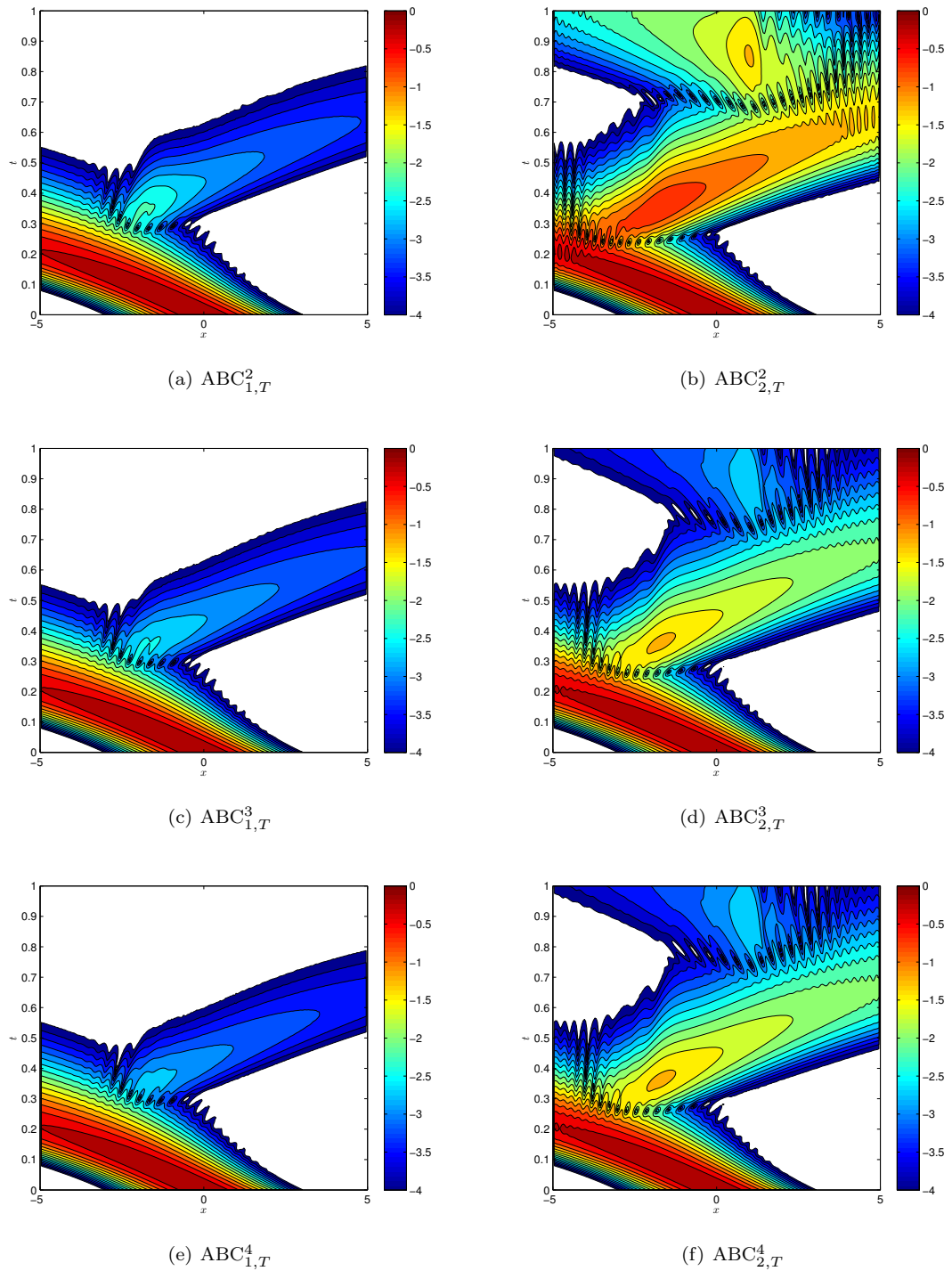


FIGURE 4.25 – Comparaison des conditions aux limites $ABC_{1,T}^M$ et $ABC_{2,T}^M$ pour le potentiel $V(r) = 5r^2$. Le maillage comporte $n_T = 1\,700\,000$ triangles et le pas de temps est $\Delta t = 10^{-3}$. Les niveaux logarithmiques sont seuillés à 10^{-4} .

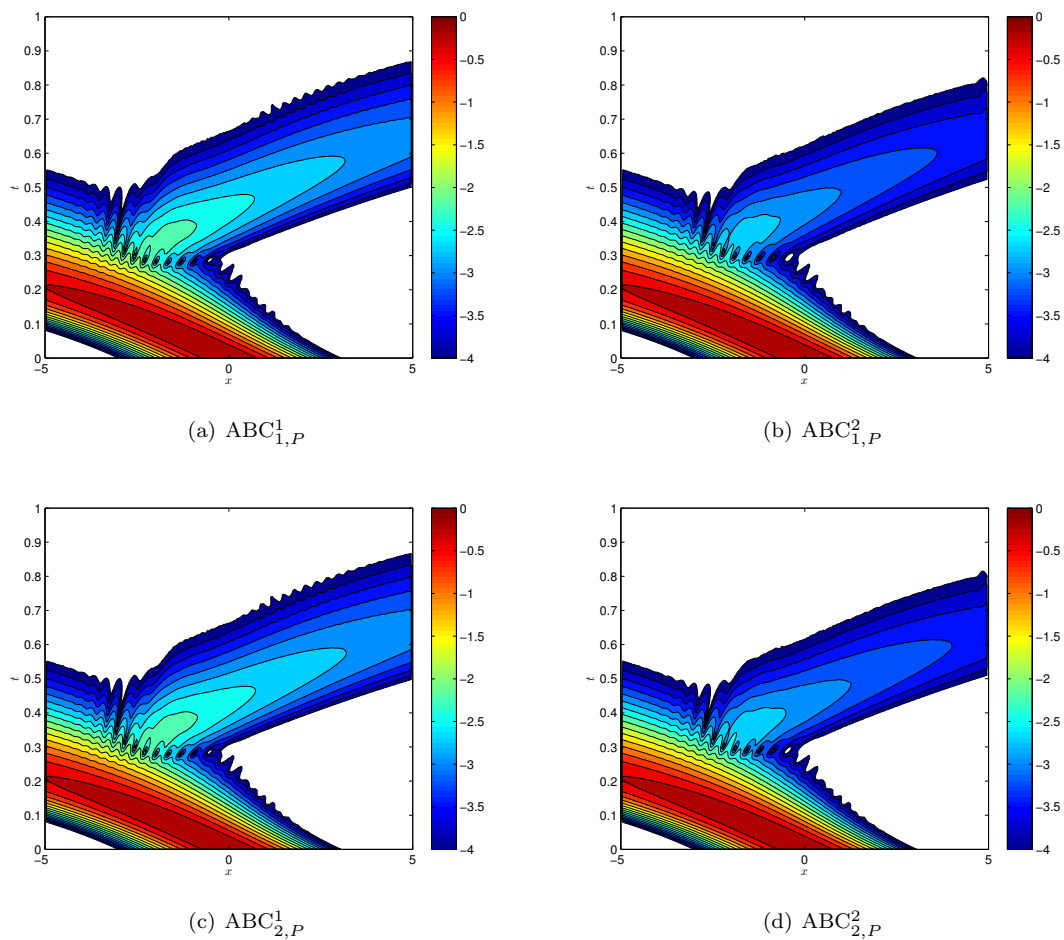


FIGURE 4.26 – Comparaison des conditions aux limites $ABC_{1,P}^M$ et $ABC_{2,P}^M$ pour le potentiel $V(r) = 5r^2$ et un maillage comportant $n_T = 1\,700\,000$ triangles. Le pas de temps est $\Delta t = 10^{-3}$, et les niveaux logarithmiques sont seuillés à 10^{-4} .

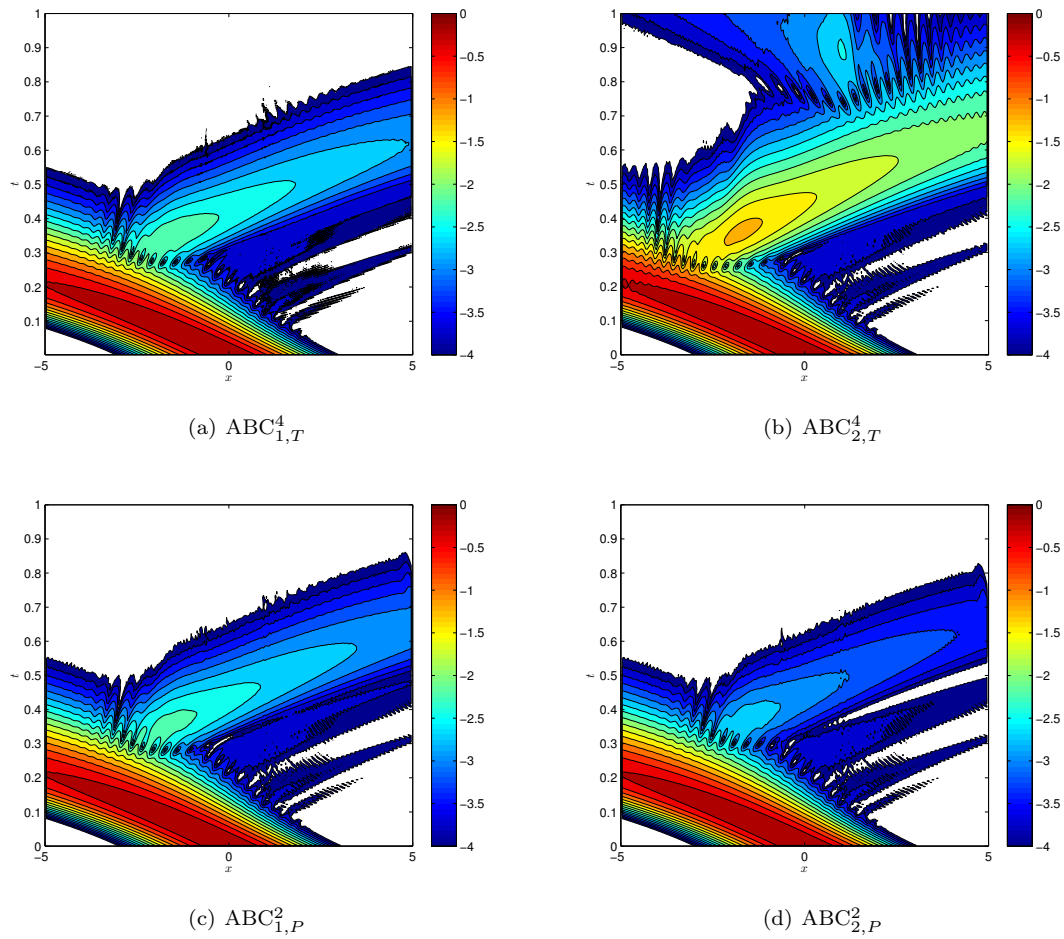


FIGURE 4.27 – Les CLA d'ordre le plus élevé pour le potentiel $V(r) = 5r^2$ et la discrétisation : $n_T = 423\,000$ triangles, $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

effets de la dispersion numérique, comme on le voit sur la figure 4.28.

Ce comportement est à rapprocher de ce qu'on a pu observer dans le cas unidimensionnel pour un potentiel : les conditions issues de la méthode directe et approchées par approximants de Padé étaient très performantes sans avoir à utiliser des grilles vraiment fines. La même précision pouvait être atteinte par les CLA issues du changement de jauge et discrétisées par convolutions discrètes, mais au prix d'un effort calculatoire en diminuant h et Δt . On observe ici le même phénomène. Si la précision à raffinement maximal semble être la même dans les deux stratégies, la méthode directe présente l'avantage d'être plus robuste numériquement, à condition bien sûr que la condition aux limites considérée n'ait pas fait l'objet d'approximations et de troncatures trop importantes, comme c'est le cas pour la famille de CLA $ABC_{2,T}^M$. Ce résultat est intéressant, car il montre que même si la résolution numérique par l'approche des approximants de Padé est, à discrétisation égale, numériquement un peu plus coûteuse que l'approche par développement de Taylor, ce coût est compensé par la possibilité (dans le cadre de la méthode directe) de prendre des grilles moins fines pour obtenir une précision égale. Ceci peut s'avérer plus efficace numériquement si on raisonne à précision fixée.

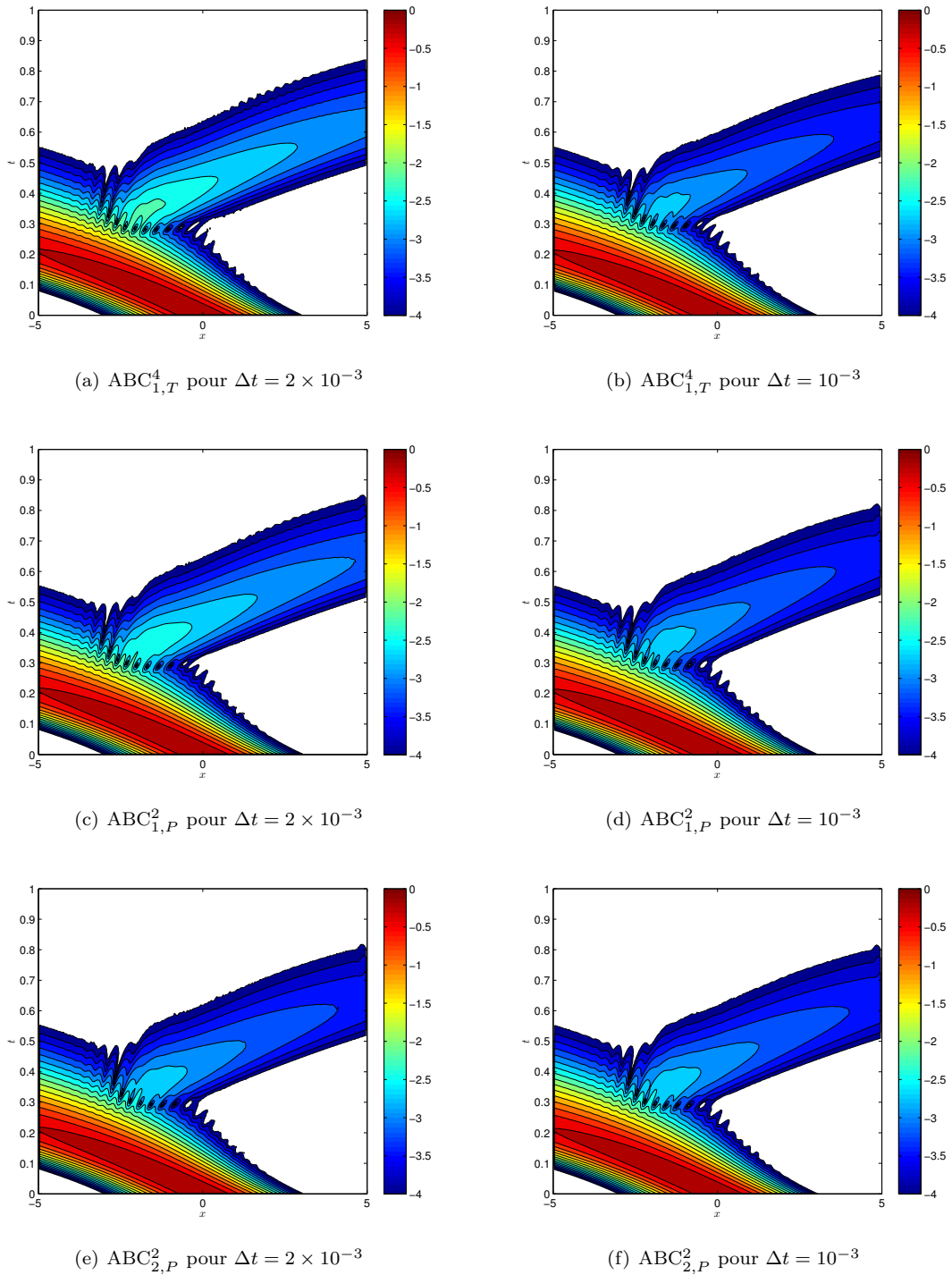


FIGURE 4.28 – Mise en évidence de la dispersion numérique pour le changement de jauge ($n_T = 1\,700\,000$).

Etude des temps de calcul

Pour terminer l'étude des exemples de potentiels radiaux, on s'intéresse aux performances des différentes conditions aux limites en termes de temps de calcul. Au sein d'une famille de CLA, les conditions des différents ordres ont pratiquement toutes le même coût numérique. En effet, pour les conditions approchées par approximants de Padé, utiliser l'ordre deux au lieu de l'ordre un revient à considérer une fonction de Padé supplémentaire, ce qui est d'un coût négligeable par rapport aux 25 fonctions considérées et à la taille du système intérieur. Quant aux conditions approchées par développement de Taylor, l'augmentation de l'ordre augmente le nombre de convolutions à effectuer pour assembler le second membre, mais l'effet sur le temps de calcul, quoique visible, reste limité. Dans toutes les études cpu à venir, nous nous intéresserons toujours aux conditions d'ordre le plus élevé.

Dans cette partie, les calculs sont effectués sur une machine de calcul comportant 8 processeurs Intel Xéon d'une fréquence de 2.27 GHz, et dotée de 48 Go de mémoire vive. On utilise la version 7.9.0.529 (R2009b) de Matlab pour linux 64 bits. Les temps chronométrés correspondent aux temps réels constatés lorsque seul le calcul en question tourne sur la machine de calcul. Nous considérons comme dans les exemples précédents un potentiel radial ne dépendant pas du temps. Dans ce cas, pour toutes les familles de CLA à l'exception de $ABC_{1,P}^M$, la matrice du système linéaire à résoudre est indépendante du temps. Le cas des conditions $ABC_{1,P}^M$ est particulier, puisque les équations de bord étant couplées avec le système intérieur, des termes en $e^{i\mathcal{W}^{n+1}}$ dépendant du temps se trouvent dans la matrice du système linéaire, qui doit donc être partiellement réassemblée à chaque itération en temps. En conséquence, on s'attend à ce que cette méthode soit moins rapide que les autres, pour ce type de potentiels. Le tableau 4.6 donne les temps de calcul associés à chacune des conditions d'ordre maximal, pour différentes discrétisations. On y reporte à la fois les temps de calcul chronométrés, en heures, et les temps cpu équivalents, tenant compte de la parallélisation éventuellement effectuée par Matlab sur tout ou partie du code. Ainsi, la correspondance entre temps de calcul observé et temps cpu utilisé peut varier d'une CLA à l'autre, et la comparaison des deux données fournit des informations intéressantes.

CLA	$n_T = 423\,000$ $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$		$n_T = 423\,000$ $\Delta t = 10^{-3}$		$n_T = 1\,700\,000$ $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$		$n_T = 1\,700\,000$ $\Delta t = 10^{-3}$	
	$ABC_{1,T}^4$	0 ^h 40	3 ^h 40	1 ^h 35	9 ^h 29	4 ^h 55	31 ^h 39	11 ^h 52
$ABC_{2,T}^4$	0 ^h 40	3 ^h 40	1 ^h 35	9 ^h 32	4 ^h 50	31 ^h 24	7 ^h 42	44 ^h 38
$ABC_{1,P}^2$	1 ^h 24	6 ^h 13	3 ^h 15	15 ^h 04	7 ^h 00	33 ^h 00	15 ^h 11	74 ^h 02
$ABC_{2,P}^2$	1 ^h 16	6 ^h 05	2 ^h 50	14 ^h 33	6 ^h 20	32 ^h 11	14 ^h 03	73 ^h 08

TABLE 4.6 – Temps de calcul en heures (à gauche : temps chronométré ; à droite : temps cpu) pour un potentiel radial du type $V(r) = 5r$, pour différentes discrétisations.

On peut constater que les méthodes utilisant les approximants de Padé sont un peu moins rapides que celles basées sur l'approche par développement de Taylor, du fait de l'augmentation de la taille du système à résoudre. Cet écart reste cependant modéré, de l'ordre de 15 %. Au sein des conditions de l'approche Padé, la méthode du changement de jauge est finalement à peine plus coûteuse que la méthode directe, le supplément de temps de calcul étant aux alentours de 2 %. Globalement, pour ce type de potentiel, le choix de la condition aux limites artificielle influence peu la durée du calcul.

4.10.3 Etude de potentiels non radiaux

Un potentiel non radial : $V(x, y) = x^2 + 5y^2$

Etudions maintenant un potentiel qui n'est pas à symétrie radiale, $V(x, y) = x^2 + 5y^2$. Le profil de ce potentiel et celui de la solution approchée se trouvent figure 4.29.

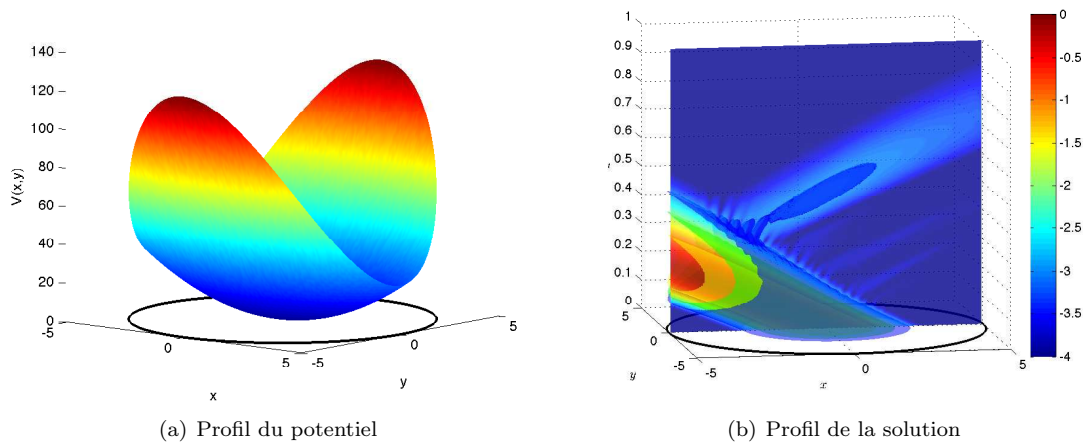


FIGURE 4.29 – Profil du potentiel $V(x, y) = x^2 + 5y^2$ et de la solution numérique associée, sur le disque de rayon 5.

Remarquons que dans ce cas, la fonction de phase est donnée par $\mathcal{V}(x, y, t) = t(x^2 + 5y^2)$ et n'est donc pas radiale. En conséquence, les matrices éléments finis de la forme $\mathbb{M}_{e^{i\mathcal{W}^{n+1}}}^\Sigma$ ne peuvent plus s'écrire $e^{i\mathcal{W}^{n+1}}\mathbb{M}^\Sigma$ comme précédemment. Ceci pénalise algorithmiquement la stratégie par changement de jauge, puisque ces matrices d'éléments finis dépendent du temps et doivent être réassemblées à chaque itération en temps. Pire, les conditions $ABC_{1,T}^M$ étant basées sur des convolutions discrètes, il faut réassembler à chaque itération en temps toutes les matrices $\mathbb{M}_{e^{i(\mathcal{W}^{n+1} - \mathcal{W}^k)}}^\Sigma$ pour $1 \leq k \leq n$ pour effectuer l'assemblage par convolution du second membre. Ceci est évidemment très coûteux, comme en témoigne au paragraphe 4.10.3 le tableau 4.7 des temps de calcul associés aux différentes CLA.

L'autre problème lié au changement de jauge est le fait que les conditions d'ordre élevé sont particulièrement difficiles à implémenter si la fonction de phase \mathcal{V} n'est pas radiale. De fait, comme expliqué dans les paragraphes 4.9.2 et 4.9.3, ne seront considérées ici que des approximations des conditions $ABC_{1,T}^4$ et $ABC_{1,P}^2$. Quant aux conditions d'ordre inférieur $ABC_{1,T}^2$ et $ABC_{1,P}^1$, elles sont certes utilisables sans modification même pour un potentiel non radial, mais nous avons vu qu'elles sont aussi moins précises que les conditions d'ordre plus élevé et que la correction apportée par les termes suivants est substantielle. Il n'est donc pas certain que les conditions associées au changement de jauge puissent donner des résultats précis.

Enfin, les conditions issues de la méthode directe ne posent aucun problème dans cette situation, car leur expression et leur implémentation sont les mêmes que le potentiel soit radial ou non. Indépendamment de la forme du potentiel, on s'attend à des résultats plus précis pour la condition $ABC_{2,P}^2$ que pour $ABC_{2,T}^4$, car on a vu que cette dernière prenait en compte de façon moins efficace le potentiel.

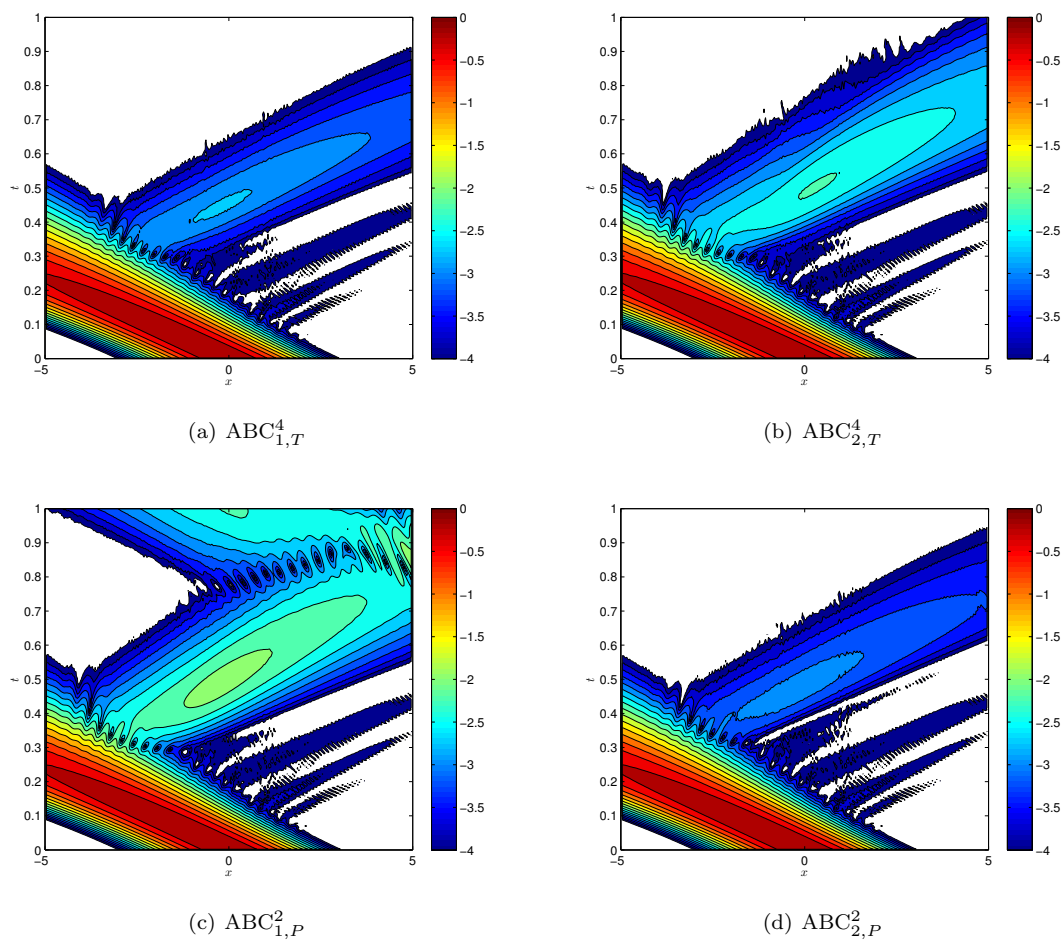


FIGURE 4.30 – Comparaison des CLA d'ordre le plus élevé pour le potentiel $V(x, y) = x^2 + 5y^2$. La discrétisation est $n_T = 423\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

Observons à présent le résultat des simulations. La figure 4.30 présente les résultats obtenus pour les conditions d'ordre le plus élevé pour chaque famille de CLA, sachant que les conditions issues du changement de jauge utilisées ici ne sont que des approximations des conditions $ABC_{1,T}^4$ et $ABC_{1,P}^2$. Nous utiliserons toutefois la même notation. Le domaine de calcul est toujours le disque de rayon 5, discrétisé en $n_T = 1\,700\,000$ triangles. Le temps final de calcul est $T = 1$ et le pas de temps vaut $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$. On observe, de manière prévisible compte tenu des résultats précédents, que la condition $ABC_{2,P}^2$ est assez précise, contrairement à la condition $ABC_{2,T}^4$. En revanche, la condition $ABC_{1,P}^2$ se comporte différemment de ce qu'on a vu précédemment pour les potentiels radiaux. Cette condition était alors plutôt satisfaisante, et égalait la précision donnée par $ABC_{2,P}^2$ à condition de raffiner suffisamment pour contrecarrer les effets de la dispersion numérique. Ici, le résultat n'est pas très bon. Cela est certainement dû au fait que des termes impliquant la dérivée curviligne $\partial_s \mathcal{V}$, bien que n'étant pas nuls (et vraisemblablement pas négligeables), ont été négligés dans ces conditions. Pourtant, curieusement, la condition $ABC_{1,T}^4$ qui elle aussi est approchée pour ce potentiel, donne un résultat proche de $ABC_{2,P}^2$.

Pour comparer les CLA indépendamment des termes négligés, on s'intéresse aux conditions d'ordre moins élevé, $ABC_{1,T}^2$ et $ABC_{1,P}^1$ respectivement. On les compare à la condition $ABC_{2,P}^1$ (figure 4.31) car le fait de prendre une condition d'ordre inférieur diminue de toute façon la précision. On observe que la condition $ABC_{1,T}^2$ donne déjà un très bon résultat, d'ailleurs meilleur que celui obtenu en ne prenant que la condition d'ordre un $ABC_{2,P}^1$. La condition $ABC_{1,P}^1$ en revanche est aussi mauvaise que $ABC_{1,P}^2$.

Le comportement de la condition $ABC_{1,P}^2$ dans ce cas est étrange, et difficilement explicable. Pour essayer de cerner la situation, on réalise d'autres simulations sur des potentiels similaires. On compare les résultats obtenus au résultat de $ABC_{1,T}^4$ (figure 4.32 et 4.33). Il apparaît que la condition $ABC_{1,P}^2$ se comporte particulièrement mal lorsque le potentiel est fortement non radial. En effet, l'amplitude du potentiel considéré joue, puisque des potentiels comme $V(x, y) = x^2$ ou $V(x, y) = y^2$ ne semblent pas poser de problème, alors que pour $V(x, y) = 5x^2$ et $V(x, y) = 5y^2$, les résultats de $ABC_{1,P}^2$ sont très mauvais (et ceci, pendant que $ABC_{1,T}^4$ donne des résultats corrects). Mais le caractère anisotrope du potentiel joue également, puisque le potentiel $V(x, y) = 5x^2 + 5y^2 = 5r^2$ ne pose pas de problème particulier (voir paragraphe 4.10.2), alors que $V(x, y) = 5x^2 + y^2$, pour lequel la dérivée curviligne $\partial_s \mathcal{V}$ est grande, donne un très mauvais résultat.

Pour essayer de comprendre ce phénomène, on réalise un dernier test basé sur la comparaison avec les conditions $ABC_{1,T}^M$. En effet, les deux familles de conditions sont basées sur le même principe, et sur le plan continu, les conditions $ABC_{1,T}^M$ issues d'une troncature du développement de Taylor sont logiquement des approximations des conditions $ABC_{1,P}^M$, prises à un certain ordre pour que les termes coïncident. Or, les conditions $ABC_{1,T}^2$ et $ABC_{1,T}^4$ permettent de traiter convenablement le problème dans les situations précédentes. On reprend donc la condition $ABC_{1,T}^2$, qui s'écrit symboliquement, en revenant à (4.59)

$$\partial_{\mathbf{n}} u - iOp(\sqrt{-\tau})u + \frac{\kappa}{2}u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T,$$

et on code cette condition en faisant apparaître explicitement l'opérateur de racine carrée, comme dans l'approche par approximants de Padé. On obtient

$$\partial_{\mathbf{n}} u - i\sqrt{i\partial_t}u + \frac{\kappa}{2}u = 0, \quad \text{sur } \Sigma_T,$$

c'est-à-dire exactement la condition $ABC_{1,P}^2$, dans laquelle on a supprimé le terme en laplacien surfa-

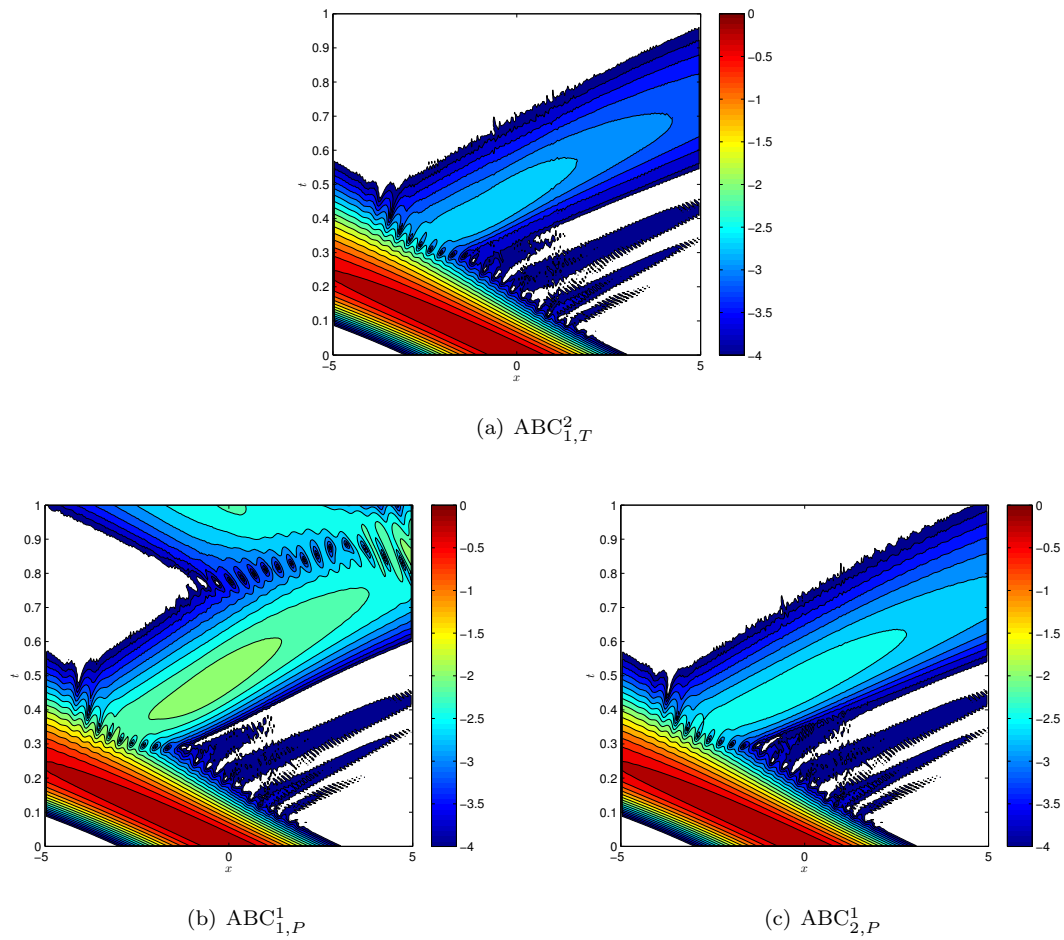


FIGURE 4.31 – Comparaison des CLA d'ordre moins élevé, sans terme curviligne négligé, pour le potentiel $V(x, y) = x^2 + 5y^2$. La discrétisation est $n_T = 423\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

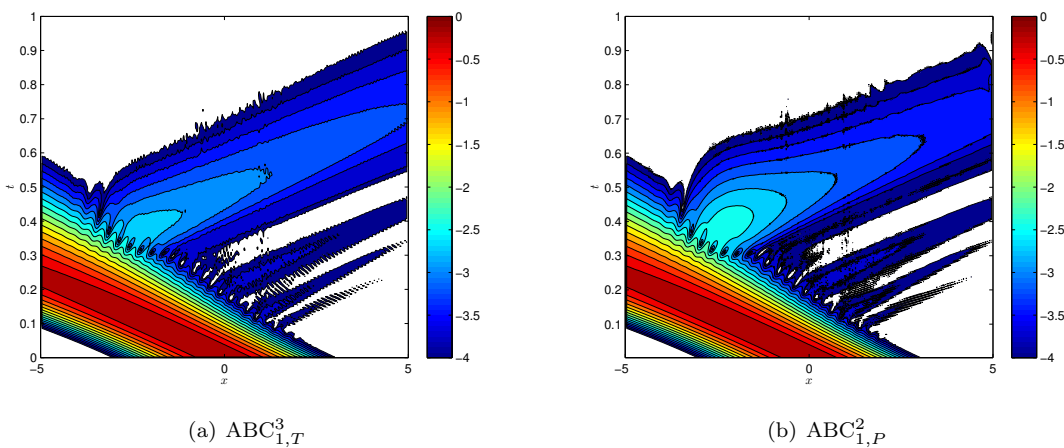


FIGURE 4.32 – Comparaison des CLA issues du changement de jauge pour le potentiel $V(x, y) = x^2$. La discrétisation est $n_T = 423\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$. Le même genre de résultat est obtenu pour $V(x, y) = y^2$.

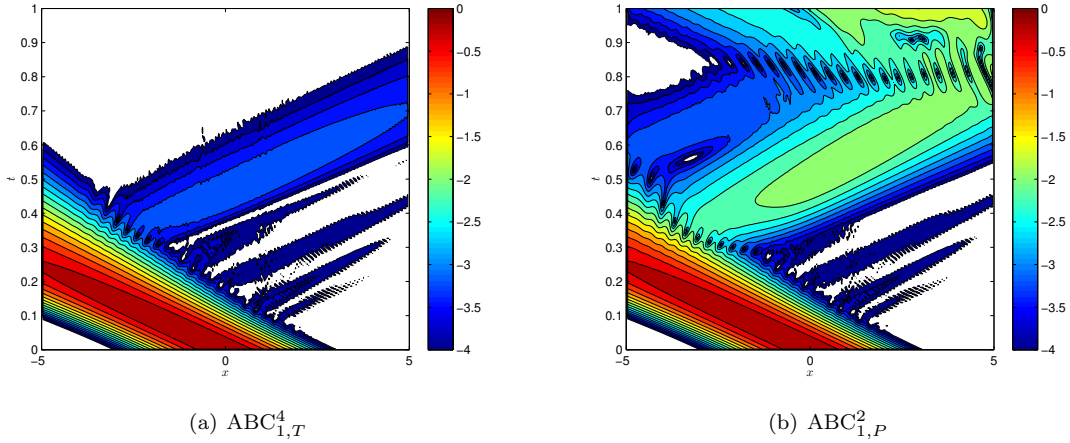


FIGURE 4.33 – Comparaison des CLA issues du changement de jauge pour le potentiel $V(x, y) = 5y^2$. La discrétisation est $n_T = 423\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

cique Δ_Σ . Il est alors facile de coder cette condition aux limites à partir de $ABC_{1,P}^2$, et on obtient un résultat tout à fait convenable, similaire à celui donné par $ABC_{1,T}^2$ figure 4.31. Ceci tend à prouver que le problème ne vient pas de l'approximation par approximants de Padé, mais la raison fondamentale de l'échec de cette CLA dans cette situation reste mystérieuse.

Lorsque le potentiel n'est pas radial, les méthodes les plus simples à implémenter sont celles liées à la méthode directe. Mais on a vu que les conditions $ABC_{2,T}^M$ étaient souvent peu précises. Les conditions $ABC_{2,P}^M$, et en particulier la condition d'ordre deux $ABC_{2,P}^2$, sont un bon outil pour traiter ce type de potentiel. On peut également considérer la condition $ABC_{1,T}^2$, mais outre une plus grande complexité algorithmique, les temps de calcul associés sont également plus élevés.

Etude des temps de calcul pour un potentiel non radial

Passons à l'étude des temps de calcul associés à chaque condition. Lorsque le potentiel n'est pas radial, les conditions $ABC_{2,T}^M$ et $ABC_{2,P}^M$ s'emploient sans aménagement par rapport au cas radial. En conséquence, les temps de calcul sont similaires à ceux constatés pour $V(r) = 5r$. En revanche pour les conditions issues du changement de jauge, les termes $e^{i\mathcal{W}^{n+1}}$ ne sont plus constants sur Σ , et on voit apparaître des matrices d'éléments finis généralisées, à réassembler à chaque itération en temps. Cela est particulièrement coûteux dans le cas des conditions discrétisées par convolutions discrètes car toutes les matrices intervenant dans la convolution sont à réassembler à chaque pas de temps.

CLA	$n_T = 423\,000$ $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$		$n_T = 1\,700\,000$ $\Delta t = 10^{-3}$	
	$ABC_{1,T}^4$	4 ^h 32	7 ^h 56	69 ^h 14
$ABC_{2,T}^4$	0 ^h 39	3 ^h 40	7 ^h 41	44 ^h 34
$ABC_{1,P}^2$	1 ^h 23	6 ^h 16	15 ^h 28	74 ^h 05
$ABC_{2,P}^2$	1 ^h 16	6 ^h 04	14 ^h 07	73 ^h 09

TABLE 4.7 – Temps de calcul en heures (à gauche : temps chronométré ; à droite : temps cpu) pour un potentiel non radial du type $V(x, y) = x^2 + 5y^2$, pour différentes discrétisations.

C'est ce qu'on observe en pratique dans le tableau 4.7. La condition $ABC_{1,T}^4$ est très coûteuse numériquement, à tel point qu'il ne semble pas envisageable de l'utiliser à moins de considérer une discrétisation très grossière. La condition aux limites $ABC_{1,P}^2$ est un peu plus coûteuse que la condition $ABC_{2,P}^2$ obtenue par changement de jauge, mais dans d'autres proportions. La condition $ABC_{2,T}^4$ est la plus rapide, ne comportant ni changement de jauge, ni fonctions auxiliaires. Cependant, la précision associée est très faible, et cette CLA ne pourra convenir que si l'amplitude du potentiel considéré reste faible. D'un point de vue pragmatique, il est donc conseillé de choisir plutôt la condition $ABC_{2,P}^2$ pour résoudre le problème associé à un potentiel non radial, car elle offre le meilleur compromis entre précision et efficacité numérique.

4.10.4 Calcul sur un domaine non circulaire : le médiateur

On s'intéresse de nouveau à une situation non radiale, mais cette fois à travers le domaine de calcul, en prenant un domaine convexe différent du disque. On considère alors le médiateur, représenté figure 4.34(a) avec le module de la donnée initiale u_0 . Le médiateur est un domaine convexe, de forme ovoïde, de frontière régulière, rappelant un médiateur de guitare. Afin d'avoir un point de repère, on considère sur ce domaine un potentiel déjà étudié dans ce qui précède, et on choisit $V(r) = 5r = 5\sqrt{x^2 + y^2}$. La représentation du potentiel sur ce domaine particulier se trouve figure 4.34(b). La donnée initiale u_0 est la même qu'auparavant (4.194), toujours centrée au point de coordonnées $(0, 0)$.

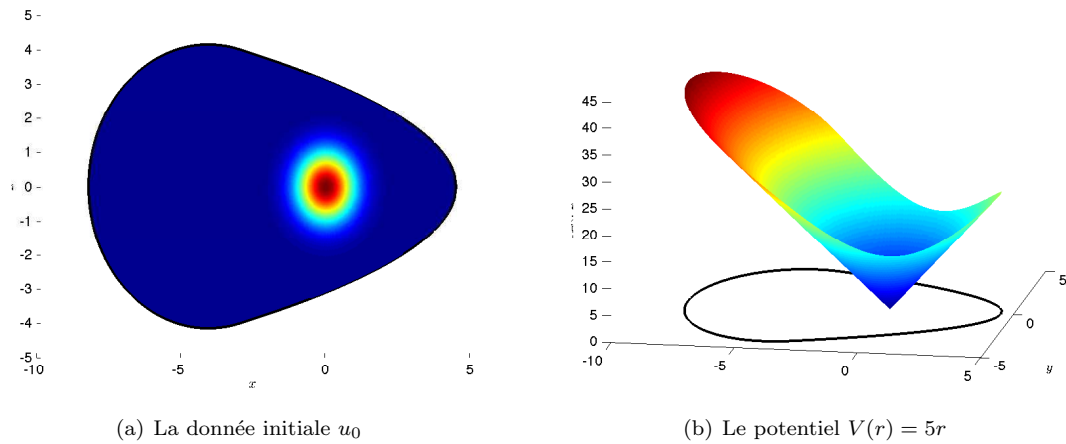


FIGURE 4.34 – Le domaine convexe du médiateur, et le potentiel $V(r) = 5r$.

Sur ce domaine, on calcule les solutions numériques obtenues en utilisant chacune des CLA d'ordre le plus élevé : $ABC_{1,T}^4$, $ABC_{2,T}^4$, $ABC_{1,P}^2$ et $ABC_{2,P}^2$. Les résultats obtenus au paragraphe 4.10.2 servent de référence globale, mais il ne faut pas chercher à comparer point par point les deux situations, car tous les paramètres ne sont pas équivalents. Tout d'abord, le domaine du médiateur étant plus grand que le disque considéré en 4.10.2, la valeur que prend le potentiel sur le bord gauche est plus grande dans le cas du médiateur ($V_{\max} \approx 40$) que dans le cas du disque ($V_{\max} = 25$). A discrétisation équivalente, on s'attend donc à voir une réflexion un peu plus forte pour le médiateur que pour le disque. D'autre part, la surface des domaines considérés n'est pas la même non plus. On prendra pour le médiateur $n_T = 920\,000$ triangles, et on peut considérer que ce choix est relativement proche

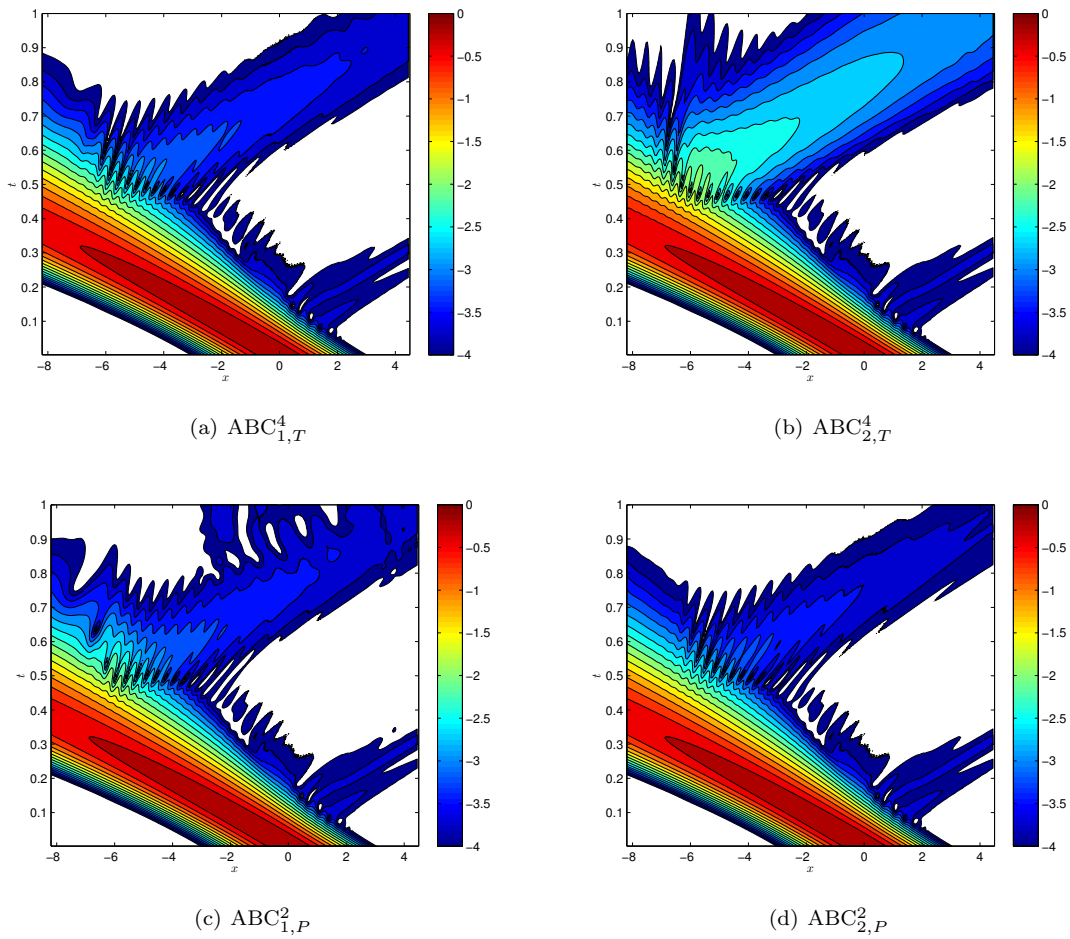


FIGURE 4.35 – Les solutions obtenues avec les CLA d'ordre le plus élevé, calculées sur le médiateur, pour le potentiel $V(r) = 5r$. La discrétisation est $n_T = 920\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

de la discrétisation obtenue pour le disque en prenant $n_T = 423\,000$ triangles. Enfin, comme le potentiel n'est pas constant sur Σ , on est dans le cas où la dérivée tangentielle $\partial_s \mathcal{V}$ n'est pas nulle. Dans les conditions provenant du changement de jauge, les termes faisant intervenir $\partial_s \mathcal{V}$ sont négligés, bien que non nuls. Les résultats des conditions $ABC_{1,T}^4$ et $ABC_{1,P}^2$ ne seront donc pas forcément aussi bons que ce qu'ils pourraient être.

Pour la discrétisation $n_T = 920\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$, les résultats se trouvent sur la figure 4.35. On observe, comme pour les autres simulations, que la condition $ABC_{2,P}^2$ donne la meilleure précision. Les conditions $ABC_{1,P}^2$ et $ABC_{1,T}^4$ donnent également un résultat assez précis, proche de $ABC_{2,P}^2$. Quant à la condition $ABC_{2,T}^4$, elle reste très imprécise, comme on l'a vu dès que le potentiel a une amplitude conséquente. La réflexion parasite reste de l'ordre de 10^{-2} , alors que les autres conditions aux limites permettent de la diminuer jusqu'à $10^{-3.5}$. En outre, on observe des perturbations bien plus importantes sur la partie principale de l'onde (oscillations sur les lignes de niveau jaunes et même orange, correspondant aux niveaux 10^{-1} environ).

4.10.5 Un potentiel dépendant du temps : $V(r, t) = 5r^2(1 + \cos(4\pi t))$

Nous terminons l'étude de l'équation linéaire avec un potentiel radial dépendant du temps, $V(r, t) = 5r^2(1 + \cos(4\pi t))$. Le domaine d'étude est à nouveau le disque de rayon 5, le temps final de calcul est $T = 1$. Le profil du potentiel à l'instant initial et le profil de la solution sont donnés par la figure 4.36. On s'assure qu'on est dans le cadre des théorèmes 4.42 et 4.43 en vérifiant que le potentiel est positif, et que le signe de sa dérivée normale ne dépend pas du temps sur Σ . En fait, au cours du temps l'amplitude du potentiel varie de manière sinusoïdale et périodique de période 0.5 : aux temps $t = 0$, $t = 0.5$ et $t = 1$, le potentiel vaut 250 sur Σ ; aux temps $t = 0.25$ et $t = 0.75$, il est nul sur Ω .

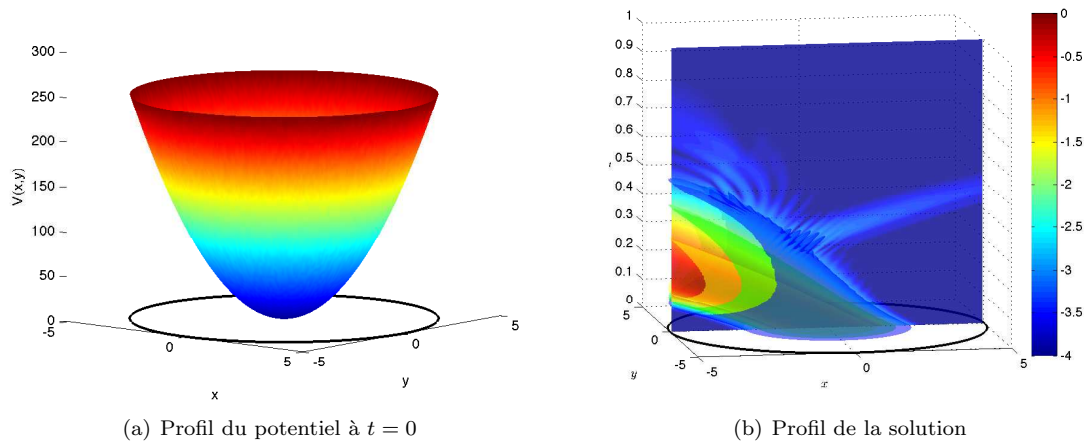


FIGURE 4.36 – Profil du potentiel $V(x, y) = 5r^2(1 + \cos(4\pi t))$ au temps $t = 0$, et de la solution numérique sur le disque de rayon $R = 5$.

Ce potentiel étant radial, on l'étudie en utilisant les conditions $ABC_{1,T}^4$, $ABC_{2,T}^4$, $ABC_{1,P}^2$ et $ABC_{2,P}^2$ classiques, sans avoir à négliger de termes. La figure 4.37 donne les résultats des simulations numériques pour ces quatre conditions, la discrétisation étant donnée par $n_T = 423\,000$ triangles et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

Il est d'abord particulièrement remarquable que la condition $ABC_{2,T}^4$ ne permet pas de traiter le cas d'un tel potentiel, car la réflexion est ici très importante, de l'ordre de 10^{-1} . Cela n'est pas surprenant étant donné que le potentiel prend des valeurs particulièrement élevées sur Σ . Les autres conditions aux limites en revanche prennent suffisamment en compte le potentiel, puisque la réflexion observée est de l'ordre de $10^{-2.5}$, voire 10^{-3} en ce qui concerne la condition $ABC_{2,P}^2$ dont on a déjà pu observer la performance. Si on raffine le maillage en prenant $n_T = 1\,700\,000$ triangles et $\Delta t = 10^{-3}$ (figure 4.38), l'effet de la dispersion numérique s'atténue pour les conditions issues du changement de jauge, et les trois conditions aux limites artificielles $ABC_{1,T}^4$, $ABC_{1,P}^2$ et $ABC_{2,P}^2$ sont tout à fait comparables. Pour ce maillage, la précision est améliorée et l'amplitude de la réflexion parasite est abaissée à $10^{-3.5}$.

Pour l'exemple $V(r, t) = 5r^2(1 + \cos(4\pi t))$, il est flagrant que la condition $ABC_{2,T}^4$ est mise en défaut. Cependant, cette condition n'a pas que des inconvénients. En plus d'être la condition aux limites la plus rapide en temps de calcul, à discrétisation fixée, son utilisation reste appropriée lorsque l'amplitude du potentiel n'est pas trop élevée. Le cas extrême d'un potentiel de faible amplitude est

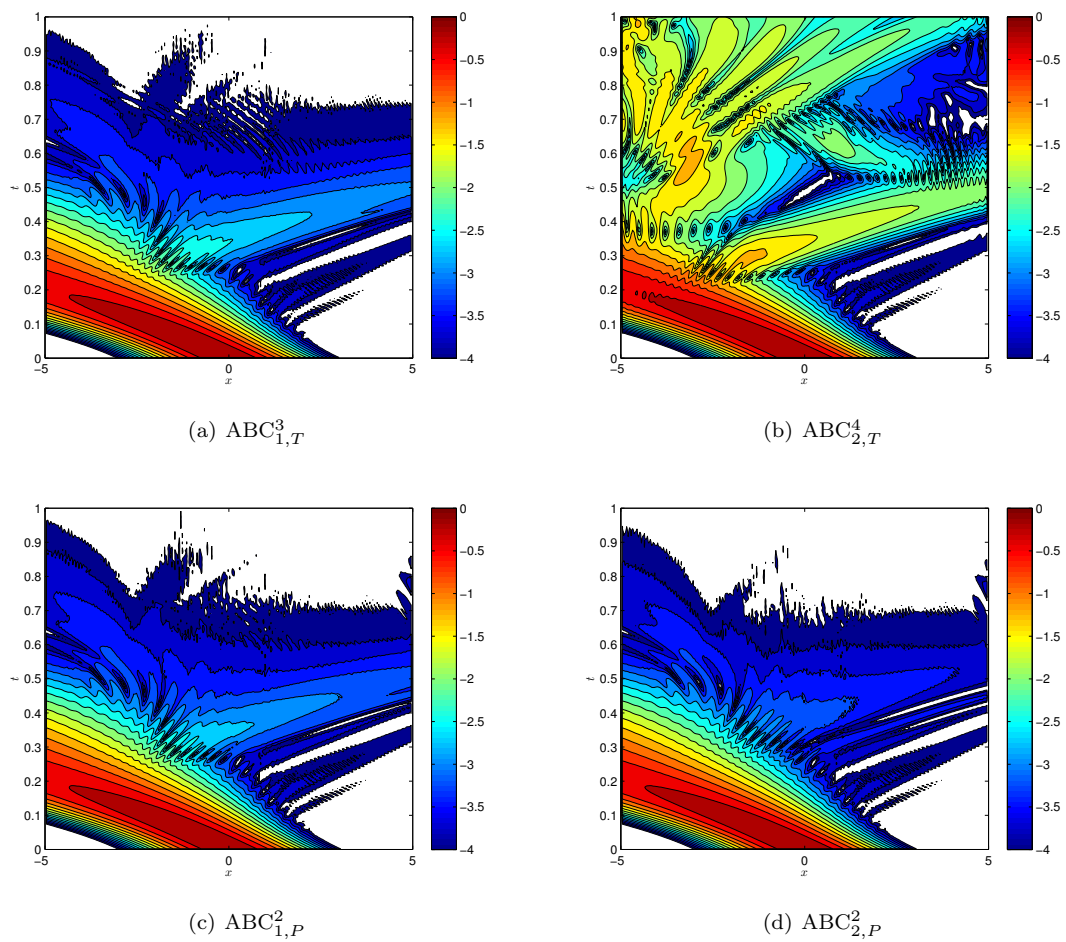


FIGURE 4.37 – Comparaison des CLA d'ordre le plus élevé pour le potentiel $V(r, t) = 5r^2(1 + \cos(4\pi t))$. La discrétisation est $n_T = 423\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

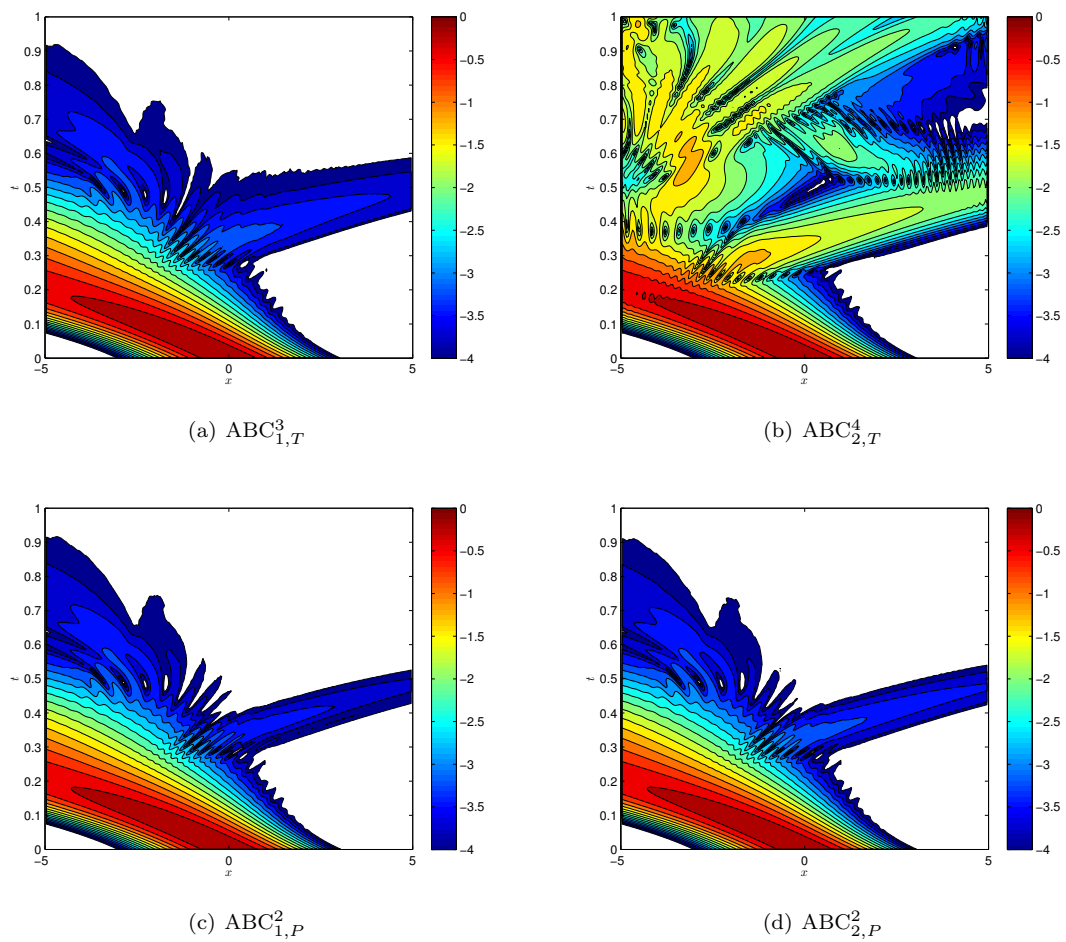


FIGURE 4.38 – Comparaison des CLA d'ordre le plus élevé pour le potentiel $V(r, t) = 5r^2(1 + \cos(4\pi t))$ pour la grille raffinée $n_T = 1\,700\,000$ et $\Delta t = 10^{-3}$.

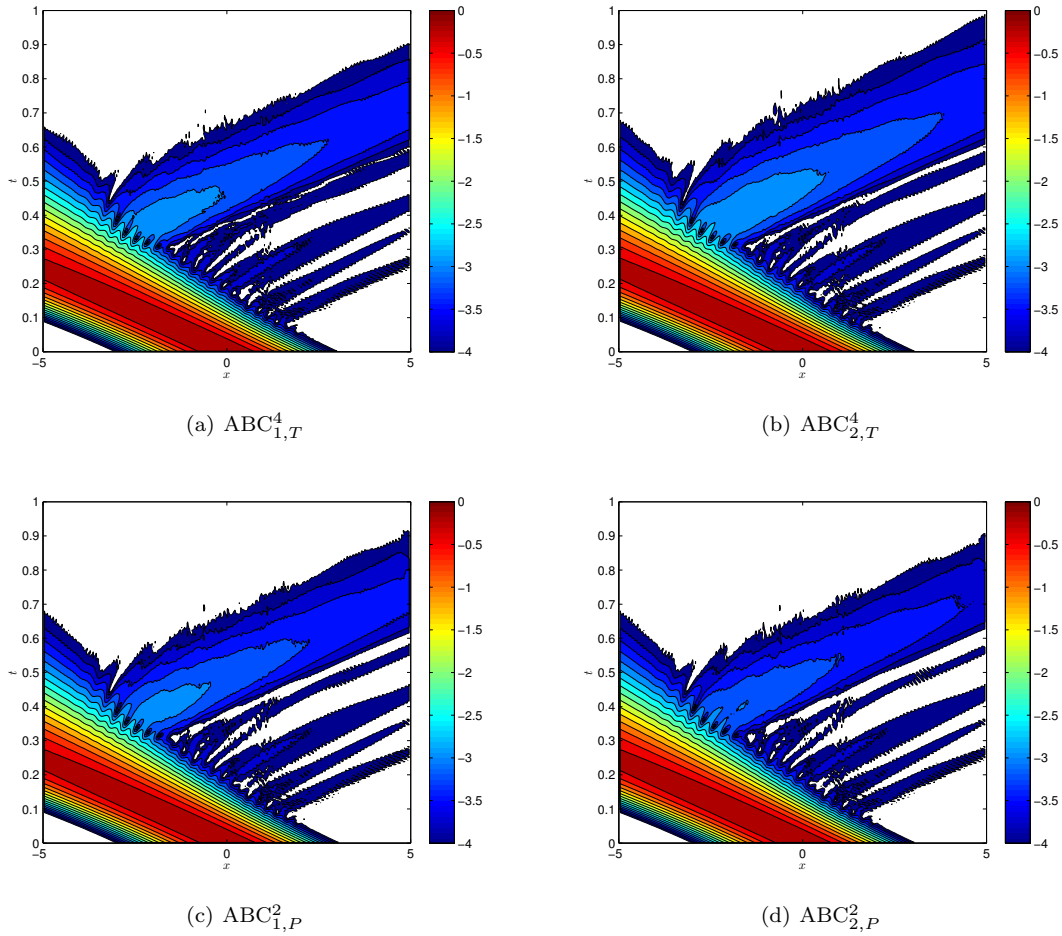


FIGURE 4.39 – Comparaison des CLA d'ordre le plus élevé pour le potentiel $V(r, t) = r(1 + \cos t)$ pour la grille $n_T = 420\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

le potentiel nul, pour lequel les conditions $ABC_{1,T}^M$ et $ABC_{2,T}^M$ sont confondues, et précises. Ensuite, plus le potentiel est grand et plus la différence entre $ABC_{1,T}^4$ et $ABC_{2,T}^4$ est marquée, aux dépens de cette dernière qui ne tient pas suffisamment compte du potentiel. Nous l'avons vu sur les potentiels $V(r) = 5r$ et $V(r) = 5r^2$, la condition $ABC_{2,T}^4$ étant acceptable pour le premier, et tout à fait mauvaise pour le deuxième. Pour confirmer ce comportement, nous étudions un autre potentiel $V(r, t)$ dépendant du temps, mais d'amplitude plus faible : $V(r, t) = r(1 + \cos t)$. Comme on peut le voir figure 4.39 pour la discrétisation $n_T = 420\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$, toutes les conditions aux limites donnent de bons résultats pour ce potentiel. En conséquence, la condition $ABC_{2,T}^4$ continuera à être étudiée.

Passons à présent à l'étude cpu associée à un potentiel de ce type. Lorsque le potentiel dépend du temps, la matrice du système est évidemment à réassembler à chaque itération en temps pour mettre à jour le potentiel, indépendamment du choix de la condition aux limites. Par ailleurs, les performances respectives des différentes CLA sont proches de celles observées pour le potentiel $V(r) = 5r$, comme en atteste le tableau 4.8.

CLA	$n_T = 423\,000$		$n_T = 423\,000$	
	$\Delta t = 2 \times 10^{-3}$		$\Delta t = 1 \times 10^{-3}$	
$ABC_{1,T}^4$	0 ^h 45	3 ^h 58	1 ^h 32	7 ^h 37
$ABC_{2,T}^4$	0 ^h 45	3 ^h 46	1 ^h 32	7 ^h 33
$ABC_{1,P}^2$	1 ^h 31	6 ^h 20	3 ^h 22	15 ^h 11
$ABC_{2,P}^2$	1 ^h 26	6 ^h 14	3 ^h 09	14 ^h 08

TABLE 4.8 – Temps de calcul en heures (à gauche : temps chronométré ; à droite : temps cpu) pour un potentiel radial et dépendant du temps, du type $V(r, t) = 5r^2(1 + \cos(4\pi t))$, pour différentes discrétisations.

4.11 Conclusion

Nous avons détaillé dans ce chapitre la dérivation des conditions aux limites issues de chacune des deux stratégies mises en évidence dans le cas unidimensionnel, à savoir la stratégie du changement de jauge et la méthode directe. Pour chacune de ces deux stratégies, nous avons en outre proposé deux approches, sur le plan continu : la troncature par développement de Taylor $|\tau|$ grand, et l'approximation par approximants de Padé de la racine carrée. Ceci nous a conduit à quatre familles de conditions aux limites, $ABC_{1,T}^M$, $ABC_{2,T}^M$, $ABC_{1,P}^M$ et $ABC_{2,P}^M$. Les conditions tronquées par développement de Taylor sont ensuite discrétisées en temps par l'intermédiaire d'une convolution discrète, tandis que les conditions issues de l'approche Padé sont discrétisées à l'aide de fonctions auxiliaires, solutions d'un problème de Schrödinger sur le bord du domaine. Comme dans le cas 1D, on dispose d'estimations *a priori* pour la plupart des conditions aux limites de l'approche Taylor, et on prouve que le schéma associé reste inconditionnellement stable lorsque les CLA sont discrétisées sous forme de convolutions discrètes.

Afin d'observer et de comparer la précision des différentes familles de CLA, on a effectué des tests numériques pour des potentiels de différentes formes : potentiel radial $V(r)$, potentiel quelconque $V(x, y)$, potentiel radial dépendant du temps $V(r, t)$, et deux domaines, l'un circulaire, l'autre (le médiateur) convexe avec une courbure non constante. Dans un premier temps, ces tests ont prouvé la nécessité de recourir à des conditions aux limites adaptées, car les conditions sans potentiel sont incapables d'approcher la solution, à moins que le potentiel ne soit très faible. D'autre part, ces tests ont mis en évidence le fait que les conditions $ABC_{2,T}^M$ ne prennent pas suffisamment en compte le potentiel. En fait, ces conditions sont particulièrement inappropriées lorsque le potentiel prend des valeurs importantes sur le bord, situation dans laquelle on a justement besoin des conditions aux limites artificielles adéquates, car les conditions sans potentiel ne suffisent plus.

Les deux familles de conditions aux limites issues de la stratégie de changement de jauge, $ABC_{1,T}^M$ et $ABC_{1,P}^M$, donnent des résultats plutôt précis, et globalement identiques qu'il s'agisse de l'approche Taylor ou de l'approche Padé, à l'exception du cas non radial où les conditions $ABC_{1,P}^M$ de l'approche Padé donnent des résultats étonnamment mauvais. Dans ce cas, il faut considérer l'approche Taylor si on souhaite utiliser le changement de jauge. L'inconvénient de la stratégie du changement de jauge est son codage plus délicat en raison des termes en exponentielle et, sur le plan numérique, la dispersion numérique que ces termes engendrent. De plus, dès que le problème n'est plus à symétrie radiale, le déphasage entraîne également un surcoût algorithmique, tout particulièrement pour l'approche Taylor du fait de la structure convolutive.

Les conditions $ABC_{2,P}^M$, issues de la méthode directe, ne présentent pas cet inconvénient. Elles

conjuguent la simplicité du code par approximants de Padé et du code sans déphasage, à une très bonne prise en compte du potentiel et à l'absence de dispersion numérique. Sous cet angle, ces conditions se présentent comme la meilleure famille de CLA parmi celles étudiées. Cette performance est à nuancer par un léger surcoût, par rapport aux conditions de l'approche Taylor, dû à l'augmentation de la taille du système par l'ajout de fonctions auxiliaires sur le bord. Cependant, si on raisonne à précision fixée, les conditions $ABC_{2,P}^M$ permettent de prendre une grille moins fine pour obtenir le même résultat que celui qu'on aurait avec les conditions $ABC_{1,T}^M$ ou $ABC_{1,P}^M$. Le gain de temps réalisé en considérant une grille moins fine fait plus que compenser le surcoût dû aux fonctions auxiliaires, ce qui fait des conditions $ABC_{2,P}^M$ les CLA les plus performantes, à précision fixée.

L'étape suivante est le passage au non linéaire : le potentiel est alors à la fois non radial (du moins dès lors que la donnée initiale a une impulsion non nulle), et dépendant du temps. D'après ce qu'on a vu, les conditions avec changement de jauge risquent d'être pénalisantes numériquement (le potentiel n'étant pas radial). En particulier, comme on a vu que les conditions $ABC_{1,P}^M$ pouvaient poser problème lorsque le potentiel n'est pas radial, nous n'utiliserons pas ces conditions dans le cas non linéaire. Nous considérerons donc les trois autres familles de conditions aux limites.

Chapitre 5

L'équation de Schrödinger en dimension deux avec potentiel et non linéarité

Sommaire

5.1	Adaptation des CLA pour une non linéarité	286
5.1.1	Conditions aux limites de l'approche Taylor	286
5.1.2	Conditions aux limites de l'approche Padé	286
5.2	Etude du problème aux limites dans les cas NLABC_{1,T}² et NLABC_{2,T}^M	287
5.3	Semi-discrétisation des conditions aux limites et implémentation du point fixe	290
5.3.1	Formulation variationnelle et algorithme de point fixe	290
5.3.2	Traitement numérique des conditions aux limites NLABC _{1,T} ^M et NLABC _{2,T} ^M	291
5.3.3	Stabilité du problème semi-discret pour NLABC _{1,T} ² et NLABC _{2,T} ^M	294
5.3.4	Traitement numérique de la condition aux limites NLABC _{2,P} ²	295
5.4	Semi-discrétisation et implémentation de la méthode de relaxation	297
5.4.1	Principe de la méthode de relaxation	297
5.4.2	Application de la méthode de relaxation à la condition NLABC _{2,P} ²	298
5.4.3	Application de la méthode de relaxation à la condition NLABC _{2,T} ³	300
5.4.4	Application de la méthode de relaxation à la condition NLABC _{1,T} ²	301
5.5	Résultats numériques	302
5.5.1	Construction numérique du soliton	302
5.5.2	Choix de la méthode de résolution	304
5.5.3	Le potentiel cubique $\mathcal{V} = q u ^2$ avec donnée initiale solitonique	305
5.5.4	Le cas d'une donnée initiale gaussienne	309
5.5.5	Des potentiels mixtes $\mathcal{V} = V(r) + f(u)$	312
5.6	Conclusion	315

Dans ce chapitre, nous considérons la généralisation des résultats précédents lorsque le potentiel V est remplacé par un potentiel non linéaire, défini par $\mathcal{V}(x, y, t, u) = V(x, y, t) + f(u)$. Ainsi, nous considérons le problème initial

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + Vu + f(u)u = 0, & (x, y) \in \mathbb{R}^2, t > 0, \\ u(x, y, 0) = u_0(x, y), & (x, y) \in \mathbb{R}^2. \end{cases} \quad (5.1)$$

La fonction f est une fonction réelle et en pratique, elle sera toujours une fonction de $|u|^2$.

5.1 Adaptation des CLA pour une non linéarité

Nous nous plaçons dans le même genre de configuration géométrique que dans le chapitre 4. Pour obtenir les familles de conditions aux limites associées au système (5.1) à partir des CLA obtenues précédemment, on applique la même méthode que dans le chapitre 2 et dans [11] : on remplace formellement V par le potentiel non linéaire $V + f(u)$.

5.1.1 Conditions aux limites de l'approche Taylor

Etudions pour commencer ce que deviennent les conditions aux limites basées sur le développement de Taylor, et plus particulièrement, les conditions $ABC_{2,T}^M$ issues de la méthode directe. De même que dans le cas de la dimension une, on abandonne la symétrisation du terme $(\partial_{\mathbf{n}}\mathcal{V})I_t$, étant donné que $\text{sg}(\partial_{\mathbf{n}}f(u))$ n'a aucune raison d'être constant par rapport au temps sur Σ . En revanche, la question peut se poser pour le terme $\mathcal{V}I_t^{1/2}$, car il semble plus réalisable de déterminer si $V + f(u)$ est de signe constant sur Σ . Par exemple, ce sera le cas dès que V et f sont chacun soit positif soit négatif. On obtient dans le cas d'un potentiel non linéaire la condition d'ordre quatre suivante :

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4}\partial_t^{1/2}u + \frac{\kappa}{2}u - e^{i\pi/4}\left(\frac{\kappa^2}{8} + \frac{\Delta_{\Sigma}}{2}\right)I_t^{1/2}u \\ - e^{-i\pi/4}\frac{\text{sg}(V)}{2}\sqrt{|V|}I_t^{1/2}\left(\sqrt{|V|}u\right) - e^{i\pi/4}\frac{\text{sg}(f(u))}{2}\sqrt{|f(u)|}I_t^{1/2}\left(\sqrt{|f(u)|}u\right) \\ + i\left(\frac{\partial_s(\kappa\partial_s)}{2} + \frac{\kappa^3 + \Delta_{\Sigma}\kappa}{8} - \frac{\partial_{\mathbf{n}}V}{4} - \frac{\partial_{\mathbf{n}}f(u)}{4}\right)I_tu = 0, \end{aligned} \quad (5.2)$$

notée $NLABC_{2,T}^4$. On en déduit aisément les conditions aux limites d'ordre inférieur $NLABC_{2,T}^M$, pour $M = 2$ et $M = 3$.

Le cas des conditions $ABC_{1,T}^M$ est différent. Même si f est une fonction radiale, le potentiel non linéaire $V + f(u)$ ne l'est pas, à moins que la donnée initiale u_0 ait une impulsion nulle. Comme nous prenons une donnée initiale avec un nombre d'onde non nul, la solution u perd la symétrie radiale, et le potentiel $f(u)$ n'est donc pas radial. Or, nous avons vu que pour un potentiel non radial, il était difficile d'implémenter les conditions d'ordres trois et quatre. Nous ne l'avons d'ailleurs pas vraiment fait, nous contentant de négliger les termes provenant de $\partial_s\mathcal{V}$. Cependant, cette action correspond finalement numériquement à ne considérer que la condition d'ordre deux. Comme par ailleurs, pour un potentiel, la condition d'ordre deux donne déjà de bons résultats, nous nous limiterons à considérer la condition d'ordre deux dans le cas non linéaire. L'adaptation de la condition $ABC_{1,T}^2$ conduit à

$$\partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4}e^{i\mathcal{V}}\partial_t^{1/2}\left(e^{-i\mathcal{V}}u\right) + \frac{\kappa}{2}u = 0, \quad (5.3)$$

qui est notée $NLABC_{1,T}^2$, et où la nouvelle fonction de phase est donnée par

$$\mathcal{V}(x, y, t, u) = \int_0^t V(x, y, \sigma)d\sigma + \int_0^t f(u)(x, y, \sigma)d\sigma. \quad (5.4)$$

5.1.2 Conditions aux limites de l'approche Padé

En ce qui concerne les CLA issues de l'approche Padé, on ne traite que le cas des conditions $ABC_{2,P}^M$ obtenues par la méthode directe, car nous avons vu que les deux familles de conditions aux limites conduisaient à des résultats sensiblement équivalents pour une discrétisation assez fine. Or,

les conditions provenant de la méthode directe ne sont pas affectées par la dispersion numérique, et on peut obtenir de très bons résultats en raffinant moins que dans le cas du changement de jauge. De plus, le changement de jauge se prête assez mal à l'étude d'un potentiel non radial (ce qui est le cas ici), entraînant une programmation à la fois plus délicate et plus coûteuse numériquement. Pour toutes ces raisons, nous limiterons dans le cas non linéaire les conditions de l'approche Padé à la famille ABC_{2,P}^M, et plus particulièrement à sa condition d'ordre deux. La condition NLABC_{2,P}², adaptée à une non linéarité, s'écrit sur Σ

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\sqrt{i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + V + f(u)}u + \frac{\kappa}{2}u - \frac{\kappa}{2}(i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + V + f(u))^{-1}\Delta_{\Sigma}u = 0. \quad (5.5)$$

On introduit ensuite les approximants de Padé d'ordre m pour approcher l'opérateur racine carrée

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}}u - i\left(\sum_{k=0}^m a_k^m\right)u + i\sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m (i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + V + f(u) + d_k^m)^{-1}u \\ + \frac{\kappa}{2}u - \frac{\kappa}{2}(i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + V + f(u))^{-1}\Delta_{\Sigma}u = 0, \end{aligned} \quad (5.6)$$

puis les fonctions auxiliaires $(\varphi_k)_{1 \leq k \leq m}$ et ψ définies respectivement par

$$(i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + V + f(u) + d_k^m)\varphi_k = u \quad \text{sur } \Sigma, \quad (5.7)$$

pour $1 \leq k \leq m$, et

$$(i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + V + f(u))\psi = \Delta_{\Sigma}u \quad \text{sur } \Sigma, \quad (5.8)$$

avec les conditions initiales $\varphi_k(\mathbf{x}, 0) = 0$ pour $1 \leq k \leq m$ et $\psi(\mathbf{x}, 0) = 0$, pour $\mathbf{x} \in \Sigma$. Finalement, la condition aux limites (5.6) devient

$$\partial_{\mathbf{n}}u - i\left(\sum_{k=0}^m a_k^m\right)u + i\sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k + \frac{\kappa}{2}u - \frac{\kappa}{2}\psi = 0. \quad (5.9)$$

Le système (5.9)–(5.7)–(5.8) constitue l'approximation de la condition NLABC_{2,P}² par m approximants de Padé.

Remarque 5.1. Les conditions aux limites sans potentiel sont naturellement les mêmes que dans le cas potentiel, à savoir ABC_{0,T}⁴ donnée par (4.101) et ABC_{0,P}² donnée par (4.103) pour les conditions d'ordre le plus élevé.

5.2 Étude du problème aux limites dans les cas NLABC_{1,T}² et NLABC_{2,T}^M

On s'intéresse ici aux conditions d'ordre deux NLABC_{1,T}² et NLABC_{2,T}², ainsi qu'à la condition d'ordre trois symétrisée NLABC_{2,T}³. En effet, parmi les conditions issues du changement de jauge, on ne considère dans la partie non linéaire que la condition d'ordre deux. En ce qui concerne la méthode directe, dans le cas potentiel, la condition d'ordre quatre se traitait en s'appuyant sur la symétrisation du terme $\partial_{\mathbf{n}}V I_t$, puis sur le fait que $\partial_{\mathbf{n}}V$ soit de signe constant au cours du temps sur Σ . Ici cependant, on ne peut rien dire sur le signe de $\partial_{\mathbf{n}}f(u)$ sur Σ , ce qui exclut de traiter l'ordre quatre.

Pour les conditions artificielles issues de la méthode directe, nous avons le théorème suivant.

Théorème 5.48. Soit $u_0 \in L^2(\Omega)$ une donnée initiale à support compact dans Ω . Soit $V \in C^\infty(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^+, \mathbb{R})$ un potentiel à valeurs réelles et f une fonction réelle. On note $u \in C([0; T], H^1(\Omega))$ une solution du problème avec donnée initiale et condition aux limites $NLABC_{2,T}^2$

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + Vu + f(|u|^2)u = 0, & \text{dans } \Omega_T, \\ \partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} u + \frac{\kappa}{2} u = 0, & \text{sur } \Sigma_T, \\ u(x, y, 0) = u_0(x, y), & \text{sur } \Omega. \end{cases} \quad (5.10)$$

Alors, u satisfait l'inégalité d'énergie suivante :

$$\forall t > 0, \quad \|u(t)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u_0\|_{L^2(\Omega)}. \quad (5.11)$$

De plus, si on munit le système de la condition aux limites $NLABC_{2,T}^3$ symétrisée

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} u + \frac{\kappa}{2} u - e^{i\pi/4} \left(\frac{\kappa^2}{8} + \frac{\Delta_\Sigma}{2} \right) I_t^{1/2} u - e^{i\pi/4} \frac{\text{sg}(V)}{2} \sqrt{|V|} I_t^{1/2} \left(\sqrt{|V|} u \right) \\ - e^{i\pi/4} \frac{\text{sg}(f(|u|^2))}{2} \sqrt{|f(|u|^2)|} I_t^{1/2} \left(\sqrt{|f(|u|^2)|} u \right) = 0, \end{aligned} \quad (5.12)$$

et que V est un potentiel positif, et f une fonction réelle positive, alors l'inégalité (5.11) est encore vérifiée.

Démonstration. Le schéma de la preuve est totalement analogue à la preuve du théorème 4.42. L'identité (4.113) devient

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \bar{u} \partial_t u \, d\Omega - i \int_{\Sigma} \bar{u} \partial_{\mathbf{n}} u \, d\Sigma + i \int_{\Omega} |\nabla u|^2 \, d\Omega - i \int_{\Omega} V |u|^2 \, d\Omega - i \int_{\Omega} f(|u|^2) |u|^2 \, d\Omega \\ = - \int_{\Omega} u(x, \tilde{T}) \bar{u} \delta_{\tilde{T}}(t) \, d\Omega + \int_{\Omega} u_0(x) \bar{u} \delta_0(t) \, d\Omega. \end{aligned}$$

Comme la fonction f est réelle, et que $|u|^2$ est réel également, cette identité conduit, de même que dans le cas potentiel, à

$$\|u(\tilde{T})\|^2 - \|u_0\|^2 = \text{Re} \left(i \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \bar{u} \partial_{\mathbf{n}} u \, d\Sigma dt \right) \quad (5.13)$$

pour tout $\tilde{T} \in [0; T]$, et où $\partial_{\mathbf{n}} u$ est donné par la condition aux limites $NLABC_{2,T}^2$ ou $NLABC_{2,T}^3$. Or, la condition $NLABC_{2,T}^2$ coïncide exactement avec la condition $ABC_{2,T}^2$ utilisée dans le cas d'un potentiel. Il suffit donc de considérer le résultat du théorème 4.42 pour $M = 2$. Considérons maintenant la condition d'ordre trois $NLABC_{2,T}^3$. Dans ce cas, on écrit le membre de droite de (5.13) sous la forme

$$\begin{aligned} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} i \bar{u} \partial_{\mathbf{n}} u \, d\Sigma dt &= \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \left(-ie^{-i\pi/4} \bar{u} \partial_t^{1/2} u + ie^{i\pi/4} \bar{u} \frac{\Delta_\Sigma}{2} I_t^{1/2} u \right) d\Sigma dt - \frac{i}{2} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \kappa |u|^2 \, d\Sigma dt \\ &+ ie^{i\pi/4} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \frac{\kappa^2}{8} \bar{u} I_t^{1/2} u \, d\Sigma dt \\ &+ ie^{i\pi/4} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \frac{\text{sg}(V)}{2} \sqrt{|V|} \bar{u} I_t^{1/2} \left(\sqrt{|V|} u \right) d\Sigma dt \\ &+ ie^{i\pi/4} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} \frac{\text{sg}(f(|u|^2))}{2} \sqrt{|f(|u|^2)|} \bar{u} I_t^{1/2} \left(\sqrt{|f(|u|^2)|} u \right) d\Sigma dt. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Les quatre premiers de ces cinq termes sont déjà traités dans la preuve du théorème 4.42. Quant au cinquième, il se traite de manière analogue à celui en V . En appliquant l'identité de Plancherel sur

l'intégrale en temps, et on en exploitant le fait que $\text{sg}(f(|u|^2))$ ne dépend pas du temps, on a

$$\begin{aligned} i e^{i\pi/4} \int_{\Sigma} \int_{\mathbb{R}} \frac{\text{sg}(f(|u|^2))}{2} \sqrt{|f(|u|^2)|} \bar{u} I_t^{1/2} \left(\sqrt{|f(|u|^2)|} u \right) dt d\Sigma \\ = i e^{i\pi/4} \int_{\Sigma} \frac{\text{sg}(f(|u|^2))}{2} \int_{\mathbb{R}} \left| \mathcal{F}_t \left(\sqrt{|f(|u|^2)|} u \right) (s, \tau) \right|^2 \frac{1}{\sqrt{i\tau}} d\tau d\Sigma. \end{aligned}$$

Comme $\frac{1}{\sqrt{i\tau}}$ varie dans $e^{-i\pi/4}\mathbb{R}^+ \cup e^{i\pi/4}\mathbb{R}^+$, on en déduit que si f est une fonction positive, alors le terme ci-dessus est de partie réelle négative, ce qui conclut la preuve pour la condition NLABC_{2,T}³. \square

En ce qui concerne les conditions issues du changement de jauge, on a un résultat analogue pour la condition d'ordre deux.

Théorème 5.49. *Soit $u_0 \in L^2(\Omega)$ une donnée initiale à support compact dans Ω . Soit $V \in C^\infty(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^+, \mathbb{R})$ un potentiel à valeurs réelles et f une fonction réelle. On note $u \in C([0; T], H^1(\Omega))$ une solution du problème avec donnée initiale et muni de la condition aux limites NLABC_{1,T}²*

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + V u + f(|u|^2)u = 0, & \text{dans } \Omega_T, \\ \partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\pi/4} e^{i\mathcal{V}} \partial_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u) + \frac{\kappa}{2} u = 0, & \text{sur } \Sigma_T, \\ u(x, y, 0) = u_0(x, y), & \text{sur } \Omega, \end{cases} \quad (5.15)$$

où la fonction de phase \mathcal{V} est définie par

$$\mathcal{V}(x, y, t, u) = \int_0^t V(x, y, \sigma) d\sigma + \int_0^t f(|u|^2)(x, y, \sigma) d\sigma.$$

Alors, u satisfait l'inégalité d'énergie suivante :

$$\forall t > 0, \quad \|u(t)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u_0\|_{L^2(\Omega)}. \quad (5.16)$$

Démonstration. On considère l'identité (5.13) dans laquelle on introduit la condition d'ordre deux NLABC_{1,T}². Il faut donc étudier la partie réelle du terme

$$-i e^{-i\pi/4} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} e^{i\mathcal{V}} \bar{u} \partial_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u) d\Sigma dt,$$

que l'on réécrit en appliquant le théorème de Plancherel pour la transformée de Fourier par rapport au couple (s, t) de covariable (ξ, τ)

$$\begin{aligned} -i e^{-i\pi/4} \int_{\Sigma \times \mathbb{R}} e^{i\mathcal{V}} \bar{u} \partial_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u) d\Sigma dt &= -i e^{-i\pi/4} \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} \overline{\mathcal{F}(e^{-i\mathcal{V}} u)(\xi, \tau)} \mathcal{F} \left(\partial_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u) \right) (\xi, \tau) d\xi d\tau \\ &= -i e^{-i\pi/4} \int_{\mathbb{R} \times \mathbb{R}} \sqrt{i\tau} \left| \mathcal{F}(e^{-i\mathcal{V}} u)(\xi, \tau) \right|^2 d\xi d\tau. \end{aligned}$$

En fait, seule l'expression de \mathcal{V} (qui dépend maintenant de u) change par rapport au cas d'un potentiel seul. On conclut donc de la même manière que ce terme varie dans $i\mathbb{R}^- \cup \mathbb{R}^-$, et est donc de partie réelle négative. Ceci achève la preuve pour la condition NLABC_{1,T}². \square

5.3 Semi-discrétisation des conditions aux limites et implémentation du point fixe

5.3.1 Formulation variationnelle et algorithme de point fixe

Comme pour la dimension une, l'équation intérieure est discrétisée selon le schéma de Duràn-Sanz-Serna

$$i \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \Delta v^{n+1} + W^{n+1} v^{n+1} + f(v^{n+1}) v^{n+1} = 0,$$

avec la notation maintenant usuelle $v^{n+1} = u^{n+1/2} = \frac{u^{n+1} + u^n}{2}$. On écrit alors la formulation variationnelle pour une fonction-test $g \in H^1(\Omega)$

$$\begin{aligned} \frac{2i}{\Delta t} \int_{\Omega} v^{n+1} g \, d\Omega + \int_{\Sigma} \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} g \, d\Sigma - \int_{\Omega} \nabla v^{n+1} \nabla g \, d\Omega \\ + \int_{\Omega} W^{n+1} v^{n+1} g \, d\Omega + \int_{\Omega} f(v^{n+1}) v^{n+1} g \, d\Omega = \frac{2i}{\Delta t} \int_{\Omega} u^n g \, d\Omega. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Matriciellement, la contribution de la condition aux limites conduit à un terme de bord $-\mathbb{B}^{n+1} \mathbf{v}^{n+1}$ et à un second membre $-\mathbf{b}^n$ ne faisant plus intervenir \mathbf{v}^{n+1} . On obtient un système matriciel de la forme

$$\frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} \mathbf{v}^{n+1} - \mathbb{B}^{n+1} \mathbf{v}^{n+1} - \mathbb{S} \mathbf{v}^{n+1} + \mathbb{M}_{W^{n+1}} \mathbf{v}^{n+1} + \mathbb{M}_{f(\mathbf{v}^{n+1})} \mathbf{v}^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} \mathbf{u}^n + \mathbf{b}^n. \quad (5.18)$$

Or, cette équation est non linéaire en \mathbf{v}^{n+1} , d'une part *via* le terme $\mathbb{M}_{f(\mathbf{v}^{n+1})}$, mais également *via* les termes de la matrice \mathbb{B}^{n+1} dont certains dépendent de \mathbf{v}^{n+1} . Afin de d'écrire l'algorithme de point fixe, il convient donc de distinguer dans la discrétisation de la condition aux limites les termes linéaires en v^{n+1} des termes non linéaires. On écrit la condition discrétisée sous la forme

$$\partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} = -B_L^{n+1} v^{n+1} - B_{NL}^{n+1}(v^{n+1}) \quad (5.19)$$

où B_L^{n+1} est un coefficient, et B_{NL}^{n+1} une fonction de v^{n+1} , ne contenant que des termes non linéaires en v^{n+1} . Le système (5.18) se réécrit alors

$$\frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} \mathbf{v}^{n+1} - \mathbb{B}_L^{n+1} \mathbf{v}^{n+1} - \mathbb{S} \mathbf{v}^{n+1} + \mathbb{M}_{W^{n+1}} \mathbf{v}^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} \mathbf{u}^n - \mathbb{M}_{f(\mathbf{v}^{n+1})} \mathbf{v}^{n+1} + \mathbf{b}^n + \mathbb{B}_{NL}^{n+1}(\mathbf{v}^{n+1}). \quad (5.20)$$

Cette fois, le membre de gauche de (5.20) est linéaire en \mathbf{v}^{n+1} . La détermination de \mathbf{v}^{n+1} s'effectuera donc en résolvant successivement les équations

$$\left(\frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} - \mathbb{B}_L^{n+1} - \mathbb{S} + \mathbb{M}_{W^{n+1}} \right) \boldsymbol{\zeta}^{s+1} = \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} \mathbf{u}^n - \mathbb{M}_{f(\boldsymbol{\zeta}^s)} \boldsymbol{\zeta}^s + \mathbf{b}^n + \mathbb{B}_{NL}^{n+1}(\boldsymbol{\zeta}^s) \quad (5.21)$$

pour $s \geq 0$, où $\boldsymbol{\zeta}$ est initialisé par $\boldsymbol{\zeta}^0 = \mathbf{v}^n$, et à convergence du point fixe, on obtient $\mathbf{v}^{n+1} = \boldsymbol{\zeta}^{s+1}$. La règle d'obtention de (5.21) est de remplacer \mathbf{v}^{n+1} par $\boldsymbol{\zeta}^{s+1}$ là où \mathbf{v}^{n+1} intervient de manière linéaire, et par $\boldsymbol{\zeta}^s$ dans les expressions non linéaires en \mathbf{v}^{n+1} .

La discrétisation des différentes conditions aux limites doit donc distinguer ostensiblement les termes linéaires en v^{n+1} des termes non linéaires.

5.3.2 Traitement numérique des conditions aux limites $\text{NLABC}_{1,T}^M$ et $\text{NLABC}_{2,T}^M$

Dans cette section, nous donnons la discrétisation en temps des conditions aux limites issues de l'approche Taylor, et précisons les détails de l'implémentation numérique dans l'environnement éléments finis. Il s'agit toujours d'éléments finis linéaires \mathbb{P}_1 .

Commençons par discrétiser la condition $\text{NLABC}_{2,T}^4$ obtenue par la méthode directe. De manière analogue au cas du potentiel, mais sans symétriser le dernier terme en $\partial_{\mathbf{n}}\mathcal{V}$, nous avons

$$\begin{aligned} \partial_{\mathbf{n}}v^{n+1} + e^{-i\pi/4}\sqrt{\frac{2}{\Delta t}}b^{n+1} + \frac{\kappa}{2}v^{n+1} - e^{i\pi/4}\sqrt{\frac{\Delta t}{2}}\left(\frac{\kappa^2}{2}a_0^{n+1} + \frac{1}{2}a_2^{n+1}\right. \\ \left. + \frac{1}{2}\text{sg}(W^{n+1})\sqrt{|W^{n+1}|}a_V^{n+1} + \frac{1}{2}\text{sg}(f(v^{n+1}))\sqrt{|f(v^{n+1})|}a_f^{n+1}\right) \\ \left. + i\frac{\Delta t}{2}\left(\frac{1}{2}\partial_s(\kappa d_1^{n+1}) + \frac{\kappa^3 + \Delta_\Sigma\kappa}{8}d_0^{n+1} - \frac{\partial_{\mathbf{n}}W^{n+1}}{4}d_0^{n+1} - \frac{\partial_{\mathbf{n}}f(v^{n+1})}{4}d_0^{n+1}\right) = 0, \end{aligned} \quad (5.22)$$

où les coefficients b^{n+1} , a_V^{n+1} , a_γ^{n+1} pour $\gamma \in \{0, 1, 2\}$ et d_γ^{n+1} pour $\gamma = \{0, 1\}$ sont définis par (4.134), (4.136), (4.135) et (4.137), et où on a posé

$$a_f^{n+1} = \alpha_{n+1} \star \left(\sqrt{|f(v^{n+1})|}v^{n+1}\right). \quad (5.23)$$

Pour obtenir la formulation éléments finis associée, on explicite dans (5.22) les convolutions discrètes, et on isole les termes en v^{n+1} en utilisant les notations $\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mu_4$ introduites en (4.171)

$$\begin{aligned} -\partial_{\mathbf{n}}v^{n+1} = & \left(\mu_1 + \mu_2\kappa + \mu_3\left(\frac{\kappa^2}{2} + \frac{1}{2}\partial_s^2 + \frac{W^{n+1}}{2} + \frac{f(v^{n+1})}{2}\right)\right. \\ & \left. + \mu_4\left(\frac{1}{2}\partial_s(\kappa\partial_s) + \frac{\kappa^3 + \Delta_\Sigma\kappa}{8} - \frac{\partial_{\mathbf{n}}W^{n+1}}{4} - \frac{\partial_{\mathbf{n}}f(v^{n+1})}{4}\right)\right)v^{n+1} \\ & + \mu_1\sum_{k=0}^n\beta_{n+1-k}v^k + \mu_3\sum_{k=0}^n\alpha_{n+1-k}\left(\frac{\kappa^2}{2} + \frac{1}{2}\partial_s^2\right)v^k \\ & + \mu_3\sum_{k=0}^n\alpha_{n+1-k}\text{sg}(W^{n+1})\sqrt{|W^{n+1}|}\left(\sqrt{|W^k|}v^k\right) \\ & + \mu_3\sum_{k=0}^n\alpha_{n+1-k}\text{sg}(f(v^{n+1}))\sqrt{|f(v^{n+1})|}\left(\sqrt{|f(v^k)|}v^k\right) \\ & + \mu_4\sum_{k=0}^n\delta_{n+1-k}\left(\frac{1}{2}\partial_s(\kappa\partial_s) + \frac{\kappa^3 + \Delta_\Sigma\kappa}{8} - \frac{\partial_{\mathbf{n}}W^{n+1}}{4} - \frac{\partial_{\mathbf{n}}f(v^{n+1})}{4}\right)v^k. \end{aligned} \quad (5.24)$$

Le terme éléments finis $\int_{\Sigma}\partial_{\mathbf{n}}v^{n+1}g\,d\Sigma$ est donc associé matriciellement à $-\mathbb{B}^{n+1}\mathbf{v}^{n+1} - \mathbf{b}^n$, où le terme de bord s'écrit

$$\begin{aligned} \mathbb{B}^{n+1}\mathbf{v}^{n+1} = & \mu_1\mathbb{M}^\Sigma\mathbf{v}^{n+1} + \mu_2\mathbb{M}_\kappa^\Sigma\mathbf{v}^{n+1} \\ & + \mu_3\left(\frac{1}{2}\mathbb{M}_{\kappa^2}^\Sigma\mathbf{v}^{n+1} - \frac{1}{2}\mathbb{S}^\Sigma\mathbf{v}^{n+1} + \frac{1}{2}\mathbb{M}_{W^{n+1}}^\Sigma\mathbf{v}^{n+1} + \frac{1}{2}\mathbb{M}_{f(v^{n+1})}^\Sigma\mathbf{v}^{n+1}\right) \\ & + \mu_4\left(-\frac{1}{2}\mathbb{S}_\kappa^\Sigma + \frac{1}{8}\mathbb{M}_{\kappa^3 + \Delta_\Sigma\kappa}^\Sigma\mathbf{v}^{n+1} - \frac{1}{4}\mathbb{M}_{\partial_{\mathbf{n}}W^{n+1}}^\Sigma\mathbf{v}^{n+1} - \frac{1}{4}\mathbb{M}_{\partial_{\mathbf{n}}f(v^{n+1})}^\Sigma\mathbf{v}^{n+1}\right), \end{aligned}$$

et où les autres termes se mettent sous la forme

$$\begin{aligned} \mathbf{b}^n = & \mu_1 \sum_{k=1}^n \beta_{n+1-k} \mathbb{M}^\Sigma \mathbf{v}^k + \mu_3 \sum_{k=1}^n \alpha_{n+1-k} \left(\frac{1}{2} \mathbb{M}_{\kappa^2}^\Sigma - \frac{1}{2} \mathbb{S}^\Sigma \right) \mathbf{v}^k \\ & + \mu_3 \sum_{k=1}^n \alpha_{n+1-k} \left(\frac{1}{2} \mathbb{M}_{\text{sg}(W^{n+1})}^\Sigma \sqrt{|W^{n+1}|} \sqrt{|W^k|} + \frac{1}{2} \mathbb{M}_{\text{sg}(f(\mathbf{v}^{n+1}))}^\Sigma \sqrt{|f(\mathbf{v}^{n+1})|} \sqrt{|f(\mathbf{v}^k)|} \right) \mathbf{v}^k \\ & + \mu_4 \sum_{k=1}^n \delta_{n+1-k} \left(-\frac{1}{2} \mathbb{S}_\kappa^\Sigma + \frac{1}{8} \mathbb{M}_{\kappa^3 + \Delta_\Sigma}^\Sigma - \frac{1}{4} \mathbb{M}_{\partial_n W^{n+1}}^\Sigma - \frac{1}{4} \mathbb{M}_{\partial_n f(\mathbf{v}^{n+1})}^\Sigma \right) \mathbf{v}^k. \end{aligned} \quad (5.25)$$

En vue de l'application du point fixe, le terme portant sur \mathbf{v}^{n+1} se décompose encore en termes linéaires et non linéaires en \mathbf{v}^{n+1} sous la forme (5.19), où la matrice \mathbb{B}_L^{n+1} est donnée par

$$\mathbb{B}_L^{n+1} = \mu_1 \mathbb{M}^\Sigma + \mu_2 \mathbb{M}_\kappa^\Sigma + \mu_3 \left(\frac{1}{2} \mathbb{M}_{\kappa^2}^\Sigma - \frac{1}{2} \mathbb{S}^\Sigma + \frac{1}{2} \mathbb{M}_{W^{n+1}}^\Sigma \right) + \mu_4 \left(-\frac{1}{2} \mathbb{S}_\kappa^\Sigma + \frac{1}{8} \mathbb{M}_{\kappa^3 + \Delta_\Sigma}^\Sigma - \frac{1}{4} \mathbb{M}_{\partial_n W^{n+1}}^\Sigma \right). \quad (5.26)$$

Finalement, à chaque itération du point fixe, on résout le système suivant

$$\left(\frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} - \mathbb{B}_L^{n+1} - \mathbb{S} + \mathbb{M}_{W^{n+1}} \right) \boldsymbol{\zeta}^{s+1} = \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} \mathbf{u}^n - \mathbb{M}_{f(\boldsymbol{\zeta}^s)} \boldsymbol{\zeta}^s + \mathbf{b}^n + \frac{1}{2} \mathbb{M}_{f(\boldsymbol{\zeta}^s)}^\Sigma \boldsymbol{\zeta}^s - \frac{1}{4} \mathbb{M}_{\partial_n f(\boldsymbol{\zeta}^s)}^\Sigma \boldsymbol{\zeta}^s, \quad (5.27)$$

où $\boldsymbol{\zeta}^s$ est initialisé par $\boldsymbol{\zeta}^0 = v^n$, la matrice \mathbb{B}_L^{n+1} est donnée par (5.26), et \mathbf{b}^n , qui ne dépend que des v^0, \dots, v^n , par (5.25). A convergence, on peut alors définir $v^{n+1} = \boldsymbol{\zeta}^{s+1}$.

Remarque 5.2. En pratique, on ne traitera pas numériquement la condition d'ordre quatre. En effet, la condition d'ordre quatre fait intervenir le terme $\partial_n f(|u|^2)$, dont l'évaluation est problématique puisque u n'est connu que sur les nœuds du maillage et non de manière analytique (voir aussi paragraphe 4.9.2). Compte tenu des faibles améliorations constatées, dans le cas d'un potentiel, entre les conditions d'ordre trois et d'ordre quatre, cette restriction ne devrait pas être trop pénalisante.

On peut à présent étudier le cas de la condition NLABC $_{1,T}^2$ découlant du changement de jauge. Sa discrétisation est donnée par

$$\partial_n v^{n+1} + e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} e^{i\mathscr{W}^{n+1}} e^{i\mathbb{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^{n+1} \beta_{n+1-k} e^{-i\mathscr{W}^k} e^{-i\mathbb{W}^k} v^k + \frac{\kappa}{2} v^{n+1} = 0, \quad (5.28)$$

où interviennent une fonction de phase \mathscr{W}^{n+1} associée au potentiel V

$$\mathscr{W}^{n+1} = \int_0^{t_{n+1/2}} V(x, y, \sigma) d\sigma, \quad (5.29)$$

et une fonction de phase \mathbb{W}^{n+1} associée à la non linéarité $f(u)$

$$\mathbb{W}^{n+1} = \int_0^{t_{n+1/2}} f(v^{n+1})(x, y, \sigma) d\sigma. \quad (5.30)$$

En procédant comme dans la section 2.3, on a pour $p \geq 1$

$$\mathbb{E}^p = \exp(i\mathbb{W}^p) = \exp\left(i \frac{\Delta t}{2} f(v^p)\right) \widetilde{\mathbb{E}^{p-1}},$$

où $\widetilde{\mathbb{E}^{p-1}}$ ne dépend plus de v^{n+1}

$$\widetilde{\mathbb{E}^{p-1}} = \exp\left(i\Delta t \sum_{l=1}^{p-1} f(v^l)\right) \quad \text{pour } p \geq 1,$$

et $\widetilde{E^0} = 1$. En mettant en évidence les termes en v^{n+1} , on obtient

$$\partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} = \mu_1 v^{n+1} + \mu_2 \kappa v^{n+1} + \mu_1 e^{i\mathcal{W}^{n+1}} e^{i\frac{\Delta t}{2} f(v^{n+1})} \widetilde{\mathbb{E}^n} \sum_{k=1}^n \beta_{n+1-k} e^{-i\mathcal{W}^k} \overline{\mathbb{E}^k} v^k.$$

L'équation à résoudre pour itérer le point fixe est donc

$$\partial_{\mathbf{n}} \zeta^{s+1} = \mu_1 \zeta^{s+1} + \mu_2 \kappa \zeta^{s+1} + \mu_1 e^{i\mathcal{W}^{n+1}} e^{i\frac{\Delta t}{2} f(\zeta^s)} \widetilde{\mathbb{E}^n} \sum_{k=1}^n \beta_{n+1-k} e^{-i\mathcal{W}^k} \overline{\mathbb{E}^k} v^k,$$

où ζ^s est initialisée par $\zeta^0 = v^n$. La formulation matricielle de l'intégrale de bord $\int_{\Sigma} \partial_{\mathbf{n}} \zeta^{s+1} g d\Sigma$ est alors

$$(\mu_1 \mathbb{M}^{\Sigma} + \mu_2 \mathbb{M}_{\kappa}^{\Sigma}) \zeta^{s+1} + \mu_1 \sum_{k=1}^n \beta_{n+1-k} \mathbb{M}_{e^{i(\mathcal{W}^{n+1}-\mathcal{W}^k)} e^{i\frac{\Delta t}{2} f(\zeta^s)} \widetilde{\mathbb{E}^n} \overline{\mathbb{E}^k}}^{\Sigma} \mathbf{v}^k. \quad (5.31)$$

On voit que le second membre \mathbf{b}^n est une convolution faisant intervenir des matrices de masses généralisées associées notamment aux fonctions $e^{i(\mathcal{W}^{n+1}-\mathcal{W}^k)}$. Si la partie linéaire V du potentiel est radiale, l'expression (5.31) se simplifie partiellement :

$$(\mu_1 \mathbb{M}^{\Sigma} + \mu_2 \mathbb{M}_{\kappa}^{\Sigma}) \zeta^{s+1} + \mu_1 e^{i\mathcal{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^n \beta_{n+1-k} \mathbb{M}_{e^{i\frac{\Delta t}{2} f(\zeta^s)} \widetilde{\mathbb{E}^n} \overline{\mathbb{E}^k}}^{\Sigma} \left(e^{-i\mathcal{W}^k} \mathbf{v}^k \right). \quad (5.32)$$

Globalement, pour la condition NLABC $_{1,T}^2$, l'équation de point fixe à résoudre se présente sous la forme

$$\left(\frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} - \mathbb{B}^{\Sigma} - \mathbb{S} + \mathbb{M}_{W^{n+1}} \right) \zeta^{s+1} = \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} \mathbf{u}^n - \mathbb{M}_{f(\zeta^s)} \zeta^s + \mathbf{b}^n, \quad (5.33)$$

avec pour matrice des termes de bord

$$\mathbb{B}^{\Sigma} = \mu_1 \mathbb{M}^{\Sigma} + \mu_2 \mathbb{M}_{\kappa}^{\Sigma}, \quad (5.34)$$

et pour second membre associé aux temps passés

$$\mathbf{b}^n = \mu_1 \sum_{k=1}^n \beta_{n+1-k} \mathbb{M}_{e^{i(\mathcal{W}^{n+1}-\mathcal{W}^k)} e^{i\frac{\Delta t}{2} f(\zeta^s)} \widetilde{\mathbb{E}^n} \overline{\mathbb{E}^k}}^{\Sigma} \mathbf{v}^k. \quad (5.35)$$

Comme dans le cas d'un potentiel ou d'un domaine non radial au paragraphe 4.9.2, on observe que l'utilisation de cette condition aux limites conduit à une grande complexité algorithmique, du fait des n matrices de masses généralisées à réassembler à chaque itération en temps t_n . Sur l'ensemble d'une résolution comportant N itérations en temps, l'assemblage des termes \mathbf{b}^n successifs nécessite à lui seul l'assemblage de $N(N+1)/2$ matrices de masses généralisées. On s'attend donc logiquement à constater un surcoût de temps de calcul lors des simulations numériques associées à NLABC $_{1,T}^2$, comparées aux simulations liées aux conditions NLABC $_{2,T}^M$. De plus, ce surcoût sera d'autant plus pénalisant que Δt sera petit.

5.3.3 Stabilité du problème semi-discret pour $\text{NLABC}_{1,T}^2$ et $\text{NLABC}_{2,T}^M$

Pour les conditions de l'approche Taylor, nous pouvons nous intéresser à ce que deviennent les théorèmes 4.46 et 4.47 en présence d'une non linéarité, sous les hypothèses semi-discrètes équivalentes aux hypothèses formulées dans le cas continu.

Théorème 5.50. *Soit $(u^n)_{0 \leq n \leq N}$ une solution du système*

$$\begin{cases} i \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \Delta v^{n+1} + W^{n+1} v^{n+1} + f(v^{n+1}) v^{n+1} = 0, & \text{dans } \Omega, \\ \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} + \Lambda_{2,T}^{M,n+1} v^{n+1} = 0, & \text{sur } \Sigma, \quad \text{pour } M \in \{2, 3\}, \\ u^0 = u_0, & \text{dans } \Omega, \end{cases} \quad (5.36)$$

où les opérateurs $\Lambda_{2,T}^{2,n+1}$ et $\Lambda_{2,T}^{3,n+1}$ sont définis par

$$\Lambda_{2,T}^{2,n+1} v^{n+1} = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} b^{n+1} + \frac{\kappa}{2} v^{n+1},$$

et

$$\begin{aligned} \Lambda_{2,T}^{3,n+1} v^{n+1} = & \Lambda_{2,T}^{2,n+1} v^{n+1} - e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{\Delta t}{2}} \left(\frac{\kappa^2}{2} a_0^{n+1} + \frac{1}{2} a_2^{n+1} \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \text{sg}(W^{n+1}) \sqrt{|W^{n+1}|} a_V^{n+1} + \frac{1}{2} \text{sg}(f(v^{n+1})) \sqrt{|f(v^{n+1})|} a_f^{n+1} \right). \end{aligned}$$

Pour $M = 2$, on a l'inégalité d'énergie suivante :

$$\forall n \in \{0, \dots, N\}, \quad \|u^n\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u^0\|_{L^2(\Omega)}. \quad (5.37)$$

De plus, si V est un potentiel positif sur Σ indépendamment du temps, et si f est une fonction positive, alors l'inégalité (5.37) reste vérifiée pour $M = 3$.

Démonstration. Le début de la preuve est le même que celui de la preuve du théorème 4.46. Comme f est une fonction réelle, on aboutit à l'identité (4.153), dans laquelle on remplace $\partial_{\mathbf{n}} v^{n+1}$ en utilisant la condition aux limites retenue. La condition d'ordre deux est exactement la même que la condition d'ordre deux dans le cas potentiel, la preuve pour $M = 2$ se déduit donc directement du théorème 4.46. Quant à la condition aux limites d'ordre trois $\text{NLABC}_{2,T}^3$, elle conduit à l'étude des mêmes termes que la preuve associée à la condition $\text{ABC}_{2,T}^3$, enrichie du terme

$$ie^{i\pi/4} \int_{\Sigma} \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{P-1} a_{f(v^{n+1})}^{n+1} \sqrt{f(v^{n+1})} \overline{v^{n+1}} d\Sigma,$$

qui se traite exactement de la même manière que le terme similaire associé au potentiel W^{n+1} , et faisant intervenir les coefficients a_V^{n+1} . Ceci achève la preuve pour les conditions $\text{NLABC}_{2,T}^2$ et $\text{NLABC}_{2,T}^3$. \square

Etudions maintenant la transposition du théorème 4.47 à la condition $\text{NLABC}_{1,T}^2$ avec changement de jauge.

Théorème 5.51. Soit $(u^n)_{0 \leq n \leq N}$ une solution du système muni de la condition aux limites $NLABC_{1,T}^2$

$$\begin{cases} i \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \Delta v^{n+1} + W^{n+1} v^{n+1} + f(v^{n+1}) v^{n+1} = 0, & \text{dans } \Omega, \\ \partial_n v^{n+1} + e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} e^{i\mathbb{W}^{n+1}} \widetilde{b^{n+1}} + \frac{\kappa}{2} v^{n+1} = 0, & \text{sur } \Sigma, \\ u^0 = u_0, & \text{dans } \Omega, \end{cases} \quad (5.38)$$

où les fonctions de phase W^{n+1} et \mathbb{W}^{n+1} sont définies par (5.29) et (5.30). On a l'inégalité d'énergie suivante :

$$\forall n \in \{0, \dots, N\}, \quad \|u^n\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u^0\|_{L^2(\Omega)}. \quad (5.39)$$

Démonstration. Encore une fois, il suffit de reprendre la preuve du théorème 4.46 jusque (4.153). Il reste alors à étudier le terme

$$- e^{i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta}} \int_{\Sigma} \sum_{n=0}^{P-1} \widetilde{b^{n+1}} e^{i\mathcal{W}^{n+1}} e^{i\mathbb{W}^{n+1}} \overline{v^{n+1}} d\Sigma, \quad (5.40)$$

ce qui se fait exactement de la même manière que dans le cas du potentiel seul, en introduisant une extension infinie $(w_n^P)_{n \in \mathbb{N}}$ de la suite finie $(e^{-i\mathcal{W}^{n+1}} e^{-i\mathbb{W}^{n+1}} v^{n+1})_{0 \leq n \leq P-1}$, définie par

$$w_n^P = \begin{cases} e^{-i\mathcal{W}^{n+1}} e^{-i\mathbb{W}^{n+1}} v^{n+1}, & \text{si } n \leq P, \\ 0, & \text{si } n \geq P+1. \end{cases}$$

On obtient alors par les mêmes techniques que (5.40) est de partie réelle négative, ce qui conclut la preuve. \square

5.3.4 Traitement numérique de la condition aux limites $NLABC_{2,P}^2$

La condition aux limites $NLABC_{2,P}^2$ pour l'approche Padé est constituée des trois équations (5.9), (5.7) et (5.8). La discrétisation de ce système est donnée par :

$$\begin{cases} \partial_n v^{n+1} - i \left(\sum_{k=0}^m a_k^m \right) v^{n+1} + \frac{\kappa}{2} v^{n+1} + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k^{n+1/2} - \frac{\kappa}{2} \psi^{n+1/2} = 0, \\ \left(\frac{2i}{\Delta t} + \Delta_{\Sigma} + W^{n+1} + f(v^{n+1}) + d_k^m \right) \varphi_k^{n+1/2} - v^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t} \varphi_k^n, \\ \left(\frac{2i}{\Delta t} + \Delta_{\Sigma} + W^{n+1} + f(v^{n+1}) \right) \psi^{n+1/2} - \Delta_{\Sigma} v^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t} \psi^n, \\ \varphi_k^0 = 0 \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m, \quad \psi^0 = 0, \quad \text{sur } \Sigma. \end{cases} \quad (5.41)$$

Pour résoudre ce système non linéaire, on applique un algorithme de point fixe, initialisé par

$$\begin{aligned} \zeta^0 &= v^n \\ \phi_k^0 &= \varphi_k^{n-1/2} \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m \\ \chi^0 &= \psi^{n-1/2}. \end{aligned}$$

Puis, on détermine à chaque itération les solutions ζ^{s+1} , ϕ_k^{s+1} et χ^{s+1} du système

$$\begin{cases} \partial_{\mathbf{n}} \zeta^{s+1} - i \left(\sum_{k=0}^m a_k^m \right) \zeta^{s+1} + \frac{\kappa}{2} \zeta^{s+1} + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \phi_k^{s+1} - \frac{\kappa}{2} \chi^{s+1} = 0, \\ \left(\frac{2i}{\Delta t} + \Delta_{\Sigma} + W^{n+1} + d_k^m \right) \phi_k^{s+1} - \zeta^{s+1} = \frac{2i}{\Delta t} \varphi_k^n - f(\zeta^s) \phi_k^s, \\ \left(\frac{2i}{\Delta t} + \Delta_{\Sigma} + W^{n+1} \right) \chi^{s+1} - \Delta_{\Sigma} \zeta^{s+1} = \frac{2i}{\Delta t} \psi^n - f(\zeta^s) \chi^s. \end{cases} \quad (5.42)$$

La règle est de remplacer v^{n+1} (resp. φ_k^{n+1} , ψ^{n+1}) par ζ^{s+1} (resp. ϕ_k^{s+1} , χ^{s+1}) dans les expressions linéaires en v^{n+1} , et par ζ^s (resp. ϕ_k^s , χ^s) dans les expressions non linéaires en v^{n+1} ou les expressions croisées du type $v^{n+1} \varphi_k^{n+1}$. On écrit ensuite la formulation éléments finis associée au système (5.42) en injectant la première équation dans la formulation variationnelle (5.17) de l'équation intérieure. On obtient matriciellement

$$\begin{aligned} \left(\frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} - \mathbb{S} + \mathbb{M}_{W^{n+1}} + i \left(\sum_{k=0}^m a_k^m \right) \mathbb{M}^{\Sigma} - \frac{1}{2} \mathbb{M}_{\kappa}^{\Sigma} \right) \zeta^{s+1} - i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \mathbb{M}^{\Sigma} \phi_k^{s+1} + \frac{1}{2} \mathbb{M}_{\kappa}^{\Sigma} \chi^{s+1} \\ = \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} \mathbf{u}^n - \mathbb{M}_{f(\zeta^s)} \zeta^s, \end{aligned} \quad (5.43)$$

et en écrivant la forme matricielle des équations de Schrödinger sur Σ impliquant les fonctions auxiliaires φ_k

$$- \mathbb{M}^{\Sigma} \zeta^{s+1} + \left(\frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^{\Sigma} - \mathbb{S}^{\Sigma} + \mathbb{M}_{W^{n+1}}^{\Sigma} + d_k^m \mathbb{M}^{\Sigma} \right) \phi_k^{s+1} = \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^{\Sigma} \varphi_k^n - \mathbb{M}_{f(\zeta^s)}^{\Sigma} \phi_k^s, \quad (5.44)$$

et ψ

$$\mathbb{S}^{\Sigma} \zeta^{s+1} + \left(\frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^{\Sigma} - \mathbb{S}^{\Sigma} + \mathbb{M}_{W^{n+1}}^{\Sigma} \right) \chi^{s+1} = \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^{\Sigma} \psi^n - \mathbb{M}_{f(\zeta^s)}^{\Sigma} \chi^s. \quad (5.45)$$

Matriciellement, le problème avec condition aux limites NLABC $_{2,P}^2$ conduit à la résolution du système linéaire

$$\begin{pmatrix} A^{\Omega} & A^{\square} & 0 & 0 & 0 \\ A^{\square} & A^{\Sigma} & B_1 & \dots & B_m & \tilde{B} \\ & C_1 & D_1 & & 0 & \\ 0 & \vdots & & \ddots & & 0 \\ & C_m & 0 & & D_m & \\ 0 & \tilde{C} & 0 & & & \tilde{D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \zeta^{\Omega, s+1} \\ \zeta^{\Sigma, s+1} \\ \phi_1^{s+1} \\ \vdots \\ \phi_m^{s+1} \\ \chi^{s+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{E}^{\Omega} \\ \mathbf{E}^{\Sigma} \\ \mathbf{F}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{F}_m \\ \tilde{\mathbf{F}} \end{pmatrix} \quad (5.46)$$

d'inconnues ζ^{s+1} , ϕ_k^{s+1} pour $1 \leq k \leq m$, et χ^{s+1} . Dans ce système, la matrice A et le vecteur \mathbf{E} ont été réordonnés comme en (4.180), conformément au réordonnement du maillage distinguant les

points intérieurs et des points extérieurs. Les différents éléments de ce système sont donnés par

$$\begin{aligned}
A &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} - \mathbb{S} + \mathbb{M}_{W^{n+1}} + i \left(\sum_{k=1}^m a_k^m \right) \mathbb{M}^\Sigma - \frac{1}{2} \mathbb{M}_\kappa^\Sigma, \\
B_k &= -i a_k^m d_k^m \mathbb{M}^\Sigma, & \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\
\tilde{B} &= \frac{1}{2} \mathbb{M}_\kappa^\Sigma, \\
C_k &= -\mathbb{M}^\Sigma, & \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\
\tilde{C} &= \mathbb{S}^\Sigma, \\
D_k &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma - \mathbb{S}^\Sigma + \mathbb{M}_{W^{n+1}}^\Sigma + d_k^m \mathbb{M}^\Sigma, & \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\
\tilde{D} &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma - \mathbb{S}^\Sigma + \mathbb{M}_{W^{n+1}}^\Sigma,
\end{aligned} \tag{5.47}$$

et

$$\begin{aligned}
\mathbf{E} &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} \mathbf{u}^n - \mathbb{M}_{f(\zeta^s)} \zeta^s, \\
\mathbf{F}_k &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma \varphi_k^n - \mathbb{M}_{f(\zeta^s)}^\Sigma \phi_k^s, & \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\
\tilde{\mathbf{F}} &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^\Sigma \psi^n - \mathbb{M}_{f(\zeta^s)}^\Sigma \chi^s.
\end{aligned} \tag{5.48}$$

En termes de dimensions du système, le surcoût induit par l'utilisation des $m+1$ fonctions auxiliaires est le même que dans le cas d'un potentiel linéaire.

5.4 Semi-discrétisation et implémentation de la méthode de relaxation

5.4.1 Principe de la méthode de relaxation

Au lieu de résoudre l'équation non linéaire en utilisant l'algorithme de point fixe, on peut utiliser la méthode de relaxation de Besse [29]. Appliquée à l'équation de Schrödinger avec non linéarité

$$i\partial_t u + \Delta u + f(u)u = 0, \quad \text{sur } \Omega_T, \tag{5.49}$$

la méthode de relaxation consiste à résoudre le système

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \Upsilon u = 0, & \text{sur } \Omega_T, \\ \Upsilon = f(u), & \text{sur } \Omega_T, \end{cases} \tag{5.50}$$

qui n'est qu'une reformulation évidente de (5.49). Le système (5.50) est ensuite discrétisé comme suit

$$\begin{cases} i \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} + \Delta u^{n+1/2} + \Upsilon^{n+1/2} u^{n+1/2} = 0, \\ \frac{\Upsilon^{n+3/2} + \Upsilon^{n+1/2}}{2} = f(u^{n+1}), \end{cases} \tag{5.51}$$

pour $0 \leq n \leq N$, et en posant $\Upsilon^{n+1/2} = \frac{\Upsilon^{n+1} + \Upsilon^n}{2}$, et en initialisant Υ par $\Upsilon^{-1/2} = f(u^0)$. La formulation variationnelle associée à (5.51) s'écrit, pour une fonction-test $g \in H^1(\Omega)$,

$$\frac{2i}{\Delta t} \int_{\Omega} v^{n+1} d\Omega - \int_{\Omega} \nabla v^{n+1} \nabla g d\Omega + \int_{\Sigma} \partial_n v^{n+1} g d\Sigma + \int_{\Omega} \Upsilon^{n+1/2} v^{n+1} g d\Omega = \frac{2i}{\Delta t} \int_{\Omega} u^n g d\Omega, \tag{5.52}$$

couplée à l'équation de mise à jour de Υ sur Ω

$$\Upsilon^{n+3/2} = 2f(v^{n+1}) - \Upsilon^{n+1/2}. \quad (5.53)$$

Dans l'intégrale de bord sur Σ , on remplace $\partial_{\mathbf{n}}v^{n+1}$ en utilisant la condition aux limites souhaitée, dans laquelle on tient compte de $\Upsilon = f(u)$.

L'avantage évident de cette méthode est qu'elle ne nécessite pas d'itérer comme le point fixe. L'autre avantage indéniable est qu'elle ne nécessite pas une refonte du code. Il suffit de partir des codes précédemment écrits pour les potentiels variables en espace et en temps pour l'équation en v^{n+1} . La résolution du système linéaire sur v^{n+1} est simplement alternée avec l'équation de mise à jour de Υ , qui elle, ne coûte rien. Une telle méthode est donc au moins deux à trois fois plus rapide que la méthode de point fixe, selon le nombre moyen d'itérations effectuées par l'algorithme de point fixe. Ce gain de temps est particulièrement crucial sur la condition $\text{NLABC}_{1,T}^2$, car on a vu que pour un potentiel non constant sur Σ la méthode est excessivement coûteuse, du fait des matrices d'éléments finis à rassembler tout au long de chaque convolution. Le fait d'utiliser la méthode de relaxation, et de ne pas avoir à itérer, rend cette condition aux limites un peu plus envisageable, même si elle reste clairement plus coûteuse que les autres.

La convergence du schéma (5.51) a été démontrée [29] pour une non linéarité de la forme $f(u) = \lambda|u|^{2\sigma}$, mais compte tenu de la complexité et de la pénibilité de la preuve, on n'envisage pas ici d'étudier la stabilité du schéma semi-discret incorporant les conditions aux limites artificielles. Il n'y a cependant aucun obstacle *a priori* à cette étude, qui pourra faire l'objet d'un futur travail.

Un autre intérêt de la méthode de relaxation, également prouvé dans [29], est que pour la non linéarité cubique $f(u) = q|u|^2$, la méthode conserve deux quantités théoriques essentielles que sont la densité $\int_{\mathbb{R}^2} |u|^2 dx$ et l'énergie $\int_{\mathbb{R}^2} (|\nabla u|^2 + \frac{q}{2}|u|^4) dx$. Le fait que ces quantités physiques soient préservées est un atout important.

Cette méthode comporte néanmoins un inconvénient, tout du moins théorique. La non linéarité présentée dans [29], $f(u) = \lambda|u|^{2\sigma}$ avec $\lambda \in \mathbb{R}^*$, correspond à un cas très général. Dans ce cas, on résout le système

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \lambda \Upsilon u = 0, & \text{sur } \Omega_T, \\ \Upsilon = |u|^{2\sigma}, & \text{sur } \Omega_T. \end{cases}$$

D'après sa définition, on voit bien que Υ est censé être positif. Le point négatif de la méthode de relaxation est que, jusqu'ici, il n'a pas encore été prouvé qu'avec le schéma de type (5.51), on préservait la propriété

$$\Upsilon^{n+1/2} \geq 0 \quad \text{pour } n \geq 0.$$

Notons toutefois qu'aucun exemple n'a encore été trouvé dans lequel Υ devient effectivement négatif.

5.4.2 Application de la méthode de relaxation à la condition $\text{NLABC}_{2,P}^2$

La condition aux limites $\text{NLABC}_{2,P}^2$ s'écrit

$$\partial_{\mathbf{n}} u - i\sqrt{i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + f(u)} + \frac{\kappa}{2}u - \frac{\kappa}{2}(i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + f(u))^{-1} \Delta_{\Sigma} u = 0, \quad \text{sur } \Sigma.$$

La méthode de relaxation consiste alors à résoudre le système

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \Upsilon u = 0, & \text{sur } \Omega_T, \\ \partial_{\mathbf{n}} u - i\sqrt{i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + \Upsilon} + \frac{\kappa}{2}u - \frac{\kappa}{2}(i\partial_t + \Delta_{\Sigma} + \Upsilon)^{-1} \Delta_{\Sigma} u = 0, & \text{sur } \Sigma, \\ \Upsilon = f(u), & \text{sur } \Omega_T. \end{cases} \quad (5.54)$$

Comme pour le traitement classique du problème, on introduit les fonctions auxiliaires $(\varphi_k)_{1 \leq k \leq m}$ et ψ , puis on discrétise l'ensemble pour obtenir

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{2i}{\Delta t} v^{n+1} + \Delta v^{n+1} + \Upsilon^{n+1/2} v^{n+1} = 0, \quad \text{sur } \Omega, \\ \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} - i \left(\sum_{k=0}^m a_k^m \right) v^{n+1} + \frac{\kappa}{2} v^{n+1} + i \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k^{n+1/2} - \frac{\kappa}{2} \psi^{n+1/2} = 0, \quad \text{sur } \Sigma, \\ \left(\frac{2i}{\Delta t} + \Delta_{\Sigma} + \Upsilon^{n+1/2} + d_k^m \right) \varphi_k^{n+1/2} - v^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t} \varphi_k^n, \quad \text{sur } \Sigma, \\ \left(\frac{2i}{\Delta t} + \Delta_{\Sigma} + \Upsilon^{n+1/2} \right) \psi^{n+1/2} - \Delta_{\Sigma} v^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t} \psi^n, \quad \text{sur } \Sigma, \\ \varphi_k^0 = 0 \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m, \quad \psi^0 = 0, \quad \text{sur } \Sigma, \\ \Upsilon^{n+3/2} = 2f(v^{n+1}) - \Upsilon^{n+1/2}, \quad \text{sur } \Omega. \end{array} \right. \quad (5.55)$$

L'écriture matricielle de la formulation éléments finis associée est alors

$$\begin{pmatrix} A^{\Omega} & A^{\square} & 0 & 0 \\ A^{\square} & A^{\Sigma} & B_1 & \dots & B_m & \tilde{B} \\ & C_1 & D_1 & & 0 & \\ 0 & \vdots & & \ddots & 0 & \\ & C_m & 0 & & D_m & \\ 0 & \tilde{C} & 0 & & \tilde{D} & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}^{\Omega, n+1} \\ \mathbf{v}^{\Sigma, n+1} \\ \varphi_1^{n+1/2} \\ \vdots \\ \varphi_m^{n+1/2} \\ \psi^{n+1/2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{E}^{\Omega} \\ \mathbf{E}^{\Sigma} \\ \mathbf{F}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{F}_m \\ \tilde{\mathbf{F}} \end{pmatrix} \quad (5.56)$$

où les différentes matrices sont données par

$$\begin{aligned} A &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} - \mathbb{S} + \mathbb{M}_{\Upsilon^{n+1/2}} + i \left(\sum_{k=1}^m a_k^m \right) \mathbb{M}^{\Sigma} - \frac{1}{2} \mathbb{M}_{\kappa}^{\Sigma}, \\ B_k &= -i a_k^m d_k^m \mathbb{M}^{\Sigma}, & \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ \tilde{B} &= \frac{1}{2} \mathbb{M}_{\kappa}^{\Sigma}, \\ C_k &= -\mathbb{M}^{\Sigma}, & \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ \tilde{C} &= \mathbb{S}^{\Sigma}, \\ D_k &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^{\Sigma} - \mathbb{S}^{\Sigma} + \mathbb{M}_{\Upsilon^{n+1/2}}^{\Sigma} + d_k^m \mathbb{M}^{\Sigma}, & \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ \tilde{D} &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^{\Sigma} - \mathbb{S}^{\Sigma} + \mathbb{M}_{\Upsilon^{n+1/2}}^{\Sigma}, \end{aligned} \quad (5.57)$$

et les vecteurs constituant le second membre par

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M} \mathbf{u}^n, \\ \mathbf{F}_k &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^{\Sigma} \varphi_k^n, \quad \text{pour } 1 \leq k \leq m, \\ \tilde{\mathbf{F}} &= \frac{2i}{\Delta t} \mathbb{M}^{\Sigma} \psi^n. \end{aligned} \quad (5.58)$$

Remarque 5.3. L'algorithme de relaxation s'applique en fait de manière particulièrement simple, puisqu'il suffit de considérer le code associé à un potentiel dépendant du temps $V(\mathbf{x}, t)$, et de remplacer W^{n+1} par $\Upsilon^{n+1/2}$, puis de mettre à jour Υ selon la règle (5.53).

Remarque 5.4. L'ajout d'une partie linéaire $V(\mathbf{x}, t)$ au potentiel non linéaire ne présente pas de difficulté. Il suffit pour cela de remplacer $\Upsilon^{n+1/2}$ par $W^{n+1} + \Upsilon^{n+1/2}$ dans les quatre premières équations de (5.55), où $W^{n+1} = V^{n+1/2}$.

5.4.3 Application de la méthode de relaxation à la condition NLABC $_{2,T}^3$

La condition aux limites d'ordre trois NLABC $_{2,T}^3$ s'écrit, en présence d'une non linéarité $f(u)$ où f est une fonction positive,

$$\partial_{\mathbf{n}}u = -e^{-i\pi/4}\partial_t^{1/2}u - \frac{\kappa}{2}u + e^{i\pi/4}\left(\frac{\kappa^2}{8} + \frac{\Delta_{\Sigma}}{2} + \frac{f(u)}{2}\right)I_t^{1/2}u, \quad \text{sur } \Sigma_T.$$

Remarquons que pour la méthode de relaxation, nous n'avons pas symétrisé le terme de potentiel apparaissant en $I_t^{1/2}$. Cela est bien sûr possible, mais il faut être prudent, car bien que la fonction f soit supposée positive, nous avons vu qu'il n'existe pas de preuve que Υ reste lui aussi positif.

La méthode de relaxation appliquée à la condition aux limites NLABC $_{2,T}^3$ consiste alors à résoudre le système

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \Upsilon u = 0, & \text{sur } \Omega_T, \\ \partial_{\mathbf{n}}u = -e^{-i\pi/4}\partial_t^{1/2}u - \frac{\kappa}{2}u + e^{i\pi/4}\left(\frac{\kappa^2}{8} + \frac{\Delta_{\Sigma}}{2} + \frac{\Upsilon}{2}\right)I_t^{1/2}u, & \text{sur } \Sigma_T, \\ \Upsilon = f(u), & \text{sur } \Omega_T. \end{cases} \quad (5.59)$$

Ce système est discrétisé de la manière suivante :

$$\begin{cases} \frac{2i}{\Delta t}v^{n+1} + \Delta v^{n+1} + \Upsilon^{n+1/2}v^{n+1} = 0, & \text{sur } \Omega, \\ \partial_{\mathbf{n}}v^{n+1} = -e^{-i\pi/4}\sqrt{\frac{2}{\Delta t}}\sum_{k=1}^{n+1}\beta_{n+1-k}v^k - \frac{1}{2}\kappa v^{n+1} \\ \quad + \frac{e^{i\pi/4}}{2}\sqrt{\frac{\Delta t}{2}}\sum_{k=1}^{n+1}\alpha_{n+1-k}\left(\frac{\kappa^2}{2} + \frac{1}{2}\partial_s^2 + \frac{\Upsilon^{n+1/2}}{2}\right)v^k, & \text{sur } \Sigma, \\ \Upsilon^{n+3/2} = 2f(v^{n+1}) - \Upsilon^{n+1/2}, & \text{sur } \Omega. \end{cases} \quad (5.60)$$

La formulation éléments finis se traduit ensuite matriciellement par

$$\left(\frac{2i}{\Delta t}\mathbb{M} - \mathbb{B}^{\Sigma} - \mathbb{S} + \mathbb{M}_{\Upsilon^{n+1/2}}\right)\mathbf{v}^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t}\mathbb{M}\mathbf{u}^n + \mathbf{b}^n, \quad (5.61)$$

où la matrice des termes de bord \mathbb{B}^{Σ} vaut

$$\mathbb{B}^{\Sigma} = e^{-i\pi/4}\sqrt{\frac{2}{\Delta t}}\mathbb{M}^{\Sigma} + \frac{1}{2}\mathbb{M}_{\kappa}^{\Sigma} + \frac{e^{i\pi/4}}{2}\sqrt{\frac{\Delta t}{2}}\left(\frac{1}{2}\mathbb{M}_{\kappa}^{\Sigma} - \frac{1}{2}\mathbb{S}^{\Sigma} + \frac{1}{2}\mathbb{M}_{\Upsilon^{n+1/2}}^{\Sigma}\right), \quad (5.62)$$

et le second membre \mathbf{b}^n vaut

$$\mathbf{b}^n = e^{-i\pi/4}\sqrt{\frac{2}{\Delta t}}\sum_{k=1}^n\beta_{n+1-k}\mathbb{M}^{\Sigma}\mathbf{v}^k + \frac{e^{i\pi/4}}{2}\sqrt{\frac{\Delta t}{2}}\sum_{k=1}^n\alpha_{n+1-k}\left(\frac{1}{2}\mathbb{M}_{\kappa}^{\Sigma} - \frac{1}{2}\mathbb{S}^{\Sigma} + \frac{1}{2}\mathbb{M}_{\Upsilon^{n+1/2}}^{\Sigma}\right)\mathbf{v}^k. \quad (5.63)$$

La résolution de l'équation (5.61) est ensuite suivie de la mise à jour de Υ

$$\Upsilon^{n+3/2} = 2f(u^{n+1}) - \Upsilon^{n+1/2}.$$

Remarque 5.5. Cette fois encore, l'ajout d'un potentiel linéaire $V(\mathbf{x}, t)$ s'effectue sans difficulté particulière. En pratique, il suffit de remplacer $\Upsilon^{n+1/2}$ par $W^{n+1} + \Upsilon^{n+1/2}$ dans les équations (5.61) à (5.63).

5.4.4 Application de la méthode de relaxation à la condition $\text{NLABC}_{1,T}^2$

Voyons à présent comment se traduit la méthode de relaxation pour les conditions aux limites avec changement de jauge. Pour une non linéarité $f(u)$, la condition $\text{NLABC}_{1,T}^2$ s'écrit

$$\partial_{\mathbf{n}}u = -e^{-i\pi/4}e^{i\mathcal{V}}\partial_t^{1/2}(e^{-i\mathcal{V}}u) - \frac{\kappa}{2}u, \quad \text{sur } \Sigma_T,$$

avec la fonction de phase

$$\mathcal{V}(x, y, t) = \int_0^t f(u)(x, y, \sigma) d\sigma.$$

La méthode de relaxation appliquée à cette condition aux limites consiste à résoudre le système

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + \Upsilon u = 0, & \text{sur } \Omega_T, \\ \partial_{\mathbf{n}}u = -e^{-i\pi/4}e^{i\mathcal{V}}\partial_t^{1/2}(e^{-i\mathcal{V}}u) - \frac{\kappa}{2}u, & \text{sur } \Sigma_T, \\ \Upsilon = f(u), & \text{sur } \Omega_T. \end{cases} \quad (5.64)$$

Ce système est discrétisé de la manière suivante :

$$\begin{cases} \frac{2i}{\Delta t}v^{n+1} + \Delta v^{n+1} + \Upsilon^{n+1/2}v^{n+1} = 0, & \text{sur } \Omega, \\ \mathbb{W}^{n+1} = \exp\left(i\frac{\Delta t}{2}\Upsilon^{n+1/2}\right) \exp\left(i\Delta t \sum_{k=0}^{n-1} \Upsilon^{k+1/2}\right), & \text{sur } \Sigma, \\ \partial_{\mathbf{n}}v^{n+1} = -e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} e^{i\mathbb{W}^{n+1}} \sum_{k=1}^{n+1} \beta_{n+1-k} e^{-i\mathbb{W}^k} v^k - \frac{1}{2}\kappa v^{n+1}, & \text{sur } \Sigma, \\ \Upsilon^{n+3/2} = 2f(v^{n+1}) - \Upsilon^{n+1/2}, & \text{sur } \Omega. \end{cases} \quad (5.65)$$

On remarque qu'au moment du calcul de v^{n+1} , le terme \mathbb{W}^{n+1} fait appel aux termes $\Upsilon^{k+1/2}$ jusqu'à $\Upsilon^{n+1/2}$, qui sont déjà connus. Ceci est différent du cas de l'algorithme par point fixe, dans lequel le terme \mathbb{E}^{n+1} dépend encore de v^{n+1} , ce qui oblige à introduire les fonctions $\widetilde{\mathbb{E}}^p$.

La formulation éléments finis se traduit ensuite matriciellement par

$$\left(\frac{2i}{\Delta t}\mathbb{M} - \mathbb{B}^\Sigma - \mathbb{S} + \mathbb{M}_{\Upsilon^{n+1/2}}\right) \mathbf{v}^{n+1} = \frac{2i}{\Delta t}\mathbb{M}\mathbf{u}^n + \mathbf{b}^n, \quad (5.66)$$

avec

$$\mathbb{B}^\Sigma = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \mathbb{M}^\Sigma + \frac{1}{2} \mathbb{M}_\kappa^\Sigma, \quad (5.67)$$

et le second membre \mathbf{b}^n vaut

$$\mathbf{b}^n = e^{-i\pi/4} \sqrt{\frac{2}{\Delta t}} \sum_{k=1}^n \beta_{n+1-k} \mathbb{M}_{e^{i(\mathbb{W}^{n+1}-\mathbb{W}^k)}}^\Sigma \mathbf{v}^k. \quad (5.68)$$

La détermination de v^{n+1} est ensuite suivie par la mise à jour de $\Upsilon^{n+3/2}$ par (5.53). Cette fois encore, on peut généraliser les équations précédentes au cas d'un potentiel de la forme $V(\mathbf{x}, t) + f(u)$, en ajoutant W^{n+1} dans l'équation intérieure et en remplaçant formellement $\Upsilon^{n+1/2}$ par $W^{n+1} + \Upsilon^{n+1/2}$ dans la condition aux limites et dans la définition de \mathbb{W}^{n+1} .

5.5 Résultats numériques

Nous allons maintenant comparer les trois conditions aux limites artificielles retenues $\text{NLABC}_{1,T}^2$, $\text{NLABC}_{2,T}^3$ et $\text{NLABC}_{2,P}^2$, sur des exemples numériques. Ces trois conditions aux limites sont également comparées aux conditions sans potentiel $\text{ABC}_{0,T}^3$ et $\text{ABC}_{0,P}^2$.

Si on prend comme donnée initiale une gaussienne d'énergie assez faible, alors pour le potentiel $\mathcal{V} = |u|^2$, la condition sans potentiel permet parfaitement de résoudre le problème. En effet, l'effet du laplacien prédomine, et la non linéarité n'a pratiquement aucune influence. En revanche, lorsqu'on considère une donnée initiale comme le soliton, pour lequel la non linéarité et la dispersion due au Laplacien se compensent, la condition sans potentiel ne suffit clairement pas, et là les CLA mises au point précédemment entrent en jeu. En dimension deux, il n'existe pas d'expression analytique du soliton. Il faut donc le construire numériquement.

5.5.1 Construction numérique du soliton

Pour construire numériquement le soliton en dimension deux, on cherche les solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger, obtenues à l'aide d'une méthode de tir [46]. Considérons l'équation de Schrödinger non linéaire cubique

$$i\partial_t u + \Delta u + q|u|^2 u = 0, \quad \text{sur } \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^+, \quad (5.69)$$

avec $q > 0$, et cherchons les solutions stationnaires sous la forme

$$u(r, t) = e^{i\mu t} \psi(r), \quad (5.70)$$

où $r = \|\mathbf{x}\| = \sqrt{x^2 + y^2}$, $\mu \in \mathbb{R}$ et ψ est supposée localisée en espace. On est alors amené à résoudre le problème elliptique non linéaire

$$-\mu\psi + \Delta\psi + q|\psi|^2\psi = 0, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2. \quad (5.71)$$

Ayant fait l'hypothèse que ψ est à symétrie radiale, on écrit l'équation en coordonnées polaires, ce qui nous ramène, en considérant comme domaine Ω le disque de rayon R , à résoudre une équation différentielle d'ordre deux sur l'intervalle $[0; R]$

$$\partial_r^2 \psi + \frac{1}{r} \partial_r \psi - \mu\psi + q|\psi|^2\psi = 0, \quad r \in [0; R]. \quad (5.72)$$

On peut alors se ramener à $\mu = 1$ en posant le changement de variable

$$\tilde{\psi}(r) = \frac{1}{\sqrt{\mu}} \psi\left(\frac{r}{\sqrt{\mu}}\right).$$

Par ailleurs, l'obtention d'une solution de classe C^2 impose $\psi'(0) = 0$, afin d'éviter une singularité en 0. Finalement, il s'agit de résoudre le problème différentiel suivant :

$$\begin{cases} \partial_r^2 \psi + \frac{1}{r} \partial_r \psi - \psi + q|\psi|^2\psi = 0, & 0 < r < R, \\ \psi'(0) = 0, \quad \psi(0) = \beta, \end{cases} \quad (5.73)$$

dont on cherche une solution globale qui tend vers 0 lorsque $r \rightarrow +\infty$. Un développement de Taylor en $r = 0$ montre qu'il faut prendre $\psi''(0) = \beta - q|\beta|^2\beta$. On résout cette équation différentielle par

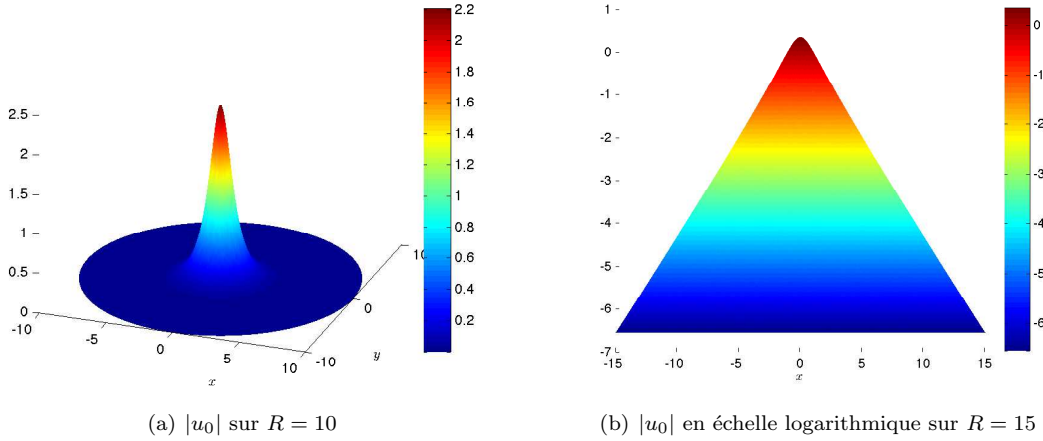


FIGURE 5.1 – Module de la donnée initiale solitonique pour l'équation non linéaire cubique sur le disque de rayon 10.

n_T	n_P	n_E	$\min T $	$\max T $
6 800 000	3 400 000	5 056	1×10^{-5}	1×10^{-4}
1 700 000	858 000	2 528	6×10^{-5}	4×10^{-4}
428 000	215 000	1 264	2×10^{-4}	2×10^{-3}
107 000	54 000	632	9×10^{-4}	7×10^{-3}

TABLE 5.1 – Paramètres des maillages du disque de rayon 10.

une méthode de tir en prenant un pas radial égal à $\Delta r = 10^{-3}$. La donnée initiale β est ajustée de manière à obtenir les bonnes propriétés de décroissance sur ψ . On obtient alors une donnée initiale $\psi(r)$ radiale, pour $r \leq R$, que l'on étend par symétrie radiale au disque de rayon R pour obtenir le soliton. On donne au soliton une impulsion $\mathbf{k}_0 = k_0 x$ en le multipliant par une gaussienne appropriée

$$u_0(x, y) = \psi(r)e^{-ik_0 x}. \quad (5.74)$$

En $R = 10$, on a $|u_0(R)| \approx 5 \times 10^{-5}$. Si on agrandit le domaine à $R = 15$, on obtient $|u_0(R)| \approx 3 \times 10^{-7}$. En fait, le soliton est à décroissance relativement lente, ce qui oblige à considérer, en lien avec la valeur de q , des domaines plutôt grands, sous peine que la donnée initiale ne puisse pas être considérée comme numériquement à support compact. Au niveau de la programmation de l'algorithme, ceci nécessite de passer le code en quadruple précision pour obtenir une réelle décroissance jusqu'à $R = 15$. En effet, le nombre de chiffres significatifs après la virgule pour le calcul de β est fondamental. Le module du soliton est représenté figure 5.1. La figure 5.1(b) montre bien que, même en agrandissant le domaine de calcul à $R = 15$, il est difficile d'obtenir que le soliton soit très petit sur la frontière.

Finalement, le domaine de calcul Ω retenu est le disque de rayon 10. Ce domaine étant de surface quatre fois plus grande que celle du domaine utilisé dans le cas d'un potentiel, nous devons considérer des maillages comportant en moyenne quatre fois plus de triangles pour garder une discrétisation équivalente. Les caractéristiques des maillages utilisés, ainsi que les indications sur la fourchette des surfaces des triangles associés, se trouvent dans le tableau 5.1.

Remarque 5.6. Cette construction se généralise immédiatement à une non linéarité du type $f(u) = q|u|^{2\sigma}$, avec $\sigma > 0$ et $q > 0$. Ceci permet notamment de construire un soliton pour l'équation quintique,

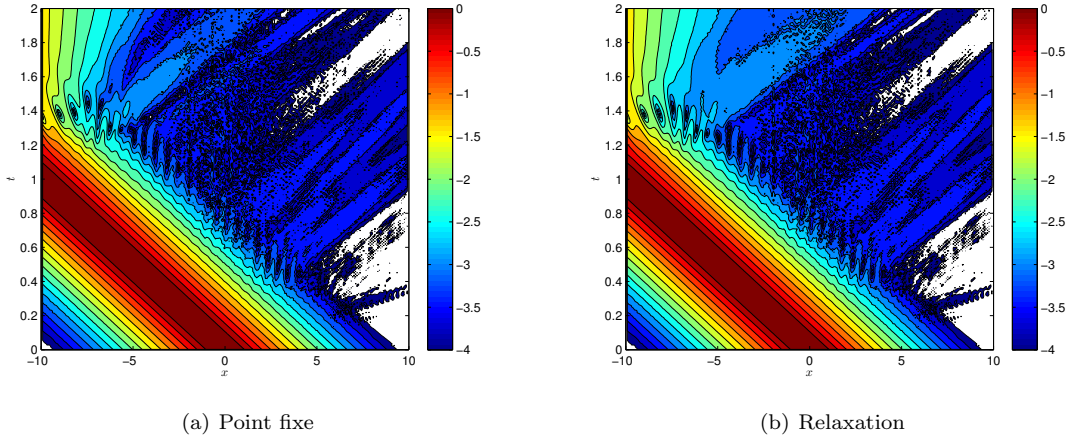


FIGURE 5.2 – Comparaison des résultats obtenus pour la condition $\text{NLABC}_{2,T}^3$ par l’algorithme de point fixe et la méthode de relaxation, pour le potentiel cubique.

CLA	Point fixe		Relaxation	
$\text{NLABC}_{1,T}^2$	17 ^h 21	48 ^h 10	4 ^h 47	11 ^h 27
$\text{NLABC}_{2,T}^3$	5 ^h 11	26 ^h 58	3 ^h 09	9 ^h 53
$\text{NLABC}_{2,P}^2$	6 ^h 05	25 ^h 06	2 ^h 51	12 ^h 31

TABLE 5.2 – Comparaison des temps de calculs pour la résolution par point fixe et la résolution par la méthode de relaxation, la discrétisation étant $n_T = 423\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

de potentiel $\mathcal{V} = q|u|^4$.

5.5.2 Choix de la méthode de résolution

On s’attache ici à comparer brièvement l’algorithme de point fixe et la méthode de relaxation. Sur le papier, la méthode de relaxation est clairement plus rapide, puisque chaque itération en temps est équivalente à une seule itération du point fixe, qui en effectue toujours au moins deux. Encore faut-il vérifier que cette méthode conduit à la même précision que le point fixe, et que l’on peut donc substituer une méthode à l’autre. C’est ce que nous nous attachons à déterminer ici.

Pour le point fixe, le critère d’arrêt est $\|\zeta^{s+1} - \zeta^s\|_{L^2(\mathbb{C}^{n_P})}^2 < \varepsilon$, et la valeur de ε est fixée à 10^{-6} . Le nombre maximal d’itérations est 100. Pour les deux méthodes, le système linéaire est résolu en utilisant UMFPACK. On représente figure 5.2 les résultats obtenus avec la condition aux limites $\text{NLABC}_{2,T}^3$ dans le cas du potentiel cubique $\mathcal{V} = |u|^2$, la donnée initiale étant le soliton construit en 5.5.1. La discrétisation choisie est $n_T = 423\,000$ triangles et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$. On a $k_0 = 5$ et $T = 2$.

On observe que les résultats obtenus pour $\text{NLABC}_{2,T}^3$ sont identiques, indépendamment de la méthode de résolution utilisée. Nous ne les avons pas représentés ici, mais on obtient les mêmes résultats en considérant les autres conditions aux limites. Ceci nous laisse le choix de la méthode à utiliser en fonction d’autres critères, comme le temps de calcul. Les temps de calcul associés à cet exemple sont reportés dans le tableau 5.2, pour ces deux méthodes de résolution et pour les trois conditions aux limites $\text{NLABC}_{1,T}^2$, $\text{NLABC}_{2,T}^3$ et $\text{NLABC}_{2,P}^2$. Comme on s’en doutait compte tenu du principe de la méthode de relaxation, le tableau 5.2 est sans équivoque : la méthode de relaxation

est clairement plus rapide que l'algorithme de point fixe, pratiquement deux fois plus rapide pour les conditions $\text{NLABC}_{2,T}^3$ et $\text{NLABC}_{2,P}^2$, et trois à quatre fois plus rapide pour la condition $\text{NLABC}_{1,T}^2$.

Pour réaliser les courbes comparatives des différentes conditions aux limites artificielles, on utilisera désormais la méthode de relaxation, qui donne les mêmes résultats que le point fixe mais en étant nettement plus rapide.

5.5.3 Le potentiel cubique $\mathcal{V} = q|u|^2$ avec donnée initiale solitonique

Le premier exemple numérique considéré pour comparer les CLA non linéaires est le potentiel cubique donné par $f(u) = |u|^2$. Nous prenons la donnée initiale solitonique décrite par (5.74) sur le disque de rayon $R = 10$, avec une impulsion donnée $k_0 = 5$ et le temps final de calcul vaut $T = 2$. Les trois CLA sont comparées entre elles et aux conditions sans potentiel $\text{ABC}_{0,T}^3$ et $\text{ABC}_{0,P}^2$. On représente figure 5.3 les résultats obtenus pour la discrétisation $n_T = 1\,700\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$. La figure 5.4 donne une représentation tridimensionnelle de ces résultats, complémentaire de la première.

Tout d'abord, on observe bien que le soliton est transporté sans dispersion visible, du moins tant qu'il ne touche pas la frontière du domaine. Ceci n'est pas anodin car le soliton est instable en dimension deux.

On remarque ensuite que la condition sans potentiel $\text{ABC}_{0,T}^3$ est inadéquate pour résoudre ce problème. Elle génère des réflexions importantes, notamment dans les niveaux $10^{-1.5}$. On observe un résultat à peu près similaire pour la condition sans potentiel de l'approche Padé, $\text{ABC}_{0,P}^2$. Les conditions aux limites artificielles permettent d'y remédier. La moins précise des CLA est la condition $\text{NLABC}_{2,T}^3$, car si la zone de réflexion est moins étendue que pour les conditions sans potentiel, il subsiste le long de la frontière en $\mathbf{x} = (-10, 0)$ une réflexion de niveau $10^{-1.5}$ qui ne s'atténue pas. Ceci est plutôt gênant. Heureusement, on n'observe pas ce phénomène pour les conditions $\text{NLABC}_{1,T}^2$ et $\text{NLABC}_{2,P}^2$. Ces deux conditions permettent de réduire notablement, et sans contrepartie, le niveau de la réflexion. La condition $\text{NLABC}_{2,P}^2$ de l'approche Padé semble très légèrement plus précise que celle de l'approche Taylor avec changement de jauge. Si on se réfère à la partie traitant d'un potentiel en 2D, il faut noter que l'on ne considère que l'ordre deux pour les conditions $\text{NLABC}_{1,T}^M$. L'ajout du terme d'ordre trois, sous réserve que l'on parvienne à inclure de manière correcte les termes $\partial_s e^{-i\mathcal{V}}$, permettrait certainement d'améliorer encore les résultats, comme dans le cas linéaire.

Une autre représentation des mêmes résultats est la figure 5.4, qui représente en 3D les isosurfaces de niveaux 10^{-1} , 10^{-2} et 10^{-3} . Cette représentation est complémentaire de la représentation dans le plan $y = 0$, elle permet d'estimer le volume de la réflexion pour chacun des niveaux donnés.

En théorie, le soliton ne subit aucune dispersion. Sa norme infinie reste donc égale au cours du temps à sa norme infinie initiale, tant que l'onde n'est pas sortie du domaine. Or, il est bien connu [83] que le soliton est instable en dimension deux. Si l'énergie de la donnée initiale u_0 est plus grande que l'énergie de l'état fondamental, alors la norme infinie de la solution obtenue explose ; si cette énergie est trop petite, la norme infinie diminue, au lieu de rester égale à $\|u_0\|_\infty$. Ici, on voit que globalement, le soliton ne disperse pas. Pour observer cela de plus près, on représente figure 5.5 l'évolution de la norme infinie de u au cours du temps (la méthode utilisée est toujours la méthode de relaxation). Pour les quatre conditions aux limites testées, la norme infinie reste constante égale à la norme infinie du soliton (égale à 2.2 environ), tant que l'onde n'atteint pas la frontière. La norme infinie diminue ensuite pour les trois conditions aux limites artificielles dépendant du potentiel. Pour la condition sans potentiel $\text{ABC}_{0,T}^3$, on observe au temps $t = 1$ une augmentation de la norme infinie, qui atteint

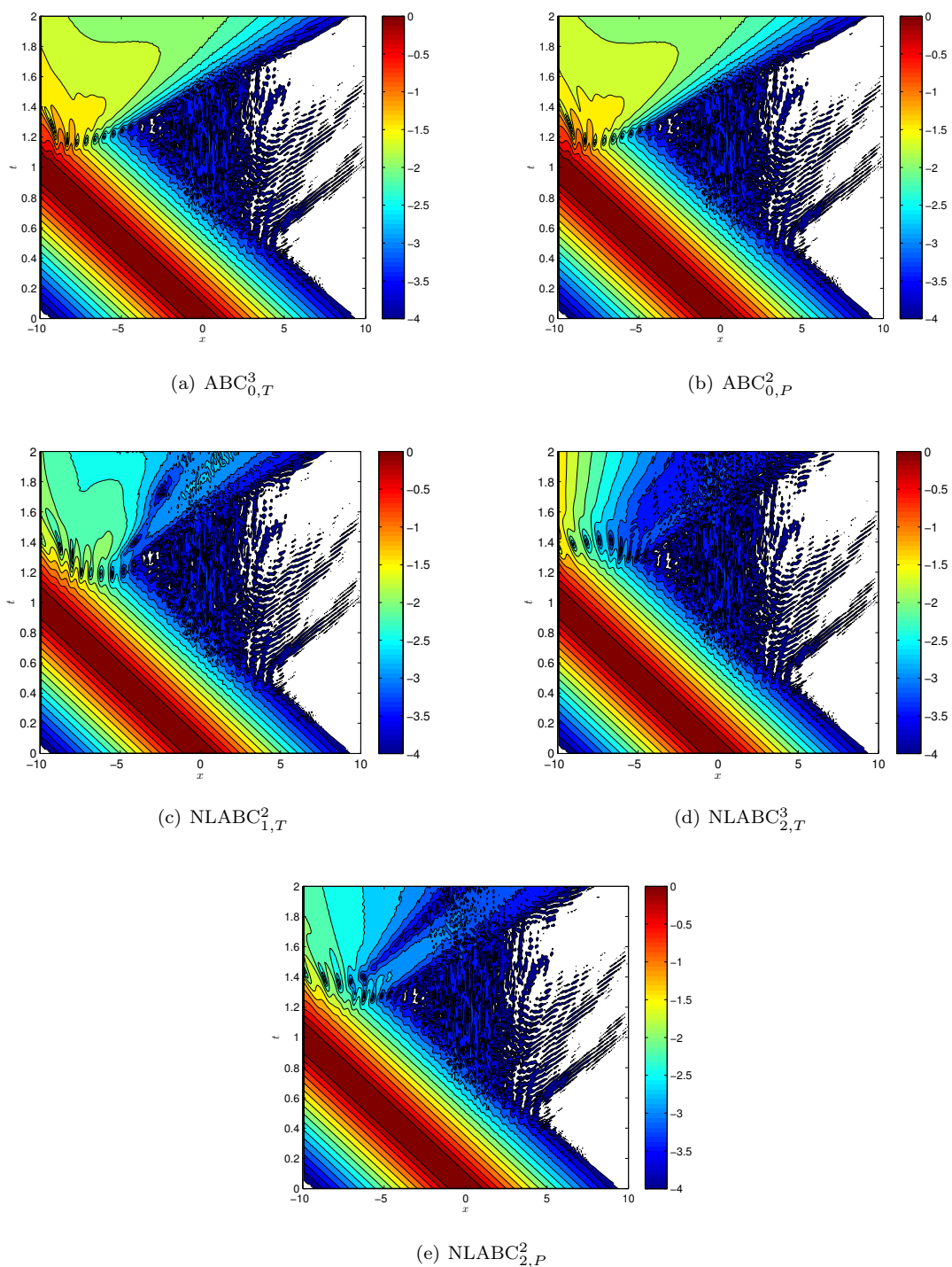


FIGURE 5.3 – Solutions numériques obtenues avec les différentes CLA pour le potentiel cubique $\mathcal{V} = |u|^2$ lorsque la donnée initiale est le soliton. La discrétisation est $n_T = 1\,700\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

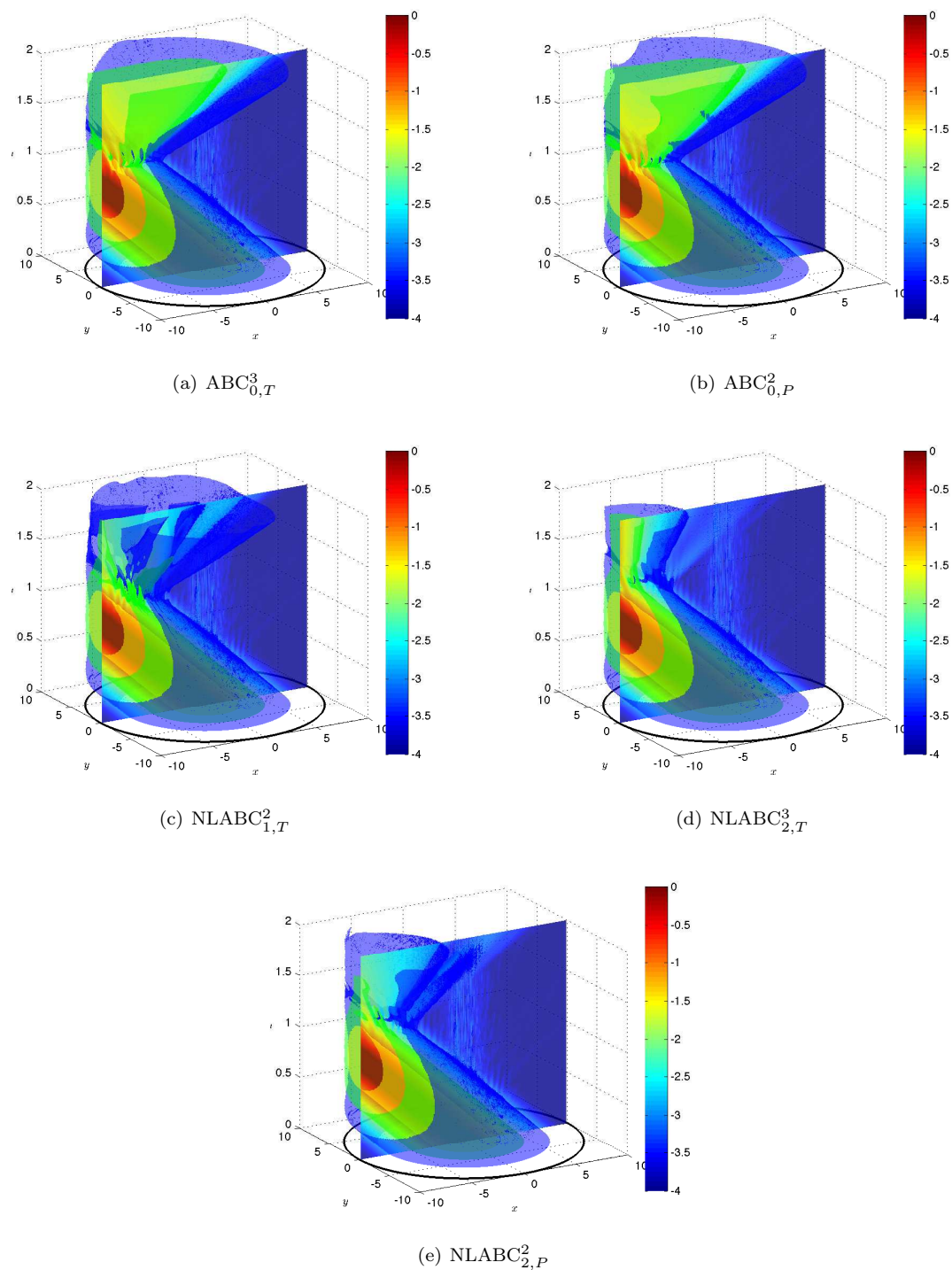


FIGURE 5.4 – Représentation 3D des solutions obtenues pour chacune des conditions aux limites, pour l'équation cubique avec $\mathcal{V} = |u|^2$ initialisée par le soliton. La discrétisation est $n_T = 1\,700\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

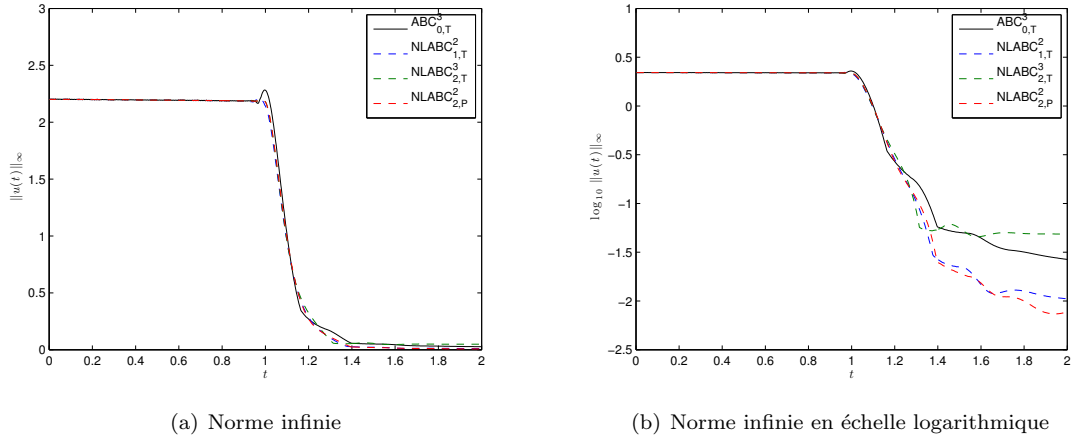


FIGURE 5.5 – Evolution de la norme infinie pour les quatre conditions aux limites $ABC_{0,T}^3$, $NLABC_{1,T}^2$, $NLABC_{2,T}^3$ et $NLABC_{2,P}^2$, pour l'équation cubique avec $\mathcal{V} = |u|^2$ initialisée par le soliton. La discrétisation est $n_T = 1\,700\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

2.3, avant de diminuer (figure 5.5(a)). C'est un premier élément qui marque le manque de précision de la condition sans potentiel. On s'intéresse ensuite à étudier de plus près la décroissance de la norme infinie. Pour cela, on passe en échelle logarithmique (figure 5.5(b)). Pour les conditions $NLABC_{1,T}^2$ et $NLABC_{2,P}^2$, la norme infinie continue à diminuer jusqu'à 10^{-2} , alors que la condition sans potentiel stagne autour de $10^{-1.5}$ à partir de $t = 1.4$. Le cas de la condition $NLABC_{2,T}^3$ est un peu particulier. Du point de vue de la norme infinie, cette condition conduit à la même précision que la condition sans potentiel. En réalité, si on compare les figures 5.3(a) et 5.3(c), ou les figures 5.4(a) et 5.4(d), on remarque que la zone de réflexion associée à $NLABC_{2,T}^3$ est moins étendue que celle associée à $ABC_{0,T}^3$. Par définition de la norme infinie, cette différence n'est pas perceptible sur la figure 5.5. Il n'en reste pas moins que la condition $NLABC_{2,T}^3$ conduit à un moins bon résultat que les conditions $NLABC_{1,T}^2$ et $NLABC_{2,P}^2$. Ceci est à rapprocher du fait que pour un potentiel $V(\mathbf{x}, t)$ d'une certaine amplitude, les conditions $ABC_{2,T}^M$ donnent un résultat plus grossier que les autres conditions aux limites, car elles ne prennent pas suffisamment en compte le potentiel.

Les temps de calcul associés aux trois CLA, pour la méthode de relaxation, sont reportés dans le tableau 5.3 pour deux discrétisations. Les temps de calcul associés aux conditions $ABC_{0,T}^3$ et $ABC_{0,P}^2$ sont à très peu de chose près les mêmes que ceux associés aux conditions $NLABC_{2,T}^3$ et $NLABC_{2,P}^2$ respectivement. Nous ne les avons donc pas reportés ici. Ceci prouve d'ailleurs que les deux conditions $NLABC_{2,T}^3$ et $NLABC_{2,P}^2$ ne rajoutent aucun surcoût par rapport aux conditions sans potentiel. Il n'en va pas de même pour les conditions du changement de jauge, à cause des exponentielles en temps à prendre en compte dans les matrices d'éléments finis à chaque convolution. En effet, comme dans le cas potentiel, la condition $NLABC_{1,T}^2$ avec changement de jauge est plus longue que la condition $NLABC_{2,T}^3$, et cela est d'autant plus marqué lorsqu'on raffine en espace, et que les matrices éléments finis à réassembler dans la convolution sont de taille plus grande. La condition $NLABC_{2,P}^2$ est un peu surprenante. Pour $n_T = 423\,000$ triangles, son temps d'exécution est du même ordre de grandeur que celui de $NLABC_{2,T}^3$, et même plus petit, ce qui est plutôt surprenant. Pour $n_T = 1\,700\,000$ en revanche, le temps de calcul explose et est trois fois plus important que pour $NLABC_{2,T}^3$, et

CLA	$n_T = 423\,000$ $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$		$n_T = 1\,700\,000$ $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$	
NLABC $^2_{1,T}$	4 ^h 47	11 ^h 27	22 ^h 06	62 ^h
NLABC $^3_{2,T}$	3 ^h 09	9 ^h 53	13 ^h 14	53 ^h
NLABC $^2_{2,P}$	2 ^h 51	12 ^h 31	40 ^h 10	199 ^h

TABLE 5.3 – Temps de calcul en heures (à gauche : temps chronométré ; à droite : temps cpu) pour le potentiel cubique $\mathcal{V} = |u|^2$ et pour le soliton, pour deux discrétisations.

presque deux fois plus important que pour NLABC $^2_{1,T}$. L'étude du conditionnement des systèmes (du moins, du conditionnement à l'instant initial) ne suffit pas à lui seul à expliquer ce phénomène, car même si le système linéaire associé à NLABC $^2_{2,P}$ est beaucoup plus mal conditionné que celui associé à NLABC $^3_{2,T}$, le conditionnement des systèmes associés à chacune des conditions aux limites évolue dans les mêmes proportions lorsqu'on augmente le nombre de triangles de $n_T = 423\,000$ à $n_T = 1\,700\,000$, alors que le temps de résolution est identique pour les deux méthodes lorsque $n_T = 423\,000$.

5.5.4 Le cas d'une donnée initiale gaussienne

Nous nous intéressons à présent à ce qui se passe lorsque la donnée initiale est une gaussienne de nombre d'onde k_0 . A titre d'exemple, nous prenons

$$u_0(x, y) = e^{-\frac{x^2+y^2}{w^2} - ik_0x}, \quad \text{pour } (x, y) \in \Omega, \quad (5.75)$$

avec $w = 0.5$. Compte tenu de la décroissance de cette donnée initiale, on prend comme domaine de calcul le disque de rayon $R = 2.5$. Sur ce domaine, u_0 peut être considérée comme numériquement à support compact, puisque pour un point (x_Σ, y_Σ) du bord de norme égale à $r_\Sigma = 2.5$, on a $u_0(x_\Sigma, y_\Sigma) \approx 10^{-11}$. Le module de cette donnée initiale est représenté sur Ω figure 5.6. La surface du domaine Ω considéré ici étant quatre fois plus petite que celle du domaine utilisé dans le cas d'un potentiel, nous pourrions considérer des maillages comportant en moyenne quatre fois moins de triangles. Les caractéristiques des maillages utilisés, ainsi que les indications sur la fourchette des surfaces des triangles associés, se trouvent dans le tableau 5.4.

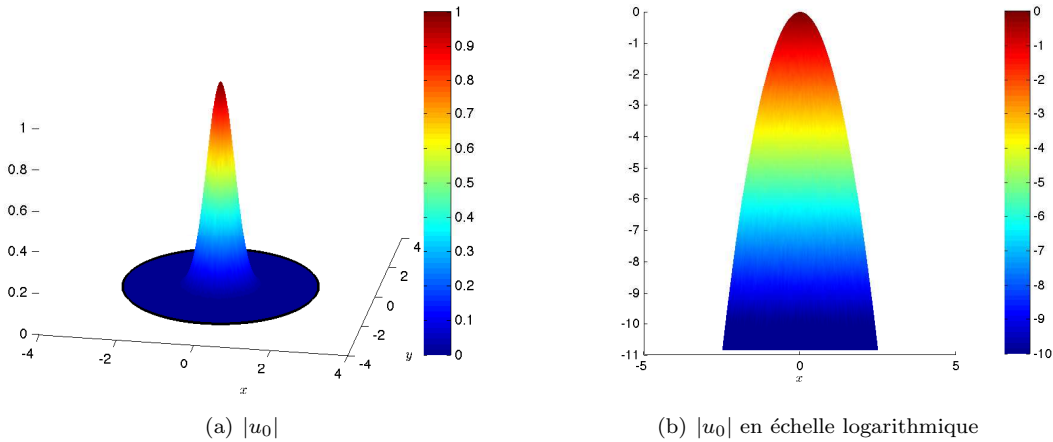
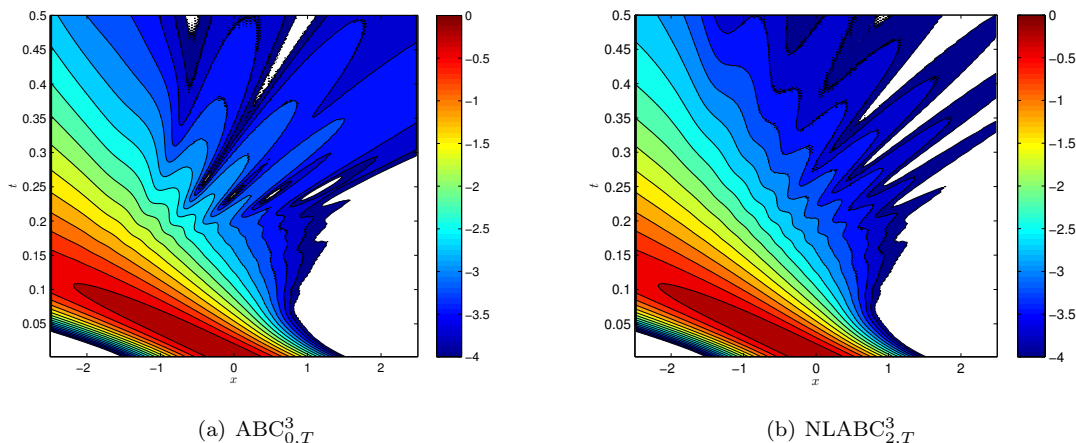


FIGURE 5.6 – Représentation du module de la donnée initiale u_0 sur le disque de rayon $R = 2.5$.

n_T	n_P	n_E	$\min T $	$\max T $
1 700 000	847 000	2 560	3×10^{-6}	3×10^{-5}
423 000	212 000	1 280	1×10^{-5}	1×10^{-4}
105 000	53 000	640	6×10^{-5}	4×10^{-4}
26 000	13 000	320	2×10^{-4}	2×10^{-3}

TABLE 5.4 – Paramètres des maillages du disque de rayon 2.5.

FIGURE 5.7 – Solutions numériques associées au potentiel $\mathcal{V} = 5|u|^2$ pour $k_0 = 10$ et une donnée initiale gaussienne, pour les conditions aux limites $ABC_{0,T}^3$ et $NLABC_{2,T}^3$. La discrétisation est $n_T = 423\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

La particularité qu'on peut observer lorsque la donnée initiale est une gaussienne, est que les conditions sans potentiel $ABC_{0,T}^M$ et $ABC_{0,P}^M$ permettent de résoudre convenablement le problème. La prise en compte du potentiel dans la condition aux limites n'apporte alors pas grand chose de nouveau, et ce, quelle que soit la condition aux limites considérée. Par exemple, on considère la non linéarité $f(u) = 5|u|^2$, $k_0 = 10$ et $T = 0.5$, et on compare la condition sans potentiel $ABC_{0,T}^3$ à la condition $NLABC_{2,T}^3$ (figure 5.7) pour la discrétisation $n_T = 423\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$. On voit que l'apport de la prise en compte du potentiel est certes visible en échelle logarithmique, mais vraiment minime, tant la condition sans potentiel donne déjà un bon résultat. En effet, on peut comparer les résultats obtenus à une solution de référence, calculée en utilisant des PML sur un domaine circulaire élargi de rayon 5.8 (figure 5.8(a)). On voit que la simulation avec la condition sans potentiel d'ordre trois présente peu de défauts.

En fait, dans ce cas de figure, la non linéarité est trop faible pour avoir une importance, et l'effet prédominant dans l'équation est l'effet dispersif du laplacien. D'ailleurs, à y regarder de plus près, on s'aperçoit que le profil de la solution associée à $\mathcal{V} = 5|u|^2$ est à peine différent du profil de la solution potentiel nul (figure 5.8(b)). Cela montre bien que les conditions aux limites dépendant du potentiel ne peuvent pas apporter grand chose à la résolution du problème.

L'effet essentiellement dispersif de l'équation est particulièrement visible pour des nombres d'onde plus faibles. Si on prend $k_0 = 5$, la représentation 3D de la solution (figure 5.9) met bien en évidence la dispersion. Dans ce cas, les conditions aux limites ne jouent pratiquement aucun rôle.

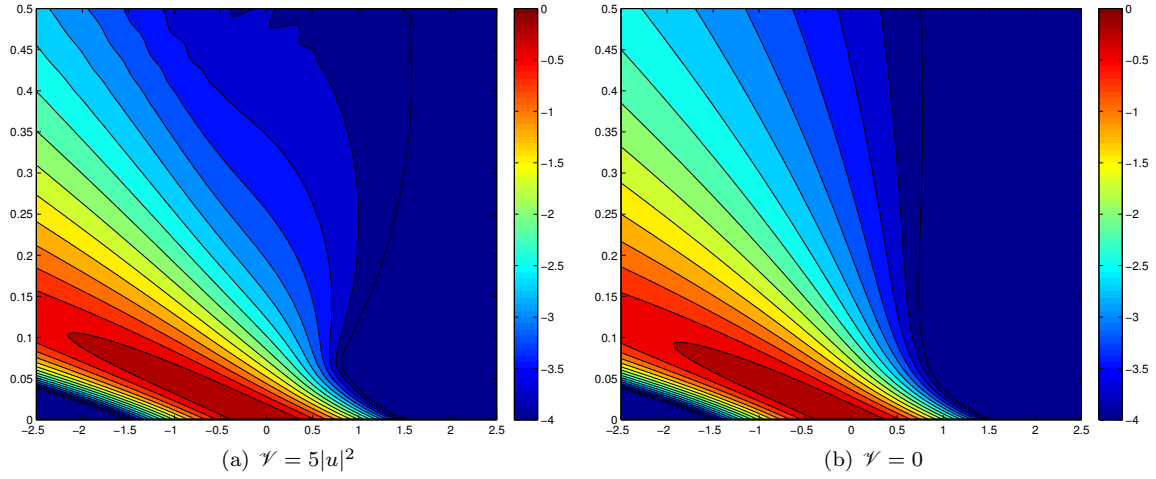


FIGURE 5.8 – Solutions de référence obtenues à l'aide de PML pour $\Psi = 5|u|^2$ et $\Psi = 0$, lorsque $k_0 = 10$ et la donnée initiale est une gaussienne.

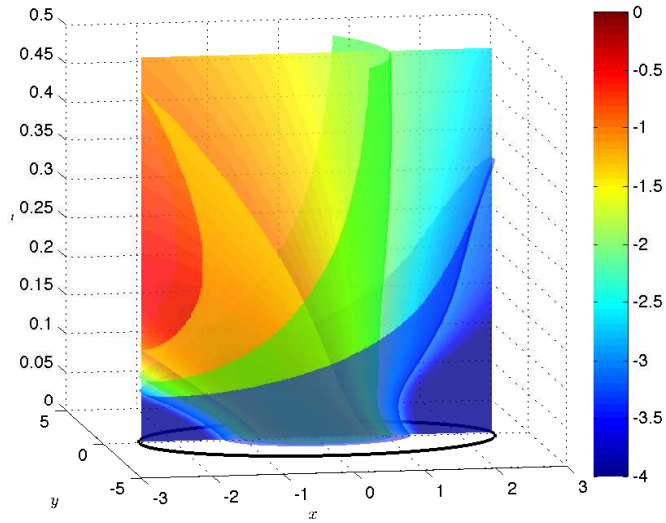


FIGURE 5.9 – Représentation 3D de la solution pour $\Psi = 5|u|^2$, $k_0 = 5$ et une donnée initiale gaussienne.

5.5.5 Des potentiels mixtes $\mathcal{V} = V(r) + f(u)$

Pour observer la nécessité d'utiliser des conditions aux limite appropriées, en-dehors des cas dans lesquels la non linéarité joue réellement un rôle (comme pour le soliton), il faut considérer un potentiel mixte de la forme $\mathcal{V} = V + f(u)$. A titre d'exemple, nous considérons $\mathcal{V} = r^2 + |u|^2$. On fixe le nombre d'onde à $k_0 = 10$ et le temps final de calcul à $T = 0.5$.

La figure 5.10 présente les solutions numériques issues des conditions aux limites $ABC_{0,T}^3$, $ABC_{0,P}^2$, $NLABC_{1,T}^2$, $NLABC_{2,T}^3$ et $NLABC_{2,P}^2$. Les conditions sans potentiel ne suffisent désormais plus à résoudre le problème. Sur la représentation tridimensionnelle (figure 5.11), on prend particulièrement conscience du volume de réflexion engendré par les conditions sans potentiel, et de l'amélioration apportée par les conditions non linéaires. Pour les conditions tenant compte du potentiel, seules les lignes de niveau les plus faibles restent perturbés. Les perturbations sont un peu plus importantes pour la condition du changement de jauge $NLABC_{1,T}^2$, certainement du fait de la dispersion numérique. En effet, la présence des exponentielles complexes oscillantes $e^{i\mathcal{V}}$ rend ces conditions plus sensibles à la discrétisation. Les conditions $NLABC_{2,T}^3$ et $NLABC_{2,P}^2$ conduisent, elles, à une précision identique.

CLA	$n_T = 423\,000$		$n_T = 1\,700\,000$	
	$\Delta t = 2 \times 10^{-3}$		$\Delta t = 2 \times 10^{-3}$	
$NLABC_{1,T}^2$	0 ^h 37	2 ^h 07	3 ^h 10	12 ^h 21
$NLABC_{2,T}^3$	0 ^h 35	2 ^h 05	3 ^h 14	12 ^h 26
$NLABC_{2,P}^2$	0 ^h 45	3 ^h 08	3 ^h 47	16 ^h 40

TABLE 5.5 – Temps de calcul en heures (à gauche : temps chronométré; à droite : temps cpu) pour la non linéarité mixte $\mathcal{V} = r^2 + |u|^2$ et pour une donnée initiale gaussienne, pour deux discrétisations.

Le tableau 5.5 donne les temps de calculs associés aux trois conditions non linéaires, pour $n_T = 423\,000$ et $n_T = 1\,700\,000$ triangles. Sur cet exemple, on remarque que la condition $NLABC_{1,T}^2$ n'est pratiquement pas pénalisée par le réassemblage des matrices d'éléments finis au sein des convolutions. Il faut reconnaître que le domaine de calcul est seize fois plus petit que celui utilisé pour le soliton, ce qui explique que la construction des matrices d'éléments finis du bord prenne moins d'importance. On remarque aussi que la condition de l'approche Padé est d'exécution un peu plus longue que les conditions de l'approche Taylor, les écarts étant de l'ordre de 20 à 30 %.

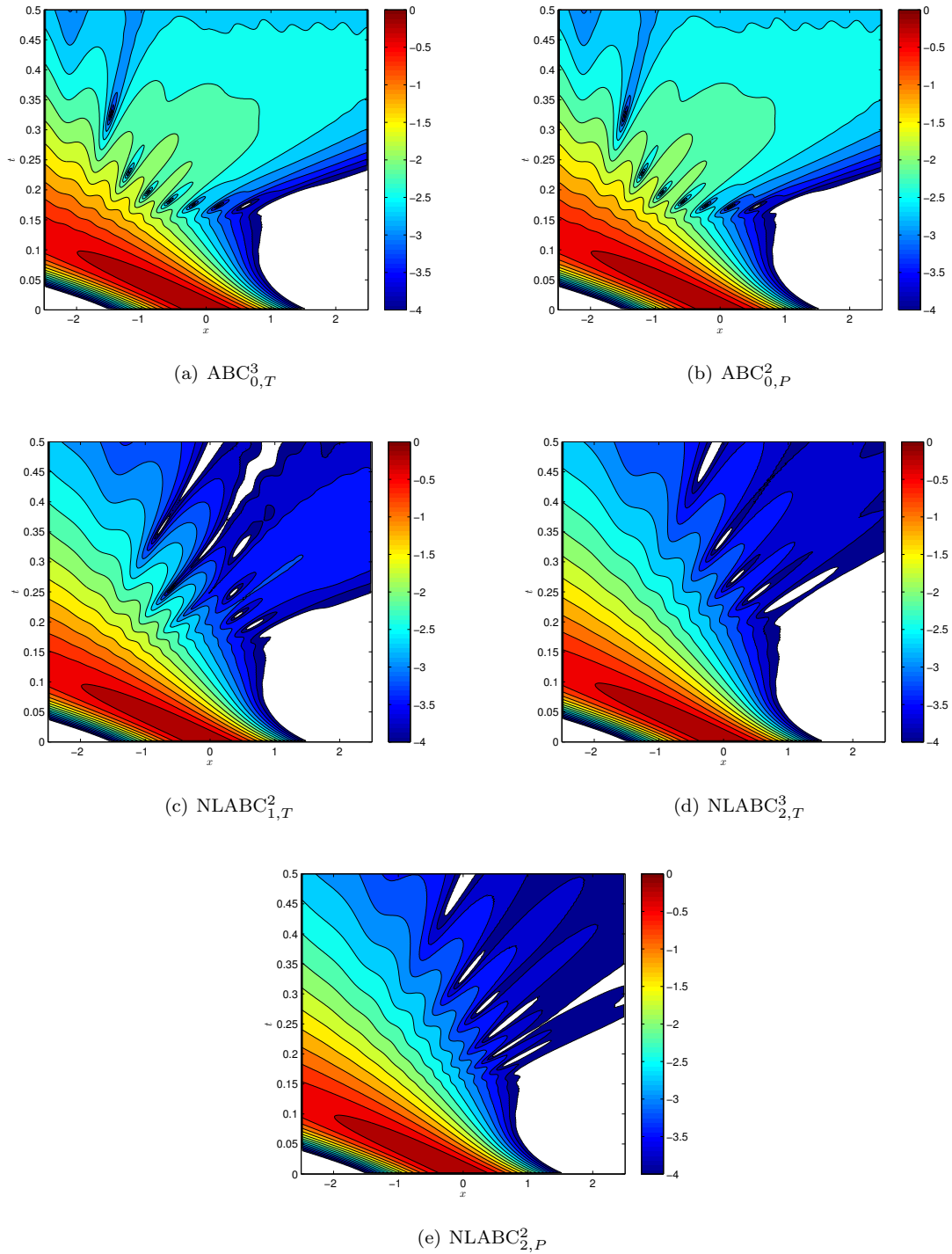


FIGURE 5.10 – Représentation des solutions pour $\mathcal{V} = r^2 + |u|^2$, $k_0 = 10$ et la donnée initiale gaussienne. La discrétisation est $n_T = 1\,700\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

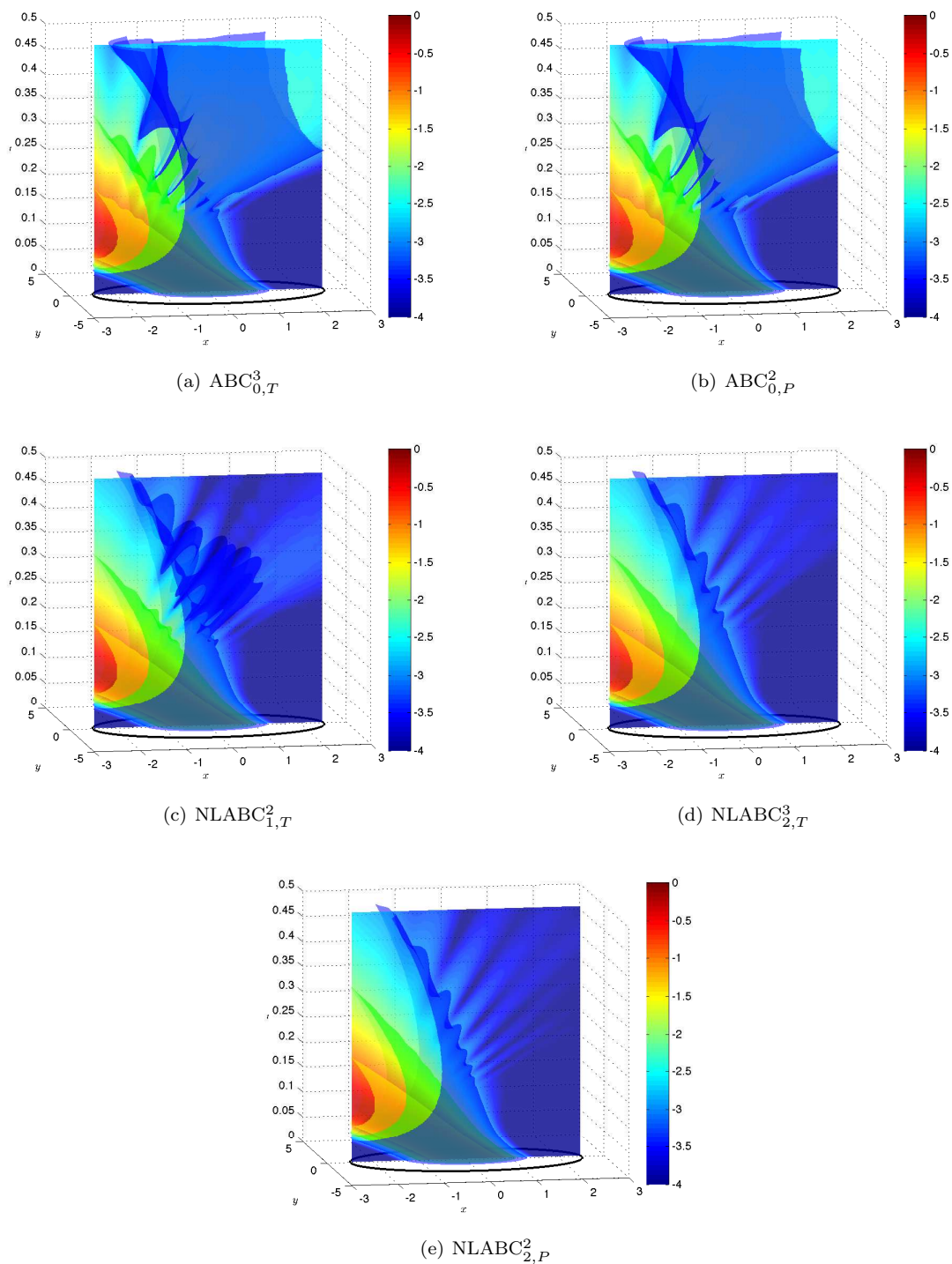


FIGURE 5.11 – Représentation 3D des solutions pour $\mathcal{V} = r^2 + |u|^2$, $k_0 = 10$ et une donnée initiale gaussienne. La discrétisation est $n_T = 1\,700\,000$ et $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$.

5.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons adapté les conditions $ABC_{1,T}^M$, $ABC_{2,T}^M$ et $ABC_{2,P}^M$ construites dans le chapitre 4, à une non linéarité $f(u)$. En nous basant sur les spécificités du cas non radial, nous avons explicité les conditions $NLABC_{1,T}^2$, $NLABC_{2,T}^3$ et $NLABC_{2,P}^2$ que nous serions amenés à utiliser. Pour les conditions issues de l'approche Taylor, les estimations *a priori* demeurent valables.

Deux méthodes de résolution différentes ont été envisagées pour résoudre le problème non linéaire : un algorithme de point fixe, comme dans le chapitre 2, ou une méthode de relaxation. Les schémas numériques associés ont été écrits pour les trois conditions artificielles non linéaires. Dans le cas des conditions de l'approche Taylor associées à un algorithme de point fixe, les inégalités d'énergie semi-discrètes sont préservées. La méthode de relaxation étant nettement plus rapide, c'est celle-ci qui est utilisée pour les tests numériques.

Les trois CLA non linéaires sont comparées numériquement aux conditions sans potentiel $ABC_{0,T}^3$ et $ABC_{0,P}^2$. Pour le potentiel cubique et le soliton, les conditions les plus précises sont $NLABC_{1,T}^2$ et $NLABC_{2,P}^2$, qui améliorent nettement les conditions sans potentiel. La condition $NLABC_{2,T}^3$ en revanche présente quelques défauts le long de la frontière du domaine, et n'est donc pas très appropriée dans ce cas. Au contraire, lorsque la donnée initiale est une gaussienne, la condition $NLABC_{2,T}^3$ est très satisfaisante pour résoudre le problème. Les autres conditions aux limites conviennent également, mais comme la condition $NLABC_{2,T}^3$ est aussi la condition aux limites la plus rapide, elle est à privilégier dans cette situation.

Conclusion générale

Nous avons étudié dans cette thèse différentes manières d'étendre les conditions aux limites artificielles pour l'équation de Schrödinger sans potentiel, au cas où l'équation comporte un potentiel, linéaire ou non linéaire. La généralité de la méthode proposée permet de traiter le cas de tous les potentiels physiquement répulsifs, même s'ils ne sont connus que numériquement. La restriction aux potentiels de type répulsif correspond à la situation dans laquelle il est pertinent de chercher des conditions aux limites artificielles. Pour un potentiel attractif confinant la solution, il vaudra mieux élargir le domaine de calcul si nécessaire, de manière à pouvoir travailler ensuite avec n'importe quel type de condition aux limites, ceci n'ayant plus d'importance lorsque la solution est confinée. Nous avons dégagé deux stratégies principales, l'une basée sur le changement de jauge, et l'autre directe.

En dimension une, la stratégie du changement de jauge conduit à un problème continu bien posé, et le schéma semi-discret de Crank-Nicolson associé est inconditionnellement stable. Les conditions issues de la méthode directe sont approchées par des approximants de Padé et l'introduction de fonctions auxiliaires, et si l'on ne dispose d'aucun résultat de stabilité pour ces conditions, elles sont néanmoins très efficaces numériquement. Ces conditions s'adaptent à un potentiel non linéaire, et permettent de traiter avec succès le potentiel non linéaire cubique, mais aussi d'autres non linéarités plus générales. Les résultats obtenus améliorent très nettement les conditions sans potentiel, et améliorent également les résultats obtenus à l'aide de PML. Ces conditions aux limites s'appliquent également à l'équation stationnaire dans le chapitre 3, que ce soit pour des problèmes de type *scattering* ou pour la recherche d'états propres. De nombreux exemples numériques valident les résultats.

On a ensuite considéré le cas de la dimension deux, lorsque le domaine de calcul est convexe, de frontière régulière. Les nouvelles conditions aux limites établies prennent en compte la géométrie du domaine en plus de l'information sur le potentiel. Notre étude conduit à quatre familles de conditions aux limites, selon qu'on effectue le changement de jauge ou qu'on choisit la méthode directe, et selon qu'on approche les opérateurs mis en jeu par une troncature du développement de Taylor à $|\tau|$ grand, ou qu'on approche les opérateurs de type racine carrée par des approximants de Padé. Pour les CLA de l'approche Taylor, on a démontré que le problème continu est bien posé, et que le problème semi-discret est inconditionnellement stable. Les tests numériques permettent de mettre en évidence les propriétés respectives des différentes familles de conditions aux limites, en termes de précision et de temps de calcul. Ces conditions s'adaptent également avec succès à l'équation non linéaire en dimension deux, pour traiter le cas du potentiel cubique ou de non linéarités de la forme $V + f(u)$. Les schémas numériques dans le cas non linéaire sont de type point fixe ou relaxation, cette dernière méthode étant clairement la plus efficace. En non linéaire, la difficulté vient du fait qu'il est difficile de prévoir le caractère focalisant ou défocalisant d'une non linéarité, selon que le potentiel sous-jacent est attractif ou répulsif. En conséquent, la classe des non linéarités admissibles est délicate à déterminer.

De manière expérimentale cependant, l'utilisation des CLA donne des résultats très satisfaisants en non linéaire. On note également que dans le cas d'un potentiel mixte $V + f(u)$ constitué d'un potentiel répulsif et d'une non linéarité défocalisante, la non linéarité devient négligeable en temps long, et c'est l'effet du potentiel répulsif qui l'emporte.

Pour résumer, les résultats théoriques de stabilité ont été démontrés uniquement lorsqu'on n'utilise pas d'approximants de Padé. Ces situations correspondent au changement de jauge et aux conditions ABC_1^M en dimension une (théorème 1.13 sur pour le problème continu et théorème 1.21 pour le problème semi-discret), et à l'approche Taylor et aux conditions $ABC_{1,T}^M$ et $ABC_{2,T}^M$ en dimension deux (théorèmes 4.43 et 4.42 pour le problème continu, théorèmes 4.47 et 4.46 pour le problème semi-discret). En fonction de l'ordre de la condition aux limites considérée, les conditions d'obtention de ces résultats sont les suivantes :

Condition d'ordre deux (ABC_1^2 en dimension une, $ABC_{1,T}^2$ et $ABC_{2,T}^2$ en dimension deux) : la stabilité des problèmes continu et semi-discret est obtenue sans autre condition que le fait que la donnée initiale est à support compact dans Ω .

Condition d'ordre trois (en dimension deux, $ABC_{1,T}^3$ et $ABC_{2,T}^3$) : pour la condition $ABC_{2,T}^3$ issue de la méthode directe, la stabilité du problème continu est obtenue sous la condition supplémentaire que V reste positif sur la frontière Σ , et la stabilité du problème semi-discret sous la condition semi-discrète équivalente. Pour la condition $ABC_{1,T}^3$ issue du changement de jauge, on obtient la stabilité dans le cas d'un potentiel et d'un domaine de calcul qui sont tous deux à symétrie radiale, sans hypothèse sur le signe de V . Dans les deux cas, on fait également l'hypothèse qu'on travaille dans la zone hyperbolique, ou la zone hyperbolique semi-discrète.

Condition d'ordre quatre (ABC_1^4 en dimension une, $ABC_{1,T}^4$ et $ABC_{2,T}^4$ en dimension deux) : en dimension deux, pour les conditions $ABC_{1,T}^4$, la stabilité n'est démontrée que dans le cas d'un problème à symétrie radiale. Pour les trois familles de conditions aux limites, la stabilité du problème continu est obtenue sous la condition supplémentaire (par rapport à la condition d'ordre trois) que la dérivée normale $\partial_{\mathbf{n}}V$ du potentiel est de signe constant sur la frontière. La stabilité du problème semi-discrétisé est obtenu sous les conditions supplémentaires que κ soit positive sur Σ , que la fonction $\kappa^3 + \partial_s^2 \kappa$ soit négative, et que la dérivée normale $\partial_{\mathbf{n}}W^n$ du potentiel soit positive sur Σ . Cependant, ces restrictions supplémentaires sont vraisemblablement des hypothèses trop fortes compte tenu de la faible amplitude des termes correcteurs d'ordre quatre.

Les résultats qu'on peut en déduire dans le cas d'un potentiel non linéaire de la forme $\mathcal{V} = V + f(|u|^2)$ sont donnés par les théorèmes 2.30 et 2.31 en dimension une (condition d'ordre deux uniquement), et par les théorèmes 5.49, 5.48, 5.51 et 5.50 en dimension deux.

Condition d'ordre deux ($NLABC_1^2$ en dimension une, $NLABC_{1,T}^2$ et $NLABC_{2,T}^2$ en dimension deux) : la stabilité du problème continu comme du problème semi-discret est obtenue sans autre condition que d'avoir u_0 à support compact dans Ω .

Condition d'ordre trois ($NLABC_{2,T}^3$ en dimension deux) : en dimension deux, la condition issue du changement de jauge n'est pas étudiée au-delà de l'ordre deux. Pour la condition $NLABC_{2,T}^3$ issue de la méthode directe, la stabilité est obtenue sous réserve que le potentiel V soit positif sur la frontière, et que f soit une fonction positive. Il faut également que la condition d'hyperbolicité soit vérifiée.

Condition d'ordre quatre : en dimension une comme en dimension deux, la stabilité du problème associé à cette condition n'est pas étudiée dans le cas non linéaire, car elle nécessite de maîtriser le signe de $\partial_{\mathbf{n}}f(|u|^2)$ sur la frontière, ce qui semble *a priori* difficile à tester.

Concernant les aspects plus prospectifs, du point de vue continu de nombreuses pistes ont été explorées pour construire les conditions aux limites artificielles les plus adaptées au potentiel. Nous en avons abandonné certaines, après avoir démontré qu'elles n'étaient qu'une approximation d'une autre famille de conditions aux limites, ce qui permet de se focaliser sur les CLA les plus précises sur le plan continu.

Nous n'avons pas considéré ici les questions ni d'existence de la solution du problème avec conditions aux limites artificielle, ni de régularité des solutions. Cette question intéressante mériterait une étude à part entière. Quant aux résultats de stabilité, nous n'avons aucun résultat lié à l'approche par approximants de Padé, mais des pistes existent notamment avec [93]. La stabilité du schéma de relaxation, pour le non linéaire en dimension deux, reste également à démontrer.

Sur le plan numérique, tous les calculs ont été effectués avec Matlab, dans lequel les conditions aux limites artificielles peuvent être ajoutées sans difficulté, ce qui permet d'obtenir rapidement une vérification numérique des résultats pressentis. Cependant, ce code est loin d'être optimal, et les temps de calcul sont bien trop élevés pour une exploitation plus poussée. Un des objectifs futurs est de transposer ces codes dans un logiciel tel que `GetDP`, développé par C. Geuzaine et P. Dular, associé au mailleur `gmsh` (C. Geuzaine et J.-F. Remacle). Cette migration du code permettra certainement une beaucoup plus grande efficacité numérique, et préparera l'extension à la dimension trois.

D'autres pistes existent pour l'amélioration des performances numériques, comme la recherche d'approximations rapides pour les convolutions (cf. [2] pour une vue d'ensemble sur ces approximations). On pourrait également remplacer les approximants de Padé par une autre approximation rationnelle de la racine carrée, avec le double objectif d'obtenir une preuve de stabilité, et éventuellement de minimiser la détérioration du conditionnement du système linéaire associé, qui devient pénalisante en dimension deux. La recherche d'un préconditionneur efficace et robuste est notamment un des ingrédients-clés de l'amélioration de nos codes, en particulier pour un passage à la dimension trois.

Une autre direction d'étude concerne l'extension à des équations vectorielles, à des systèmes d'équations de Schrödinger ou encore à des problèmes couplés comme l'équation de Schrödinger-Poisson. Les méthodes développées dans cette thèse pour obtenir les conditions aux limites peuvent également s'appliquer à d'autres équations dispersives.

A terme, les conditions aux limites développées dans cette thèse peuvent être utilisées comme conditions de transmission optimisées dans les problèmes de décomposition de domaines dans la veine des travaux de Desprès pour Helmholtz [27, 26, 55, 70]. Des premiers travaux sont déjà en cours sur ce sujet par Halpern et Szeftel [57]. Ceci fait également l'objet d'études dans le cadre de l'ANR Microwave (2009–2013). En vue d'une implémentation parallèle efficace, le passage à `gmsh-GetDP` sera un atout majeur.

Bibliographie

- [1] M. Abramowitz and I. Stegun. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables, 10th printing*, volume 55 of *National Bureau of Standards Applied Mathematics Series*. For sale by the Superintendent of Documents, U.S. Government Printing Office, Washington, D.C., 1964.
- [2] X. Antoine, A. Arnold, C. Besse, M. Ehrhardt, and A. Schädle. A review of transparent and artificial boundary conditions techniques for linear and nonlinear Schrödinger equations. *Commun. Comput. Phys.*, 4(4) :729–796, 2008.
- [3] X. Antoine and H. Barucq. Microlocal diagonalization of strictly hyperbolic pseudodifferential systems and application to the design of radiation conditions in electromagnetism. *SIAM J. Appl. Math.*, 61(6) :1877–1905 (electronic), 2001.
- [4] X. Antoine, H. Barucq, and A. Bendali. Bayliss-Turkel-like radiation conditions on surfaces of arbitrary shape. *J. Math. Anal. Appl.*, 229(1) :184–211, 1999.
- [5] X. Antoine, H. Barucq, and L. Vernhet. High-frequency asymptotic analysis of a dissipative transmission problem resulting in generalized impedance boundary conditions. *Asymptot. Anal.*, 26(3-4) :257–283, 2001.
- [6] X. Antoine and C. Besse. Étude microlocale d’une condition transparente pour l’équation de Schrödinger linéaire. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 331(5) :359–364, 2000.
- [7] X. Antoine and C. Besse. Quasi-analytic determination of the Dirichlet-to-Neumann operator associated to a linear Schrödinger-type equation. In *Mathematical and numerical aspects of wave propagation (Santiago de Compostela, 2000)*, pages 891–895. SIAM, Philadelphia, PA, 2000.
- [8] X. Antoine and C. Besse. Construction, structure and asymptotic approximations of a micro-differential transparent boundary condition for the linear Schrödinger equation. *J. Math. Pures Appl. (9)*, 80(7) :701–738, 2001.
- [9] X. Antoine and C. Besse. Une étude microlocale quasi-analytique d’une condition transparente pour l’équation de Schrödinger linéaire. In *Actes des V^{èmes} Journées Zaragoza-Pau de Mathématiques Appliquées et de Statistiques (Jaca, 1999)*, pages 93–100. Publ. Univ. Pau, Pau, 2001.
- [10] X. Antoine and C. Besse. Unconditionally stable discretization schemes of non-reflecting boundary conditions for the one-dimensional Schrödinger equation. *J. Comput. Phys.*, 188(1) :157–175, 2003.
- [11] X. Antoine, C. Besse, and S. Descombes. Artificial boundary conditions for one-dimensional cubic nonlinear Schrödinger equations. *SIAM J. Numer. Anal.*, 43(6) :2272–2293 (electronic), 2006.

- [12] X. Antoine, C. Besse, M. Ehrhardt, and P. Klein. Modeling boundary conditions for solving stationary Schrödinger equations. *En préparation*, 2010.
- [13] X. Antoine, C. Besse, and P. Klein. Absorbing boundary conditions for the one-dimensional Schrödinger equation with an exterior repulsive potential. *J. Comput. Phys.*, 228(2) :312–335, 2009.
- [14] X. Antoine, C. Besse, and P. Klein. Absorbing boundary conditions for Schrödinger equations with general potentials and nonlinearities. *Soumis*, 2010.
- [15] X. Antoine, C. Besse, and V. Mouysset. Numerical schemes for the simulation of the two-dimensional Schrödinger equation using non-reflecting boundary conditions. *Math. Comp.*, 73(248) :1779–1799 (electronic), 2004.
- [16] X. Antoine, C. Besse, and J. Szeftel. Towards accurate artificial boundary conditions for nonlinear PDEs through examples. *Cubo*, 11(4) :29–48, 2009.
- [17] X. Antoine, M. Darbas, and Y.-Y. Lu. An improved surface radiation condition for high-frequency acoustic scattering problems. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 195(33-36) :4060–4074, 2006.
- [18] A. Arnold. Numerically absorbing boundary conditions for quantum evolution equations. *VLSI Design*, 6 (1-4) :313–319, 1998.
- [19] A. Arnold. Mathematical concepts of open quantum boundary conditions. *Transp. Theory Stat. Phys.*, pages 30/4–6 561–584, 2001.
- [20] W. Bao. The nonlinear Schrödinger equation and applications in Bose-Einstein condensation and plasma physics. In *Dynamics in models of coarsening, coagulation, condensation and quantization*, volume 9 of *Lect. Notes Ser. Inst. Math. Sci. Natl. Univ. Singap.*, pages 141–239. World Sci. Publ., Hackensack, NJ, 2007.
- [21] W. Bao and Q. Du. Computing the ground state solution of Bose-Einstein condensates by a normalized gradient flow. *SIAM J. Sci. Comput.*, 25(5) :1674–1697 (electronic), 2004.
- [22] W. Bao and W. Tang. Ground-state solution of Bose-Einstein condensate by directly minimizing the energy functional. *J. Comput. Phys.*, 187(1) :230–254, 2003.
- [23] H. Barucq, C. Bekkey, and R Djellouli. Construction of local boundary conditions for an eigenvalue problem using micro-local analysis : application to optical waveguide problems. *J. Comput. Phys.*, 193(2) :666–696, 2004.
- [24] N. Ben Abdallah, P. Degond, and P. Markowich. On a one-dimensional Schrödinger-Poisson scattering model. *Z. Angew. Math. Phys.*, 48(1) :135–155, 1997.
- [25] N. Ben Abdallah, F. Méhats, and O. Pinaud. On an open transient Schrödinger-Poisson system. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 15(5) :667–688, 2005.
- [26] J.-D. Benamou and B. Desprès. A domain decomposition method for the Helmholtz equation and related optimal control problems. *J. Comput. Phys.*, 136(1) :68–82, 1997.
- [27] A. Bendali, Y. Boubendir, and M. Fares. A FETI-like domain decomposition method for coupling finite elements and boundary elements in large-size problems of acoustic scattering. *Computers and Structures*, 85 :526–535, 2007.
- [28] J.-P. Bérenger. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *J. Comput. Phys.*, 114(2) :185–200, 1994.

- [29] C. Besse. A relaxation scheme for the nonlinear Schrödinger equation. *SIAM J. Numer. Anal.*, 42(3) :934–952 (electronic), 2004.
- [30] J.-F. Bony, R. Carles, D. Häfner, and L. Michel. Scattering theory for the Schrödinger equation with repulsive potential. *J. Math. Pures Appl. (9)*, 84(5) :509–579, 2005.
- [31] J.-M. Bony. Calcul symbolique et propagation des singularités pour les équations aux dérivées partielles non linéaires. *Ann. Sci. École Norm. Sup. (4)*, 14(2) :209–246, 1981.
- [32] A. Boutet de Monvel, A. S. Fokas, and D. Shepelsky. Analysis of the global relation for the nonlinear Schrödinger equation on the half-line. *Lett. Math. Phys.*, 65(3) :199–212, 2003.
- [33] C.-H. Bruneau, L. Di Menza, and T. Lehner. Numerical resolution of some nonlinear Schrödinger-like equations in plasmas. *Numer. Methods Partial Differential Equations*, 15(6) :672–696, 1999.
- [34] L. Burgnies, O. Vanbésien, and D. Lippens. Transient analysis of ballistic transport in stublike quantum waveguides. *Appl. Phys. Lett.*, 71 :803–805, 1997.
- [35] R. Carles. Nonlinear Schrödinger equations with repulsive harmonic potential and applications. *SIAM J. Math. Anal.*, 35(4) :823–843 (electronic), 2003.
- [36] R. Carles. Linear vs. nonlinear effects for nonlinear Schrödinger equations with potential. *Commun. Contemp. Math.*, 7(4) :483–508, 2005.
- [37] R. Carles. *Semi-classical analysis for nonlinear Schrödinger equations*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Hackensack, NJ, 2008.
- [38] T. Cazenave. *Blow up and scattering in the nonlinear Schrödinger equation*. Textos de Métodos Matemáticos 30, I.M.U.F.R.J., Rio de Janeiro, 1994.
- [39] T. Cazenave. *An introduction to nonlinear Schrödinger equations*. Instituto de Matemática-UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, 1996.
- [40] M.M. Cerimele, M.L. Chiofalo, F. Pistella, S. Succi, and M.P. Tosi. Numerical solution of the Gross-Pitaevskii equation using an explicit finite-difference scheme : An application to trapped Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. E*, 62(1) :1382–1389, Jul 2000.
- [41] G. Chen and J. Zhou. *Boundary element methods*. Computational Mathematics and Applications. Academic Press Ltd., London, 1992.
- [42] M.L. Chiofalo, S. Succi, and M.P. Tosi. Ground state of trapped interacting Bose-Einstein condensates by an explicit imaginary-time algorithm. *Phys. Rev. E*, 62(5) :7438–7444, Nov 2000.
- [43] J.F. Claerbout. Coarse grid calculation of waves in inhomogeneous media with application to delineation of complicated seismic structure. *Geophysics*, 35 :407–418, 1970.
- [44] G. Dauphin. *Application des représentations diffusives au temps discret*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Télécommunications, 2001.
- [45] P. Debernardi and P. Fasano. Quantum confined Stark effect in semiconductor quantum wells including valence band mixing and Coulomb effects. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 29 :2741–2755, 1993.
- [46] L. Di Menza. Numerical computation of solitons for optical systems. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 43(1) :173–208, 2009.

- [47] G. Doetsch. *Anleitung zum praktischen Gebrauch der Laplace-Transformation und der Z-Transformation*. Dritte, Neu bearbeitete Auflage. Mit einer Tabelle Korrespondierender Funktionen von Rudolf Herschel. R. Oldenbourg Verlag, Munich, 1967.
- [48] S.-H. Dong, Z.-Q. Ma, and G. Esposito. Exact solutions of the Schrödinger equation with inverse-power potential. *Found. Phys. Lett.*, 12(5) :465–474, 1999.
- [49] E. Dubach. Artificial boundary conditions for diffusion equations : numerical study. *J. Comput. Appl. Math.*, 70(1) :127–144, 1996.
- [50] J. Duque. Solving time-dependent equations of Schrödinger-type using mapped infinite elements. *Int. J. Modern Phys. C*, 2 :309–316, 2005.
- [51] A. Durán and J. M. Sanz-Serna. The numerical integration of relative equilibrium solutions. The nonlinear Schrödinger equation. *IMA J. Numer. Anal.*, 20(2) :235–261, 2000.
- [52] B. Engquist and A. Majda. Absorbing boundary conditions for the numerical simulation of waves. *Math. Comp.*, 31(139) :629–651, 1977.
- [53] B. Engquist and A. Majda. Radiation boundary conditions for acoustic and elastic wave calculations. *Comm. Pure Appl. Math.*, 32(3) :313–357, 1979.
- [54] H. Galicher. *Analyse mathématique de modèles en nanophysique*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2009.
- [55] M.J. Gander, F. Magoulès, and F. Nataf. Optimized Schwarz methods without overlap for the Helmholtz equation. *SIAM J. Sci. Comput.*, 24(1) :38–60 (electronic), 2002.
- [56] X.-G. Gong, L. Shen, D. Zhang, and A. Zhou. Finite element approximations for Schrödinger equations with applications to electronic structure computations. *J. Comput. Math.*, 26(3) :310–323, 2008.
- [57] L. Halpern and J. Szeftel. Optimized and quasi-optimal Schwarz waveform relaxation for the one dimensional Schrödinger equation. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, à paraître (2010–2011).
- [58] S. Kar and R. R. Parwani. Can degenerate bound states occur in one-dimensional quantum mechanics? *Europhys. Lett. EPL*, 80(3) :Art. 30004, 5, 2007.
- [59] D. Klindworth. Discrete transparent boundary conditions for multiband effective mass approximations. Master’s thesis, Technische Universität Berlin, 2009.
- [60] R. Koley and S. Kar. Exact bound states in volcano potentials. *Phys. Lett. A*, 363(5-6) :369–373, 2007.
- [61] R. Kosloff and D. Kosloff. Absorbing boundaries for wave propagation problems. *J. Comput. Phys.*, 63(2) :363–376, 1986.
- [62] R. Lascar. Propagation des singularités des solutions d’équations pseudo-différentielles quasi homogènes. *Ann. Inst. Fourier (Grenoble)*, 27(2) :vii–viii, 79–123, 1977.
- [63] C.S. Lent and D.J. Kirkner. The quantum transmitting boundary method. *J. Appl. Phys.*, 67(10) :6353–6359, 1990.
- [64] M. Levy. Non-local boundary conditions for radiowave propagation. *Phys. Rev. E*, 62(1) :1382–1389, Jul 2000.
- [65] M. Levy. *Parabolic equation methods for electromagnetic wave propagation*, volume 45 of *IEE Electromagnetic Waves Series*. Institution of Electrical Engineers (IEE), London, 2000.

- [66] E.F. Lindmann. Free-space boundary conditions for the time dependent wave equation. *J. Comput. Phys.*, 18 :16–78, 1985.
- [67] E.Z. Liverts, E.G. Drukarev, and V.B. Mandelzweig. Accurate analytic presentation of solution of the Schrödinger equation with arbitrary physical potential. *Ann. Physics*, 322(12) :2958–2577, 2007.
- [68] E. Lorin, A. Bandrauk, and S. Chelkowski. Numerical Maxwell-Schrödinger model for laser-molecule interaction and propagation. *Comput. Phys. Comm.*, 177 (12) :908–932, 2007.
- [69] E. Lorin, A. Bandrauk, and S. Chelkowski. Mathematical modeling of boundary conditions for laser-molecule time dependent Schrödinger equations and some aspects of their numerical computation - one-dimensional case. *Numer. Meth. for P.D.E.*, 25 :110–136, 2009.
- [70] F. Magoulès, P. Iványi, and B.H.V. Topping. Non-overlapping Schwarz methods with optimized transmission conditions for the Helmholtz equation. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 193(45-47) :4797–4818, 2004.
- [71] F.A. Milinazzo, C.A. Zala, and G.H. Brooke. Rational square-root approximations for parabolic equation algorithms. *J. Acoust. Soc. Amer.*, 101 (2) :760–766, 1997.
- [72] C. Moyer. Numerical solution of the stationary state Schrödinger equation using transparent boundary conditions. *Computing in Science and Engineering*, 8(4) :32–40, 2006.
- [73] J. G. Muga, J. P. Palao, B. Navarro, and I. L. Egusquiza. Complex absorbing potentials. *Phys. Rep.*, 395(6) :357–426, 2004.
- [74] F. H. Murray. The Asymptotic Expansion of the Functions $W_{k,m}(z)$ of Whittaker. *Amer. J. Math.*, 45(3) :186–191, 1923.
- [75] L. Nirenberg. *Pseudodifferential operators and some applications*, volume 17 of *Regional Conf. Ser. in Math. AMS 17, Lectures on Linear Partial Differential Equations*. AMS, 1973.
- [76] S. Odermatt, M. Luisier, and B. Witzigmann. Bandstructure calculation using the $k \cdot p$ method for arbitrary potentials with open boundary conditions. *J. Appl. Phys.*, 97 :046104, 2005.
- [77] J. S Papadakis and E. T Flouri. A Neumann to Dirichlet map for the bottom boundary of a stratified sub-bottom region in parabolic approximation. *J. Comput. Acoust.*, 16(3) :409–425, 2008.
- [78] J.S. Papadakis. Exact non-reflecting boundary conditions for parabolic-type approximations in underwater acoustics. *J. Comput. Acoust.*, 2 :83–98, 1994.
- [79] O. Pinaud. Uniform bounds and weak solutions to an open Schrödinger-Poisson system. *Commun. Math. Sci.*, 5(3) :697–722, 2007.
- [80] F.F. Register, U. Ravaioli, and K. Hess. Numerical simulation of mesoscopic system with open boundaries using multidimensional time-dependent Schrödinger equation. *J. Appl. Phys.*, 69 :7153–7158, 1991.
- [81] F. Schmidt and P. Deuffhard. Discrete transparent boundary conditions for the numerical solution of Fresnel’s equation. *Comput. Math. Appl.*, 29(9) :53–76, 1995.
- [82] H. Shao and Z. Wang. Arbitrarily precise numerical solutions of the one-dimensional Schrödinger equation. *Comput. Phys. Comm.*, 180(1) :1–7, 2009.

- [83] C. Sulem and P.-L. Sulem. *The nonlinear Schrödinger equation*, volume 139 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 1999. Self-focusing and wave collapse.
- [84] J. Szeftel. Design of absorbing boundary conditions for Schrödinger equations in \mathbb{R}^d . *SIAM J. Numer. Anal.*, 42(4) :1527–1551 (electronic), 2004.
- [85] J. Szeftel. Absorbing boundary conditions for nonlinear scalar partial differential equations. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 195(29-32) :3760–3775, 2006.
- [86] J. Szeftel. Absorbing boundary conditions for one-dimensional nonlinear Schrödinger equations. *Numer. Math.*, 104(1) :103–127, 2006.
- [87] J. Szeftel. A nonlinear approach to absorbing boundary conditions for the semilinear wave equation. *Math. Comp.*, 75(254) :565–594 (electronic), 2006.
- [88] F.D. Tappert. The parabolic approximation method. In *Wave propagation and underwater acoustics (Workshop, Mystic, Conn., 1974)*, pages 224–287. Lecture Notes in Phys., Vol. 70. Springer, Berlin, 1977.
- [89] M. Taylor. *Pseudodifferential operators*, volume 34 of *Princeton Mathematical Series*. Princeton University Press, Princeton, N.J., 1981.
- [90] O. Vacus. Mathematical analysis of absorbing boundary conditions for the wave equation : The corner problem. *Math. Comp.*, 74(249) :177–200, 2004.
- [91] D. Yevick, T. Friese, and F. Schmidt. A comparison of transparent boundary conditions for the Fresnel equation. *J. Comput. Phys.*, 168(2) :433–444, 2001.
- [92] J. Yu and S.-H. Dong. Exactly solvable potentials for the Schrödinger equation with spatially dependent mass. *Phys. Lett. A*, 325(3-4) :194–198, 2004.
- [93] J. Zhang, Z.Z. Sun, X. Wu, and D. Wang. A finite difference scheme for the Schrödinger equation with high-order absorbing boundary conditions. *Submitted*, 2010.
- [94] Y. Zhang and W. Bao. Dynamics of the center of mass in rotating Bose-Einstein condensates. *Appl. Numer. Math.*, 57(5-7) :697–709, 2007.
- [95] C. Zheng. A perfectly matched layer approach to the nonlinear Schrödinger wave equations. *J. Comput. Phys.*, 227(1) :537–556, 2007.
- [96] C. Zheng. An exact absorbing boundary condition for the Schrödinger equation with sinusoidal potentials at infinity. *Commun. Comput. Phys.*, 3(3) :641–658, 2008.
- [97] A. Zisowsky, A. Arnold, M. Ehrhardt, and T. Koprucki. Discrete transparent boundary conditions for transient *kp*-Schrödinger equations with application to quantum heterostructures. *ZAMM Z. Angew. Math. Mech.*, 85(11) :793–805, 2005.