

ETUDE COMPARATIVE DU TRAITEMENT DES CONDITIONS AUX LIMITES TRANSPARENTES POUR L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER

par

Christophe Besse

Univ Lille 1/ Labo Paul Painlevé / Inria Equipe Simpaf

Jeudi 22 Mars 2007

- 1 INTRODUCTION
- 2 CONDITIONS AUX LIMITES TRANSPARENTES
- 3 GÉNÉRALISATION AUX CAS 2D ET NON LINÉAIRES
- 4 APPLICATION NUMÉRIQUE

- 1 INTRODUCTION
- 2 CONDITIONS AUX LIMITES TRANSPARENTES
- 3 GÉNÉRALISATION AUX CAS 2D ET NON LINÉAIRES
- 4 APPLICATION NUMÉRIQUE

INTRODUCTION

Collaboration avec

- X. Antoine : IECN-Nancy
- A. Arnold : Techn. Univ. Wien
- M. Ehrhardt : Techn. Univ. Berlin
- A. Schädle : Zuse-Institut Berlin

MOTIVATION : La résolution numérique de l'équation de Schrödinger linéaire ou non linéaire conduit à l'introduction d'un domaine de calcul fini Ω .
⇒ introduction d'une frontière régulière fictive Γ

QUESTIONS NATURELLES :

- 1 Quelles peuvent être les conditions à imposer sur $\Gamma \times [0, T]$ tel que la solution approchée coïncide avec la restriction à Ω de la vraie solution ?
- 2 Si ces conditions existent, comment les manipuler numériquement ?

OBJECTIF : revue des solutions existentes.

INTRODUCTION

Collaboration avec

- X. Antoine : IECN-Nancy
- A. Arnold : Techn. Univ. Wien
- M. Ehrhardt : Techn. Univ. Berlin
- A. Schädle : Zuse-Institut Berlin

MOTIVATION : La résolution numérique de l'équation de Schrödinger linéaire ou non linéaire conduit à l'introduction d'un domaine de calcul fini Ω .
 \Rightarrow introduction d'une frontière régulière fictive Γ

QUESTIONS NATURELLES :

- 1 Quelles peuvent être les conditions à imposer sur $\Gamma \times [0, T]$ tel que la solution approchée coïncide avec la restriction à Ω de la vraie solution ?
- 2 Si ces conditions existent, comment les manipuler numériquement ?

OBJECTIF : revue des solutions existentes.

INTRODUCTION

Collaboration avec

- X. Antoine : IECN-Nancy
- A. Arnold : Techn. Univ. Wien
- M. Ehrhardt : Techn. Univ. Berlin
- A. Schädle : Zuse-Institut Berlin

MOTIVATION : La résolution numérique de l'équation de Schrödinger linéaire ou non linéaire conduit à l'introduction d'un domaine de calcul fini Ω .
⇒ introduction d'une frontière régulière fictive Γ

QUESTIONS NATURELLES :

- 1 Quelles peuvent être les conditions à imposer sur $\Gamma \times [0, T]$ tel que la solution approchée coïncide avec la restriction à Ω de la vraie solution ?
- 2 Si ces conditions existent, comment les manipuler numériquement ?

OBJECTIF : revue des solutions existentes.

EQUATION DE SCHRÖDINGER 1D

$$\begin{aligned} Lu &= i\partial_t u + \partial_x^2 u - V(x, t)u = 0, & (x, t) \in \mathbb{R}_x \times \mathbb{R}_t^{*+}, \\ \lim_{|x| \rightarrow \infty} u(x, t) &= 0, \\ u(x, 0) &= u_0(x), & \text{supp}(u_0) \in [x_l, x_r], \end{aligned}$$

V : potentiel réel donné, constant en dehors de $[x_l, x_r]$,

$V(x) = V_l$ si $x < x_l$, $V(x) = V_r$ si $x > x_r$.

THM : si $u^0 \in L^2(\mathbb{R})$ et $V \in C([0, \infty[, L^\infty(\mathbb{R}))$ alors $\exists ! u \in C(\mathbb{R}^+, L^2(\mathbb{R}))$
et $\|u(t)\|_{L^2(\mathbb{R})} = \|u^0\|_{L^2(\mathbb{R})}$, $\forall t \geq 0$.

u vit dans $Q = \{(x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+\}$, **non borné**.

Pour résoudre ce problème numériquement, on doit

- se restreindre au domaine de calcul $Q_{int} = \{(x, t) \in]x_l, x_r[\times \mathbb{R}^+\}$
- introduire des conditions aux limites artificielles ou des couches absorbantes.
- alternative : éléments infinis

EQUATION DE SCHRÖDINGER 1D

$$\begin{aligned} Lu &= i\partial_t u + \partial_x^2 u - V(x, t)u = 0, & (x, t) \in \mathbb{R}_x \times \mathbb{R}_t^{*+}, \\ \lim_{|x| \rightarrow \infty} u(x, t) &= 0, \\ u(x, 0) &= u_0(x), & \text{supp}(u_0) \in [x_l, x_r], \end{aligned}$$

V : potentiel réel donné, constant en dehors de $[x_l, x_r]$,

$V(x) = V_l$ si $x < x_l$, $V(x) = V_r$ si $x > x_r$.

THM : si $u^0 \in L^2(\mathbb{R})$ et $V \in C([0, \infty[, L^\infty(\mathbb{R}))$ alors $\exists ! u \in C(\mathbb{R}^+, L^2(\mathbb{R}))$
et $\|u(t)\|_{L^2(\mathbb{R})} = \|u^0\|_{L^2(\mathbb{R})}$, $\forall t \geq 0$.

u vit dans $Q = \{(x, t) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+\}$, **non borné**.

Pour résoudre ce problème numériquement, on doit

- se restreindre au domaine de calcul $Q_{int} = \{(x, t) \in]x_l, x_r[\times \mathbb{R}^+\}$
- introduire des conditions aux limites artificielles ou des couches absorbantes.
- alternative : éléments infinis

INTRODUCTION

Objectif des conditions aux limites artificielles :

approcher la solution exacte u de Q , restreinte à Q_{int}

- conditions aux limites absorbantes (CLA) : problème bien posé + "fonctionnelle énergie" absorbée à la frontière
- conditions aux limites transparentes (CLT) : solution approchée coïncide avec u sur Q_{int} .
- CLA locales en espace et/ou en temps
- CLT non locales en temps (et en espace pour dimensions sup.)

REMARQUE : si $V(x, t) = V(t)$

$$\begin{array}{ccc} i\partial_t u + \partial_x^2 u - V(t)u = 0 & \longleftrightarrow & i\partial_t v + \partial_x^2 v = 0 \\ & \curvearrowright & \curvearrowleft \\ & v(x, t) = u(x, t) \exp\left(i \int_0^t V(s) ds\right) & \end{array}$$

- 1 INTRODUCTION
- 2 CONDITIONS AUX LIMITES TRANSPARENTES
- 3 GÉNÉRALISATION AUX CAS 2D ET NON LINÉAIRES
- 4 APPLICATION NUMÉRIQUE

CLTs ANALYTIQUES SCHRÖDINGER 1D

CLT dérivées dans différents champs d'applications

- Papadakis (1982), Dalrymple-Martin (1992) : équations paraboliques, Baskakov-Popov (1991)
- Extension inhomogène : Arnold (1991), Ben Abdallah-Méhats-Pinaud (2005)

Non locales en t et **connectent** $\partial_x u(x_{l,r}, t)$ avec $u(x_{l,r}, t)$.

APPLICATION DE DIRICHLET-À-NEUMANN (DTN)

$$\partial_{\mathbf{n}} u(x, t) = -\frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{\pi}} e^{-iV_{l,r}t} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \frac{u(x, \tau) e^{iV_{l,r}\tau}}{\sqrt{t-\tau}} d\tau \quad \text{en } x = x_l, x_r,$$

où \mathbf{n} désigne la normale unitaire sortante en x_l, x_r .

NOTATIONS ET HYPOTHÈSES :

- $\Omega =]x_l, x_r[, \Omega_l =]-\infty, x_l[, \Omega_r = [x_r, \infty[, \Gamma = \{x_l, x_r\}$
- Continuité de u et $\partial_x u$ à la traversée de Γ

QUESTION : recherche de la condition aux limites sur Γ faisant passer les données de Ω vers $\Omega_{l,r}$.

CLTs ANALYTIQUES SCHRÖDINGER 1D

Avec la décomposition $L^2(\mathbb{R}) = L^2(\Omega) \oplus L^2(\Omega_r \cup \Omega_l)$, Schrödinger \iff

PROBLÈME INTÉRIEUR

$$\begin{cases} (i\partial_t + \partial_x^2)v = 0, & x \in \Omega, t > 0, \\ \partial_x v = \partial_x w, & x \in \Gamma, t > 0, \\ v(x, 0) = u^0(x), & x \in \Omega. \end{cases}$$

PROBLÈME EXTÉRIEUR

$$\begin{cases} (i\partial_t + \partial_x^2)w = 0, & x \in (\Omega_l \cup \Omega_r), t > 0, \\ w(x, t) = v(x, t), & x = x_{l,r}, t > 0, \\ \lim_{|x| \rightarrow \infty} w(x, t) = 0, & t > 0, \\ w(x, 0) = 0, & x \in \Omega_l \cup \Omega_r. \end{cases}$$

Analyse par transformée de Laplace

$$\mathcal{L}(u)(x, \tau) = \hat{u}(\tau) = \int_0^\infty u(x, t) e^{-\tau t} dt$$

avec la covariable $\tau = \sigma + i\omega$, $\sigma > 0$

Laplace dans Ω_r $i\partial_t w + \partial_x^2 w = 0 \longrightarrow i\tau \hat{w} + \partial_x^2 \hat{w} = 0$

Solution : $\hat{w}(x, \tau) = A^+(\tau) e^{\sqrt[4]{-i\tau} x} + A^-(\tau) e^{-\sqrt[4]{-i\tau} x}$
avec la détermination de la racine carrée telle que $Re(\sqrt[4]{\cdot}) > 0$.

CLTs ANALYTIQUES SCHRÖDINGER 1D

$$w \in L^2(\Omega_r) \Rightarrow A^+ = 0$$

$$\hat{w}(x, \tau) = e^{-\sqrt{-i\tau}(x-x_r)} \mathcal{L}(w(x_r, \cdot))(\tau),$$

alors en dérivant et par continuité

$$\begin{aligned} \partial_x \hat{w}(x, \tau)|_{x=x_r} &= -\sqrt{-i\tau} \hat{w}(x, \tau)|_{x=x_r} \\ &= -e^{-i\pi/4} \tau \frac{\hat{w}(x, \tau)|_{x=x_r}}{\sqrt{\tau}} \end{aligned}$$

Laplace inverse

$$\partial_x w(x, t)|_{x=x_r} = -e^{-i\pi/4} \partial_t \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{w(x, s)|_{x=x_r}}{\sqrt{t-s}} ds \right) = -e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} w(x_r, t)$$

Condition analogue en x_l

$$-\partial_x w(x, t)|_{x=x_l} = -e^{-i\pi/4} \partial_t \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{w(x, s)|_{x=x_l}}{\sqrt{t-s}} ds \right) = -e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} w(x_l, t)$$

CONDITION AUX LIMITES :

$$(\partial_{\mathbf{n}} + e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2})w = 0 \text{ sur } \Gamma$$

A résoudre (*)

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

PROPRIÉTÉ D'(*)

Si $u_0 \in H^1(\Omega)$, il existe une solution $v \in C(\mathbb{R}_t^+, H^1(\Omega))$. De plus, v vérifie

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

et la solution est unique

Rappel : sur \mathbb{R} tout entier, on a

$$\|u(t)\|_{L^2} = \|u_0\|_{L^2}, \quad \forall t > 0.$$

CLTs ANALYTIQUES SCHRÖDINGER 1D

REMARQUE 1 Condition aux limites d'impédance

$$u(x, t) = -\frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\partial_{\mathbf{n}} u(x, \tau)}{\sqrt{t - \tau}} d\tau, \quad \text{en } x = x_{l,r},$$

sous la forme d'une application Neumann-à-Dirichlet (NtD).

CLTs ANALYTIQUES SCHRÖDINGER 1D

REMARQUE 1 Condition aux limites d'impédance

$$u(x, t) = -\frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\partial_{\mathbf{n}} u(x, \tau)}{\sqrt{t - \tau}} d\tau, \quad \text{en } x = x_{l,r},$$

sous la forme d'une application Neumann-à-Dirichlet (NtD).

REMARQUE 2 Potentiel dépendant du temps

$$\partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\pi/4} e^{i\mathcal{V}} \partial_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u) = 0 \text{ sur } \Gamma$$

où $\mathcal{V}(t) = \int_0^t V(s) ds$.

CLTs ANALYTIQUES SCHRÖDINGER 1D

REMARQUE 1 Condition aux limites d'impédance

$$u(x, t) = -\frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\partial_{\mathbf{n}} u(x, \tau)}{\sqrt{t-\tau}} d\tau, \quad \text{en } x = x_{l,r},$$

sous la forme d'une application Neumann-à-Dirichlet (NtD).

REMARQUE 2 Potentiel dépendant du temps

$$\partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\pi/4} e^{i\mathcal{V}} \partial_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u) = 0 \text{ sur } \Gamma$$

où $\mathcal{V}(t) = \int_0^t V(s) ds$.

REMARQUE 3 CLT inhomogène : onde entrante $u_{in}(t)$ en x_r

$$\partial_x (u(x_r, t) - u_{in}(x_r, t)) = -\frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{\pi}} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{(u(x_r, \tau) - u_{in}(x_r, \tau))}{\sqrt{t-\tau}} d\tau,$$

CLTs ANALYTIQUES SCHRÖDINGER 1D

REMARQUE 1 Condition aux limites d'impédance

$$u(x, t) = -\frac{e^{i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\partial_{\mathbf{n}} u(x, \tau)}{\sqrt{t-\tau}} d\tau, \quad \text{en } x = x_{l,r},$$

sous la forme d'une application Neumann-à-Dirichlet (NtD).

REMARQUE 2 Potentiel dépendant du temps

$$\partial_{\mathbf{n}} u + e^{-i\pi/4} e^{i\mathcal{V}} \partial_t^{1/2} (e^{-i\mathcal{V}} u) = 0 \text{ sur } \Gamma$$

où $\mathcal{V}(t) = \int_0^t V(s) ds$.

REMARQUE 3 CLT inhomogène : onde entrante $u_{in}(t)$ en x_r

$$\partial_x (u(x_r, t) - u_{in}(x_r, t)) = -\frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{\sqrt{\pi}} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{(u(x_r, \tau) - u_{in}(x_r, \tau))}{\sqrt{t-\tau}} d\tau,$$

REMARQUE 4 u_0 à support non compact

$$\partial_x u(x_r, t) = -\frac{e^{-\frac{\pi}{4}i}}{\sqrt{\pi}} \int_0^t \frac{\partial_t u(x_r, \tau)}{\sqrt{t-\tau}} d\tau + \frac{e^{-\frac{\pi}{4}i}}{\sqrt{\pi t}} \int_{x_r}^{\infty} \partial_x u^0(x) e^{\frac{i(x-x_r)^2}{t}} dx$$

RÉSUMÉ : dérivation des CLTs analytiques

- 1 Séparer le problème original en deux équations couplées : problèmes intérieurs et extérieurs
- 2 Appliquer la transformée de Laplace en temps t
- 3 Résoudre l'EDO en x
- 4 Autoriser seulement les ondes "sortantes" en sélectionnant la solution décroissante quand $x \rightarrow \pm\infty$
- 5 Identifier les valeurs de Dirichlet et Neumann en $x_{l,r}$
- 6 Laplace inverse

CLTs $\frac{1}{2}$ DISCRÈTES EN TEMPS SCHRÖDINGER 1D

Discrétisation semi discrète en temps de

EQUATION DE SCHRÖDINGER 1D

$$i\partial_t u = -\partial_x^2 u, \quad (x, t) \in \mathbb{R}_x \times \mathbb{R}_t^{*+}$$

Méthode A-stable : pas de temps Δt , u^n approx. de $u(x, n\Delta t)$.

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

Exemple : Crank-Nicolson $K = 1$, $\alpha_0 = 1$, $\alpha_1 = -1$, $\beta_{0,1} = 1/2$.

$$i \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = -\partial_x^2 \frac{u^{n+1} + u^n}{2}, \quad x \in \mathbb{R}, \forall n \in \mathbb{N},$$

CLTs $\frac{1}{2}$ DISCRÈTES EN TEMPS SCHRÖDINGER 1D

On procède comme pour les CLTs analytiques : séparation en problèmes intérieurs et extérieurs.

A la place de Laplace :

TRANSFORMÉE EN \mathcal{Z}

$$\mathcal{Z}(u^n) = \hat{u}(z) := \sum_{n=0}^{\infty} u^n z^{-n}, \quad z \in \mathbb{C}, \quad |z| > R(\mathcal{Z}(u^n)),$$

où $R(\mathcal{Z}(u^n))$ est le rayon de convergence de la série de Laurent $\mathcal{Z}(u^n)$.

Propriété intéressante :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(u')(\tau) &= s\hat{u}(\tau) - u(0^+) & \mathcal{Z}(u_{n+1}) &= z\hat{u}(z) - zu_0 \\ & & \mathcal{Z}(u_{n+1} \pm u_n) &= (z \pm 1)\hat{u}(z) - zu_0 \end{aligned}$$

CLTs $\frac{1}{2}$ DISCRÈTES EN TEMPS SCHRÖDINGER 1D

Application de la transformée en \mathcal{Z} au schéma numérique avec hypothèse $\text{supp}(u^j) \subset [x_l, x_r]$, $0 \leq j \leq K-1$:

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

où

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

est la *fonction génératrice du schéma d'intégration en temps*.

Exemples :

- Crank Nicolson : $\delta(z) = 2 \frac{z-1}{z+1}$
- Euler implicite : $\delta(z) = \frac{z-1}{z}$

CLTs $\frac{1}{2}$ DISCRÈTES EN TEMPS SCHRÖDINGER 1D

Résolution de l'EDO $\left(\partial_x^2 + i\frac{\delta(z)}{\Delta t}\right)\hat{w}(z) = 0$ en x

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

Il faut $u^n \in L^2(]x_r, \infty[)$. Or, méthode A-stable $\Rightarrow \delta$ envoie $\{|z| > 1\}$ dans $\{\text{Re}(z) > 0\}$

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

Dérivation de $\hat{w}(x, z)$ par rapport à x

$$\mathcal{Z}(\partial_x w^n)(z) = -e^{-i\pi/4} \sqrt{i\frac{\delta(z)}{\Delta t}} \mathcal{Z}(w^n)(z),$$

en $x = x_r$, puis transformée en \mathcal{Z} inverse.

CLTs $\frac{1}{2}$ DISCRÈTES EN TEMPS SCHRÖDINGER 1D

Exemple pour Crank-Nicolson (Schmidt-Deuffhard 95, Antoine-Besse 03, ...)

CRANK-NICOLSON

$$i \frac{v^{n+1} - v^n}{\Delta t} = -\partial_x^2 \frac{v^{n+1} + v^n}{2}, \quad x \in \Omega, \forall n \in \mathbb{N}_0,$$

$$v^0(x) = u^0(x), \quad x \in \Omega,$$

$$\partial_{\mathbf{n}} v^{n+1} = \sum_{k=0}^{n+1} \omega_k^{(l,r)} v^{n+1-k}, \quad \text{en } x = x_l, x_r,$$

$$\omega_k = -e^{-\frac{i\pi}{4}} \frac{2}{\sqrt{2\Delta t}} (-1)^k \tilde{\omega}_k, \quad k \in \mathbb{N},$$

$$(\tilde{\omega}_0, \tilde{\omega}_1, \tilde{\omega}_2, \tilde{\omega}_3, \tilde{\omega}_4, \tilde{\omega}_5, \dots) = (1, 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4}, \frac{1 \cdot 3}{2 \cdot 4}, \dots).$$

De manière équivalente, on peut écrire la condition d'impédance

$$v^{n+1} = -e^{\frac{i\pi}{4}} \frac{\sqrt{2\Delta t}}{2} \sum_{k=0}^{n+1} \tilde{\omega}_k \partial_{\mathbf{n}} v^{n+1-k}, \quad \text{en } x = x_l, x_r.$$

CONDITION DE PÔLES SCHRÖDINGER 1D

Ruprecht, Schädle, Schmidt, Zschiedrich : preprint

Rappel : Laplace dans Ω_r

$$(*) \quad i\partial_t w + \partial_x^2 w = 0 \quad \longrightarrow \quad i\tau \hat{w} + \partial_x^2 \hat{w} = 0$$

Solution : $\hat{w}(x, \tau) = A^+(\tau)e^{\sqrt{-i\tau}x} + A^-(\tau)e^{-\sqrt{-i\tau}x} = S1 + S2$.

Choix de $A^+ = 0$ pour assurer $\lim_{x \rightarrow \infty} w = 0$

Laplace en x (covariable q) de (*)

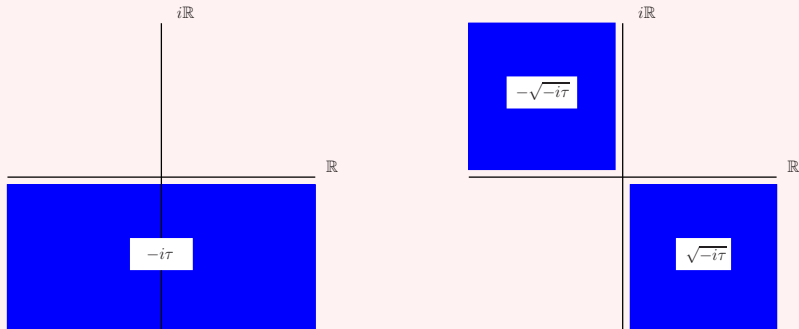
$$i\tau W(q, \tau) + q^2 W(q, \tau) - q\hat{w}(x_r, \tau) - \partial_x \hat{w}(x_r, \tau) = 0$$

Résolution en $W(q, \tau)$:

$$W(q, \tau) = \underbrace{\frac{\hat{w}(x_r, \tau) + \frac{\partial_x \hat{w}(x_r, \tau)}{\sqrt{-i\tau}}}{2(q - \sqrt{-i\tau})}}_{T1} + \underbrace{\frac{\hat{w}(x_r, \tau) - \frac{\partial_x \hat{w}(x_r, \tau)}{\sqrt{-i\tau}}}{2(q + \sqrt{-i\tau})}}_{T2}.$$

CONDITION DE PÔLES SCHRÖDINGER 1D

$$\operatorname{Re}(\tau) > 0 \Rightarrow$$



$$W(q, \tau) = \underbrace{\frac{\alpha}{(q - \sqrt{-i\tau})}}_{T_1} + \underbrace{\frac{\beta}{(q + \sqrt{-i\tau})}}_{T_2}.$$

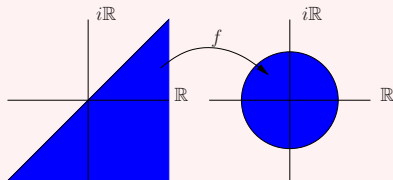
W a un pôle T_2 dans le 2^{ème} quadrant et T_1 dans le 4^{ème}.

Laplace inverse en x : $T_1 \leftrightarrow A^+(\tau)e^{\sqrt[4]{-i\tau}x}$ et $T_2 \leftrightarrow A^-(\tau)e^{-\sqrt[4]{-i\tau}x}$

CONDITION DE PÔLES SCHRÖDINGER 1D

Exclusion de T_1 : forcer W à être analytique dans un demi-plan contenant 4^{ème} quadrant mais pas le 2^{ème}.

Transformation de Möbius : $f : \mathbb{C} \setminus \{s_0\} \rightarrow \mathbb{C} \setminus \{1\}$
 $q \mapsto \tilde{q} = \frac{q + s_0}{q - s_0}$



$W(\tilde{q}, \tau)$ doit être analytique dans $B(0, 1) \Rightarrow W(\tilde{q}, \tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{a}_n(\tau) \tilde{q}^n$.

CONDITION DE PÔLES SCHRÖDINGER 1D

- $s_0 = i - 1$.

- Insérer la série tronquée $W(\tilde{q}, \tau) = \sum_{n=0}^N \hat{a}_n(\tau) \tilde{q}^n$ dans

$$i\tau W(q, \tau) + q^2 W(q, \tau) - q\hat{w}(x_r, \tau) - \partial_x \hat{w}(x_r, \tau) = 0$$

- Trier les puissances de \tilde{q}

- $\tilde{q}^0 \rightarrow (i\tau + s_0^2)\hat{a}_0 + s_0\hat{w}(x_r, \tau) - \partial_x \hat{w}(x_r, \tau) = 0$

$$\tilde{q}^1 \rightarrow 4s_0^2\hat{a}_0 + i\tau\hat{a}_1 + 2s_0\hat{w}(x_r, \tau) = 0$$

$$\tilde{q}^2 \rightarrow 4s_0^2\hat{a}_0 + (-i\tau + 3s_0^2)\hat{a}_1 + (i\tau + s_0^2)\hat{a}_2 = 0$$

$$\tilde{q}^k \rightarrow (i\tau + s_0^2)\hat{a}_k + (-2i\tau + 2s_0^2)\hat{a}_{k-1} + i\tau\hat{a}_{k-2} = 0$$

CONDITION DE PÔLES SCHRÖDINGER 1D

A résoudre

$$\left\{ \begin{array}{ll} (i\partial_t + \partial_x^2)v = 0, & x \in \Omega, t > 0, \\ v(x, 0) = u^0(x), & x \in \Omega, \\ \partial_x v(x_r, t) = (i\partial_t + s_0^2)a_0 + s_0 v(x_r, t), & x = x_r \\ 4s_0^2 a_0 = -i\partial_t \hat{a}_1 - 2s_0 v(x_r, t), & x = x_r \\ (-i\partial_t + 3s_0^2)a_1 = -4s_0^2 a_0 - (i\partial_t + s_0^2)a_2, & x = x_r \\ (-2i\partial_t + 2s_0^2)\partial_t a_{k-1} = -(i\partial_t + s_0^2)\hat{a}_k - i\partial_t a_{k-2}, & x = x_r, k \leq N. \end{array} \right.$$

Avantage : local en temps

CLTs DISCRÈTES EN ESPACE SCHRÖDINGER 1D

Alonso-Mallo & Reguera (02,03), Lubich & Schädle (02)

Discrétisation de Schrödinger en espace avec $D_x^2 u_j = \frac{u_{j-1} - 2u_j + u_{j+1}}{\Delta^2 x}$

CRANK-NICOLSON

$$\begin{aligned}i\partial_t u_j(t) &= -D_x^2 u_j(t), \quad j \in \mathbb{Z}, t > 0, \\ \lim_{|j| \rightarrow \infty} u_j(t) &= 0, \quad t > 0, \\ u_j(0) &= u^0(j\Delta x), \quad j \in \mathbb{Z},\end{aligned}$$

avec $x_j = x_l + j\Delta x$, $j \in \mathbb{Z}$, $u_j(t) \approx u(x_j, t)$, et Δx et J choisis tels que $x_J = x_r$.

Splitting intérieur-extérieur + Laplace en temps : pb extérieur

$$i\tau \hat{w}_j(\tau) + D_x^2 \hat{w}_j = 0, \quad j > J.$$

CLTs DISCRÈTES EN ESPACE SCHRÖDINGER 1D

Equation caractéristique

$$\hat{\omega}^2 - 2 \left(1 - \frac{\Delta x^2}{2} i\tau \right) \hat{\omega} + 1 = 0.$$

Choix de la racine $\hat{\omega}(\tau)$ t.q $|\hat{\omega}| > 1$ pour $\text{Re}(\tau) > 0 \Rightarrow$ solution décroissante

$$\hat{w}_j(\tau) = \hat{v}_J(\tau) \hat{\omega}^{j-J}(\tau), \quad j > J.$$

Egalisation des conditions aux limites entre pb int. et ext. :

$$\hat{v}_{J-1} - \hat{v}_J = (\hat{\omega}(\tau) - 1) \hat{v}_J.$$

CRANK-NICOLSON

$$\begin{aligned} (i\partial_t + D_x^2) v_j(t) &= 0, \quad j = 0, \dots, J, t \geq 0, \\ v_{J-1,1}(t) - v_{J,0}(t) &= \mathcal{L}^{-1}((\hat{\omega}^{-1}(\cdot) - 1) \hat{v}_{J,0}(\cdot))(t), \quad t \geq 0, \\ v_j(0) &= u^0(x_j), \quad j = 0, \dots, J. \end{aligned}$$

CLTs DISCRÉTISATION COMPLÈTE

Arnold & Ehrhardt (91, 95)

Combiner l'analyse pour CLTs discrètes en temps et espace

$$\begin{aligned}i \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} &= -D_x^2 \frac{u_j^{n+1} + u_j^n}{2}, \quad j \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}, \\ \lim_{|j| \rightarrow \infty} \frac{u_j^n}{u_j^0} &= 0, \quad n \in \mathbb{N}_0, \\ u_j^0 &= u^0(j\Delta x), \quad j \in \mathbb{Z},\end{aligned}$$

Transformée en \mathcal{Z} dans le domaine extérieur

$$\left(D_x^2 + i \frac{\delta(z)}{\Delta t} \right) \hat{w}_j(z) = 0, \quad j > J.$$

équivalent à

$$\hat{w}_{j+1}(z) - 2 \left[1 - \frac{i \Delta x^2}{2 \Delta t} \delta(z) + \frac{\Delta x^2}{2} V_r \right] \hat{w}_j(z) + \hat{w}_{j-1}(z) = 0, \quad j > J.$$

Equation caractéristique

$$\hat{\omega}^2 - 2 \left[1 - \frac{iR}{2} \left(\frac{z-1}{z+1} + i \frac{\Delta t}{2} V_r \right) \right] \hat{\omega} + 1 = 0,$$

avec l'abréviation $R = 2\Delta x^2/\Delta t$.

CLTs DISCRÉTISATION COMPLÈTE

Choix de la racine + décroissance à l'infini

$$\hat{u}_{J-1}(z) = \hat{\omega}(z)\hat{u}_J(z).$$

Défini une suite $(\omega_n) := \mathcal{Z}^{-1}\{\hat{\omega}(z)\}$, $n \in \mathbb{N}$ mais pas décroissante à l'infini.
Introduction de $\hat{s}(z) := \frac{z+1}{z}\hat{\omega}(z)$ et $(s_n) = \mathcal{Z}^{-1}\{\hat{s}(z)\}$, qui converge vers 0.

CLTs en x_r

$$u_J^n - u_{J-1}^n = - \sum_{k=1}^n s_{n-k} u_J^k + u_{J-1}^{n-1}, \quad n \in \mathbb{N},$$

$$s_n = \left[-i\frac{R}{2} + \frac{\sigma}{2}\right] \delta_n^0 + \left[1 + i\frac{R}{2} + \frac{\sigma}{2}\right] \delta_n^1 + \gamma e^{-in\varphi} \frac{P_n(\mu) - P_{n-2}(\mu)}{2n-1},$$

$$\varphi = \arctan \frac{2R(\sigma+2)}{R^2 - 4\sigma - \sigma^2}, \quad \mu = \frac{R^2 + 4\sigma + \sigma^2}{\sqrt{(R^2 + \sigma^2)[R^2 + (\sigma+4)^2]}}$$

$$\sigma = 2\Delta x^2 V_r, \quad \gamma = \frac{i}{2} \sqrt[4]{(R^2 + \sigma^2)[R^2 + (\sigma+4)^2]} e^{i\varphi/2}.$$

P_n : polynômes de Legendre ($P_{-1} \equiv P_{-2} \equiv 0$), et δ_n^k : symbole de Kronecker.

DISCRÉTISATION DE LA CONVOLUTION

Les schémas précédents reprennent l'analyse de Laplace pour construire les approximations de la CLT.

Autres possibilités :

- Quadrature : Mayfield (89), Baskakov & Popov (91)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{u(x_r, \tau)}{\sqrt{t-\tau}} d\tau \Big|_{t=t_{n+1}} &= \int_0^{t_{n+1}} \frac{u_\tau(x_r, \tau)}{\sqrt{t_{n+1}-\tau}} d\tau \\ &\approx \frac{1}{\Delta t} \sum_{k=0}^n (u_J^{k+1} - u_J^k) \int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{d\tau}{\sqrt{t_{n+1}-\tau}}. \end{aligned}$$

Toujours non local en temps

DISCRÉTISATION DE LA CONVOLUTION

Les schémas précédents reprennent l'analyse de Laplace pour construire les approximations de la CLT.

Autres possibilités :

- Quadrature : Mayfield (89), Baskakov & Popov (91)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{u(x_r, \tau)}{\sqrt{t-\tau}} d\tau \Big|_{t=t_{n+1}} &= \int_0^{t_{n+1}} \frac{u_\tau(x_r, \tau)}{\sqrt{t_{n+1}-\tau}} d\tau \\ &\approx \frac{1}{\Delta t} \sum_{k=0}^n (u_J^{k+1} - u_J^k) \int_{t_k}^{t_{k+1}} \frac{d\tau}{\sqrt{t_{n+1}-\tau}}. \end{aligned}$$

Toujours non local en temps

- Approximation rationnelle du symbole Bruneau & DiMenza (95), Szeftel (04) A résoudre

$$\partial_x \hat{u}(x_r, \tau) = -e^{-i\pi/4} \sqrt[4]{i\tau} \hat{u}(x_r, \tau).$$

Approximation de $\sqrt[4]{i\tau}$ par

$$\begin{aligned} R_m(i\tau) &= a_0^m + \sum_{k=1}^m \frac{a_k^m i\tau}{i\tau + d_k^m} = \sum_{k=0}^m a_k^m - \sum_{k=1}^m \frac{a_k^m d_k^m}{i\tau + d_k^m}, \\ a_k^m &> 0, \quad k \in \{0, \dots, m\}, \quad d_k^m > 0, \quad k \in \{1, \dots, m\}. \end{aligned}$$

DISCRÉTISATION DE LA CONVOLUTION

L'équation devient

$$\partial_x \hat{u}(x_r, \tau) = -e^{i\pi/4} \left[\left(\sum_{k=0}^m a_k^m \right) \hat{u}(x_r, \tau) - \sum_{k=1}^m \frac{a_k^m d_k^m}{i\tau + d_k^m} \hat{u}(x_r, \tau) \right].$$

Idee de Lindmann (85) ; fonctions auxiliaires $\varphi_k = \varphi_k(t)_{k=1, \dots, m}$ qui satisfont

$$\frac{1}{i\tau + d_k^m} \hat{u}(x_r) = \hat{\varphi}_k, \quad k = 1, \dots, m.$$

Laplace inverse : EDO pour φ_k

$$i \frac{d\varphi_k}{dt} + d_k^m \varphi_k = u(x_r, t), \quad \varphi_k(0) = 0, \quad k = 1, \dots, m.$$

d'où la condition aux limites

$$\begin{cases} \partial_{\mathbf{n}} u = -e^{-\frac{i\pi}{4}} \left[\left(\sum_{k=0}^m a_k^m \right) u - \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m \varphi_k \right], & \text{en } x = x_r, t > 0, \\ i \frac{d\varphi_k}{dt} + d_k^m \varphi_k = u(x_r, t), & t > 0, k = 1, \dots, m, \\ \varphi_k(0) = 0, & t > 0, k = 1, \dots, m. \end{cases}$$

DISCRÉTISATION DE LA CONVOLUTION

- Bruneau Dimenza : $R_m(i\tau)$ interpol $\sqrt[2m+1]{i\tau}$ en $2m + 1$ points distincts.

DISCRÉTISATION DE LA CONVOLUTION

- Bruneau Dimenza : $R_m(i\tau)$ interpol $\sqrt[4]{i\tau}$ en $2m + 1$ points distincts.
- Padé :

$$a_0^m = 0, \quad a_k^m = \frac{1}{m \cos^2\left(\frac{(2k+1)\pi}{4m}\right)}, \quad d_k^m = \tan^2\left(\frac{(2k+1)\pi}{4m}\right).$$

DISCRÉTISATION DE LA CONVOLUTION

- Bruneau Dimenza : $R_m(i\tau)$ interpol $\sqrt[4]{i\tau}$ en $2m + 1$ points distincts.
- Padé :

$$a_0^m = 0, \quad a_k^m = \frac{1}{m \cos^2\left(\frac{(2k+1)\pi}{4m}\right)}, \quad d_k^m = \tan^2\left(\frac{(2k+1)\pi}{4m}\right).$$

- Szeftel : optimisation du coef. de relection

$$RC(\tau) = \frac{-\sqrt{\tau} - ia_0^m - i \sum_{k=1}^m \frac{a_k^m(-\tau)}{-\tau + d_k^m}}{\sqrt{\tau} - ia_0^m - i \sum_{k=1}^m \frac{a_k^m(-\tau)}{-\tau + d_k^m}},$$

DISCRÉTISATION DE LA CONVOLUTION

- Bruneau Dimenza : $R_m(i\tau)$ interpol $\sqrt[m]{i\tau}$ en $2m + 1$ points distincts.
- Padé :

$$a_0^m = 0, \quad a_k^m = \frac{1}{m \cos^2\left(\frac{(2k+1)\pi}{4m}\right)}, \quad d_k^m = \tan^2\left(\frac{(2k+1)\pi}{4m}\right).$$

- Szeftel : optimisation du coef. de relection

$$RC(\tau) = \frac{-\sqrt{\tau} - ia_0^m - i \sum_{k=1}^m \frac{a_k^m(-\tau)}{-\tau + d_k^m}}{\sqrt{\tau} - ia_0^m - i \sum_{k=1}^m \frac{a_k^m(-\tau)}{-\tau + d_k^m}},$$

- Convolution rapide : Arnold, Ehrhardt, Sofronov (03), Lubich Schädle (02), Jiang & Greengard (04)

PML SCHRÖDINGER 1D

PML (PERFECTLY MATCHED LAYER) :

- inventée par Bérenger (94) pour Maxwell.
- Interpretation comme une dilatation des coordonnées dans le plan complexe : Chew-Weedon (94)
- Collino (97) pour équations paraxiales
- C. Zheng (07) survey pour PML pour Schrödinger 1d, 2d, NLS et système.

PROBLÈME EXTÉRIEUR DANS Ω_r

$$\begin{cases} (i\partial_t + \partial_x^2)w = 0, & x \in \Omega_r, t > 0, \\ \lim_{|x| \rightarrow \infty} w(x, t) = 0, & t > 0, \\ w(x, 0) = 0, & x \in \Omega_r. \end{cases}$$

Recherche de solution sous la forme $w = \exp(\lambda x + \tau t)$, $\text{Re}(\tau) > 0$ ($\tau \leftrightarrow$ Laplace).

$$i\tau + \lambda^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = -\sqrt{-is}.$$

Dilatation des coordonnées dans \mathbb{C} : $R \in \mathbb{C}$

$$x' = x + R \int_{x_r}^x \sigma(s) ds,$$

PML SCHRÖDINGER 1D

Solution $w' = \exp(\lambda x' + \tau t)$ vérifie

$$i\partial_t w + \frac{1}{1 + R\sigma} \partial_x \left(\frac{1}{1 + R\sigma} \partial_x w \right) = 0$$

et $w' = w e^{\lambda R \int_{x_r}^x \sigma(s) ds}$: si R choisi tel que $\text{Re}(\lambda R) < 0$, w' tend vers 0 plus vite que w , et on peut confiner l'équation extérieure sur un intervalle $[x_r, x_{rp}]$.

On prend par ex. $R = e^{i\pi/4}$,

$$\sigma(x) := \begin{cases} \sigma_0(x - x_l)^2 & \text{pour } x \leq x_l \\ 0 & \text{pour } x_l < x < x_r \\ \sigma_0(x - x_r)^2 & \text{pour } x \geq x_r \end{cases}$$

et on résoud numériquement

$$i\partial_t w + \frac{1}{1 + R\sigma} \partial_x \left(\frac{1}{1 + R\sigma} \partial_x w \right) = 0, \quad x \in [x_{lp}, x_{rp}]$$
$$w = 0, \quad x \in \{x_{lp}, x_{rp}\}$$

- 1 INTRODUCTION
- 2 CONDITIONS AUX LIMITES TRANSPARENTES
- 3 GÉNÉRALISATION AUX CAS 2D ET NON LINÉAIRES**
- 4 APPLICATION NUMÉRIQUE



FRONTIÈRE RECTILIGNE : Dimenza (95), Arnold (98)

$$\Omega^{int} = \{x = (x_1, x_2); x_2 < 0\}$$

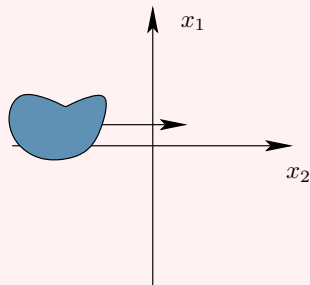
$$\Omega^{ext} = \{x = (x_1, x_2); x_2 > 0\}$$

On s'intéresse à une CLT en $x_2 = 0$

$$i\partial_t u + \partial_{x_1}^2 u + \partial_{x_2}^2 u = 0$$

$i\partial_t + \partial_{x_1}^2$ joue le rôle de $i\partial_t$ en 1d

$\partial_{x_2}^2$ joue le rôle de ∂_x en 1d



Analyse similaire au cas 1d : transformée de Fourier-Laplace partielle

$$\mathcal{F}\hat{u}(\tau, \xi, x_2) = \int_0^{+\infty} \int_{\mathbb{R}_{x_1}} e^{-i\xi x_1 - \tau t} u(t, x_1, x_2) dx_1 dt,$$

avec $\tau = \sigma + i\omega$.

Splitting pb. intérieur-extérieur + transmission

$$v(x, t) = w(x, t) \text{ et } \partial_x w(x, t) = \partial_x v(x, t), \quad (x, t) \in \Gamma \times \mathbb{R}^+,$$

CLTs POUR SCHRÖDINGER 2D

$$(\partial_{x_2}^2 + i\tau - \xi^2) \mathcal{F}\hat{w}(x_2, \xi, \tau) = 0,$$

Solution

$$\mathcal{F}\hat{w}(x_2, \xi, \tau) = A^+(\xi, \tau)e^{i\lambda_1^+(\xi, \tau)x_2} + A^-(\xi, \tau)e^{i\lambda_1^-(\xi, \tau)x_2},$$

avec $\lambda_1^\pm(\xi, \tau) = \pm\sqrt{i\tau - \xi^2}$.

Si $(x_2, t, \xi, \omega) \in \mathcal{E} := \{(x_2, t, \xi, \omega) \in \mathbb{R}^4, \omega + \xi^2 > 0\}$, $\text{Im}(\lambda_1^\pm) = \pm\Psi(\xi, \tau)$,
 $\Psi(\xi, \tau) > 0$.

Pour que $\mathcal{F}\hat{w}(\cdot, \xi, \tau) \in L^2(\mathbb{R}^+)$, il faut $A^- = 0$

$$\mathcal{F}\hat{w}(x_2, \xi, \tau) = A^+(\xi, \tau)e^{i\lambda_1^+(\xi, \tau)x_2}.$$

- Dérivation par rapport à x_2
- Restriction à $x_2 = 0$
- Laplace inverse

$$\partial_{\mathbf{n}}u + i\Lambda^+(\partial_{x_2}, \partial_t)u = 0, \text{ sur } \Gamma \times \mathbb{R}^+,$$

avec

$$\Lambda^+(\partial_{x_2}, \partial_t)w(0, x_2, t) = \frac{1}{(2\pi)^2 i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} \int_{\mathbb{R}} \lambda_1^+(\xi, \tau) \mathcal{F}\hat{w}(0, \xi, \tau) e^{i\xi x_1 + \tau t} d\xi d\tau$$

Formellement

$$\Lambda^+(\partial_{x_2}, \partial_t) = -\sqrt{i\partial_t + \Delta_{\Gamma}},$$

où Δ_{Γ} est l'opérateur de surface Laplace-Beltrami $\partial_{x_2}^2$.

Opérateur pseudo différentiel non local en espace et en temps

CLTs POUR SCHRÖDINGER 2D

REMARQUE : Découpage de l'espace en trois zone

$$\mathcal{F}\hat{u}(x_2, \xi, \tau) = A^+(\xi, \tau)e^{i\sqrt{i\tau - \xi^2}x_2}$$

Pour simplifier, $\sigma = 0 : \tau = i\omega$

- ① Si $\xi^2 + \omega > 0 : i\sqrt{i\tau - \xi^2} = -\sqrt{\xi^2 + \omega}$ ainsi \Rightarrow décroissance exponentielle de la solution : onde evanescente
- ② Si $\xi^2 + \omega < 0 : i\sqrt{i\tau - \xi^2} = i\sqrt{-(\omega + \xi^2)}$ ainsi terme oscillant \Rightarrow partie propagative

zone hyperbolique $\mathcal{H} = \{(x_2, t, \xi, \omega) | \xi^2 + \omega < 0\}$

zone elliptique $\mathcal{E} = \{(x_2, t, \xi, \omega) | \xi^2 + \omega > 0\}$

zone glancing $\mathcal{G} = \{(x_2, t, \xi, \omega) | \xi^2 + \omega = 0\}$

On peut se restreindre à la zone \mathcal{H} et la CLT devient une CLA

$$\mathcal{T}^+u = \partial_{\mathbf{n}}u + +i\Lambda^+|_{\mathcal{H}}(\partial_{x_2}, \partial_t)u = 0$$

Toujours non local en espace-temps

CLTs POUR SCHRÖDINGER 2D

APPROXIMATIONS : on s'intéresse aux phénomènes hautes fréquences temporelles Antoine-Besse (01)

$$|\tau| \gg \xi^2$$

$$\underbrace{\sqrt{i\tau - \xi^2}}_{\substack{\text{non local en} \\ \text{x et t}}} = \sqrt{i\tau} \underbrace{\sqrt{1 + \frac{i\xi^2}{\tau}}}_{\substack{|\tau| \gg \xi^2 \\ \text{dl Taylor}}} \approx \sqrt{i\tau} - \underbrace{\frac{\xi^2}{2\sqrt{i\tau}}}_{\text{local en espace}} + \underbrace{\dots}_{\text{local en espace}}$$

$$\sqrt{i\tau} \rightsquigarrow e^{i\pi/4} \partial_t^{1/2} \quad 1/\sqrt{i\tau} \rightsquigarrow e^{-i\pi/4} I_t^{1/2}$$

Conditions aux limites approchées locales en espace à différents ordre

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

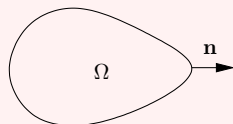
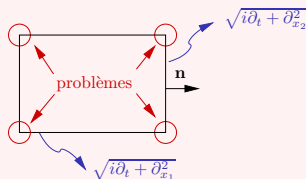
Traitement numérique : solutions identique au 1D.

CLTs POUR SCHRÖDINGER 2D

Problème

Cette construction conduit inévitablement à des problèmes de raccord aux coins.

Il faut travailler sur un ouvert **convexe** de frontière quelconque.



CLAS POUR SCHRÖDINGER 2D

CAS D'UN OUVERT RÉGULIER DE \mathbb{R}^2 : Antoine-Besse (01, 03)

MÉTHODOLOGIE POUR LA FACTORISATION

- Paramétrisation locale de la frontière par rapport aux variables radiales r et curvilignes s

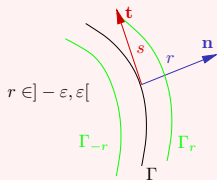
$$\Delta = \partial_r^2 + \kappa_r \partial_r + h^{-1} \partial_s (h^{-1} \partial_s)$$

$\kappa_r = h^{-1} \kappa$: courbure sur la surface parallèle Γ_r à Γ

$$h(r, s) = 1 + r\kappa.$$

$$\begin{aligned} &\Rightarrow i\partial_t + \Delta = \partial_r^2 + \kappa_r \partial_r \\ &+ i\partial_t + h^{-1} \partial_s (h^{-1} \partial_s) \end{aligned}$$

$$r \rightsquigarrow x_2 \quad s \rightsquigarrow x_1 \quad t \rightsquigarrow t$$



- Définir les zones \mathcal{H} , \mathcal{E} et \mathcal{G} identique au cas précédent où

$\omega \rightarrow$ covariable de t

$\xi \rightarrow$ covariable de s

- Un peu de calcul pseudo-différentiel



PROBLÈME AUX LIMITES APPROCHÉ

$$(DN^{m/2}) \quad \begin{cases} (i\partial_t + \Delta)v = 0, & (x, t) \in \Omega \times [0, T], \\ \partial_{\mathbf{n}}v + T_{m/2}v = 0, & (x, t) \in \Gamma \times [0, T], \\ v(x, 0) = v_0(x), & x \in \Omega, \end{cases}$$

avec $T_{m/2}$, $m \in \{1, \dots, 4\}$, les opérateurs pseudodifférentiels en temps (non locaux) et différentiels en espace (locaux) donnés sur $\Gamma \times [0, T]$ par

$$T_{1/2}v = e^{-i\pi/4} \partial_t^{1/2} v,$$

$$T_1v = T_{1/2}v + \frac{\kappa}{2}v,$$

$$T_{3/2}v = T_1v - e^{i\pi/4} \left(\frac{\kappa^2}{8} + \frac{1}{2} \Delta_{\Gamma} \right) I_t^{1/2} v,$$

$$T_2v = T_{3/2}v + i \left(\frac{\kappa^3}{8} + \frac{1}{2} \partial_s(\kappa \partial_s) + \frac{\Delta_{\Gamma} \kappa}{8} \right) I_tv,$$

avec $I_t^{1/2} = I_t \partial_t^{1/2}$.

Propriété : existence de solution + $\|u(t)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|u(0)\|_{L^2(\Omega)}$

REMARQUES

- Construction dans le cas circulaire plus simple : Antoine-Besse (04)
- Cadre de frontières rectilignes ou circulaires : construction de CLT totalement discrète possible : Arnold, Ehrhardt, Schulte, Sofronov (06)

EQUATION DE SCHRÖDINGER 1D

$$i\partial_t u + \partial_x^2 u + q|u|^2 u = 0, \quad (x, t) \in \mathbb{R}_x \times \mathbb{R}_t^{*+},$$

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} u(x, t) = 0,$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad \text{supp}(u_0) \in [x_l, x_r],$$

- Boutet de Monvel, Fokas, Shepelsky (03) : opérateur Dirichlet Neumann exact pour $q = \pm 2$ par inverse scattering **limité à cette constante!**. Numérique réalisé par C. Zheng (06) ne fonctionne bien, pour solutions vraiment non linéaires (soliton), que pour des solutions lents.
- Antoine-Besse-Descombes (06) : changement de jauge + analyse pseudo-différentielle + hypothèse haute fréquence. CLAs à différents ordres.

Exemple : ordre 2

$$\partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4}e^{i\mathbb{U}}\partial_t^{1/2}(e^{-i\mathbb{U}}u) + \frac{i}{4}\partial_{\mathbf{n}}(|u|^2)e^{i\mathbb{U}}I_t(e^{-i\mathbb{U}}u) = 0, \quad \text{at } \Gamma,$$

où

$$\mathbb{U}(x, t) = \int_0^t |u(x, s)|^2 ds.$$

Numérique ne fonctionne bien, pour solutions vraiment non linéaires (soliton), que pour des solutions rapides !

- Szeftel (06) : stratégie pseudo-différentielle sans changement de jauge.

Exemple : ordre 2

$$\partial_{\mathbf{n}}u + e^{-i\pi/4}\partial_t^{1/2}u - qe^{i\pi/4}\frac{|u|^2}{2}I_t^{1/2}u = 0, \quad \text{sur } \Gamma.$$

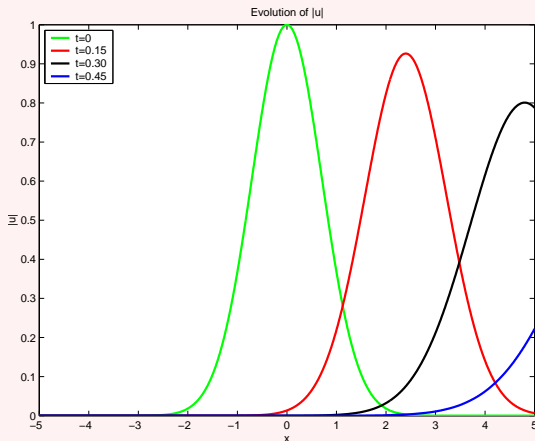
Résultats numériques un peu moins bons.

- Szeftel (06) : stratégie paradifférentielle pour des nonlinéarités de type $u\partial_x u$, mais pas encore $|u|^2u$.

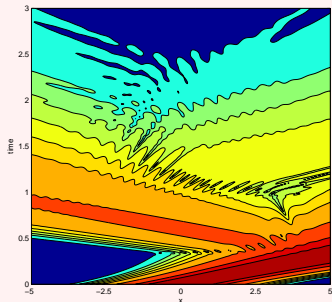
- 1 INTRODUCTION
- 2 CONDITIONS AUX LIMITES TRANSPARENTES
- 3 GÉNÉRALISATION AUX CAS 2D ET NON LINÉAIRES
- 4 APPLICATION NUMÉRIQUE

APPLICATION NUMÉRIQUE

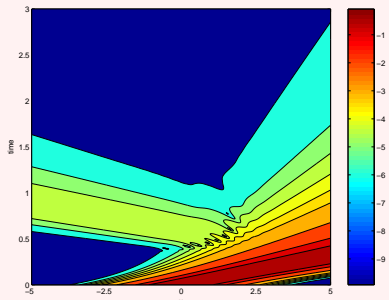
CAS 1D LINÉAIRE $u(x, t) = \sqrt{\frac{i}{-4t + i}} \exp\left(\frac{-ix^2 - k_0x + k_0^2t}{-4t + i}\right)$ $k_0 = 8$,
 $\Omega = [-5, 5]$, $N = 1024$, $\delta_t = 10^{-3}$



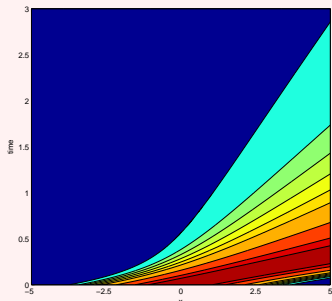
CONTOUR DE $\log_{10}(|u|)$



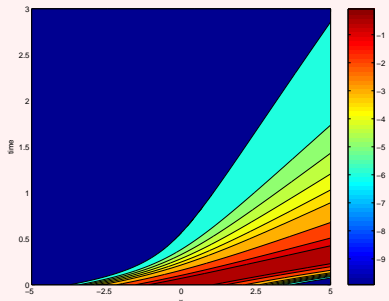
Baskakov-Popov



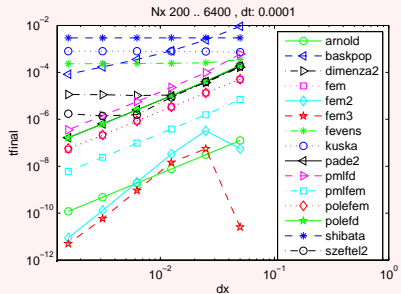
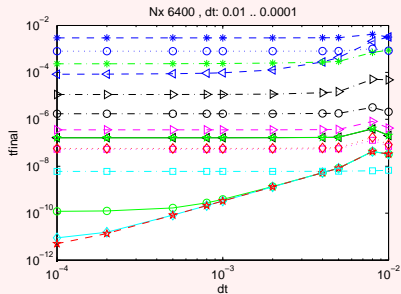
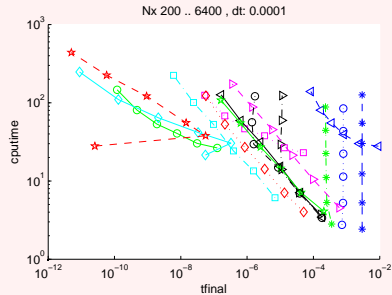
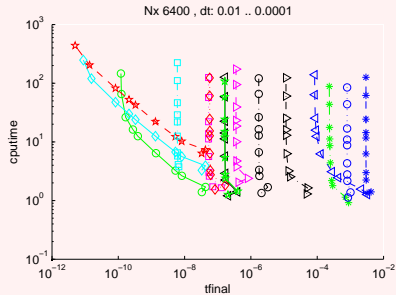
Antoine-Besse DN1



Antoine-Besse DN2



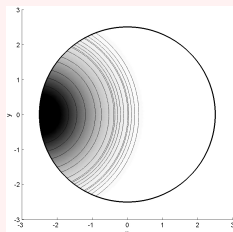
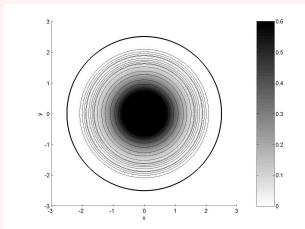
Arnold-Ehrhardt



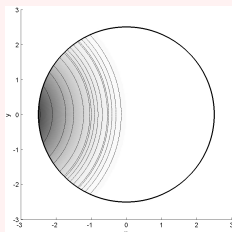
Solution explicite (2D)

$$u(x_1, x_2, t) = \frac{i}{i - 4t} \exp\left(-i \frac{x_1^2 + x_2^2 + 5ix_1 + 25it}{i - 4t}\right).$$

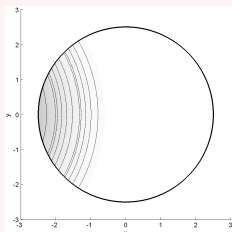
Approximation éléments finis (\mathcal{P}^1) : $\Omega_i = D(0, 10)$, 3278 triangles, $\delta t = 10^{-2}$.



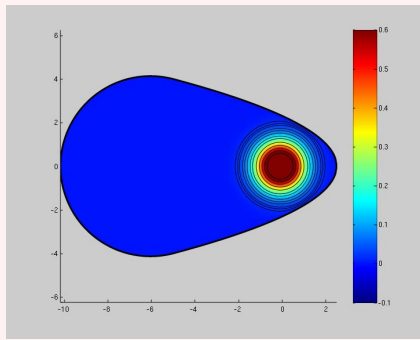
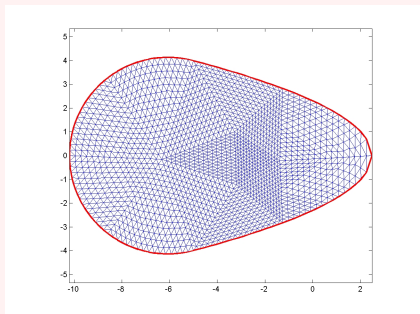
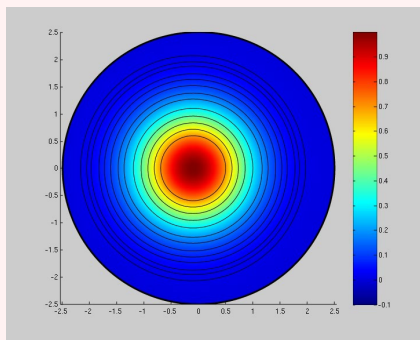
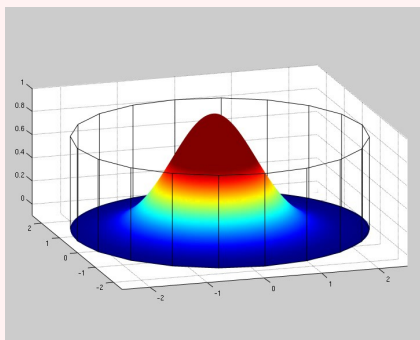
t=0.25

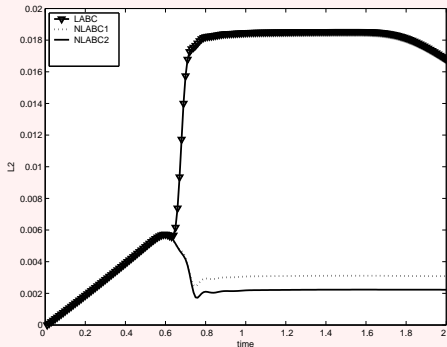
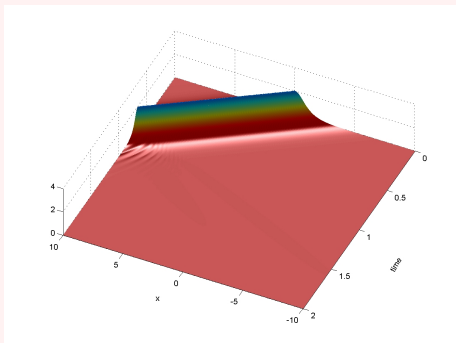


t=0.35



t=0.50





$$u_{\text{ex}}(x, t) = \sqrt{\frac{2a}{q}} \operatorname{sech}(\sqrt{a}(x - ct)) \exp\left(i\frac{c}{2}(x - ct)\right) \exp\left(i\left(a + \frac{c^2}{4}\right)t\right).$$

$a = 2, q = 1$ et $c = 15$

