



**HAL**  
open science

# Contribution à l'analyse numérique de problèmes d'évolution : comportements asymptotiques et applications à l'équation de Schrödinger

Guillaume Dujardin

► **To cite this version:**

Guillaume Dujardin. Contribution à l'analyse numérique de problèmes d'évolution : comportements asymptotiques et applications à l'équation de Schrödinger. Mathématiques [math]. Université de Lille, 2018. tel-01950160

**HAL Id: tel-01950160**

**<https://hal.science/tel-01950160v1>**

Submitted on 10 Dec 2018

**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.

UNIVERSITÉ DE LILLE

ÉCOLE DOCTORALE  
SCIENCES POUR L'INGÉNIEUR

# HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

en

Mathématiques

présentée et soutenue par

Guillaume DUJARDIN

## Contribution à l'analyse numérique de problèmes d'évolution : comportements asymptotiques et applications à l'équation de Schrödinger

préparée chez Inria Lille - Nord Europe

dans le projet MEPHYSTO et au

laboratoire Paul Painlevé, UMR CNRS 8524

soutenue le 12 novembre 2018

Composition du jury

<i>Rapporteurs :</i>	W. BAO	-	National University of Singapore
	A. DEBUSSCHE	-	ENS Rennes
	M. HARAGUS	-	Université de Franche-Comté
<i>Examineurs :</i>	E. FAOU	-	Inria Rennes - Bretagne Atlantique
	E. HAIRER	-	Université de Genève
<i>Référent :</i>	S. DE BIÈVRE	-	Université de Lille



## Remerciements

Je tiens à remercier Weizhu Bao, Arnaud Debussche et Mariana Haragus, qui ont rapporté ce manuscrit d’habilitation. Mes remerciements vont également à Stephan De Bièvre, qui a accepté d’être mon référent scientifique. Enfin, je remercie Erwan Faou et Ernst Hairer, qui me font le plaisir et l’honneur de participer au jury.

Les travaux présentés dans cette HDR ne seraient rien sans l’incroyable inspiration procurée par mes collègues et coauteurs Christophe Besse, François Castella, David Cohen, Matteo Conforti, Saliya Coulibaly, Stephan De Bièvre, Erwan Faou, Viðar Guðmundsson, Frédéric Héreau, Alexandre Kudlinski, Ingrid Lacroix-Violet, Pauline Lafitte, Arnaud Mussot, Gilbert Reinisch, Simona Rota Nodari, Bruno Sericola, Majid Taki, Gaston Thiofack, et Stefano Trillo.

Le travail chez Inria est d’autant plus agréable que les directions successives du centre de Lille ont été enthousiastes et motivantes à chaque instant, ce qui me permet de remercier Max Dauchet, David Simplot et Isabelle Herlin. Mes différents responsables d’équipe chez Inria (Philippe Chartier, Thierry Goudon, Antoine Gloria) ont aussi montré un professionnalisme à toute épreuve. Les “services support” d’Inria ne sont pas en reste, tant les moyens informatiques que les services généraux, les ressources humaines que le service communication, et surtout les précieuses assistantes (dont l’incomparable Karine Lewandowski). Bien sûr, symétriquement, les équipes de direction du laboratoire Paul Painlevé (Christophe Besse, puis Benoît Fresse), et les secrétariats (notamment Anaïs Henry et Véronique Buffels) ont un rôle important dans les bonnes conditions de travail des personnels enseignants-chercheurs.

Outre les collaborateurs directs mentionnés plus haut, nombreux sont les collègues avec lesquels il est extrêmement agréable de parler de mathématiques (et parfois même d’autres choses). Ces années passées à Lille chez Inria ont beaucoup bénéficié de l’interaction avec Frédéric Bernicot, Léa Blanc-Centi, Denis Bonheure, Benjamin Boutin, Caterina Calgari, Clément Cancès, Claire Chainais, Vianney Combet, Jean-François Coulombel, Emmanuel Creusé, Stephan De Bièvre, André de Laire, Anne Devys, Thomas Gallouët, Jean-Claude Garreau, Maxime Gazeau, Ludovic Goudenège, Adrien Hardy, Sahbi Keraani, Stella Krell, Ingrid Lacroix-Violet, Pierre Mennuni, Benoît Merlet, Sebastian Minjeaud, Alexandre Mouton, Flore Nabet, Martin Parisot, Thomas Rey, Gabriel Rivière, Mathias Rousset, Olivier Serman, Christopher Shirley, Marielle Simon, Juliette Venel.

Des collègues, qui n’ont pas nécessairement été lillois, méritent également de figurer dans ces remerciements, tels Virigine Bonnaillie-Noël, Aline Lefebvre-Lepot, Gilles Vilmart, Lisl Weynans-Swingedouw, pour leur indéfectible amitié et le plaisir que je peux avoir à les croiser régulièrement.

Figurent également dans ces remerciements une longue liste d’enseignants et d’enseignants-chercheurs en mathématiques qui donnent énormément d’énergie au quotidien pour former des mathématiciens.

Enfin, ma famille (mes parents, mon frère et sa famille, mes enfants), Benjie, et mes amis (notamment, mais pas exclusivement, Adrien, Astrée, Caro, Florence, Jonathan, Klusky, Léna, Lothaire, Mimi, Skwat, Théo) sont une source de soutien

et d'énergie sans laquelle tout serait bien plus difficile.

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>1</b>
1.1	Comportement quantitatif des méthodes numériques . . . . .	2
1.2	Comportement qualitatif des méthodes numériques . . . . .	2
1.3	Simulation d'équations de Schrödinger issues de la physique . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Équations de Schrödinger en optique non-linéaire</b>	<b>7</b>
2.1	Contexte scientifique et problématiques . . . . .	7
2.2	Instabilité modulationnelle par impulsions de dispersion . . . . .	10
2.2.1	Généralités sur l'instabilité modulationnelle dans les fibres périodiques . . . . .	10
2.2.2	Analyse de l'instabilité modulationnelle lorsque la dispersion est un peigne d'impulsions de Dirac . . . . .	13
2.2.3	Résultats expérimentaux et discussions physiques . . . . .	14
2.2.4	Conclusions . . . . .	17
2.3	Structure hétérocline de la résonance paramétrique dans NLS . . . . .	20
2.3.1	Obtention de l'oscillateur réduit . . . . .	20
2.3.2	Étude et exploitation de l'oscillateur réduit . . . . .	22
2.3.3	Conclusions . . . . .	27
2.4	Solitons de Peregrine pour NLS avec coefficients périodiques . . . . .	27
2.4.1	Problématique . . . . .	27
2.4.2	Obtention de la solution de Peregrine généralisée . . . . .	27
2.4.3	Analyse de la solution de Peregrine généralisée . . . . .	28
2.4.4	Persistance au-delà de la relation d'intégrabilité . . . . .	30
2.4.5	Conclusion . . . . .	31
2.5	Contrôle du soliton de K.-M. par modulation périodique . . . . .	31
2.5.1	Problématique . . . . .	31
2.5.2	Le soliton de Kuznetsov-Ma généralisé . . . . .	31
2.5.3	Influence de l'intensité et de la fréquence de la modulation sur le soliton de Kuznetsov-Ma . . . . .	32
2.5.4	Conclusions et perspectives . . . . .	33
<b>3</b>	<b>Intégration numérique d'EDO et d'EDP stochastiques</b>	<b>35</b>
3.1	Contexte scientifique et problématiques . . . . .	35
3.2	Méthodes préservant l'énergie pour des EDS de Poisson . . . . .	36
3.2.1	Motivations . . . . .	36
3.2.2	Description des méthodes . . . . .	36
3.2.3	Propriétés qualitatives et quantitatives . . . . .	37
3.2.4	Expériences numériques . . . . .	38
3.2.5	Conclusions et perspectives . . . . .	42
3.3	Méthodes exponentielles pour NLS avec dispersion aléatoire . . . . .	42

3.3.1	Introduction . . . . .	43
3.3.2	Description des méthodes . . . . .	43
3.3.3	Propriétés des méthodes exponentielles . . . . .	44
3.3.4	Expériences numériques . . . . .	44
3.3.5	Conclusions . . . . .	46
<b>4</b>	<b>Méthodes d'ordre élevé pour des équations de NLS</b>	<b>47</b>
4.1	Contexte scientifique et problématiques . . . . .	47
4.2	Méthodes RK exponentielles de collocation pour NLS . . . . .	48
4.2.1	Description des méthodes . . . . .	48
4.2.2	Ordre des méthodes de Runge–Kutta exponentielles pour l'équation de NLS . . . . .	49
4.3	Méthodes RKexp pour les condensats de B.–E. en rotation . . . . .	50
4.3.1	Condensats de Bose–Einstein en rotation . . . . .	50
4.3.2	Description des méthodes . . . . .	51
4.3.3	Résultats concernant ces deux familles de méthodes . . . . .	53
4.3.4	Expériences numériques . . . . .	54
<b>5</b>	<b>Comportement en temps long de méthodes numériques</b>	<b>59</b>
5.1	Contexte scientifique et problématiques . . . . .	60
5.2	Analyse en temps long du splitting de Lie pour Schrödinger . . . . .	61
5.2.1	Introduction . . . . .	61
5.2.2	Le résultat principal . . . . .	62
5.2.3	Illustrations numériques . . . . .	64
5.3	Temps long pour le splitting de Lie : le cas totalement discrétisé . . . . .	65
5.3.1	Introduction . . . . .	65
5.3.2	Résultats d'approximation . . . . .	66
5.3.3	Un résultat de forme normale totalement discrétisé . . . . .	68
5.3.4	Conséquence du résultat précédent sur la préservation en temps long de la régularité Gevrey des solutions totalement discrétisées . . . . .	69
5.4	Analyse en temps long de méthodes avec sous-cyclage . . . . .	70
5.4.1	Introduction . . . . .	70
5.4.2	Erreur asymptotique d'une méthode numérique . . . . .	71
5.4.3	Comparaison de méthodes de splitting avec et sans sous- cyclage sur un système d'EDO linéaires multi-échelles . . . . .	72
5.4.4	Comparaison de méthodes de splitting avec et sans sous- cyclage sur un système d'EDP linéaires multi-échelles . . . . .	76
5.4.5	Conclusions et perspectives . . . . .	80
5.5	Convergence exponentielle de solutions discrétisées de F.–P. . . . .	80
5.5.1	Problématique . . . . .	80
5.5.2	Discrétisations de l'équation de Fokker–Planck homogène en domaine non-borné en vitesse . . . . .	81

---

5.5.3	Discrétisations de l'équation de Fokker–Planck inhomogène en domaine non-borné en vitesse . . . . .	86
5.5.4	Expériences numériques . . . . .	91
5.5.5	Conclusions et perspectives . . . . .	91
<b>A</b>	<b>Quantum dots en 2D : au-delà de la réponse linéaire</b>	<b>95</b>
A.1	Introduction . . . . .	95
A.2	Description du pulse initial . . . . .	95
A.3	Modélisation par Schrödinger–Poisson non-linéaire . . . . .	96
A.4	Comparaison entre les modèles de quantum dots et conclusions . . . . .	98
<b>B</b>	<b>Analyse temps long d'EDP avec bords périodiques</b>	<b>101</b>
B.1	Introduction . . . . .	101
B.2	Le cas de la demi-droite . . . . .	102
B.3	L'exemple de l'équation de Schrödinger sur un segment . . . . .	104
	<b>Bibliographie</b>	<b>107</b>





# Introduction

## Sommaire

<b>1.1</b>	<b>Comportement quantitatif des méthodes numériques . . . .</b>	<b>2</b>
<b>1.2</b>	<b>Comportement qualitatif des méthodes numériques . . . .</b>	<b>2</b>
<b>1.3</b>	<b>Simulation d'équations de Schrödinger issues de la physique</b>	<b>3</b>

## Préambule

À l'origine de chacun de mes travaux se trouve un problème d'évolution de Cauchy issu de la modélisation, déterministe ou stochastique, d'un système physique. Ce problème de Cauchy comprend une équation différentielle ou une équation aux dérivées partielles et peut faire intervenir des quantités aléatoires. L'étude théorique du problème de Cauchy est bien établie : il possède typiquement une unique solution maximale dans des espaces adaptés. Les questions auxquelles je m'intéresse concernent la simulation numérique des solutions de ce type de problème. Elles sont de natures différentes. On peut les regrouper en 3 catégories.

La première catégorie est celle des questions liées au comportement quantitatif des solutions numériques. Quelle précision peut-on garantir, sur un horizon de temps fini, pour une méthode numérique donnée ? La notion centrale dans ce contexte est bien sûr celle de l'ordre des méthodes que l'on construit, adaptées aux problèmes que l'on considère.

La deuxième catégorie concerne le comportement qualitatif en temps long des solutions numériques. Par exemple, peut-on garantir des propriétés de conservation de la régularité des solutions discrétisées ? Des propriétés de préservation de quantités physiques (positivité et intégrale égale à 1 d'une densité de probabilité de présence de particules ou énergie totale d'un système hamiltonien) ? Des propriétés de convergence vers un état d'équilibre (et à la bonne vitesse) ?

Enfin, la troisième catégorie regroupe les questions liées à l'interaction avec la physique. Que peut-on apprendre de différents modèles physiques d'un même système par des simulations numériques éclairées ?

L'objet de cette introduction est de lister les résultats obtenus avec mes collaborateurs pour chacune de ces familles de questions, dans des situations particulières, détaillées dans les autres chapitres de ce manuscrit. Les principales applications des travaux listés sont l'optique non-linéaire, la mécanique quantique, et les équations cinétiques.

## 1.1 Comportement quantitatif des méthodes numériques

Les principales questions relatives au comportement quantitatif des méthodes numériques sont traitées dans le chapitre 4 pour les problèmes déterministes et dans le chapitre 3 pour les problèmes stochastiques.

Nous nous sommes intéressés dans [Duj09b] aux méthodes de Runge–Kutta exponentielles appliquées à l'équation de Schrödinger non-linéaire. Ces méthodes sont issues de méthodes similaires dans le cadre parabolique. Elles tirent parti de l'existence d'une méthode d'intégration exacte et rapide d'une partie linéaire de l'équation. Nous avons montré que les méthodes de collocation à  $s$  étages sont d'ordre au moins  $s$ , et que des conditions simples sur les coefficients d'une méthode à  $s$  étages permettent d'atteindre l'ordre  $s + 1$  et l'ordre  $s + 2$ . Ce travail est présenté en section 4.2. Par la suite, nous nous sommes intéressés dans [BDLV17] à la possibilité qu'offrent ces méthodes de simuler des condensats de Bose–Einstein en rotation avec une grande précision. Ce travail est détaillé en section 4.3.

Nous avons également considéré des méthodes d'intégration de problèmes stochastiques. Nous avons proposé et analysé dans [CD14] des méthodes exponentielles d'intégration de problèmes de Poisson stochastiques préservant exactement l'énergie. Nous avons traité de la question de la préservation des Casimir par ces méthodes. Nous avons également montré que les méthodes exponentielles proposées sont d'ordre 1. Ce travail est présenté en section 3.2. Par ailleurs, dans [CD17], nous avons considéré des méthodes exponentielles pour l'intégration d'équations de Schrödinger non-linéaires avec dispersion aléatoire. En particulier, nous avons proposé une méthode explicite dont nous avons prouvé qu'elle était d'ordre 1 et une méthode implicite qui préserve la norme 2. Nous avons utilisé la première méthode pour supporter numériquement une conjecture sur l'exposant critique assurant l'existence de solution en dimension 2. Ce travail est détaillé en section 3.3.

## 1.2 Comportement qualitatif des méthodes numériques

L'ensemble des questions ayant trait au comportement qualitatif des méthodes numériques est regroupé dans le chapitre 5.

Dans [DF07b], nous avons considéré la question de la propagation en temps long de la régularité, mesurée sur l'échelle des espaces de Sobolev, de la solution numérique d'une équation de Schrödinger linéaire produite par une méthode de splitting. En particulier, nous avons mis en évidence la présence de résonances dans ces méthodes et montré qu'en dehors des pas de temps résonnants, la régularité de la solution est préservée sur des temps exponentiellement grands en l'inverse de la taille du potentiel, par une méthode perturbative de forme normale. Ce travail est présenté en section 5.2. Par la suite, nous avons poussé cette étude dans [CD09] en montrant que l'on peut également assurer la propagation de la régularité de la solution de la même équation par une méthode de splitting en utilisant cette fois

l'échelle de régularité Gevrey et dans un contexte totalement discrétisé. Ce travail est décrit en section 5.3.

Dans [DL16], on considère des systèmes multi-échelles, dont les solutions convergent vers un état d'équilibre, que l'on intègre par des méthodes de splitting avec sous-cyclage. On analyse l'ordre asymptotique de ces méthodes sur des exemples et l'on montre notamment qu'il est possible, en utilisant une méthode avec sous-cyclage, que l'ordre asymptotique soit strictement supérieur à l'ordre local de la méthode. Ce travail est présenté en section 5.4.

Enfin, dans [DHL18], on considère l'équation de Fokker–Planck inhomogène. On propose des discrétisations en espace et en vitesse qui permettent d'assurer la convergence exponentielle en temps long des solutions vers un état d'équilibre numérique, qui est une approximation de l'état d'équilibre exact. Pour cela, on étend des techniques hypocoercives, développées dans le cadre fonctionnel continu, à des situations discrètes. Les résultats sont détaillés en section 5.5.

### 1.3 Simulation numérique d'équations de Schrödinger issues de la physique

Je me suis intéressé à la simulation de la propagation de la lumière dans des fibres optiques, et en particulier au phénomène d'instabilité modulationnelle. Les travaux correspondants sont détaillés dans le chapitre 2. Avec mes collaborateurs, nous avons étudié l'instabilité modulationnelle dans des fibres optiques avec impulsion de dispersion en régime de dispersion normale dans [RNCD<sup>+</sup>15] (et [CND<sup>+</sup>15]). Nous avons proposé une étude d'un système linéarisé permettant de comprendre théoriquement la dynamique de ce phénomène, nous avons illustré et interprété numériquement les résultats obtenus, que nous avons comparés avec d'autres modèles numériques et avec des résultats expérimentaux réalisés spécifiquement. Ce travail est détaillé dans la section 2.2. Par la suite, nous avons poussé cette étude dans [CMK<sup>+</sup>16] : nous avons montré comment un système réduit permet, par des techniques de troncation et de moyennisation, de décrire le phénomène de résonance paramétrique y compris dans le régime des fortes excitations. Nous avons ainsi mis en évidence une structure hétérocline cachée de certaines solutions de l'équation de Schrödinger non-linéaire. Nous avons validé l'ensemble de nos résultats numériquement en intégrant plusieurs modèles. Les résultats précis sont présentés en section 2.3.

Avec d'autres collaborateurs, nous nous sommes intéressés à la formation et à la propagation de solitons dans des fibres optiques avec dispersion périodique en régime de dispersion anormale, sous une condition d'intégrabilité de l'équation. Ce type de solution peut être considéré comme un premier pas vers l'analyse des ondes scélérates en optique non-linéaire. Nous avons considéré des solutions de Peregrine et nous avons analysé l'influence des paramètres physiques d'excitation sur la forme des solitons correspondants. Ce travail, publié dans [TCT<sup>+</sup>15], est présenté en section 2.4. Par la suite, nous avons considéré dans [TCT<sup>+</sup>17] des solutions de type Kuznetsov–Ma et nous avons également étudié l'influence des paramètres physiques

d'excitation sur la forme des solitons correspondants. Ce travail est décrit en section 2.5.

Enfin, avec d'autres collaborateurs, nous avons comparé dans [GHJ<sup>+</sup>14] plusieurs modèles de description du comportement d'un "quantum dot" formé de deux électrons placés dans un potentiel parabolique confinant. En particulier, nous avons étudié la réponse du quantum dot prévue par chacun des modèles à une courte et forte excitation, dépassant de loin le régime de la réponse linéaire, et mis en évidence numériquement que certains des modèles physiques ne sont pas pertinents dans ce régime. Ce travail est détaillé dans l'Annexe A.

Les travaux exposés dans ce manuscrit correspondent aux publications suivantes dont je suis l'un des auteurs. Elles sont rangées par ordre chronologique. Les premières publications, marquées d'une étoile, sont issues de ma thèse. Parmi celles-ci, les publications 1, 3 et 4 sont néanmoins décrites dans ce manuscrit.

1. \* [DF07a] G. Dujardin et E. Faou, *Long time behavior of splitting methods applied to the linear Schrödinger equation*, Comptes-rendus de l'Académie des Sciences de Paris, Sér. I, no. 344, p. 89–92, 2007.
1. \* [DF07b] G. Dujardin et E. Faou, *Normal form and long time analysis of splitting schemes for the linear Schrödinger equation with small potential*, Numerische Mathematik, 108(2), p. 223–262, 2007.
2. \* [CDS08] F. Castella, G. Dujardin et B. Sericola, *Moments' analysis in homogeneous Markov reward models*, Methodology and Computing in Applied Probability, vol. 11, no. 4, p. 583, 2008.
3. \* [CD09] F. Castella et G. Dujardin, *Propagation of Gevrey regularity over long times for the fully discrete Lie–Trotter splitting scheme applied to the linear Schrödinger equation*, ESAIM : Mathematical Modelling and Numerical Analysis, vol. 43, no. 4, p. 651–676, 2009.
4. \* [Duj09b] G. Dujardin, *Exponential Runge–Kutta methods for the Schrödinger equation*, Applied Numerical Mathematics, vol. 59, no. 8, p. 1839–1857, 2009.
5. [Duj09a] G. Dujardin, *Asymptotics of linear initial boundary value problems with periodic boundary data on the half-line and finite intervals*, Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences, vol. 465, no. 2111, p. 3341–3360, 2009.
6. [CD14] D. Cohen et G. Dujardin, *Energy-preserving integrators for stochastic Poisson systems*, Communications in Mathematical Sciences, vol. 12, no. 8, p. 1523–1539, 2014.
7. [GHJ<sup>+</sup>14] V. Guðmundsson, S. Hauksson, A. Johnsen, G. Reinisch, A. Manolescu, C. Besse et G. Dujardin, *Excitation of radial collective modes in a quantum dot : Beyond linear response*, Annalen der Physik, vol. 526, no. 5-6, p. 235–248, 2014.

8. [RNCD<sup>+</sup>15] S. Rota Nodari, M. Conforti, G. Dujardin, A. Kudlinski, A. Mussot, S. Trillo et S. De Bièvre, *Modulational instability in dispersion-kicked optical fibers*, Physical Review A, vol. 92, no. 1, p. 013810, 2015.
8. [CND<sup>+</sup>15] M. Conforti, S. Rota Nodari, G. Dujardin, A. Kudlinski, A. Mussot, S. Trillo et S. De Bièvre, *Modulation instability in periodically dispersion kicked optical fibers*, 2015 European Conference on Lasers and Electro-Optics - European Quantum Electronics Conference, p. EF P 17, Optical Society of America, 2015.
9. [TCT<sup>+</sup>15] C. G. L. Tiofack, S. Coulibaly, M. Taki, S. De Bièvre et G. Dujardin, *Comb generation using multiple compression points of Peregrine rogue waves in periodically modulated nonlinear Schrödinger equations*, Physical Review A, vol. 92, p. 043837, 2015.
10. [CMK<sup>+</sup>16] M. Conforti, A. Mussot, A. Kudlinski, S. Rota Nodari, G. Dujardin, S. De Bièvre, A. Armaroli et S. Trillo, *Heteroclinic structure of parametric resonance in the nonlinear Schrödinger equation*, Physical Review Letters, vol. 117, p. 013901, 2016.
11. [DL16] G. Dujardin et P. Lafitte, *Asymptotic behaviour of splitting schemes involving time-subcycling techniques*, IMA Journal of Numerical Analysis, vol. 36, no. 4, p. 1804–1841, 2016.
12. [TCT<sup>+</sup>17] C.G.L. Tiofack, S. Coulibaly, M. Taki, S. De Bièvre et G. Dujardin, *Periodic modulations controlling Kuznetsov–Ma soliton formation in nonlinear Schrödinger equations*, Physics Letters A, vol. 381, no. 24, p. 1999–2003, 2017.
13. [CD17] D. Cohen et G. Dujardin, *Exponential integrators for nonlinear Schrödinger equations with white noise dispersion*, Stochastics and Partial Differential Equations : Analysis and Computations, vol. 5, no. 4, p. 592–613, 2017.
14. [BDLV17] C. Besse, G. Dujardin et I. Lacroix-Violet, *High order exponential integrators for nonlinear Schrödinger equations with application to rotating Bose–Einstein condensates*, SIAM Journal on Numerical Analysis, vol. 55, no. 3, p. 1387–1411, 2017.
15. [DHL18] G. Dujardin, F. Héreau et P. Lafitte, *Coercivity, hypocoercivity, exponential time decay and simulations for discrete Fokker–Planck equations*, 2018 (submitted).



# Équations de Schrödinger en optique non-linéaire

---

## Sommaire

---

<b>2.1</b>	<b>Contexte scientifique et problématiques . . . . .</b>	<b>7</b>
<b>2.2</b>	<b>Instabilité modulationnelle par impulsions de dispersion . .</b>	<b>10</b>
2.2.1	Généralités sur l'instabilité modulationnelle dans les fibres périodiques . . . . .	10
2.2.2	Analyse de l'instabilité modulationnelle lorsque la dispersion est un peigne d'impulsions de Dirac . . . . .	13
2.2.3	Résultats expérimentaux et discussions physiques . . . . .	14
2.2.4	Conclusions . . . . .	17
<b>2.3</b>	<b>Structure hétérocline de la résonance paramétrique dans NLS . . . . .</b>	<b>20</b>
2.3.1	Obtention de l'oscillateur réduit . . . . .	20
2.3.2	Étude et exploitation de l'oscillateur réduit . . . . .	22
2.3.3	Conclusions . . . . .	27
<b>2.4</b>	<b>Solitons de Peregrine pour NLS avec coefficients périodiques</b>	<b>27</b>
2.4.1	Problématique . . . . .	27
2.4.2	Obtention de la solution de Peregrine généralisée . . . . .	27
2.4.3	Analyse de la solution de Peregrine généralisée . . . . .	28
2.4.4	Persistance au-delà de la relation d'intégrabilité . . . . .	30
2.4.5	Conclusion . . . . .	31
<b>2.5</b>	<b>Contrôle du soliton de K.–M. par modulation périodique .</b>	<b>31</b>
2.5.1	Problématique . . . . .	31
2.5.2	Le soliton de Kuznetsov–Ma généralisé . . . . .	31
2.5.3	Influence de l'intensité et de la fréquence de la modulation sur le soliton de Kuznetsov–Ma . . . . .	32
2.5.4	Conclusions et perspectives . . . . .	33

---

## 2.1 Contexte scientifique et problématiques

La description de la propagation d'impulsions de lumière dans les fibres optiques se fait classiquement à partir des équations de Maxwell [Agr07]. On obtient alors



une équation d'évolution de type "ondes" pour le champ électrique sous la forme

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} + \Delta \mathbf{E} + \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2} = 0, \quad (2.1)$$

où  $c$  et  $\mu_0$  sont des constantes strictement positives représentant respectivement la vitesse de la lumière dans le vide et la perméabilité du vide. Le champ électrique inconnu  $\mathbf{E} = \mathbf{E}(t, x, y, z)$  est à valeurs vectorielles et le champ  $\mathbf{P}$  représente la polarisation de la fibre induite par le champ  $\mathbf{E}$ . On impose en général une relation liant  $\mathbf{P}$  à  $\mathbf{E}$  pour décrire la réponse de la fibre à la propagation de la lumière et fermer ainsi les équations. En toute généralité, ce type de relation est non-local en temps. Cependant, sous des hypothèses physiques appropriées (réponse instantanée de la fibre, impulsion lumineuse quasi-monochromatique, traitement perturbatif du terme non-linéaire de polarisation), on obtient une équation d'enveloppe pour le champ électrique dans la direction  $z$  de propagation sous la forme

$$\frac{\partial A}{\partial z} + \beta_1 \frac{\partial A}{\partial t} + i \frac{\beta_2}{2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + \alpha A = i\gamma |A|^2 A, \quad (2.2)$$

où le champ scalaire complexe inconnu  $A$  est lié à l'intensité du champ électrique  $\mathbf{E}$  dans la section d'abscisse  $z$  et à l'instant  $t$ ,  $\beta_1$  et  $\beta_2$  et  $\gamma$  sont des coefficients réels dépendant des caractéristiques de la fibre et de la pulsation  $\omega_0$  de l'impulsion lumineuse. Le coefficient  $\alpha$  est positif en général et modélise la perte d'énergie du signal lors de sa propagation dans la fibre ; il est le plus souvent négligé pour des distances de propagation raisonnables. Ces paramètres physiques sont susceptibles de varier avec l'abscisse  $z$  de la fibre, dans le cas des fibres dites topographiques. En travaillant dans un repère qui suit l'impulsion, que les physiciens appellent "repère retardé", on se ramène finalement au cas où  $\beta_1 = 0$  et l'équation à résoudre est

$$i\partial_z u - \frac{\beta_2}{2} \partial_t^2 u + \gamma |u|^2 u = 0, \quad (2.3)$$

où  $u$  est une fonction scalaire complexe inconnue de  $z \in \mathbb{R}$  et  $t \in \mathbb{R}$ , avec une donnée initiale  $u_0$  en  $z = 0$ . On distingue alors classiquement deux régimes :

- on dit que l'équation est défocalisante, ou de manière équivalente que la dispersion est normale, lorsque  $\beta_2$  et  $\gamma$  ont même signe. Physiquement, cela signifie que les longueurs d'ondes les plus faibles se déplacent plus lentement.
- on dit que l'équation est focalisante, ou de manière équivalente que la dispersion est anormale, dans le cas contraire, c'est-à-dire lorsque les longueurs d'ondes les plus grandes se propagent plus lentement.

La fonctionnelle d'énergie associée à (2.3) lorsque  $\beta_2$  et  $\gamma$  sont constants s'écrit

$$E(u) = -\frac{\beta_2}{2} \int \|\nabla u\|_2^2 dx - \frac{\gamma}{4} \int |u|^4 dx. \quad (2.4)$$

La dispersion normale correspond donc au cas où les deux termes de l'énergie ont même signe, alors que la dispersion anormale correspond au cas où ils sont de signes

opposés.

Les travaux présentés dans ce chapitre utilisent tous l'équation (2.3) comme modèle pour la propagation de la lumière dans une fibre optique. Les deux premiers travaux ont pour thème principal l'instabilité modulationnelle. Dans une fibre optique, le phénomène d'instabilité modulationnelle est l'amplification d'une perturbation d'une onde périodique conduisant à la génération de bandes de gain dans le spectre fréquentiel. C'est un phénomène physique que l'on retrouve en mécanique des fluides et en particulier dans le contexte des ondes de gravité, dans lequel il a été mis pour la première fois en évidence en 1967 [BF67] et porte le nom d'instabilité de Benjamin-Feir. Les deux autres travaux présentés dans ce chapitre ont trait à la formation d'ondes scélérates dans les fibres optiques en présence de coefficients périodiques de dispersion  $\beta_2$  et de non-linéarité  $\gamma$ . On s'intéresse à l'influence des paramètres des variations périodiques des coefficients sur la forme de certains solitons de l'équation correspondante, en particulier le nombre et la forme des points de compression de ces solutions.

Dans le premier travail, présenté en Section 2.2, on étudie l'instabilité modulationnelle de la fibre lorsque la dispersion  $\beta_2$  est un peigne de Dirac en  $z$ , en dispersion normale. On montre, à l'aide de la théorie de Floquet, que certaines gammes de fréquences sont linéairement instables et l'on donne des estimations sur les gammes d'instabilité et le gain correspondant. De plus, on valide cette analyse par la comparaison à des résultats expérimentaux.

En Section 2.3, on pousse plus loin l'analyse de la section précédente. Toujours en dispersion normale (cas défocalisant), on étudie l'instabilité modulationnelle au-delà du régime de perturbation linéaire de la section précédente au moyen d'un système hamiltonien oscillant réduit. On montre en particulier l'existence de solutions de type "breather" séparant différents régimes récurrents de type Fermi-Pasta-Ulam. Cette étude est de plus confirmée numériquement et indique que l'amplification paramétrique optimale peut avoir lieu en dehors des bandes de gain prévues par la théorie de Floquet.

En Section 2.4, on se place cette fois en dispersion anormale (cas focalisant), lorsque les coefficients  $\beta_2$  et  $\gamma$  varient périodiquement en respectant une condition d'intégrabilité. On montre comment l'intensité et la fréquence des variations périodiques des coefficients influencent la forme de solitons optiques de type Peregrine, qui constituent un modèle d'ondes scélérates ("rogue waves").

Enfin, en Section 2.5, on reprend l'étude précédente pour s'intéresser à l'influence de la fréquence et de l'intensité de la modulation périodique des coefficients de l'équation sur les solitons de Kuznetsov–Ma généralisés.

## 2.2 Instabilité modulationnelle dans les fibres optiques avec impulsions de dispersion

Cette section décrit les travaux publiés dans [RNCD<sup>+</sup>15]. On s'intéresse à la propagation de la lumière dans une fibre optique, modélisée par l'équation (2.3). Lorsque les propriétés physiques de la fibre ne sont pas homogènes avec la variable de propagation  $z$  mais sont des fonctions périodiques, le coefficient de dispersion  $\beta_2$  et le coefficient  $\gamma$  devant le terme non-linéaire sont des fonctions périodiques de  $z$ . Lorsque ces fonctions sont lisses et en dispersion normale, le phénomène d'instabilité modulationnelle est déjà analysé dans la littérature, et observé expérimentalement [AB12, DKB<sup>+</sup>12, DKB<sup>+</sup>13a, DKB<sup>+</sup>13b, FFS<sup>+</sup>13]. On s'intéresse dans cette section au phénomène d'instabilité modulationnelle dans la fibre lorsque les fonctions  $\beta_2$  et  $\gamma$  sont périodiques, éventuellement singulières, de  $z$ . L'équation (2.3) dans ce contexte s'écrit alors

$$i\partial_z u - \frac{\beta_2(z)}{2}\partial_t^2 u + \gamma(z)|u|^2 u = 0. \quad (2.5)$$

### 2.2.1 Généralités sur l'instabilité modulationnelle dans les fibres périodiques

On se donne une période  $Z > 0$  et l'on introduit les distributions  $Z$ -périodiques auxiliaires  $f_Z$  et  $g_Z$ , normalisées de sorte que  $f_Z + 1$  et  $g_Z + 1$  sont des distributions positives, que

$$\beta_2(z) = \beta_{av} + \beta_m f_Z(z) \quad \text{et} \quad \gamma(z) = \gamma_{av} + \gamma_m g_Z(z), \quad (2.6)$$

et que la valeur moyenne sur une période de  $f_Z$  et  $g_Z$  est nulle. On se place en régime de dispersion moyenne normale en imposant

$$\beta_{av} > 0 \quad \text{et} \quad \gamma_{av} > 0. \quad (2.7)$$

Pour une certaine puissance  $P > 0$  donnée, on s'intéresse à la stabilité linéaire de la donnée initiale  $u_0(t) = \sqrt{P}$  dont la solution exacte de (2.3) correspondante est donnée par

$$u(z, t) = \sqrt{P} e^{iP \int_0^z \gamma(s) ds}. \quad (2.8)$$

On écrit a priori une solution proche sous la forme

$$u(z, t) = \sqrt{P} e^{iP \int_0^z \gamma(s) ds} \left( 1 + p(z, t) + iq(z, t) \right),$$

avec  $p$  et  $q$  des fonctions réelles, d'amplitudes faibles. Insérant cette expression dans l'équation (2.3), linéarisant et prenant la transformée de Fourier en temps, il vient

pour l'évolution de  $p$  et  $q$  le long de la fibre

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{q}}{\partial z} + \frac{\beta_2(z)}{2} \omega^2 \hat{p} = 0, \\ \frac{\partial \hat{p}}{\partial z} - \frac{\beta_2(z)}{2} \omega^2 \hat{q} - 2\gamma(z)P\hat{q} = 0, \end{cases} \quad (2.9)$$

où le chapeau désigne la transformée de Fourier en temps et  $\omega$  est la variable duale de  $t$ . À  $\omega \in \mathbb{R}$  fixé ce système d'équations différentielles linéaires est à coefficients périodiques, et l'on peut appliquer la théorie de Floquet pour étudier sa stabilité. On se ramène ainsi à la stabilité du système dynamique linéaire à temps discret

$$\begin{pmatrix} \hat{q}(nZ) \\ \hat{p}(nZ) \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} \hat{q}((n+1)Z) \\ \hat{p}((n+1)Z) \end{pmatrix}, \quad n \in \mathbb{N}, \quad (2.10)$$

c'est-à-dire à l'étude du spectre  $\{\lambda_1, \lambda_2\}$  du flot associé dans  $\mathbb{R}^2$ . Puisque la dynamique est réelle, le spectre est stable par conjugaison. Puisque la dynamique est hamiltonienne, le produit des deux valeurs propres est égal à 1. Ainsi, soit ces valeurs propres sont sur le cercle unité et le système est linéairement stable, soit elles sont réelles et inverses l'une de l'autre, avec une de valeur absolue strictement plus grande que 1, et le système est linéairement instable. Ceci motive la définition du gain linéaire

$$G(\omega, \beta_m, \gamma_m) = \frac{1}{Z} \ln(\max\{|\lambda_1|, |\lambda_2|\}). \quad (2.11)$$

Pour l'étude de ce gain d'une manière générale, on propose une approche perturbative autour de  $\beta_m = \gamma_m = 0$ . Dans le cas  $\beta_m = \gamma_m = 0$ , la matrice du flot discret (2.10) est

$$L = \begin{pmatrix} \cos(kZ) & -\frac{\bar{\beta}_2 \omega^2}{k} \sin(kZ) \\ \frac{k}{\bar{\beta}_2 \omega^2} \sin(kZ) & \cos(kZ) \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

où

$$k^2 = \frac{\bar{\beta}_2}{2} \omega^2 \left( \frac{\bar{\beta}_2}{2} \omega^2 + 2\gamma_{av}P \right), \quad (2.13)$$

et  $\bar{\beta}_2 = \beta_{av}$ . Dans ce cas, les valeurs propres du flot discret sont

$$\lambda_{1,2} = \exp(\pm ikZ), \quad (2.14)$$

et dépendent de  $\omega$  via  $k$ . Toujours lorsque  $\beta_m = \gamma_m = 0$ , distinguons deux cas en fonction de  $\omega$  (et donc de  $k$ ) :

- soit  $k \notin (\pi/Z)\mathbb{Z}$ . Dans ce cas,  $\lambda_{1,2}$  sont distinctes, sur le cercle unité mais non réelles.
- soit  $k \in (\pi/Z)\mathbb{Z}$ . Dans ce cas,  $\lambda_{1,2} = \pm 1$  est une valeur propre double du flot discret.

Perturbons maintenant le flot discret en supposant que  $\beta_m$  et  $\gamma_m$  sont petits mais éventuellement non nuls. Examinons la situation, en fonction de  $\omega$  via  $k$  dans

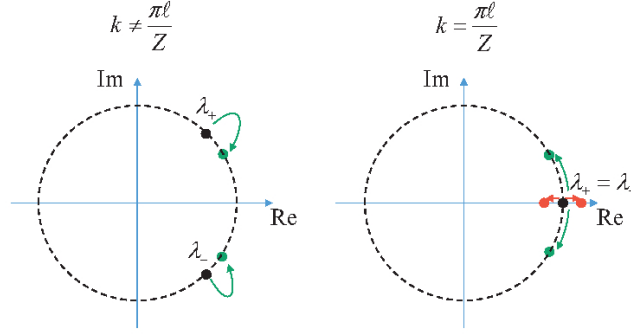


FIGURE 2.1 – Illustration du déplacement des valeurs propres de l'application de Floquet linéarisée lorsque  $\beta_m$  et  $\gamma_m$  sont petits. En noir, les valeurs propres non perturbées, en vert les valeurs propres perturbées dans le cas stable, en rouge les valeurs propres perturbées dans le cas instable.

les deux cas précédents.

- lorsque  $k \notin (\pi/Z)\mathbb{Z}$ , une petite perturbation contraint  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  à demeurer non réelles, sur le cercle unité. Dans ce cas, la solution (2.8) est linéairement stable par une perturbation de fréquence  $\omega$ . Cette propriété ne dépend notamment pas de la forme des distributions  $f_Z$  et  $g_Z$ .
- lorsque  $k \in (\pi/Z)\mathbb{Z}$ , la valeur propre  $\pm 1$  peut soit se séparer en deux valeurs propres réelles, l'une de module supérieur à 1, l'autre de module inférieur à 1, soit donner naissance à deux valeurs propres complexes conjuguées non réelles sur le cercle unité. Ainsi, la solution (2.8) est linéairement instable (dans le cas où l'une des valeurs propres quitte le cercle unité), ou stable dans le cas contraire, par une perturbation de fréquence  $\omega$ .

Ces deux situations sont illustrées en Figure 2.1.

Ainsi, avec la relation (2.13), pour de petites perturbations, seules les fréquences de la forme

$$\omega_\ell^2 = \frac{2}{\beta_{av}} \left( \sqrt{(\gamma_{av}P)^2 + \left(\frac{\ell\pi}{Z}\right)^2} - \gamma_{av}P \right), \quad (2.15)$$

sont susceptibles d'être des perturbations linéairement instables de la solution (2.8). Cette formule donnant la position des maxima dans les langues d'Arnold des courbes de gain est compatible avec celles obtenues dans la littérature par d'autres méthodes (voir par exemple [AB12, DKB<sup>+</sup>13a, DKB<sup>+</sup>13b]) pour des fonctions  $f_Z$  et  $g_Z$  lisses.

Nous allons maintenant ajouter une hypothèse sur les perturbations périodiques  $f_Z$  et  $g_Z$ , et nous allons voir d'une part que l'on peut décrire beaucoup plus précisément la courbe de gain linéaire du système d'une part, et que celle-ci correspond à la courbe de gain de l'équation non-linéaire (2.3) avec les coefficients variables (2.6) autour de la solution exacte (2.8) d'autre part.

### 2.2.2 Analyse de l'instabilité modulationnelle lorsque la dispersion est un peigne d'impulsions de Dirac

Nous considérons maintenant une fibre pour laquelle la dispersion prend la forme d'un peigne de Dirac et le coefficient non-linéaire  $\gamma$  est constant :

$$f_Z(z) = \left[ \sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta(z/Z - n) \right] - 1, \quad \gamma_m = 0. \quad (2.16)$$

Adaptant les notations de la section précédente, on peut noter  $\Phi_{\beta_m}^{\text{lin}}$  le flot du système linéarisé (2.9) sur la période  $[nZ, (n+1)Z]$ , qui dépend de la fréquence  $\omega$  de la perturbation mais pas de l'entier  $n$ . On peut écrire la matrice de ce flot comme le produit  $LK$  où la matrice  $L$  définie en (2.12) correspond à l'évolution entre deux kicks dans la dispersion (avec maintenant  $\bar{\beta}_2 = \beta_{\text{av}} - \beta_m$ ) et la matrice  $K$  définie par

$$K = \begin{pmatrix} \cos\left(\beta_m \frac{\omega^2}{2} Z\right) & -\sin\left(\beta_m \frac{\omega^2}{2} Z\right) \\ \sin\left(\beta_m \frac{\omega^2}{2} Z\right) & \cos\left(\beta_m \frac{\omega^2}{2} Z\right) \end{pmatrix},$$

correspond à l'effet d'un kick de dispersion. Les valeurs propres de  $\Phi_{\beta_m}^{\text{lin}}$  sont données par

$$\lambda_{1,2}(\omega, \beta_m) = \rho(\omega, \beta_m) \pm \sqrt{\rho(\omega, \beta_m)^2 - 1}, \quad (2.17)$$

où

$$\rho(\omega, \beta_m) = \cos(kZ) \cos\left(\beta_m \frac{\omega^2}{2} Z\right) - \frac{\bar{\beta}_2 \omega^2 + \gamma_{\text{av}} P}{k} \sin(kZ) \sin\left(\beta_m \frac{\omega^2}{2} Z\right).$$

Pour  $\ell \geq 1$ , on peut faire un développement limité de  $\rho$  au voisinage de  $(\omega_\ell, 0)$  pour obtenir

$$\rho(\omega, \beta_m) \sim (-1)^\ell (1 + C_\ell \beta_m^2 - D_\ell (\omega - \omega_\ell)^2),$$

où

$$C_\ell = Z^2 \left(\frac{\omega_\ell^2}{2}\right)^2 \left(\frac{Z}{\pi \ell}\right)^2 (\gamma_{\text{av}} P)^2, \quad (2.18)$$

$$D_\ell = \beta_{\text{av}}^2 Z^2 \frac{\omega_\ell^2}{2} \left( \left(\frac{Z}{\pi \ell}\right)^2 (\gamma_{\text{av}} P)^2 + 1 \right). \quad (2.19)$$

On remarque ainsi que  $(\omega_\ell, 0)$  est un point selle pour la fonction  $\rho$ . Avec la relation (2.17), on obtient l'estimation suivante du gain en  $\omega_\ell$  lorsque  $\beta_m$  est petit :

$$G(\omega_\ell, \beta_m) \approx |\beta_m| \frac{\omega_\ell^2}{2} \frac{Z}{\pi \ell} \gamma_{\text{av}} P, \quad (2.20)$$

On obtient également une estimation de la largeur de la bande de gain autour de  $\omega_\ell$  lorsque  $\beta_m$  est petit :

$$B(\omega_\ell, \beta_m) \propto \frac{|\beta_m|}{\beta_{av}} \omega_\ell \frac{\gamma_{av} P}{\sqrt{\left(\frac{\pi\ell}{Z}\right)^2 + (\gamma_{av} P)^2}}. \quad (2.21)$$

On illustre ces résultats perturbatifs numériquement en Figure 2.2.

On peut enfin donner un développement du gain  $G$  à la fréquence  $\omega_\ell$  lorsque  $\beta_m \neq 0$  est fixé et  $\ell$  grand, à partir de la relation (2.17) :

$$G(\omega_\ell, \beta_m) \sim \frac{\gamma_{av} P}{2|\beta_2| \pi \ell} \sqrt{4\beta_{av}^2 \sin^2\left(\frac{\beta_m}{\beta_{av}}(\pi\ell - \gamma_{av} P Z)\right) - \beta_m^2 (\gamma_{av} P)^2 Z^2}, \quad (2.22)$$

lorsque  $4\beta_{av}^2 \sin^2(\alpha(\ell)) - \beta_m^2 (\gamma_{av} P)^2 Z^2 > 0$  (sinon  $G(\omega_\ell, \beta_m)$  est d'ordre encore plus grand en  $1/\ell$ ). Il est remarquable que l'on capture à la fois la décroissance et les oscillations du gain en  $\omega_\ell$  lorsque  $\ell$  est grand comme l'illustre la Figure 2.3 et le calcul suivant, valable pour  $\ell$  assez grand et  $\beta_m$  petit :

$$G(\omega_\ell, \beta_m) \sim |\beta_m| \left| \frac{\sin\left[\frac{\beta_m}{\beta_{av}}(\pi\ell - \gamma_{av} P Z)\right]}{\frac{\beta_m}{\beta_{av}} \pi \ell} \right|. \quad (2.23)$$

En conclusion, dans le cas d'une fibre avec modulation périodique de la dispersion (2.6), nous avons montré que les seules fréquences susceptibles d'être linéairement instables quelle que soit l'intensité  $\beta_m$  de la modulation de la dispersion sont les  $(\omega_\ell)_{\ell \geq 1}$ . De plus, ces fréquences, si elles dépendent de  $\gamma_{av}$ ,  $\beta_{av}$ ,  $Z$  et  $P$ , ne dépendent pas de la forme précise de la modulation d'impulsion  $f_Z$  ni de celle de la modulation de non-linéarité  $g_Z$ . Dans le cas d'une fibre avec impulsions périodiques de dispersion sous la forme d'un peigne de Dirac (2.16), nous avons montré que ces fréquences sont toujours linéairement instables dès que  $\beta_m \neq 0$ , et estimé le gain (2.20), et la largeur de la bande de gain (2.21) créés par la modulation de dispersion. Enfin, nous avons fourni une asymptotique du gain pour les hautes fréquences (2.22). Tous nos résultats ont été illustrés numériquement.

### 2.2.3 Résultats expérimentaux et discussions physiques

Classiquement, pour réaliser une fibre avec modulation périodique de dispersion, on utilise le fait que la dispersion dépend du diamètre de la fibre : en faisant varier périodiquement le diamètre le long de l'abscisse de la fibre, on peut considérer que l'on a une dispersion périodique pour la propagation de la lumière [DKB<sup>+</sup>12, DKB<sup>+</sup>13a, DKB<sup>+</sup>13b]. Trois fibres différentes, notées  $A$ ,  $B$  et  $C$ , ont été fabriquées, qui ont en commun d'avoir le zéro de dispersion approximativement à la longueur d'onde  $1\mu m$ . Physiquement, la perturbation du diamètre en peigne de Dirac décrite en Section 2.2.2 est réalisée par une somme de "bosses" d'allure gaussienne, de variance  $w$  (de l'ordre de  $0.14\mu m$ ) petite devant la période des pertur-

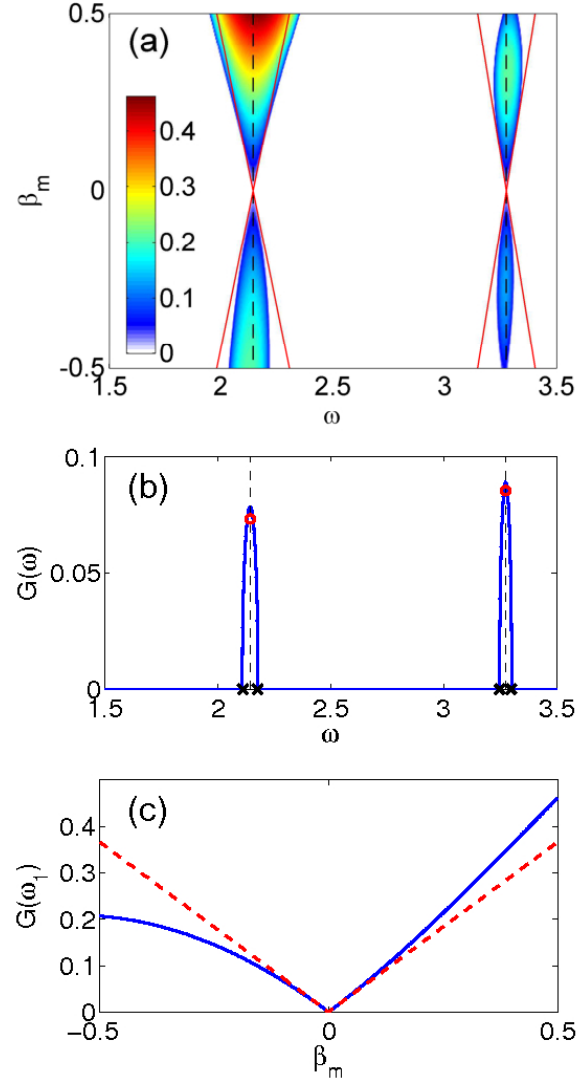


FIGURE 2.2 –  $\beta_{av} = 1$ ,  $Z = 1$ ,  $\gamma_{av} = 1$  et  $P = 1$ . (a) Courbes de niveaux de  $G$  dans le plan  $(\omega, \beta_m)$ ; les fréquences  $\omega_1 = 2.1433$  et  $\omega_2 = 3.2748$  sont indiquées en pointillés noirs; les lignes rouges correspondent à la largeur de bande approchée par la formule (2.21). (b) Gain pour  $\beta_m = 0.1$  (en bleu) en fonction de  $\omega$ ; les fréquences  $\omega_1 = 2.1433$  et  $\omega_2 = 3.2748$  sont indiquées en pointillés noirs; les cercles rouges indiquent le gain maximal approché par la formule (2.20); les croix noires indiquent la largeur de bande approchée par la formule (2.21). (c) Gain pour  $\omega = \omega_1$  (en bleu) en fonction de  $\beta_m$ ; l'approximation du gain par la formule (2.20) est tracée en pointillés rouges.



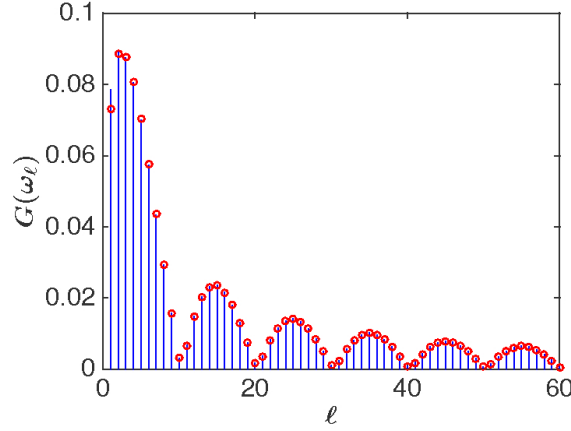


FIGURE 2.3 –  $\beta_{\text{av}} = 1$ ,  $Z = 1$ ,  $\gamma_{\text{av}} = 1$ ,  $P = 1$ ,  $\beta_m = 0.1$ . Gain pour  $\omega = \omega_\ell$  en fonction de  $\ell$  (bleu) ; En rouge le gain estimé par la formule (2.22).

bations ( $Z = 10\text{m}$ ). Concrètement, cela signifie que le diamètre à l'abscisse  $z$  est de la forme

$$d(z) = d_{\min} + \Delta g_w(z),$$

où  $d_{\min}$  est le diamètre minimal de la fibre,  $\Delta$  la différence entre le diamètre maximal et le diamètre minimal de la fibre, et  $g_w$  est la somme de gaussiennes

$$g_w(z) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-\frac{(z-nZ)^2}{2w^2}}.$$

Les trois fibres ont de plus toutes le même diamètre minimal  $d_{\min} = 137\mu\text{m}$ , et leurs diamètres maximaux respectifs sont  $172\mu\text{m}$ ,  $207\mu\text{m}$  et  $240\mu\text{m}$  (voir Figure 2.4 (a)). Leurs diamètres moyens respectifs sont alors  $d_{\text{av}}^A \simeq 139.1\mu\text{m}$ ,  $d_{\text{av}}^B \simeq 141.2\mu\text{m}$  et  $d_{\text{av}}^C \simeq 143.2\mu\text{m}$ . Au premier ordre, la dispersion à l'abscisse  $z$  dans la fibre est alors donnée par

$$\beta_2(z) \simeq \beta(d_{\text{av}}) + \beta'(d_{\text{av}})\Delta \left[ g_w(z) - \frac{w}{Z}\sqrt{2\pi} \right],$$

où  $d \mapsto \beta(d)$  est la dispersion dans la fibre en fonction du diamètre de la fibre à la longueur d'onde  $1\mu\text{m}$  considérée, et  $\beta'$  sa fonction dérivée (voir Figure 2.4 (b)). Comparant cette expression à (2.6), il vient que

$$\beta_{\text{av}} = \beta(d_{\text{av}}), \quad \beta_m = \beta'(d_{\text{av}})\frac{w}{Z}\Delta\sqrt{2\pi}, \quad \text{et} \quad f_Z(z) = \frac{Z}{w\sqrt{2\pi}}g_w(z) - 1.$$

Le dispositif expérimental et quelques approximations physiques supplémentaires sont décrits plus en détails dans la Section IV de [RNCD<sup>+</sup>15]. La puissance maximale de la pompe est fixée à  $P = 6.5\text{ W}$  et la longueur d'onde de la pompe est fixée à  $1052.5\text{ nm}$  (pour la fibre A). Dans ce régime, les variations du coefficient  $\gamma$  en fonction du diamètre sont suffisamment faibles pour que l'on puisse considérer que

$\gamma_m = 0$  comme dans l'étude théorique des sections précédentes (voir Figures 2.4 (c) et (d)).

Les résultats expérimentaux sont visibles sur la Figure 2.5 (a), sous la forme du graphe du gain en fonction de la différence de phase avec la pompe. En particulier, pour la fibre A (en bleu), on observe tout d'abord 2 lobes à  $\pm 4.8$  THz, qui sont la principale trace physique du phénomène d'instabilité modulationnelle décrit dans ce travail. On retrouve ces lobes sur les résultats des simulations numériques en Figure 2.5 (b), qui incluent des effets physiques supplémentaires par rapport à l'analyse précédente. On peut comparer ensuite la position de ces lobes (et des suivants) avec ceux prédits par l'analyse perturbative précédente. Par exemple, les fréquences  $\omega_\ell$  décrites en (2.15) sont matérialisées par des lignes verticales en pointillés sur la Figure 2.5(b). On remarque une parfaite adéquation entre les résultats expérimentaux, l'analyse précédente et les résultats numériques.

On s'intéresse également à l'aspect qualitatif suivant : de plus grandes valeurs de  $\beta_m$  conduisent-elles à des gains plus importants comme le laisse entendre la formule (2.23)? C'est la raison pour laquelle les fibres B et C ont également été manufacturées. Nous avons tenu compte qu'une modification du diamètre maximal modifie le paramètre  $\beta_m$  mais aussi le paramètre  $\beta_{av}$ , ce qui conduit les lobes d'instabilité modulationnelle à apparaître à des endroits différents pour les 3 fibres. Aussi, nous avons fait le choix de modifier la longueur d'onde de la pompe à 1061.8 nm pour la fibre B et à 1067 nm pour la fibre C, de sorte que les premiers lobes arrivent tous à  $\pm 4.8$  THz de la pompe, et ainsi on peut considérer les 3 fibres comme ayant des dispersions moyennes  $\beta_{av}$  très semblables et des  $\beta_m$  assez différents avec  $\beta_{av}^C > \beta_{av}^B > \beta_{av}^A$ . On constate en Figure 2.5(a) que les fibres B et C ont des lobes d'instabilité modulationnelle plus élevés, comme prédit par l'analyse précédente. Ce fait est confirmé par ailleurs par les simulations numériques de la Figure 2.5(b). On remarque également, expérimentalement et numériquement, que la position en fréquence des lobes augmente comme  $\sqrt{\ell}$  (où  $\ell$  est le numéro du lobe), comme le prédit la théorie perturbative précédente, notamment *via* la formule (2.15). Ce fait avait déjà été mis en évidence lorsque la dispersion varie sinusoidalement dans une fibre ([DKB+13b, CKC+15]), et se trouve dans ce travail pour la première fois vérifié pour une dispersion en peigne de Dirac. Enfin, on observe dans l'expérience deux lobes parasites (appelés "spurious lobes" sur la Figure 2.5(a)) qui proviennent d'un mélange à quatre ondes entre la pompe et les deux premiers lobes d'instabilité modulationnelle. La relation de conservation d'énergie entre ces ondes fournit une fréquence pour le maximum de ces lobes à 2.2 THz, là où l'expérience les place à 2.15 THz, soit en accord avec la théorie.

### 2.2.4 Conclusions

Nous avons proposé une analyse du phénomène d'instabilité modulationnelle dans les fibres optiques pour lesquelles la dispersion est un peigne de Dirac. Cette analyse repose sur une approche perturbative du phénomène et permet de prédire, au moins dans un certain régime ayant un intérêt physique, le phénomène d'instabilité

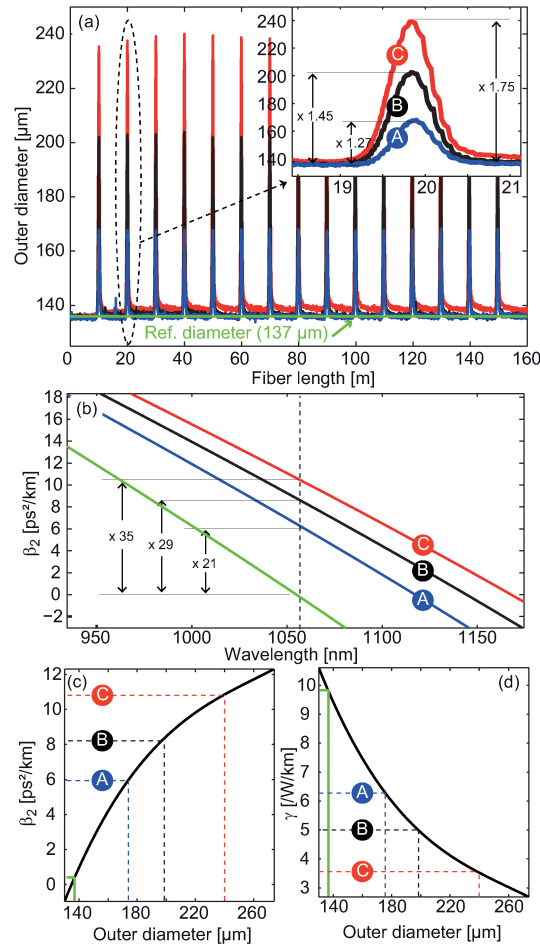


FIGURE 2.4 – (a) variation du diamètre extérieur de la fibre en fonction de l'abscisse dans la fibre pour les fibres A (en bleu), B (en noir) et C (en rouge). (b) Dispersion calculée en fonction de la longueur d'onde dans une fibre uniforme de diamètre extérieur celui de la fibre A (en bleu), B (en noir) et C (en rouge) (c) dispersion dans la fibre en fonction du diamètre extérieur (d) coefficient non-linéaire  $\gamma$  en fonction du diamètre extérieur.

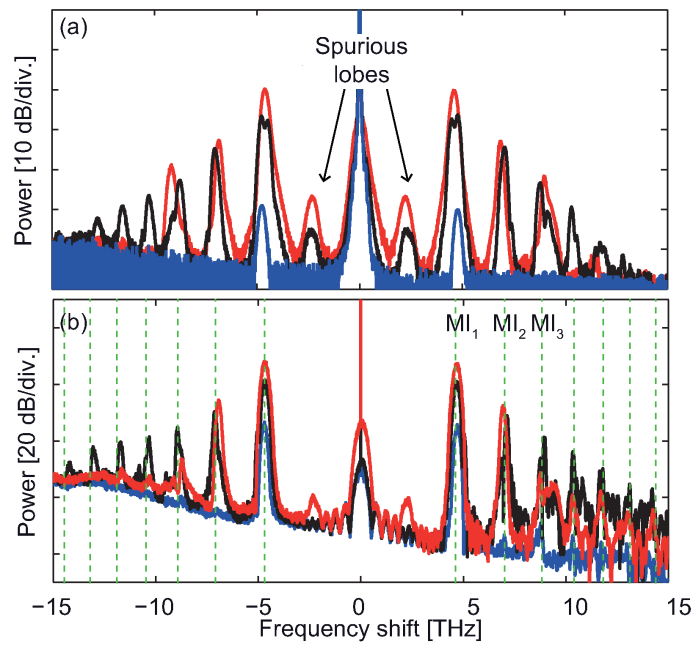


FIGURE 2.5 – (a) spectre expérimental obtenu au bout des fibres A (en bleu), B (en noir) et C (en rouge) (b) Simulations numériques des expériences correspondantes, incluant les dispersions d'ordres supérieurs :  $\beta_3 = 5.6 \times 10^{-41} \text{ s}^3/\text{m}$ ,  $\beta_4 = -1 \times 10^{-55} \text{ s}^4/\text{m}$  et des pertes de  $\alpha = 5 \text{ dB/km}$ .

modulationnelle. Nous avons mis en oeuvre expérimentalement 3 fibres différentes afin de valider notre analyse. Nous avons pu valider quantitativement notre théorie, en prédisant notamment le lieu des pics d'instabilité modulationnelle dans ce contexte. Nous avons pu valider notre théorie qualitativement, en obtenant des pics plus élevés pour des valeurs du paramètre de perturbation plus élevées. S'il est connu qu'une famille de pics d'instabilité modulationnelle se crée, en général, lorsque la dispersion d'une fibre varie de manière périodique le long de la fibre, ce travail met pour la première fois en évidence ce phénomène dans le contexte d'une dispersion en peigne de Dirac, et en propose une analyse détaillée, validée par l'expérience.

### 2.3 Structure hétérocline de la résonance paramétrique dans l'équation de Schrödinger non-linéaire

Cette section décrit les travaux publiés dans [CMK<sup>+</sup>16]. Comme dans la section 2.2, on s'intéresse à la propagation de la lumière dans une fibre optique, modélisée par l'équation (2.3) en régime de dispersion normale (cas défocalisant), lorsque les propriétés physiques de la fibre ne sont pas homogènes avec la variable de propagation  $z$  mais sont des fonctions périodiques induisant un phénomène de résonance paramétrique. On montre comment il est possible, par des techniques de troncation de modes et de moyennisation, y compris dans le régime de fortes excitations, d'obtenir un oscillateur tronqué décrivant convenablement la dynamique *au-delà du régime linéaire* décrit dans la section 2.2. Cet oscillateur exhibe en particulier une structure hétérocline complexe, et il montre l'existence de solutions de type "breather" séparant différents régimes récurrents de type Fermi-Pasta-Ulam (FPU). Nous avons validé numériquement cette étude en calculant ce type de solutions en intégrant le modèle complet de NLS de l'équation (2.3). Une autre conséquence surprenante de l'étude de cet oscillateur est qu'il montre que, passé le régime linéaire, l'amplification paramétrique maximale a lieu en dehors des bandes de gain linéaire prédites par la théorie de Floquet.

#### 2.3.1 Obtention de l'oscillateur réduit

Le fait que l'instabilité modulationnelle décrite en Section 2.2 a lieu dans des bandes de fréquences assez restreintes centrées sur les  $\omega_\ell$  (voir (2.15) et la Figure 2.2 (b)) qui sont des fréquences en général rationnellement indépendantes laisse espérer qu'une méthode de troncation à 3 modes va permettre de décrire convenablement le comportement des solutions de l'équation (2.5). On utilise de nouveau les notations (2.6) et le fait que l'on se place dans le cas défocalisant en moyenne (voir (2.7)). Sans perte de généralité, on suppose comme dans la Section 2.2 que  $\gamma_m = 0$ . De plus, on note  $Z = 2\pi/k_g$  la période de la modulation de dispersion. On insère donc dans l'équation (2.5) l'ansatz

$$u(z, t) = A_0(z) + a_1(z)e^{-i\omega t} + a_{-1}(z)e^{i\omega t},$$

où  $\omega \in \mathbb{R}$  est la pulsation de la perturbation. Regroupant les termes de pulsations  $\pm\omega$  et 0, négligeant les autres, et supposant la perturbation symétrique en écrivant

$$a_1(z) = a_{-1}(z) = \frac{\sqrt{2}}{2} A_1(z),$$

on obtient le système Hamiltonien non-autonome

$$\begin{cases} -i\dot{A}_0 &= (|A_0|^2 + 2|A_1|^2)A_0 &+ A_1^2 A_0^* \\ -i\dot{A}_1 &= \left[ \frac{\beta(z)\omega^2}{2} + \left( \frac{3|A_1|^2}{2} + 2|A_0|^2 \right) \right] A_1 &+ A_0^2 A_1^* \end{cases}, \quad (2.24)$$

où l'on a noté avec un point la dérivation par rapport à la variable d'évolution  $z$  dans la fibre et avec une étoile la conjugaison complexe. Afin de décrire l'évolution couplée à 3 modes dans la  $\ell$ ème bande d'instabilité modulationnelle, on introduit les fonctions  $u$  et  $w$  définies par

$$u(z) = A_0(z) \quad \text{et} \quad w(z) = A_1(z) e^{-i\left(\ell \frac{k_g}{2} z + \frac{\delta k(z)}{2}\right)},$$

où la fonction  $\delta k$  est définie par

$$\delta k(z) = \beta_m \omega^2 \int_0^z f_Z(z') dz'.$$

Écrivant le développement en série de Fourier de  $z \mapsto e^{i\delta k(z)}$  sous la forme

$$\exp[i\delta k(z)] = \sum_n c_n \exp(-ink_g z),$$

posant

$$F_Z(z) = \sum_{n \neq \ell} c_n \exp[-i(n - \ell)k_g z],$$

et

$$\kappa = \beta_{av} \omega^2 - pk_g + 2P,$$

le système (2.24) s'écrit dans les nouvelles variables  $u$  et  $w$

$$\begin{aligned} -i\dot{u} &= (P + |w|^2)u + [c_\ell + F_Z(z)] w^2 u^*, \\ -i\dot{w} &= \left( \frac{\kappa}{2} + \frac{|w|^2}{2} + |u|^2 \right) w + [c_\ell^* + F_Z^*(z)] u^2 w^*. \end{aligned}$$

On adopte maintenant la méthode développée dans [CBK97] dans le cadre des milieux quadratiques. On suppose  $1/k_g$  petit et l'on considère l'ansatz suivant pour les fonctions  $u$  et  $w$

$$u(z) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} u_n(z) e^{in\ell k_g z} \quad \text{et} \quad w(z) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} w_n(z) e^{in\ell k_g z},$$

où les fonctions  $u_n$  et  $w_n$  sont supposées varier moins vite que  $z \mapsto e^{ik_g z}$  et dont les harmoniques sont supposées d'ordre  $1/k_g$  (au plus). On peut alors écrire

$$u_n = \frac{1}{\ell k_g} \frac{c_{\ell(1-n)}}{n} w_0^2 u_0^* \quad \text{et} \quad w_n = \frac{1}{\ell k_g} \frac{c_{\ell(1+n)}^*}{n} u_0^2 w_0^*.$$

On obtient ainsi le système suivant pour les fonctions  $u_0$  et  $w_0$

$$\begin{cases} -iu\dot{u}_0 &= (P + |w_0|^2)u_0 + c_{\ell} w_0^2 u_0^* + \alpha (|w_0|^4 - 2|w_0 u_0|^2) u_0 \\ -i\dot{w}_0 &= \left( \frac{\kappa}{2} + \frac{|w_0|^2}{2} + |u_0|^2 \right) w_0 + c_{\ell}^* u_0^2 w_0^* - \alpha (|u_0|^4 - 2|w_0 u_0|^2) w_0 \end{cases},$$

où

$$\alpha = \frac{1}{\ell k_g} \sum_{n \neq 0} \frac{|c_{\ell(1-n)}|^2}{n}.$$

Introduisant les variables

$$\eta = |w_0|^2 \quad \text{et} \quad \phi = \text{Arg}(w_0) - \text{Arg}(u_0) + \frac{1}{2} \text{Arg}(c_{\ell}),$$

qui représentent respectivement la fraction de puissance en dehors de la pompe et la phase totale, on écrit finalement le système précédent sous la forme Hamiltonienne canonique

$$\begin{cases} \dot{\eta} &= -\frac{\partial H_{\ell}}{\partial \phi} \\ \dot{\phi} &= \frac{\partial H_{\ell}}{\partial \eta} \end{cases}, \quad (2.25)$$

où  $H_{\ell}$  est défini par

$$H_{\ell} = |c_{\ell}| \eta (1 - \eta) \cos 2\phi + \frac{\kappa}{2} \eta - \frac{3}{4} \eta^2 - \alpha \eta (1 - 3\eta + 2\eta^2).$$

### 2.3.2 Étude et exploitation de l'oscillateur réduit

Le système réduit (2.25) est une version moyennisée intégrable du comportement non-linéaire de l'instabilité modulationnelle. Il est en particulier valide quelles que soient la valeur de  $\ell$  et la fonction de modulation de la dispersion  $f_Z$ . Dans la suite, on se focalise sur une modulation de la forme

$$f_Z(z) = \cos(k_g z).$$

Dans ce cas, les solutions de (2.25) s'écrivent de manière explicite à l'aide de fonctions hyperelliptiques. Cependant, on tire déjà l'essentiel de l'information qualitative de l'étude des courbes de niveau de  $H_{\ell}$ . On montre en Figure 2.6 le diagramme de bifurcation du système (2.25), c'est-à-dire la valeur de  $\eta$  aux points stationnaires  $\dot{\eta} = \dot{\phi} = 0$  en fonctions de la fréquence de perturbation  $\omega$  lorsque  $\ell = 1$ ,  $\beta_m = 0.5$ ,  $Z = 1$  et  $P = 1$ .

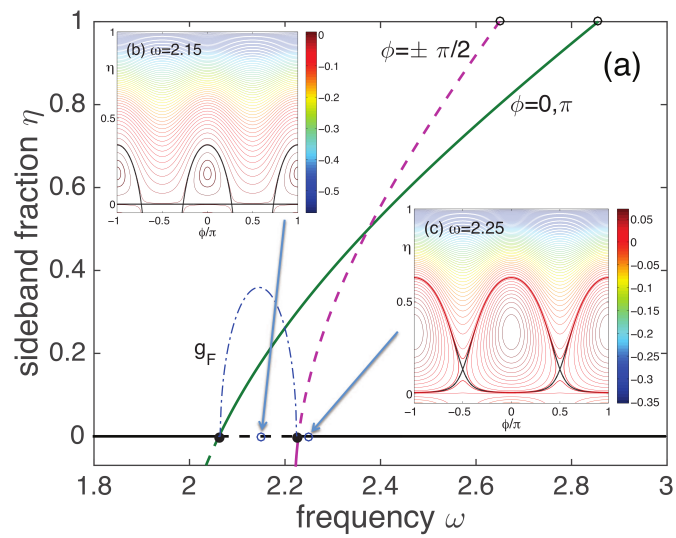


FIGURE 2.6 – (a) Diagramme de bifurcation pour le système (2.25) :  $\eta$  en fonction de  $\omega$  aux points stationnaires, en vert plein lorsque le point est stable, en rose pointillé lorsque le point est instable. Pour  $\eta = 0$ , le changement de stabilité a lieu aux bords de la bande de fréquences prédite par l’analyse de Floquet. (b) et (c) Diagrammes de phase pour le système (2.25) : (b)  $\omega = 2.15$ , dans la bande de gain linéaire. (c)  $\omega = 2.25$ , en dehors de la bande de gain linéaire (on remarque en particulier la présence de points-selles avec  $\eta \neq 0$ ).



L'instabilité de la pompe ( $\eta = 0$ ) traduit l'instabilité modulationnelle d'ordre  $\ell$ . En effet, dans le régime des fréquences  $\omega$  telles que  $|\alpha(\omega) - \kappa(\omega)/2| \leq |c_\ell(\omega)|$ , le point  $(\phi, \eta) = (0, \pm \frac{1}{2} \text{Arccos}[(\alpha - \kappa/2)/|c_\ell|])$  est un point selle de  $H_\ell$ . On retrouve en particulier les bandes de stabilité de l'analyse linéaire de la Section 2.2. Dans cette gamme de fréquences, le plan de phase associé au système (2.25) est séparé en deux parties, comme celui d'un pendule simple : au-dessus d'une séparatrice hétérocline reliant deux points selles se trouvent des orbites correspondant aux rotations du pendule ; en-dessous se trouvent des orbites périodiques correspondant aux libérations (voir Figure 2.6 (b)). Aux extrémités de cette gamme de fréquences, on voit apparaître une bifurcation dans le mode de la pompe. Dans le plan de phase  $(\phi, \eta)$ , apparaissent de nouveaux points d'équilibre pour lesquels  $\eta > 0$  : en plus des points centres stables pour lesquels  $\phi = 0[\pi]$ , on trouve des points selles instables pour lesquels  $\phi = \pi/2[\pi]$  (voir Figure 2.6 (c)). Ces derniers sont connectés par de nouvelles courbes hétéroclines, divisant naturellement le plan de phase en 3 composantes connexes.

Pour illustrer la validité de l'oscillateur réduit (2.25) pour décrire la dynamique de l'équation (2.5) dans ce contexte, et en particulier les courbes hétéroclines dans le plan de phase de (2.25) que nous venons de décrire, on intègre numériquement le système (2.5) avec une donnée initiale de la forme

$$u_0(t) = \sqrt{1 - \eta_0} + \sqrt{2\eta_0} e^{i\theta_0} \cos(\omega t), \quad (2.26)$$

avec  $\eta_0 = 0.001$  et  $\theta_0 = \phi(0) - \phi_\ell/2$  (où  $\phi_0 = \phi(0)$  est la phase initiale globale). On observe, comme attendu, un seul cycle d'amplification, connectant la solution constante à elle-même, avec un changement de phase. On peut voir cette solution comme un analogue du breather d'Akhmediev, que l'on observe dans l'équation NLS (2.5) dans le cas focalisant (en dispersion anormale). Ces solutions, que nous appelons PR breathers, sont caractérisés par une amplification à grande échelle couplée à de petites amplifications à l'échelle de  $Z$ .

La dynamique des solutions est différente dans chacune des zones du plan de phase  $(\phi, \eta)$  séparées par la solution hétérocline. Dans les deux cas, les solutions présentent des comportements récurrents de type FPU : des oscillations à large échelle se superposent à des oscillations à l'échelle  $Z$  de l'excitation du système. On montre en Figure 2.8 (a,b) le comportement de la solution de (2.5) pour une donnée initiale avec  $\eta_0 = 0.02$  et  $\phi_0 = 0$ . Le comportement est similaire lorsque  $\eta = 0$  et  $\phi_0 = \pi/2$ . Projeté dans le plan de phase  $(\phi, \eta)$ , le comportement de ces deux solutions est cependant très différent : pour  $(\eta_0, \phi_0) = (0.02, 0)$ , l'évolution projetée a lieu autour de l'orbite de libération du système moyenné (2.25) (Fig 2.8 (c)) alors que pour  $(\eta_0, \phi_0) = (0.02, \pi/2)$  celle-ci a lieu autour d'une orbite de rotation du système moyenné (2.25) (Fig 2.8 (d)).

Une conséquence encore plus frappante de l'analyse de l'hamiltonien non-linéaire réduit (2.25) est la suivante : l'instabilité modulationnelle d'amplitude maximale peut avoir lieu à des endroits différents des maxima prévus par la théorie de Floquet linéaire (voir Section 2.2), et celle-ci peut même avoir lieu en dehors des bandes de

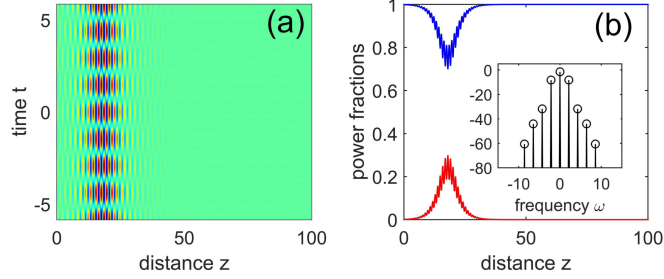


FIGURE 2.7 – Excitation d’un breather PR par intégration numérique de (2.5) avec la donnée initiale (2.26) et les paramètres  $\beta_m = 0.5$ ,  $\omega = 2.15$ ,  $Z = 1$ ,  $P = 1$ ,  $\eta_0 = 0.001$  et  $\phi_0 = 0.24162\pi$  (a)  $|u|^2$  en fonction de  $(t, x)$  (b) fractions  $|A_0|^2$  et  $|A_{\pm 1}|^2$  de la solution en fonction de  $z$  (insert : spectre en échelle logarithmique au point où  $|A_{\pm 1}|$  est maximal ( $z = 18$ )).

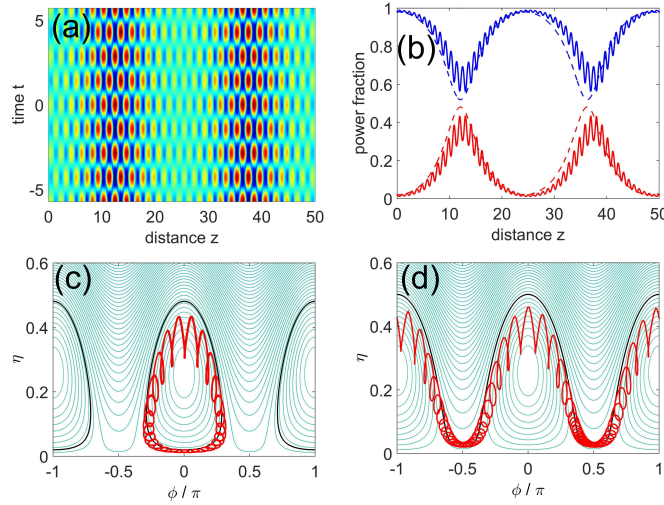


FIGURE 2.8 – Évolution quasipériodique de la solution de (2.5) pour la donnée initiale (2.26) avec  $\eta_0 = 0.02$ ,  $\beta_m = 0.5$ ,  $\omega = 2.2$ ,  $Z = 1$  et  $P = 1$  (a)  $|u|^2$  en fonction de  $(z, t)$  (b) fractions  $|A_0|^2$  et  $|A_{\pm 1}|^2$  de la solution exacte en fonction de  $z$  pour  $\phi_0 = 0$  (trait plein), comparée avec l’intégration du modèle moyenné (2.25) (pointillés) (c-d) projections des solutions de (2.5) dans le plan de phase  $(\phi, \eta)$  pour  $\phi_0 = 0$  (c) et  $\phi_0 = \pi/2$  (d).

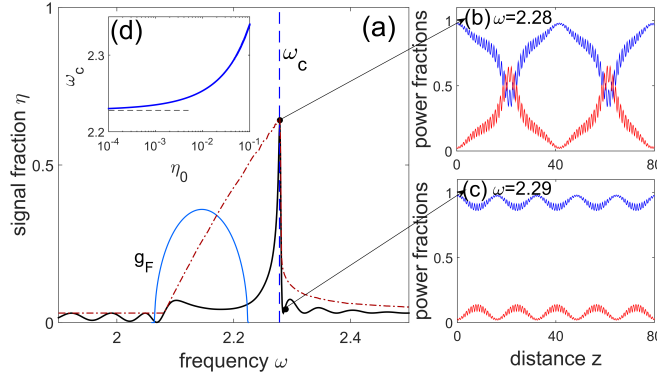


FIGURE 2.9 – (a) Fraction  $\eta$  en  $z = 20$  en fonction de  $\omega$  après intégration numérique de NLS avec  $(\eta_0, \phi_0) = (0.03, 0)$  (trait plein noir), maximum de  $z \mapsto \eta(z)$  en fonction de  $\omega$  (pointillés marron), et gain linéaire (cyan) (b,c) Évolution de la pompe et des composantes auxiliaires après intégration numérique de NLS pour des fréquences proches de  $\omega_c$  Insert (d) : Fréquence critique  $\omega_c$  en fonction de la fraction initiale  $\eta_0$  (les pointillés horizontaux correspondent à la fréquence haute de la bande de gain de Floquet).

gain prévues par l'analyse linéaire, comme le montre l'exemple suivant. Si la théorie de Floquet prédit bien que la conversion d'énergie de la pompe vers les autres modes a lieu initialement le plus rapidement aux maxima de la courbe de gain linéaire, l'analyse non-linéaire montre qu'une conversion plus forte est possible, vers des modes de fréquences plus élevées. Même si la pompe est linéairement stable pour ces fréquences, une conversion non-linéaire a lieu au voisinage de l'orbite hétérocline exhibée plus haut. En examinant la fraction  $\eta$ , par exemple en  $z = 20$ , en fonction de  $\omega$ , on observe des valeurs bien supérieures à celles prévues par la théorie linéaire, pour des fréquences  $\omega$  légèrement inférieures à une fréquence critique  $\omega_c$ , qui se trouve en-dehors des bandes de gain linéaire (Figure 2.9 (a)). Pour des fréquences légèrement supérieures à  $\omega_c$ , la fraction  $\eta(z = 20)$  est bien moins importante et l'on illustre en Figure 2.9 (b,c) le comportement de cette fraction en fonction de  $z$  pour des valeurs inférieures à  $\omega_c$  (b) et supérieures à  $\omega_c$  (c). La fréquence critique  $\omega_c$  correspond à une évolution le long de la solution hétérocline de la figure 2.6 (c), et elle est solution de l'équation

$$H_\ell(\eta(\omega), \phi = \pm\pi/2) = H_\ell(\eta_0, \phi_0).$$

Enfin, dans la limite où la fraction initiale est petite ( $\eta_0 \rightarrow 0$ ), la fréquence critique  $\omega_c$  tend vers la fréquence maximale de la bande de gain prévue par la théorie de Floquet, comme on l'illustre en Figure 2.9 (d).

### 2.3.3 Conclusions

Les travaux décrits en Section 2.3 ont permis de mettre en évidence une structure hétérocline cachée dans l'espace des solutions de l'équation de Schrödinger non-linéaire défocalisante (2.5). L'étude de l'insabilité modulationnelle, considérée comme un problème de résonance paramétrique, a été conduite via un système hamiltonien réduit et moyenné qui a permis cette mise en évidence. Deux conséquences majeures de cette structure ont été présentées. L'existence de breathers PR a été illustrée numériquement pour la première fois dans ce cas. Par ailleurs, nous avons montré que l'instabilité modulationnelle maximale peut avoir lieu, pour certaines gammes étroites de fréquences, en dehors des bandes de gain prévues par la théorie linéaire de Floquet.

## 2.4 Solitons de Peregrine avec des points de compression multiples pour l'équation de NLS avec coefficients périodiques

### 2.4.1 Problématique

On présente dans cette section les travaux publiés dans [TCT+15]. On considère l'équation de NLS (2.5), cette fois dans le cas focalisant (dispersion anormale), modélisant à nouveau la propagation d'une onde électromagnétique dans une fibre optique. Considérant des coefficients périodiques de dispersion  $\beta_2$  et de non-linéarité  $\gamma$  de sorte que l'équation soit intégrable, on montre comment il est possible, analytiquement, de mettre en évidence des solutions de type soliton de Peregrine présentant plusieurs points de compression. Ces solutions sont vues comme des limites de solitons d'Akhmediev, et sont considérées comme des solutions modèles de type ondes scélérates (rogue waves (RW)) [SG10, KP03]. Enfin, certaines propriétés de ces solutions analytiques semblent numériquement perdurer lorsque l'on sort du contexte intégrable.

### 2.4.2 Obtention de la solution de Peregrine généralisée

On considère la solution  $u$  de l'équation (2.5) lorsque les coefficients  $\beta_2$  et  $\gamma$  sont des fonctions périodiques lisses de l'abscisse  $z$ . La condition d'intégrabilité de l'équation est  $\beta_2' R - R' \beta_2 = 0$ . Ainsi,  $R/\beta_2$  est une fonction constante, que l'on prend égale à  $-1$ , pour se placer dans le cas focalisant (dispersion anormale). À partir d'une solution de la forme

$$q_0(z) = A \exp[i\varphi_0(z)], \tag{2.27}$$

où  $A > 0$ , et  $\varphi_0(z) = A^2 \int_{z_0}^z \beta_2(z') dz'$  ( $z_0 \in \mathbb{R}$ ), la méthode de Darboux [GLL12] permet d'obtenir les breathers d'Akhmediev (AB)

$$u_{\text{AB}}(z, t) = A \left[ 1 + \frac{2\eta (A \cos(d_1(t)) - \eta \cosh(d_2(z)) - i\alpha \sinh(d_2(z)))}{A \cosh(d_2(z)) - \eta \cos(d_1(t))} \right] \exp(i\varphi_0(z)), \quad (2.28)$$

où

$$\begin{aligned} d_1(t) &= 2\alpha t, \\ d_2(z) &= 2\alpha\eta \int_{z_0}^z \beta_2(z) dz, \quad \alpha = \sqrt{A^2 - \eta^2}, \end{aligned}$$

pour  $0 \leq \eta < A$ . L'intensité  $z \mapsto |u_{\text{AB}}(z, t)|^2$  est une fonction périodique de période  $\pi/\sqrt{A^2 - \eta^2}$ , et l'on retrouve dans la limite  $\eta \rightarrow A^-$  le soliton de Peregrine généralisé classique

$$u_{\text{PS}}(z, t) = A \left[ 4 \frac{1 - 2iA^2 \int_{z_0}^z \beta_2(z') dz'}{1 + 4A^4 \left( \int_{z_0}^z \beta_2(z') dz' \right)^2 + 4A^2 t^2} - 1 \right] e^{i\varphi_0(z)}. \quad (2.29)$$

On s'intéresse à une modulation de la dispersion purement sinusoïdale de la forme

$$\beta_2(z) = -1 + d_m \cos(k_m z), \quad (2.30)$$

où  $d_m > 0$  est l'intensité de la modulation et  $k_m/(2\pi)$  est sa fréquence spatiale. On illustre la transition du breather d'Akhmediev généralisé vers le soliton de Peregrine généralisé en Figure 2.10. On remarque que, dans tous les cas, la fonction intensité présente plusieurs maxima locaux. On analyse dans la suite l'influence des paramètres  $d_m$  et  $k_m$  sur la position et le nombre de ces extrema locaux.

### 2.4.3 Analyse de la solution de Peregrine généralisée

Adoptant la convention  $z_0 = 0$  dans ce qui précède, on s'aperçoit que pour toute abscisse  $z$  fixée dans la fibre, l'intensité  $t \mapsto |u_{\text{PS}}(z, t)|^2$  est maximale en  $t = 0$  où elle vaut

$$|u_{\text{PS}}(z, 0)|^2 = |u_{\text{PS}}|_{\text{max}}^2(z) = \frac{9 + 40A^4 Z^2 + 16A^8 Z^4}{(1 + 4A^4 Z^2)^2} A^2, \quad (2.31)$$

où

$$Z = z - \frac{d_m}{k_m} \sin(k_m z) = z \left( 1 - d_m \frac{\sin(k_m z)}{k_m z} \right). \quad (2.32)$$

La fonction de  $Z$  dans le membre de droite de (2.31) présente un maximum absolu de  $9A^2$  en  $Z = 0$ . Ainsi, lorsque  $d_m \geq 1$ , l'intensité maximale (par rapport au temps) a un unique maximum absolu (par rapport à l'espace) en  $z = 0$ . On appelle point de compression dans ce contexte un couple  $(z, t)$  tel que  $|q(z, t)|$  est un maximum absolu de  $|q|$ . Lorsque  $d_m > 1$ , on constate la présence de plusieurs points de compression

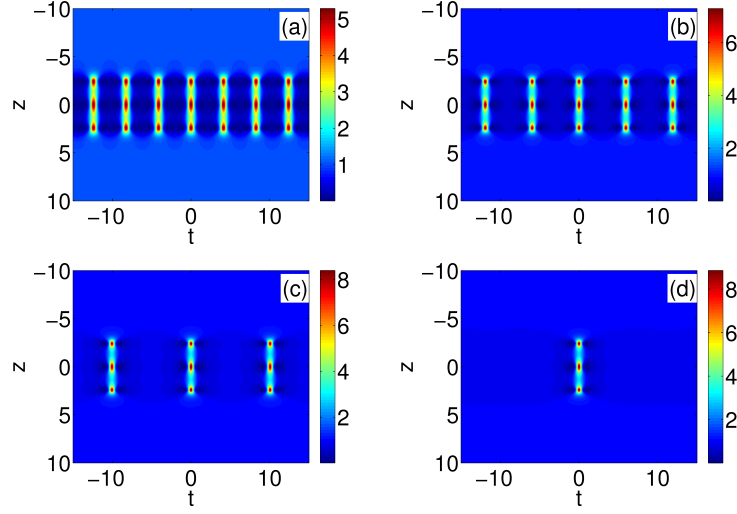


FIGURE 2.10 – Intensité  $|u_{AB}|^2$  de la solution (2.28) montrant la transition du breather d’Akhmediev généralisé vers le soliton de Peregrine généralisé : (a)  $\eta = 0.65$ , (b)  $\eta = 0.85$ , (c)  $\eta = 0.95$ , (d)  $\eta = 0.99$ . Par ailleurs,  $d_m = 2$ ,  $A = 1$ ,  $z_0 = 0$ , and  $k_m = \pi/4$ .

d’intensité maximale, pour différentes valeurs de  $z$ , solutions de

$$\frac{\sin(k_m z)}{k_m z} = \frac{1}{d_m}.$$

On appelle cette structure à multiples points de compression un peigne de Peregrine, et on l’illustre en Figure 2.11.

On remarque que le soliton de Peregrine (2.29) s’écrit encore

$$u_{PS}(z, t) = \frac{2}{W} \frac{1}{1 + (\frac{t}{W})^2} e^{i\varphi_1(z)} - A e^{i\varphi_0(z)}, \quad (2.33)$$

avec

$$\varphi_1(z) = \varphi_0(z) + \tan^{-1}(-2A^2 Z), \quad (2.34)$$

et

$$W(z) = \frac{\sqrt{1 + 4A^4 Z^2}}{2A}. \quad (2.35)$$

Par suite, sa transformée de Fourier en temps est donnée par

$$\begin{aligned} F(z, \omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} u_{PS}(t, z) e^{i\omega t} dt \\ &= \sqrt{2\pi} \left[ \frac{1 - 2iA^2 Z}{\sqrt{1 + 4A^4 Z^2}} e^{-\frac{1}{2A}|\omega|\sqrt{1+4A^4 Z^2}} - A\delta(\omega) \right] e^{i\varphi_0(z)}. \end{aligned}$$

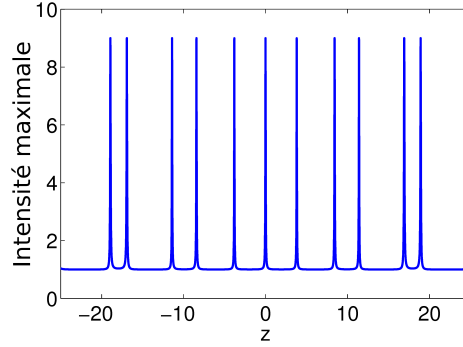


FIGURE 2.11 – Forme du peigne de Peregrine pour  $A = 1$ ,  $d_m = 20$  et  $k_m = \pi/4$ .

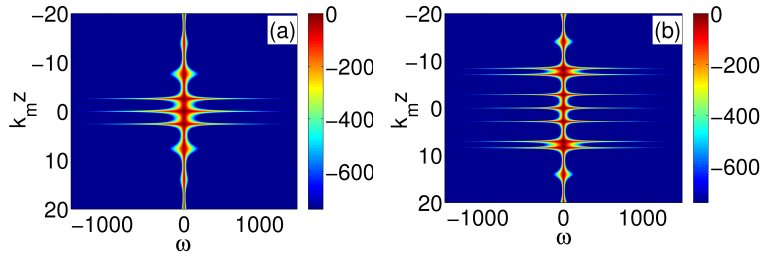


FIGURE 2.12 – Spectre de la partie pulse du soliton de Peregrine en échelle logarithmique :  $\log |F(\omega, z)|$  avec  $A = 1$  ; (a)  $d_m = 5$ , (b)  $d_m = 10$ .

En omettant la partie singulière, due à l'onde continue, on trouve lorsque  $A = 1$

$$|F(z, \omega)| = \sqrt{2\pi} e^{-0.5|\omega|\sqrt{1+4Z^2}}. \quad (2.36)$$

On peut ainsi retrouver les caractéristiques d'apparition et de disparition de l'onde scélérate dans la fibre en observant son spectre fréquentiel (voir Figure 2.12).

#### 2.4.4 Persistance au-delà de la relation d'intégrabilité

Dans des conditions expérimentales ne vérifiant pas l'hypothèse d'intégrabilité de l'équation, nous avons testé la persistance de solutions de type peigne de Peregrine. Les conditions expérimentales sont détaillées dans [DKB<sup>+</sup>12]. Nous avons utilisé les profils expérimentaux de dispersion et de non-linéarité donnés respectivement en Figure 2.13 (a) et (b). Ceux-ci correspondent en première approximation à  $d_m = 6.6$  et  $k_m = 4\pi$  pour la dispersion  $\beta_2$  et  $\gamma$  constant, ce qui viole la condition d'intégrabilité. Avec ces paramètres, nous avons intégré numériquement l'équation (2.5) pour une donnée initiale prise avec la formule (2.29) avec  $z_0 = 1.25$ . Le résultat obtenu est montré en Figure 2.13. On constate la persistance de points de compression multiples dans ce régime non-intégrable.

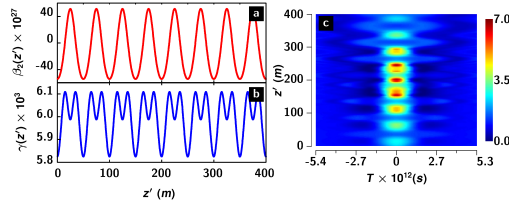


FIGURE 2.13 – Évolution dans la fibre (a) de la dispersion, (b) de la non-linéarité, (c) de l'intensité de la solution numérique obtenue.

### 2.4.5 Conclusion

Nous avons mis en évidence analytiquement une classe de solutions de l'équation de Schrödinger (2.5) dans le cas intégrable et focalisant correspondant à des solitons de Peregrine généralisé. Nous avons analysé la présence de multiples points de compression dans la fibre pour ce type de solutions. On peut voir ce type de solutions comme des exemples analysables d'ondes scélérates. L'existence de ce type d'ondes, présentant plusieurs points de compression, dans les fibres optiques, en dehors du régime intégrable, et dans des conditions expérimentalement atteignables, est confirmée numériquement.

## 2.5 Contrôle du soliton de Kuznetsov–Ma par modulation périodique

On présente dans cette section les résultats publiés dans [TCT<sup>+</sup>17].

### 2.5.1 Problématique

On s'intéresse, comme dans la Section 2.4, à la propagation dans une fibre topographique de l'enveloppe du champ électrique d'une onde électromagnétique, modélisée par l'équation de Schrödinger (2.5) à coefficients lisses et périodiques dans le cas focalisant (dispersion anormale) et intégrable. On se focalise sur les solutions de type soliton de Kuznetsov–Ma généralisé et l'on étudie en détail la dépendance des caractéristiques de ces solitons par rapport à l'intensité et la période de la modulation périodique des coefficients. En particulier, on s'intéresse à la présence de points de compression multiples dans ce type de solitons, à leur forme, leur position et à leur intensité.

### 2.5.2 Le soliton de Kuznetsov–Ma généralisé

On se place dans le cas où la modulation de dispersion est purement sinusoïdale, de la forme donnée par (2.30). La condition d'intégrabilité est prise, comme en section 2.4 de sorte que  $\gamma = -\beta_2$  (dispersion anormale, cas focalisant). Dans ces



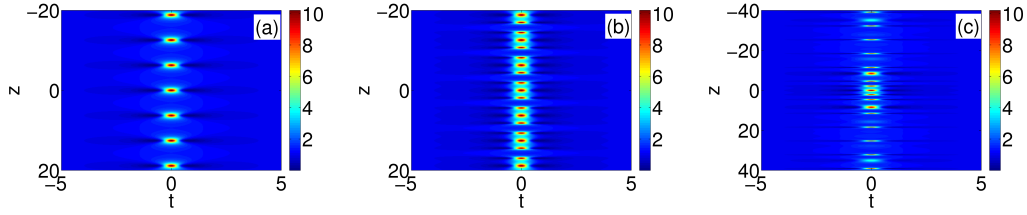


FIGURE 2.14 – (Color online) Évolution de l'intensité du soliton de Kuznetsov–Ma généralisé lorsque (a)  $d_m = 0$  (b)  $d_m = 2$ ,  $k_m = b$  (c)  $d_m = 2$ ,  $k_m = \sqrt{3}b/2$ . Avec  $a = 0.603$ .

conditions, le soliton de Kuznetsov–Ma généralisé s'écrit

$$u_{\text{Ma}}(z, t) = \left[ 1 + \frac{2(1 - 2a) \cos(bZ) - ib \sin(bZ)}{\sqrt{2a} \cosh(\omega t) - \cos(bZ)} \right] \exp(-iZ),$$

où  $a > 1/2$  est fixé,  $b = \sqrt{8a(2a - 1)}$ ,  $\omega = 2\sqrt{2a - 1}$ , et  $Z$  est donné par

$$Z = -z + \frac{d_m}{k_m} \sin(k_m z).$$

Dans le cas des coefficients constants ( $d_m = 0$ ), le soliton  $u_{\text{Ma}}$  est localisé en temps mais pas en espace : si  $b = p/q$  avec  $p$  et  $q$  premiers entre eux, alors  $u_{\text{Ma}}$  est une fonction périodique de  $z$  de période  $2\pi q = p2\pi/b$ ; dans le cas où  $b$  est irrationnel,  $u_{\text{Ma}}$  est une fonction quasi-périodique de  $z$ . On étudie dans la suite l'influence de l'intensité  $d_m$  et de la pulsation  $k_m$  de la modulation sur le soliton de Kuznetsov–Ma.

### 2.5.3 Influence de l'intensité et de la fréquence de la modulation sur le soliton de Kuznetsov–Ma

On se place maintenant dans le cas où  $d_m$  et  $k_m$  sont strictement positifs. On remarque qu'à l'abscisse  $z$ , l'intensité maximale du soliton de Kuznetsov–Ma est atteinte en  $t = 0$  avec

$$|u_{\text{Ma}}|_{\text{max}}^2(z) = 1 + \frac{4\sqrt{2a}(2a - 1)}{\sqrt{2a} - \cos(bZ)}. \quad (2.37)$$

Ainsi, lorsque  $k_m/b$  est rationnel, l'intensité maximale du soliton  $|u_{\text{Ma}}|_{\text{max}}^2$  est périodique : si  $k_m/b = p/q$  avec  $p$  et  $q$  premiers entre eux, alors la période de  $|u_{\text{Ma}}|_{\text{max}}^2$  est  $2\pi p/k_m = 2\pi q/b$ . Sinon, c'est une fonction quasipériodique de  $z$ . On illustre cela en Figure 2.14

On peut étudier plus précisément l'influence de l'intensité  $d_m$  et de la fréquence  $k_m/2\pi$  des variations périodiques dans la fibre sur la position des maxima de l'intensité du soliton de Kuznetsov–Ma. Pour cela, on caractérise ces points par le fait qu'ils sont des points critiques de la fonction  $z \mapsto |u_{\text{Ma}}|_{\text{max}}^2(z)$ . Ainsi, ils sont solution

d'au moins l'une des équations

$$\sin(bZ) = 0, \quad (2.38)$$

et

$$D_2(z) = -1 + d_m \cos(k_m z) = 0. \quad (2.39)$$

Lorsque l'équation (2.38) est satisfaite, on atteint un extremum global de la fonction. Quand les deux sont simultanément satisfaites, on a un extrémum plat (les 5 premières dérivées s'annulent aussi). Distinguons trois régimes :

- lorsque  $d_m \in ]0, 1[$ , la relation (2.39) n'est jamais satisfaite. Les maxima de la fonction  $|u_{\text{Ma}}|_{\text{max}}^2$  sont uniquement déterminés par la relation (2.38), et l'on a une répartition périodique ou quasi-périodique de ces extrema dans la fibre.
- pour la valeur critique  $d_m = 1$ , l'influence de la période  $k_m/2\pi$  peut-être analysée comme suit. Tous les extrema locaux sont globaux. De plus, lorsque  $k_m/b$  est rationnel, il y en a une infinité, certains étant plats d'autres pas. Lorsque  $k_m/b$  est irrationnel, il y a une infinité d'extrema, mais un seul est plat, en  $z = 0$ .
- lorsque  $d_m > 1$ , on observe une succession d'extrema, certains locaux, d'autres globaux, et l'on peut suivre leur évolution lorsque  $d_m$  augmente.

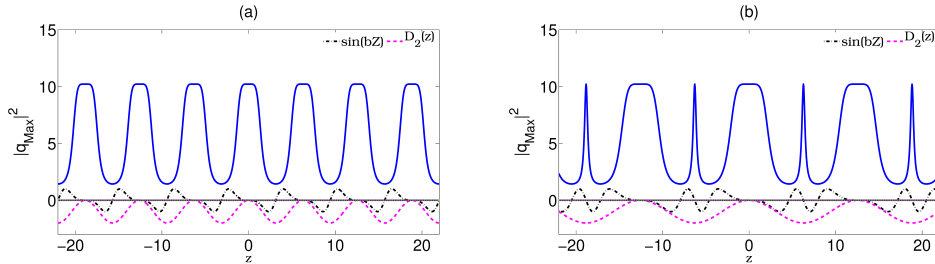


FIGURE 2.15 – Allure du soliton de Kuznetsov–Ma généralisé  $|u_{\text{Ma}}|_{\text{max}}^2$  en fonction de  $z$  (trait plein) lorsque  $D_2 = \beta_2 = -\gamma$  est périodique dans le cas où  $d_m = 1$  et  $a = 0.603$ . (a)  $k_m/b = 1.0$ , (b)  $k_m/b = 1/2$ .

Nous avons aussi analysé plus avant la périodicité et la quasi-périodicité de la fonction  $z \mapsto |u_{\text{Ma}}|_{\text{max}}^2(z)$  en fonction de  $d_m$  et  $k_m$  au moyen d'une application de Poincaré et de transformation de Fourier. Nous avons notamment proposé une analyse asymptotique des fréquences en présence lorsque  $a \gg 1$ .

## 2.5.4 Conclusions et perspectives

Nous avons analysé l'influence de l'intensité et de la fréquence d'une perturbation périodique des coefficients de l'équation de NLS (2.5) sur les caractéristiques du solution de Kuznetsov–Ma généralisé, dans le cas intégrable. Si l'intensité de la modulation périodique n'influence pas la valeur du maximum de ces solitons, elle

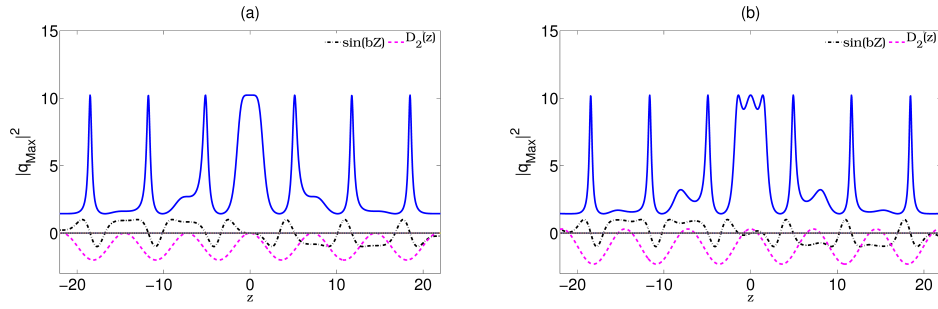


FIGURE 2.16 – Allure du soliton de Kuznetsov–Ma généralisé  $|u_{\text{Ma}}|_{\text{max}}^2$  en fonction de  $z$  (trait plein) lorsque  $D_2 = \beta_2 = -\gamma$  est périodique dans le cas où  $k_m/b = \sqrt{3}/2$  and  $a = 0.603$ . (a)  $d_m = 1$ , (b)  $d_m = 1.3$ .

crée cependant en général une infinité de points de compression. Par ailleurs, la fréquence des oscillations périodiques influence la forme du soliton. Ces travaux pourraient permettre la réalisation expérimentale et le contrôle d'ondes scélérates sous la forme de solitons de Kuznetsov–Ma généralisés.

# Intégration numérique d'EDO et d'EDP stochastiques

---

## Sommaire

---

<b>3.1</b>	<b>Contexte scientifique et problématiques . . . . .</b>	<b>35</b>
<b>3.2</b>	<b>Méthodes préservant l'énergie pour des EDS de Poisson . .</b>	<b>36</b>
3.2.1	Motivations . . . . .	36
3.2.2	Description des méthodes . . . . .	36
3.2.3	Propriétés qualitatives et quantitatives . . . . .	37
3.2.4	Expériences numériques . . . . .	38
3.2.5	Conclusions et perspectives . . . . .	42
<b>3.3</b>	<b>Méthodes exponentielles pour NLS avec dispersion aléatoire</b>	<b>42</b>
3.3.1	Introduction . . . . .	43
3.3.2	Description des méthodes . . . . .	43
3.3.3	Propriétés des méthodes exponentielles . . . . .	44
3.3.4	Expériences numériques . . . . .	44
3.3.5	Conclusions . . . . .	46

---

## 3.1 Contexte scientifique et problématiques

On regroupe dans cette section les travaux d'intégration numérique en temps de problèmes d'évolution stochastiques publiés dans [CD14] et [CD17].

Dans le premier travail, on considère des systèmes d'équations différentielles de Poisson stochastiques mis sous forme canonique

$$dy_t = B(y_t)\nabla H(y_t)\left(dt + c \circ dW_t\right), \quad (3.1)$$

où  $c \in \mathbb{R}$ ,  $W_t$  est un processus de Wiener unidimensionnel et  $\circ$  désigne le produit de Stratonovitch. Le champ de matrices  $y \mapsto B(y)$  est à valeurs dans les matrices antisymétriques et  $y \mapsto H(y)$  est une fonction lisse à valeurs réelles représentant l'énergie du problème. On introduit une nouvelle classe d'intégrateurs préservant l'énergie pour ce type de problèmes en s'inspirant d'intégrateurs introduits pour les problèmes déterministes ( $c = 0$ ). Nous avons étudié les propriétés des méthodes

introduites d'un point de vue théorique (préservation d'invariants, ordre de convergence 1 en moyenne quadratique) et nous avons illustré numériquement nos résultats sur des exemples classiques de ce domaine.

Dans le second travail, on s'intéresse à une équation de Schrödinger non-linéaire de type (2.3) où la dispersion est une fonction aléatoire de la variable d'évolution. On introduit et l'on analyse deux méthodes exponentielles pour ce problème. On prouve que la première, explicite, est d'ordre fort 1 et que la seconde, implicite, préserve la norme 2. On utilise également la première méthode pour illustrer numériquement une conjecture d'explosion en temps fini des solutions dans un cas de non-linéarité critique.

## 3.2 Méthodes numériques préservant l'énergie pour des systèmes de Poisson stochastiques

### 3.2.1 Motivations

Les solutions exactes des systèmes différentiels stochastiques de la forme (3.1) préservent exactement l'énergie  $H$  du système, par application de la règle de dérivation des fonctions composées pour le produit de Stratonovitch. De nombreuses méthodes ont été développées pour intégrer numériquement ce type de problèmes [MRT02, Wan07, BRO09, WHSB09, Mis10, BB12, MDD12], mais en général, elles ne préservent pas exactement l'Hamiltonien  $H$ . On pourra aussi consulter [FL09] pour une approche géométrique dans le cas Hamiltonien canonique et une problématique différente d'échantillonnage de calculs de moyennes d'observables. C'est pourquoi nous avons développé, analysé et mis en œuvre une classe de méthodes préservant l'énergie. En plus de la préservation de  $H$ , nos méthodes préservent les Casimir quadratiques, et elles sont d'ordre 1 en moyenne quadratique.

### 3.2.2 Description des méthodes

En nous inspirant des méthodes préservant l'énergie développées dans [Hai11] et [CH11] pour des problèmes déterministes, nous avons proposé la méthode à un pas suivante pour l'intégration de (3.1) :

$$y_{n+1} = y_n + B\left(\frac{y_n + y_{n+1}}{2}\right) \int_0^1 \nabla H(y_n + \tau(y_{n+1} - y_n)) d\tau (h + c\Delta W_n), \quad (3.2)$$

où  $h > 0$  est le pas de temps et les  $(\Delta W_n)_{n \in \mathbb{N}}$  sont les incréments du processus de Wiener :

$$\Delta W_n := \sqrt{h}\xi_n,$$

où les  $(\xi_n)_{n \in \mathbb{N}}$  sont une suite de variables aléatoires réelles indépendantes et identiquement distribuées suivant la loi normale centrée réduite.

Dans la pratique, la méthode (3.2) est généralement implicite. Puisque les incréments  $\Delta W_n$  ne sont pas presque sûrement bornés, il est commode d'en utiliser une

version modifiée  $\Delta\hat{W}_n$  qui est presque sûrement bornée. Suivant [MRT02], on pose pour tout  $n \in \mathbb{N}$  et  $h > 0$ ,

$$\zeta_{n,h} = \begin{cases} \xi_n, & \text{si } |\xi_n| \leq A_h, \\ A_h, & \text{si } \xi_n > A_h, \\ -A_h, & \text{si } \xi_n < -A_h, \end{cases}$$

pour  $A_h = \sqrt{2k|\ln(h)|}$  où  $k \geq 0$  est un entier, et

$$\Delta\hat{W}_n = \sqrt{h}\zeta_{n,h}.$$

Ainsi, la méthode que l'on considère, analyse et implémente pour l'intégration de (3.1) est la méthode  $y_n \mapsto y_{n+1}$  définie par

$$y_{n+1} = y_n + B\left(\frac{y_n + y_{n+1}}{2}\right) \int_0^1 \nabla H(y_n + \tau(y_{n+1} - y_n)) d\tau (h + c\Delta\hat{W}_n). \quad (3.3)$$

Dans le cas  $k = 2$ , il est connu ([MRT02]) que la méthode du point milieu stochastique est d'ordre 1 en moyenne quadratique.

### 3.2.3 Propriétés qualitatives et quantitatives

La méthode (3.3), tout comme le flot de l'équation continue (3.1) préserve l'énergie.

**Théorème 3.2.3.1** *Pour tout  $n \in \mathbb{N}$  et tout  $h > 0$  tels que  $y_0, \dots, y_n$  sont bien définis par la méthode (3.3), on a  $H(y_n) = H(y_0)$ .*

Les Casimir du problème (3.1) sont les fonctions numériques  $C$  de classe  $\mathcal{C}^1$  sur l'espace des phases telles que pour tout  $y$ , on a  $B(y)\nabla C(y) = 0_{\mathbb{R}^d}$ . Elles sont invariantes le long des solutions de (3.1). Elles sont également invariantes par la méthode (3.3).

**Théorème 3.2.3.2** *Pour tout Casimir  $C$  de (3.1) et tout  $n \in \mathbb{N}$  et tout  $h > 0$  tels que  $y_0, \dots, y_n$  sont bien définis par la méthode (3.3), on a  $C(y_n) = C(y_0)$ .*

La part théorique la plus importante du travail publié dans [CD14] est le théorème montrant l'ordre de la méthode (3.3).

**Théorème 3.2.3.3** *Si les fonction  $B$  et  $H$  sont lisses, si les dérivées de  $B$  jusqu'à l'ordre 3 et de  $H$  jusqu'à l'ordre 4 sont bornées sur l'espace des phases, alors la méthode (3.3) est d'ordre 1 en moyenne quadratique. Ceci signifie que pour toute donnée initiale  $y_0$  et tout  $T > 0$  tel que la solution exacte  $t \mapsto y_t$  de (3.1) existe presque sûrement sur  $[0, T]$ , on a*

$$\max_{h>0 \text{ tel que } 0 \leq nh \leq T} (\mathbb{E}(\|y_n - y_{nh}\|^2))^{\frac{1}{2}} = \mathcal{O}(h),$$

lorsque  $h$  tend vers 0.

La preuve du Théorème 3.2.3.3 consiste à comparer un développement asymptotique de la méthode (3.3) avec la méthode du point milieu stochastique. Si cette preuve ne fait pas appel directement aux propriétés géométriques précédentes (préservation de l'énergie du théorème 3.2.3.1 et des Casimir du théorème 3.2.3.2), ces propriétés permettent d'appliquer le théorème sur des exemples où il ne s'applique pas directement *a priori*, par restriction de l'espace des phases : il suffit en effet que  $B$  et  $H$  soient des fonctions lisses et qu'il existe ( $y_0$  étant fixé) un compact convexe de l'espace des phases dans lequel la solution exacte et la solution numérique restent presque sûrement pour pouvoir appliquer ce résultat d'ordre.

### 3.2.4 Expériences numériques

On compare numériquement la nouvelle méthode (3.3) aux principales méthodes classiques pour les équations différentielles stochastiques :

- la méthode d'Euler-Maruyama, appliquée au problème (3.1) mis sous sa forme d'Itô équivalente ; elle est d'ordre 1/2 [KP92],
- la méthode de Milstein, appliquée également à la version d'Itô du système (3.1) ; elle est d'ordre 1 (voir également [KP92]),
- la méthode d'Euler-Heun, introduite dans [Pla84] ; elle est d'ordre 1,
- la méthode du point milieu stochastique introduite dans [MRT02] ; elle est d'ordre 1,
- la méthode du gradient discret stochastique, introduite dans [HZZ11], et appliquée à (3.1) dans [CD14] ; elle est d'ordre 1.

On utilise 4 exemples classiques successifs.

#### 3.2.4.1 L'oscillateur harmonique stochastique

Sur l'exemple de l'oscillateur harmonique stochastique

$$d \begin{pmatrix} x_t \\ p_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_t \\ -x_t \end{pmatrix} (dt + c \circ dW_t),$$

la méthode (3.3) s'écrit

$$\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}(h + c\Delta\widehat{W}_n)^2} \begin{pmatrix} (1 - \frac{1}{4}(h + c\Delta\widehat{W}_n)^2)x_n + (h + c\Delta\widehat{W}_n)p_n \\ -(h + c\Delta\widehat{W}_n)x_n + (1 - \frac{1}{4}(h + c\Delta\widehat{W}_n)^2)p_n \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

On montre en Figure 3.1 les résultats numériques obtenus par différentes méthodes classiques, dans l'espace des phases, dans l'espace des positions, et on considère l'énergie du système. On constate la très bonne stabilité de la méthode (3.4), qui coïncide avec la méthode du point milieu stochastique puisque l'hamiltonien est quadratique, par rapport aux autres méthodes classiques. Qui plus est, elle est bien d'ordre 1, comme le montre la Figure (3.2).

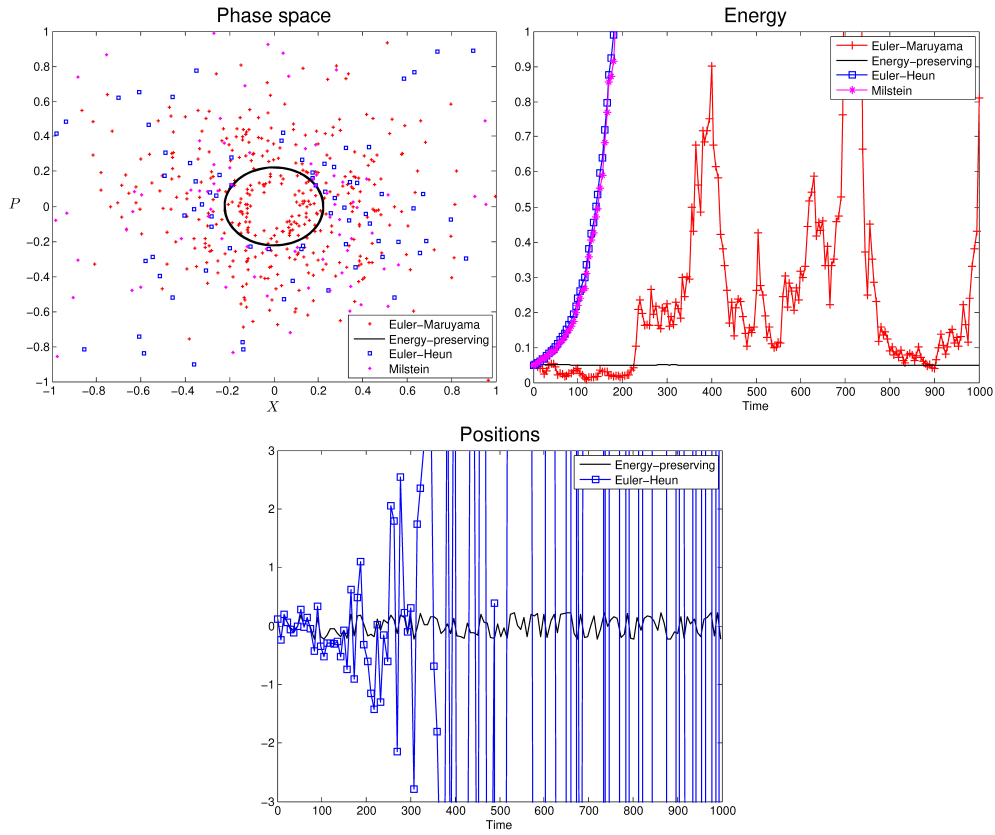


FIGURE 3.1 – L'oscillateur harmonique stochastique avec  $x_0 = 0.1, p_0 = 0.2, c = 1$ .  $N = 10^5$  pas de temps de longueur  $h = 10^{-2}$  pour la méthode d'Euler-Maruyama (+), la méthode (3.4) (trait plein), la méthode de Milstein (\*), et la méthode d'Euler-Heun ( $\square$ ).

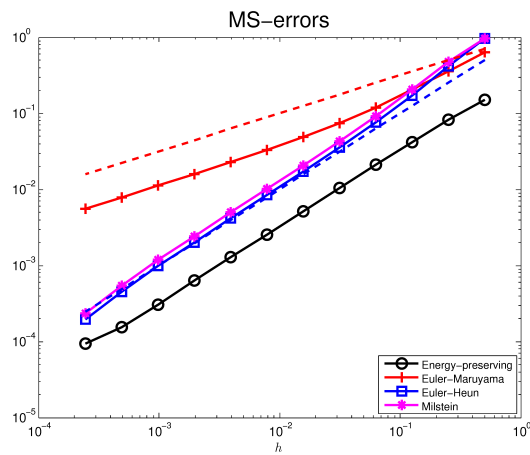


FIGURE 3.2 – Erreur quadratique moyenne finale au temps  $t = 5$  estimée avec  $M = 5000$  échantillons. Les droites en pointillés ont pour pentes  $1/2$  et  $1$ .



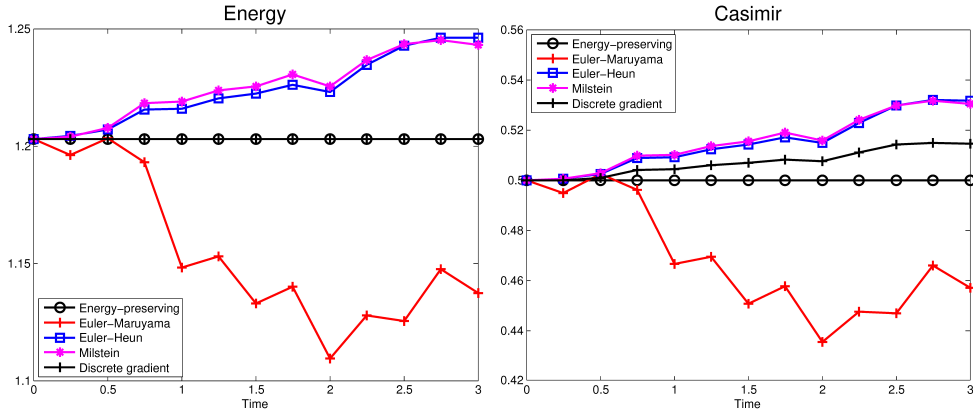


FIGURE 3.3 – Énergie (à gauche) et Casimir (à droite) pour la dynamique du solide stochastique. 300 pas de temps de taille  $h = 10^{-2}$ . Avec  $c = 1$ ,  $y_0 = (0.8, 0.6, 0)$  et  $I = (0.345, 0.653, 1)$ .

### 3.2.4.2 La dynamique du solide stochastique

Les équations du mouvement du solide stochastique de moments d’inerties principaux  $I_1$ ,  $I_2$  et  $I_3$  s’écrivent

$$\begin{pmatrix} dy_{[1]} \\ dy_{[2]} \\ dy_{[3]} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -y_{[3]} & y_{[2]} \\ y_{[3]} & 0 & -y_{[1]} \\ -y_{[2]} & y_{[1]} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_{[1]}/I_1 \\ y_{[2]}/I_2 \\ y_{[3]}/I_3 \end{pmatrix} (dt + c \circ dW_t).$$

L’énergie totale du solide est la quantité

$$H(y) = \frac{1}{2}(y_{[1]}^2/I_1 + y_{[2]}^2/I_2 + y_{[3]}^2/I_3),$$

et l’on vérifie que la fonctionnelle quadratique

$$C(y) = \frac{1}{2}(y_{[1]}^2 + y_{[2]}^2 + y_{[3]}^2),$$

est un Casimir de l’équation (3.2.4.2). La méthode (3.3), qui se réduit ici aussi à la méthode du point milieu stochastique puisque l’hamiltonien est quadratique, préserve l’énergie, de même que la méthode du gradient discret, comme on le constate en Figure 3.3 (à gauche) ; en revanche, c’est la seule méthode préservant le Casimir  $C$  numériquement, comme on le voit en Figure 3.3 (à droite).

### 3.2.4.3 Le pendule stochastique

On applique la méthode (3.3) aux équations du pendule stochastique

$$d \begin{pmatrix} p_t \\ q_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin(q_t) \\ p_t \end{pmatrix} (dt + c_1 \circ dW_t^1 + c_2 \circ dW_t^2),$$

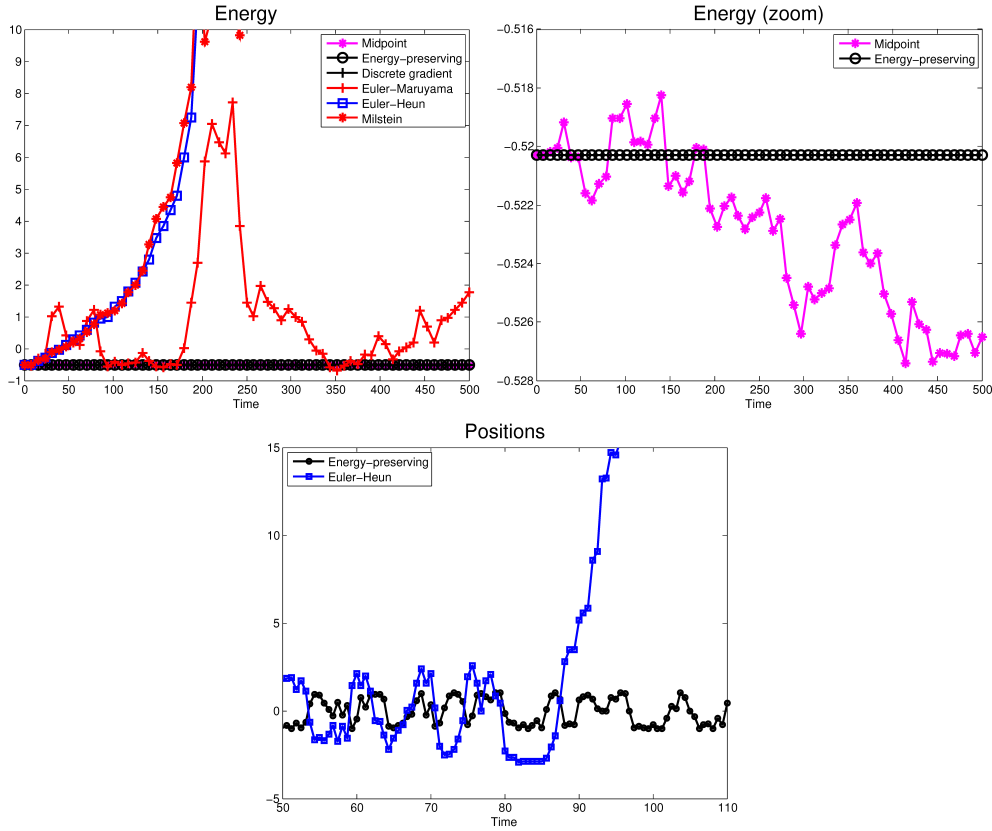


FIGURE 3.4 – Pendule stochastique partant de  $p_0 = 0.2$ ,  $q_0 = 1.0$ , avec  $c_1 = 1.0$  et  $c_2 = 0.5$ . Énergie des solutions numériques des différentes méthodes (en haut et à gauche). Zoom sur le graphe précédent (en haut et à droite). Positions numériques pour la méthode (3.3) et la méthode d'Euler-Heun (en bas).

où  $c_1$ ,  $c_2$  sont des réels positifs et  $W_1$  et  $W_2$  sont des processus de Wiener indépendants. On compare numériquement sur cet exemple cette méthode aux méthodes classiques précitées. On obtient les résultats présentés en Figure 3.4. En particulier, la méthode (3.3) et la méthode du gradient discret sont les seules à préserver l'énergie du système (figure de gauche) et la méthode (3.3) diffère bien de la méthode du point milieu stochastique (figure du milieu). De plus, elle est reproduit numériquement convenablement les trajectoires bornées en position (figure de droite).

#### 3.2.4.4 Le système de Lotka-Volterra stochastique

On teste finalement la méthode (3.3) sur l'exemple du système de Lotka-Volterra stochastique issu de [CH11] pour lequel

$$B(y) = \begin{pmatrix} 0 & dy_{[1]}y_{[2]} & bdy_{[1]}y_{[3]} \\ -dy_{[1]}y_{[2]} & 0 & -y_{[2]}y_{[3]} \\ -bdy_{[1]}y_{[3]} & y_{[2]}y_{[3]} & 0 \end{pmatrix},$$

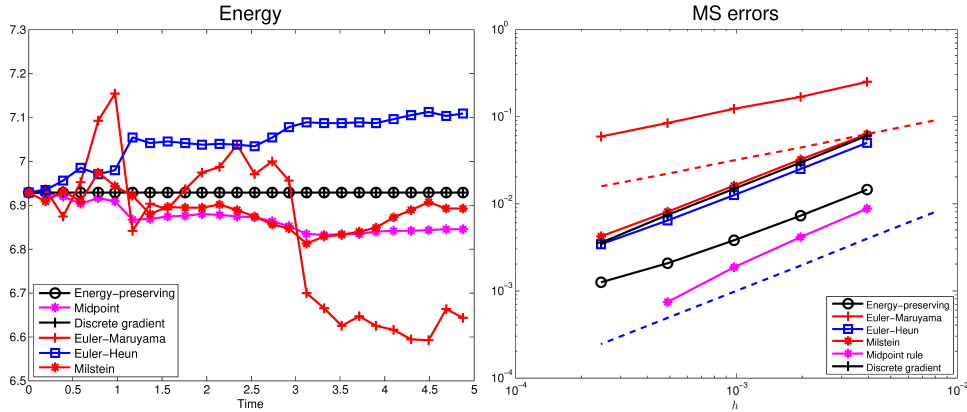


FIGURE 3.5 – Hamiltonien du système de Lotka–Volterra pour les différentes méthodes numériques (à gauche). Erreur quadratique moyenne finale pour  $t_{\text{end}} = 1$  en fonction de  $h$ , estimée avec  $M = 1000$  trajectoires (à droite). Les droites en pointillés ont pour pentes  $1/2$  et  $1$ .

et

$$H(y) = aby_{[1]} + y_{[2]} - ay_{[3]} + \nu \ln y_{[2]} - \mu \ln y_{[3]},$$

où  $a, b, d, \mu$  et  $\nu$  sont des constantes réelles. Les résultats numériques produits par les différentes méthodes sont illustrés en Figure 3.5. On constate que la méthode (3.3) et la méthode du gradient discret sont les deux seules préservant l'énergie  $H$  (figure de gauche). De plus, la méthode (3.3) est bien d'ordre 1 sur cet exemple également (figure de droite).

### 3.2.5 Conclusions et perspectives

Nous avons généralisé les méthodes préservant l'énergie de [CH11] au cas des systèmes de Poisson stochastiques. Nous avons prouvé que la méthode obtenue préserve l'énergie du système, préserve les éventuels Casimir du système, et qu'elle est d'ordre 1 en moyenne quadratique. Les questions de l'ordre faible de cette méthode, de la possibilité de produire des méthodes préservant l'énergie dans le cas stochastique d'ordre (faible) plus élevé, et de la possibilité de préserver encore d'autres invariants numériquement sont encore ouvertes à ce jour.

## 3.3 Méthodes exponentielles pour l'intégration de l'équation NLS avec dispersion aléatoire

On présente dans cette section les résultats publiés dans [CD17]. On considère l'équation NLS (2.3) avec une dispersion aléatoire de type bruit blanc (voir l'équation (3.5) ci-dessous). On introduit deux méthodes numériques exponentielles permettant l'intégration en temps de ce problème. La première est explicite et intègre la partie

stochastique de l'équation de manière exacte. Nous prouvons qu'elle est d'ordre fort 1 en moyenne quadratique et nous la comparons aux méthodes de la littérature. La seconde est implicite et symétrique, et elle préserve la norme 2.

### 3.3.1 Introduction

Nous considérons l'équation NLS posée dans  $\mathbb{R}^d$  sous la forme

$$idu + c\Delta u \circ d\beta + |u|^{2\sigma}u dt = 0, \quad (3.5)$$

où  $c$  est un nombre réel,  $\sigma$  est un nombre réel strictement positif,  $t \mapsto \beta(t)$  est un mouvement Brownien réel, et  $\circ$  désigne le produit de Stratonovitch. Cette équation, introduite dans [Gar02] dans une problématique d'analyse de solitons optiques, est globalement bien posée dans  $L^2(\mathbb{R}^d)$  dès que  $\sigma < 2/d$  ou  $d = 1$  et  $\sigma = 2$  (voir par exemple [dBD10], [DT11], [BdBD15]). Les méthodes d'intégration en temps de cette équation utilisées dans la littérature sont principalement les méthodes de splitting [Mar06], la méthode de Crank-Nicolson [BdBD15] et d'autres méthodes, implicites, symplectiques ou mutli-symplectiques [CHLZ17]. Nous comparons nos méthodes avec celles de la littérature en Section 3.3.4.

### 3.3.2 Description des méthodes

On désigne par  $S(t_2, t_1)$  le flot stochastique correspondant à la partie linéaire de l'équation (3.5) : pour toute distribution tempérée  $v$  sur  $\mathbb{R}^d$ , on pose

$$S(\widehat{t_2, t_1})v(\zeta) = \exp(-i|\zeta|^2(\beta(t_2) - \beta(t_1)))\widehat{v}(\zeta), \quad (\zeta \in \mathbb{R}^d).$$

À partir de la formulation mild de l'équation (3.5), on introduit la méthode exponentielle explicite

$$u_{n+1} = S(t_{n+1}, t_n)u_n + ihS(t_{n+1}, t_n)(|u_n|^{2\sigma}u_n), \quad (3.6)$$

où  $h > 0$  désigne le pas de temps,  $t_n = nh$  pour  $n \in \mathbb{N}$  et  $u_0$  est une donnée dans un espace  $H^s(\mathbb{R}^d)$  pour  $s > 0$  grand. De même, on introduit la méthode exponentielle implicite

$$\begin{aligned} N_* &= N\left(S\left(t_n + \frac{h}{2}, t_n\right)u_n + \frac{h}{2}N_*\right) \\ u_{n+1} &= S(t_{n+1}, t_n)u_n + hS\left(t_n + h, t_n + \frac{h}{2}\right)N_*, \end{aligned} \quad (3.7)$$

où  $N(u) = i|u|^{2\sigma}u$  est la partie non-linéaire de l'équation (3.5).

Afin de mener l'analyse de la première méthode, on fixe  $k > 0$  et  $\theta \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^+, \mathbb{R}^+)$  telle que  $\theta \equiv 1$  sur  $[0, 1]$  et  $\theta \equiv 0$  sur  $[2, +\infty[$  et l'on remplace la méthode (3.6) par la méthode

$$u_{n+1}^k = S(t_{n+1}, t_n)u_n^k + ih\theta(\|u_n^k\|_{H^s(\mathbb{R}^d)}^2)S(t_{n+1}, t_n)(|u_n^k|^{2\sigma}u_n^k), \quad (3.8)$$

pour un certain  $s > 0$ .

### 3.3.3 Propriétés des méthodes exponentielles

Le principal résultat théorique pour la méthode (3.8) est le théorème suivant.

**Théorème 3.3.3.1** *Soit  $s > d/2$ ,  $T, k > 0$  et  $u_0 \in H^{s+4}(\mathbb{R}^d)$ . On note  $t \mapsto u(t)$  la solution exacte presque sûre de la version tronquée (avec la fonction  $\theta$  devant la non-linéarité dans l'équation (3.5)), qui est dans  $\mathcal{C}([0, T], H^{s+4}(\mathbb{R}^d))$ . Il existe une constante  $C > 0$  telle que*

$$\forall h \in (0, 1), \quad \sup_{n | nh \leq T} \mathbb{E}[\|u_n^k - u^k(nh)\|_{H^s}^2] \leq Ch^2.$$

Ainsi, la méthode (3.8) est d'ordre (fort) 1 en moyenne quadratique. On en déduit le

**Corollaire 3.3.3.1** *Sous les hypothèses du Théorème 3.3.3.1, on a*

$$\lim_{C \rightarrow +\infty} \mathbb{P}\left(\max_{n=0, \dots, N} \|u^k(nh) - u_n^k\|_{H^s} \geq Ch\right) = 0,$$

uniformément en  $h \in (0, 1)$ .

Ainsi, la méthode (3.8) est d'ordre 1 en probabilité.

Concernant la méthode (3.7), on montre qu'elle préserve la norme 2 :

**Théorème 3.3.3.2** *Pour tout  $u_0 \in H^s(\mathbb{R}^d)$ ,  $h > 0$  et  $n \in \mathbb{N}$  tels que la méthode (3.7) est bien définie jusqu'au pas  $n$ , on a*

$$\|u_n\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \|u_0\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}.$$

### 3.3.4 Expériences numériques

On compare dans un premier temps la méthode (3.6) avec les méthodes classiques pour l'intégration de (3.5), en dimension 1 et 2 d'espace : la méthode de splitting de Lie, celle de Strang, et la méthode de Crank-Nicolson utilisée dans [BdBD15]. On se place en dimension 1, en domaine périodique ramené à  $[0, 2\pi]$ , et l'on utilise une discrétisation spectrale en espace. On considère  $u_0(x) = e^{-(x-\pi)^2}$  et  $\sigma = 1$ . On obtient les graphes d'erreurs visibles en Figure 3.6 pour  $c = 1.0$  et  $c = 0.25$ . On vérifie que la méthode (3.6) est d'ordre 1, conformément au théorème 3.3.3.1. En outre, la méthode de Crank-Nicolson a une moins bonne constante d'ordre que les autres méthodes, mais c'est la seule à ne pas intégrer exactement la partie stochastique de l'équation.

On effectue ensuite la même expérience numérique en ajoutant la méthode exponentielle implicite (3.7) et l'on s'intéresse à la préservation de la norme  $L^2$ . On obtient les résultats de la Figure 3.7. On constate que la méthode (3.7) est nu-

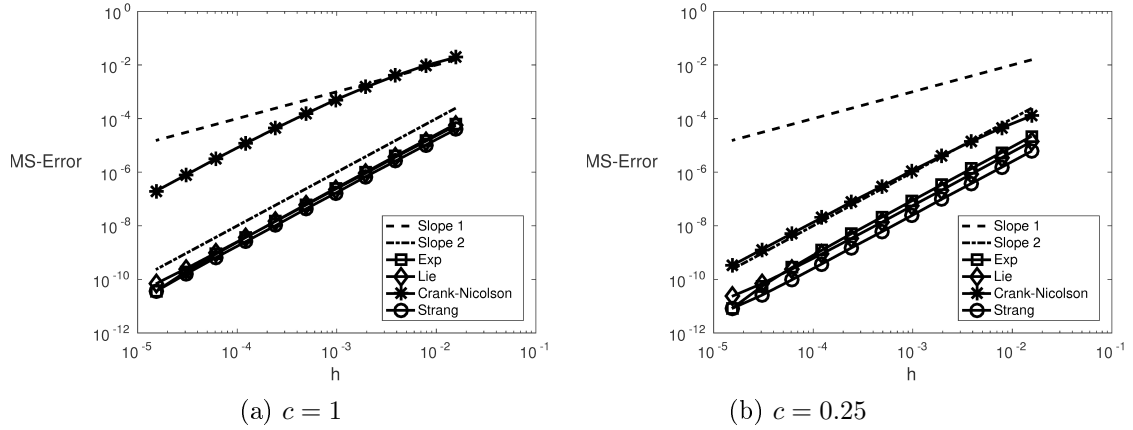


FIGURE 3.6 – Erreurs en moyenne quadratique (au carré) en fonction du pas de temps pour la méthode exponentielle (3.6)( $\square$ ), le splitting de Lie–Trotter ( $\diamond$ ), le splitting de Strang ( $\circ$ ), la méthode de Crank–Nicolson ( $*$ ), estimées avec  $M_s = 5000$  échantillons. Les droites en pointillés ont pour pentes 1 et 2.

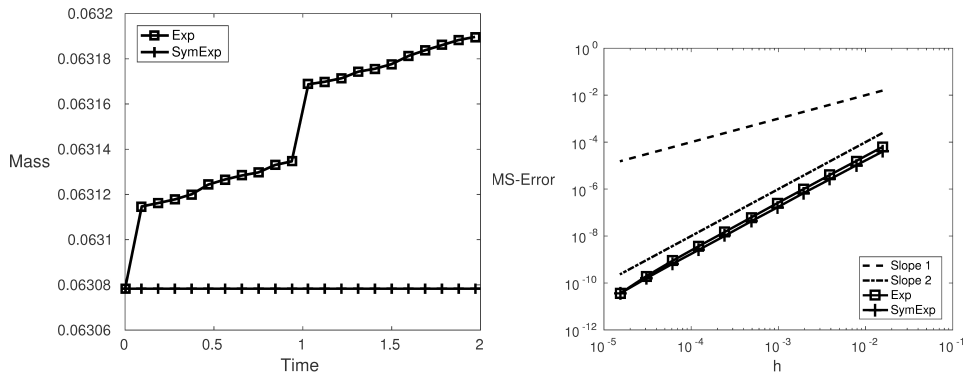


FIGURE 3.7 – Norme  $L^2$  en fonction du temps (à gauche) et erreur en moyenne quadratique (au carré) en fonction du pas de temps (à droite), estimée avec 5000 échantillons. Méthode exponentielle symétrique (3.7) ( $+$ ) et méthode exponentielle explicite (3.6) ( $\square$ ). Les droites en pointillés ont pour pentes 1 et 2.

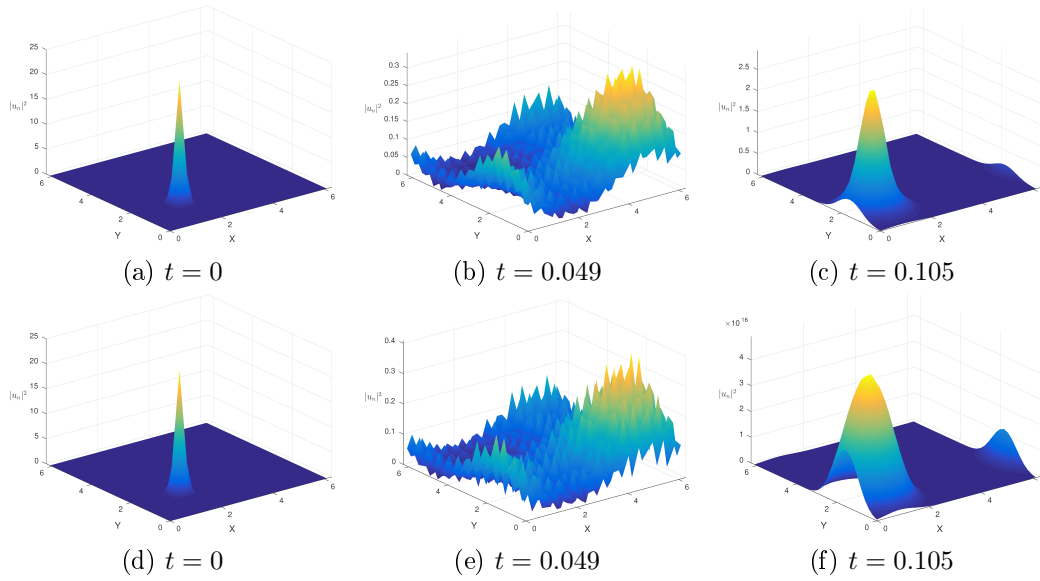


FIGURE 3.8 – Évolution donnée par la méthode exponentielle (3.6) en  $2d$  lorsque  $\sigma = 1.9$  (en haut) et  $\sigma = 2.0$  (en bas). On trace le module de  $u_n$  au carré en fonction de  $(x, y)$ . Remarquer l'échelle sur le troisième axe en Figure 3.8f.

mériquement d'ordre 1, et qu'elle préserve la norme 2 exactement, illustrant ainsi expérimentalement le Théorème 3.3.3.2.

Enfin, on a utilisé la méthode (3.7) pour illustrer numériquement une conjecture de [BdBD15] : le cas  $\sigma = 4$  est critique en dimension  $d = 1$  et le cas  $\sigma = 2$  est critique en dimension  $d = 2$ . On donne un exemple de résultat numérique en dimension  $d = 2$  obtenu par la méthode exponentielle (3.7) appliquée à l'équation (3.5) en domaine périodique ramené à  $[0, 2\pi]^2$ , avec  $c = 1$ , et  $u_0(x, y) = 5 \cdot e^{-14((x-\pi/2)^2+(y-\pi/2)^2)} \cdot e^{i10x}$ . Les paramètres numériques sont  $h = 2^{-11}$  et  $M = 2^7$  modes de Fourier par direction. Lorsque  $\sigma = 1.9$  et lorsque  $\sigma = 2.0$ , on obtient les résultats présentés en Figure 3.8.

### 3.3.5 Conclusions

Nous avons introduit et analysé deux nouvelles méthodes exponentielles d'intégration de l'équation de Schrödinger non-linéaire avec dispersion aléatoire (3.5). Nous avons montré que la première, explicite, est d'ordre fort 1 et que la seconde, implicite, préserve exactement la norme 2. Nous avons comparé ces méthodes aux méthodes classiques de la littérature pour ce type de problèmes et nous avons utilisé l'une d'elles pour confirmer numériquement une conjecture de blow-up en temps fini dans l'équation dans un cas critique.

# Méthodes d'ordre élevé pour des équations de NLS

---

## Sommaire

---

<b>4.1</b>	<b>Contexte scientifique et problématiques . . . . .</b>	<b>47</b>
<b>4.2</b>	<b>Méthodes RK exponentielles de collocation pour NLS . . .</b>	<b>48</b>
4.2.1	Description des méthodes . . . . .	48
4.2.2	Ordre des méthodes de Runge–Kutta exponentielles pour l'équation de NLS . . . . .	49
<b>4.3</b>	<b>Méthodes RKexp pour les condensats de B.–E. en rotation</b>	<b>50</b>
4.3.1	Condensats de Bose–Einstein en rotation . . . . .	50
4.3.2	Description des méthodes . . . . .	51
4.3.3	Résultats concernant ces deux familles de méthodes . . . . .	53
4.3.4	Expériences numériques . . . . .	54

---

## 4.1 Contexte scientifique et problématiques

On regroupe dans cette section les travaux d'intégration numérique d'ordre élevé en temps d'équations de NLS publiés dans [Duj09b] et [BDLV17]. La problématique est la suivante : au-delà des questions de discrétisation en espace, on souhaite développer de manière systématique des méthodes d'intégration en temps d'équations de NLS qui soient d'ordre élevé en temps et permettent de couvrir les situations physiques les plus générales. On adopte ici des méthodes de collocation, intégrant exactement la (ou une) partie linéaire de l'équation, soit sur le problème direct (méthodes de Runge–Kutta exponentielles), soit sur le problème modifié par changement de variable linéaire (méthodes de Lawson). Une des difficultés principales est de développer un contexte fonctionnel permettant de prouver l'ordre des méthodes considérées.

Dans le premier travail, on a proposé des méthodes exponentielles d'ordre élevé pour des équations de NLS linéaires et semi-linéaires en dimension  $d$ . Il s'agit de méthodes de collocation, inspirées de celles développées dans [HO05] pour les problèmes paraboliques. On prouve que les méthodes à  $s$  étages sont d'ordre  $s$  et l'on donne des conditions suffisantes pour atteindre les ordres  $s + 1$  et  $s + 2$  avec une méthode à  $s$  étages.



Dans le second travail, on étend les méthodes introduites dans [Duj09b] en les adaptant à des équations plus générales permettant notamment la simulation numérique de condensats de Bose–Einstein en rotation. On considère également des méthodes exponentielles de type Lawson. On montre que ces dernières méthodes, à  $s$  étages, sont d'ordre au moins  $s$ , et l'on prouve que certaines d'entre elles, utilisant les points de collocation de Gauss, sont d'ordre  $2s$ . On illustre numériquement ces résultats sur des cas tests physiquement significatifs.

## 4.2 Méthodes exponentielles de collocation pour des équations de NLS

### 4.2.1 Description des méthodes

On considère des équations de Schrödinger non-linéaires de la forme

$$\begin{aligned} \partial_t u(t, x) + A u(t, x) &= g(t, u(t, x)) & (t, x) \in [0, T] \times \mathbb{T}^d \\ u(0, x) &= u_0(x) & x \in \mathbb{T}^d, \end{aligned} \quad (4.1)$$

où  $\mathbb{T}^d$  désigne le tore de dimension  $d$ ,  $A = -i\Delta$  et  $g$  est une non-linéarité locale, par exemple  $g(t, u) = \pm i|u|^2 u$  pour l'équation de NLS cubique. On se donne  $s \in \mathbb{N}^*$  points  $0 \leq c_1 < \dots < c_s \leq 1$  de collocation et l'on définit les polynômes d'interpolation de Lagrange associés en posant

$$\forall i \in \{1, \dots, s\}, \quad l_i(\tau) = \prod_{j=1, j \neq i}^s \frac{\tau - c_j}{c_i - c_j}.$$

Puis, on considère pour  $h > 0$  les opérateurs

$$a_{i,j}(-hA) = \frac{1}{h} \int_0^{c_i h} e^{-(c_i h - \tau)A} l_j(\tau) d\tau,$$

pour  $(i, j) \in \{1, \dots, s\}^2$  et

$$\forall i \in \{1, \dots, n\}, \quad b_i(-hA) = \frac{1}{h} \int_0^h e^{-(h-\tau)A} l_i(\tau) d\tau,$$

pour  $i \in \{1, \dots, s\}$ . Les méthodes de Runge–Kutta exponentielles que l'on considère sont les méthodes qui, partant de  $u_n$  approchant  $u(nh)$ , définissent  $(u_{n,1}, \dots, u_{n,s})$  comme solution du système

$$u_{n,i} = e^{-c_i h A} u_n + h \sum_{j=1}^s a_{i,j}(-hA) g(t_n + c_j h, u_{n,j}), \quad i \in \{1, \dots, s\}, \quad (4.2)$$

puis donnent  $u_{n+1}$  approchant  $u((n+1)h)$  via la formule

$$u_{n+1} = e^{-hA}u_n + h \sum_{i=1}^s b_i(-hA)g(t_n + c_i h, u_{n,i}). \quad (4.3)$$

Lorsque  $A = 0$ , les opérateurs  $a_{i,j}(-hA)$  et  $b_i(-hA)$  sont scalaires et les nombres  $a_{i,j}(0)$  et  $b_i(0)$  définissent une méthode de Runge–Kutta classique dite sous-jacente.

#### 4.2.2 Ordre des méthodes de Runge–Kutta exponentielles pour l'équation de NLS

Sous de bonnes hypothèses sur la non-linéarité  $g$  et la solution  $u$  du problème de Cauchy (4.1), on montre que les méthodes de Runge–Kutta exponentielles à  $s$  étages (4.2, 4.3) sont d'ordre au moins  $s$ .

**Hypothèse 4.2.2.1** *La non-linéarité  $g$  est nulle en zéro :*

$$\forall t \in [0, T], \quad g(t, 0) = 0.$$

**Hypothèse 4.2.2.2** *La non-linéarité  $g$  est Lipschitzienne : il existe  $L > 0$  et  $\rho > 0$  tels que pour tout  $t \in [0, T]$  et tout  $u, v \in H^r(\mathbb{T}^d)$  tels que  $\|u\|_{H^r(\mathbb{T}^d)} \leq \rho$  et  $\|v\|_{H^r(\mathbb{T}^d)} \leq \rho$ , on a*

$$\|g(t, u) - g(t, v)\|_{H^r(\mathbb{T}^d)} \leq L\|u - v\|_{H^r(\mathbb{T}^d)}. \quad (4.4)$$

**Hypothèse 4.2.2.3** *L'équation (4.1) admet une unique solution  $u : [0, T] \rightarrow H^r(\mathbb{T}^d)$  suffisamment régulière.*

**Hypothèse 4.2.2.4** *La fonction composée  $f : [0, T] \rightarrow H^r(\mathbb{T}^d)$ ,  $t \mapsto g(t, u(t))$  est suffisamment régulière.*

**Théorème 4.2.2.1** *Supposons  $r \geq 0$ ,  $u_0 \in H^r(\mathbb{T}^d)$  tels que les hypothèses 4.2.2.1, 4.2.2.2, 4.2.2.3 et 4.2.2.4 sont satisfaites. Il existe  $C, h_0 > 0$  tels que pour tout  $h \in ]0, h_0[$  et tout  $N \in \mathbb{N}^*$  avec  $Nh \leq T$ , la méthode de Runge–Kutta exponentielle (4.2, 4.3) définit une unique solution au voisinage de la solution exacte. De plus, pour tout  $n \in \{0, \dots, N\}$ ,*

$$\|u_n - u(t_n)\|_{H^r(\mathbb{T}^d)} \leq Ch^s \int_0^{t_n} \|f^{(s)}(\tau)\|_{H^r(\mathbb{T}^d)} d\tau. \quad (4.5)$$

On peut également donner des conditions suffisantes sur les coefficients de la méthode de Runge–Kutta sous-jacente pour que la méthode (4.2, 4.3) soit d'ordre  $s+1$  ou d'ordre  $s+2$  pour l'équation (4.1).

**Théorème 4.2.2.2** *Sous les hypothèses du Théorème 4.2.2.1, si la méthode de Runge–Kutta sous-jacente est d'ordre  $s+1$ , alors la méthode (4.2, 4.3) est d'ordre*

$s + 1$  : il existe  $C, h_0 > 0$  tels que pour tout  $h \in ]0, h_0[$ , et tout  $N \in \mathbb{N}^*$  tels que  $Nh \leq T$ , on a pour  $n \in \{0, \dots, N\}$ ,

$$\|u_n - u(t_n)\|_{H^r} \leq C h^{s+1}.$$

**Théorème 4.2.2.3** *Sous les hypothèses du théorème 4.2.2.2 et quelques hypothèses de régularité supplémentaires sur la solution exacte de (4.1), si la méthode de Runge–Kutta sous-jacente à la méthode de Runge–Kutta exponentielle (4.2,4.3) est d'ordre  $s + 2$ , alors la méthode (4.2,4.3) est elle-même d'ordre  $s + 2$  : Il existe  $C, h_0 > 0$  tels que pour tout  $h \in (0, h_0)$  et  $N \in \mathbb{N}^*$  tels que  $Nh \leq T$ , on a pour tout  $n \in \{0, \dots, N\}$ ,*

$$\|u(t_n) - u_n\|_{H^r} \leq C h^{s+2}.$$

Il est très vraisemblable que l'on puisse montrer un théorème assurant que, si la solution de (4.1) est suffisamment régulière en temps et en espace, et si la méthode de Runge–Kutta sous-jacente à (4.2,4.3) est d'ordre  $p \in \{s, \dots, 2s\}$ , alors la méthode (4.2,4.3) est elle-même d'ordre  $2s$ . C'est ce que l'on constate numériquement avec  $p = 2s$  pour les méthodes utilisant les points de Gauss comme points de collocation  $(c_1, \dots, c_s)$ , comme on le verra en section 4.3.4. Cependant, les techniques de preuves des théorèmes 4.2.2.2 et 4.2.2.3 font intervenir des calculs et estimations d'erreurs assez complexes et ne se généralisent pas facilement au cas  $p = 2s$ . L'utilisation d'outils différents pour effectuer les calculs d'ordres dans ce contexte tels que les arbres et les  $B$ -séries, avec un contexte fonctionnel approprié, pourrait permettre d'établir une preuve de cette conjecture.

### 4.3 Méthodes exponentielles d'ordre élevé pour la simulation de condensats de Bose–Einstein en rotation

On s'intéresse dans cette section à la simulation numérique par des méthodes d'ordre élevé en temps d'équations de Gross–Pitaevskii modélisant par exemple la dynamique de condensats de Bose–Einstein en rotation. On montre dans un premier temps comment on peut ramener l'équation à une équation de Schrödinger non linéaire non autonome. On décrit ensuite les deux classes de méthodes exponentielles considérées : les méthodes de Runge–Kutta exponentielles, similaires à celles utilisées en Section 4.2 et les méthodes de Lawson. On montre ensuite quelques résultats quantitatifs (ordre des méthodes) et qualitatifs (préservation de la masse) sur ces méthodes. On illustre enfin numériquement les résultats obtenus, en dimension 1 et 2.

#### 4.3.1 Condensats de Bose–Einstein en rotation

En dimension 2, la fonction d'onde macroscopique adimensionnée  $\varphi$  d'un condensat de Bose–Einstein en rotation obéit à l'équation de Gross–Pitaevskii [BMTZ13]

$$i\partial_t \varphi = -\frac{1}{2}\Delta \varphi + V_c(\mathbf{x})\varphi + \beta|\varphi|^2\varphi - \Omega R\varphi. \quad (4.6)$$

Dans cette équation,  $V_c$  désigne le potentiel extérieur confinant appliqué au condensat,  $\beta \in \mathbb{R}$  mesure l'intensité de l'interaction moyennée des bosons et  $\Omega \in \mathbb{R}$  mesure la vitesse de rotation angulaire. Un exemple de potentiel confinant typique est

$$V_c(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} (\gamma_x^2 x^2 + \gamma_y^2 y^2), \quad (4.7)$$

où  $\gamma_x, \gamma_y > 0$ . L'opérateur de rotation  $R$ , quant à lui, s'écrit en coordonnées cartésiennes  $R = -i(x\partial_y - y\partial_x)$ . Définissant la fonctionnelle d'énergie  $E$  du système par

$$E(\varphi) = \int_{\mathbb{R}^2} \left[ \frac{1}{2} |\nabla \varphi|^2 + V_c |\varphi|^2 + \frac{\beta}{2} |\varphi|^4 - \Omega \operatorname{Re}(\varphi^* R \varphi) \right] d\mathbf{x},$$

l'équation (4.6) prend la forme hamiltonnienne

$$i\partial_t \varphi(t, \cdot) = \frac{1}{2} \nabla_{\varphi(t, \cdot)} E(\varphi(t, \cdot)).$$

Ce problème, très étudié ces dernières années [BZ05] [BMTZ13] [AD15] [AD15], se réécrit sous la forme d'une équation de Schrödinger non linéaire non autonome en faisant par exemple le changement de variable [BMTZ13]

$$\varphi(t, \mathbf{x}) = \psi(t, A(t)\mathbf{x}),$$

où  $A(t)$  est la matrice de rotation

$$A(t) = \begin{pmatrix} \cos(\Omega t) & -\sin(\Omega t) \\ \sin(\Omega t) & \cos(\Omega t) \end{pmatrix}.$$

On vérifie alors que  $\varphi$  est solution de (4.6) si et seulement si  $\psi$  est solution de

$$\partial_t \psi = \frac{i}{2} \Delta \psi - iV(t, \tilde{\mathbf{x}})\psi - i\beta |\psi|^2 \psi, \quad (4.8)$$

où  $V$  dépend du temps via la formule

$$V(t, \tilde{\mathbf{x}}) = V_c(A(t)\tilde{\mathbf{x}}),$$

et la donnée initiale du problème de Cauchy est inchangée :

$$\psi(0, \tilde{\mathbf{x}}) = \psi_0(\tilde{\mathbf{x}}) = \varphi_0(\tilde{\mathbf{x}}).$$

On a ainsi ramené l'équation d'évolution d'un condensat en rotation (4.6) à une équation de Schrödinger non-linéaire (4.8) avec un potentiel non-autonome.

### 4.3.2 Description des méthodes

Nous considérons deux classes de méthodes dont nous prouvons l'ordre élevé sur les problèmes de type (4.8) : les méthodes de Runge–Kutta exponentielles et les

méthodes de Lawson. Nous avons fait le choix de conserver dans la partie linéaire de l'équation uniquement l'opérateur de Laplace ( $A = -i\Delta/2$  avec les notations de la section précédente, voir par exemple (4.1)). Après troncature (on ramène  $\mathbb{R}^d$  à un tore  $\mathbb{T}_\delta^d$  de côté  $\delta \gg 1$  suffisamment grand pour contenir la dynamique du condensat) et périodisation de la partie potentielle (on change  $V(t, x)$  en une fonction  $w(t, x)$  de sorte que l'opérateur de multiplication est borné sur les  $H^s$ ), on conserve la multiplication par le potentiel dans le terme non-linéaire (noté  $g$  dans la section précédente). Les premières sont exactement les méthodes (4.2)-(4.3) et les suivantes sont des méthodes de Runge–Kutta appliquées à une équation déduite de (4.8) par un autre changement de variable ; on les appelle les méthodes de Lawson [Law67].

Décrivons maintenant ces méthodes de Lawson. Pour ce faire, écrivons (4.8) sous la forme

$$\begin{aligned} \partial_t \psi(t, \mathbf{x}) - L\psi(t, \mathbf{x}) &= N_w(t, \psi)(\mathbf{x}), \quad (t, \mathbf{x}) \in [0, T] \times \mathbb{T}_\delta^d, \\ \psi(0, \mathbf{x}) &= \psi_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{T}_\delta^d, \end{aligned} \tag{4.9}$$

où  $L = i\Delta/2$  et  $N_w$  est la partie non-linéaire incluant la partie linéaire de l'équation contenant le potentiel périodisé et tronqué  $w$  :

$$N_w(t, \psi)(\mathbf{x}) = -iw(t, \mathbf{x})\psi(t, \mathbf{x}) - i\beta|\psi|^2\psi(t, \mathbf{x}).$$

Posant

$$u(t, \mathbf{x}) = e^{-Lt}\psi(t, \mathbf{x}),$$

le problème (4.9) est équivalent à

$$\begin{aligned} \partial_t u(t, \mathbf{x}) &= e^{-Lt}N_w(t, e^{Lt}u(t, \mathbf{x})), \quad (t, \mathbf{x}) \in [0, T] \times \mathbb{T}_\delta^d \\ u(0, \mathbf{x}) &= \psi(0, \mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{T}_\delta^d. \end{aligned} \tag{4.10}$$

On peut alors appliquer au problème de Cauchy (4.10) une méthode de Runge–Kutta définie par son tableau de Butcher

$$\begin{array}{c|ccc} c_1 & a_{1,1} & \cdots & a_{1,s} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_s & a_{s,1} & \cdots & a_{s,s} \\ \hline & b_1 & \cdots & b_s \end{array}, \tag{4.11}$$

où les  $(a_{i,j})_{1 \leq i, j \leq s}$  et les  $(b_i)_{1 \leq i \leq s}$  sont donnés et les  $(c_i)_{1 \leq i \leq s}$  sont définis par

$$\forall k \in \{1, \dots, s\}, \quad c_k := \sum_{\ell=1}^s a_{k,\ell}. \tag{4.12}$$

On revient ensuite à l'inconnue originale  $\psi$  et l'on obtient la méthode de Lawson à

partir de  $\psi_n$  en résolvant le système

$$\psi_{n,k} = e^{c_k h L} \psi_n + h \sum_{\ell=1}^s a_{k,\ell} e^{(c_k - c_\ell) h L} N_w(t_n + c_\ell h, \psi_{n,\ell}), \quad (4.13)$$

puis en calculant  $\psi_{n+1}$  via la formule

$$\psi_{n+1} = e^{hL} \psi_n + h \sum_{k=1}^s b_k e^{(1-c_k)hL} N_w(t_n + c_k h, \psi_{n,k}). \quad (4.14)$$

### 4.3.3 Résultats concernant ces deux familles de méthodes

Les méthodes de Runge–Kutta exponentielles et les méthodes de Lawson précédentes sont des méthodes exponentielles au sens où elles font intervenir le flot exact de la partie linéaire (et autonome) associé à l’opérateur  $i\Delta/2$ . Dans le cas périodique auquel nous nous sommes ramenés, le spectre et les vecteurs propres associés à cet opérateur sont connus et l’on peut utiliser des techniques spectrales, rendues particulièrement efficaces par l’existence d’algorithmes rapides de transformation de Fourier discrète. Nous décrivons maintenant les résultats que nous avons prouvés lorsque ces méthodes sont appliquées, dans le contexte décrit précédemment, à l’équation (4.6) modélisant les condensats de Bose–Einstein en rotation.

Concernant les méthodes de Runge–Kutta exponentielles, les résultats démontrés dans la section précédente, qui s’appliquent au cas de l’équation (4.8), sont les seuls connus à ce jour quant à l’ordre des méthodes : même si on observe parfois numériquement un ordre bien supérieur (voir section suivante), il manque encore certains résultats pour démontrer la précision observée dans certains cas (par exemple pour les méthodes utilisant les points de collocation de Gauss).

Focalisons-nous maintenant sur les méthodes de Lawson. Commençons par une condition suffisante assurant la symétrie de ces méthodes.

**Théorème 4.3.3.1** *Si la méthode de Runge–Kutta à  $s$  étages définie par son tableau de Butcher (4.11) est d’ordre 1 et symétrique, c’est-à-dire si elle vérifie (4.12), si  $\sum_{i=1}^s b_i = 1$  et si*

$$\forall (k, \ell) \in \{1, \dots, s\}^2, \quad a_{s+1-k, s+1-\ell} + a_{k,\ell} = b_\ell, \quad (4.15)$$

*alors la méthode de Lawson associée (4.13)-(4.14) appliquée à l’équation (4.8) est également symétrique.*

Donnons maintenant une condition suffisante assurant la préservation de la masse par les méthodes de Lawson.

**Théorème 4.3.3.2** *Supposons que la méthode de Runge–Kutta définie par son tableau de Butcher (4.11) est d’ordre au moins 1 et qu’elle vérifie la condition de Cooper de préservation des invariants quadratiques*

$$b_k a_{k,\ell} + b_\ell a_{\ell,k} = b_k b_\ell, \quad \forall 1 \leq k, \ell \leq s. \quad (4.16)$$

Alors, la méthode de Lawson associée (4.13)-(4.14) appliquée à l'équation (4.8) préserve la norme 2 :

$$\|\psi_n\|_{L^2(\mathbb{T}_\delta^d)} = \|\psi_0\|_{L^2(\mathbb{T}_\delta^d)}, \quad \forall n \geq 0.$$

Les méthodes de collocation de Gauss sont des méthodes de Runge–Kutta symétriques et elles préservent les invariants quadratiques (car elles vérifient la condition de Cooper (4.16)). Ainsi, utilisant les théorèmes 4.3.3.1 et 4.3.3.2, les méthodes de Lawson associées sont de bons exemples de méthodes symétriques préservant la norme 2 pour l'équation (4.8). Au delà de ces résultats qualitatifs, nous avons montré les résultats quantitatifs suivants pour les méthodes de Gauss-Lawson :

**Théorème 4.3.3.3** *Soit  $\psi_0 \in H^\sigma(\mathbb{T}_\delta^d)$  et  $T > 0$  tels que la solution du problème de Cauchy (4.9) est définie et lisse sur  $[0, T]$ . Considérons une méthode de Gauss-Lawson (4.14)-(4.13) à  $s$  étages. Il existe des constantes  $C > 0$  et  $h_0 > 0$  telles que la solution numérique  $(\psi_n)_n$  fournie par la méthode de Gauss-Lawson satisfait*

$$\forall h \in (0, h_0), \quad \forall n \in \mathbb{N} \text{ tels que } 0 \leq nh \leq T, \quad \|\psi(t_n) - \psi_n\|_{H^\sigma(\mathbb{T}_\delta^d)} \leq Ch^{2s}.$$

Autrement dit, nous avons montré que le résultat de superconvergence des méthodes de collocation de Gauss se transporte aux méthodes de Gauss-Lawson appliquées à l'équation (4.8).

### 4.3.4 Expériences numériques

#### 4.3.4.1 Un exemple en dimension 1

Si le but de notre étude était d'obtenir des méthodes d'ordre élevé permettant de simuler des condensats de Bose–Einstein en rotation en dimension 2 ou 3, les méthodes obtenues permettent également d'intégrer numériquement efficacement bon nombre d'équations de Schrödinger monodimensionnelles.

On considère l'équation de NLS cubique, sans potentiel

$$\partial_t \psi = i\partial_x^2 \psi + iq|\psi|^2 \psi, \quad (t, x) \in [0, T] \times \mathbb{R}. \quad (4.17)$$

On souhaite tester numériquement les méthodes numériques pour approcher la solution exacte de cette équation qu'est le soliton

$$\psi_{ex}(t, x) = \sqrt{\frac{2a}{q}} \operatorname{sech}(\sqrt{a}(x - ct)) \exp\left(ic \frac{(x - ct)}{2}\right) \exp\left(i\left(a + \frac{c^2}{4}\right)t\right), \quad (4.18)$$

avec  $q = 8$ ,  $a = q^2/16$  et  $c = 0.5$ . On discrétise l'espace sur  $[-15, 15]$  avec  $2^{10}$  points. On compare les méthodes de Runge–Kutta exponentielles aux points de Gauss, les méthodes de Lawson aux points de Gauss, et les méthodes de splitting d'ordres 1 (Lie-Trotter), 2 (Strang), 4 et 6. On adopte pour les tracés la convention décrite en figure 4.1.

On obtient les résultats présentés en Figure 4.2. En particulier, les méthodes de Runge–Kutta exponentielles à  $s$  points aux points de Gauss semblent d'ordre

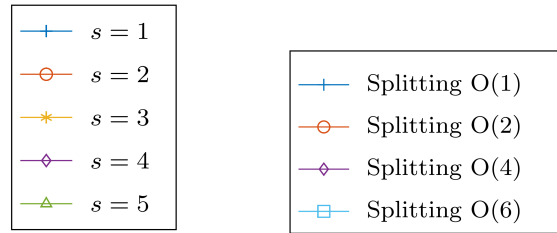


FIGURE 4.1 – Légendes pour les expériences numériques : méthodes de Runge–Kutta exponentielles et de Lawson (gauche) et méthodes de splitting (droite).

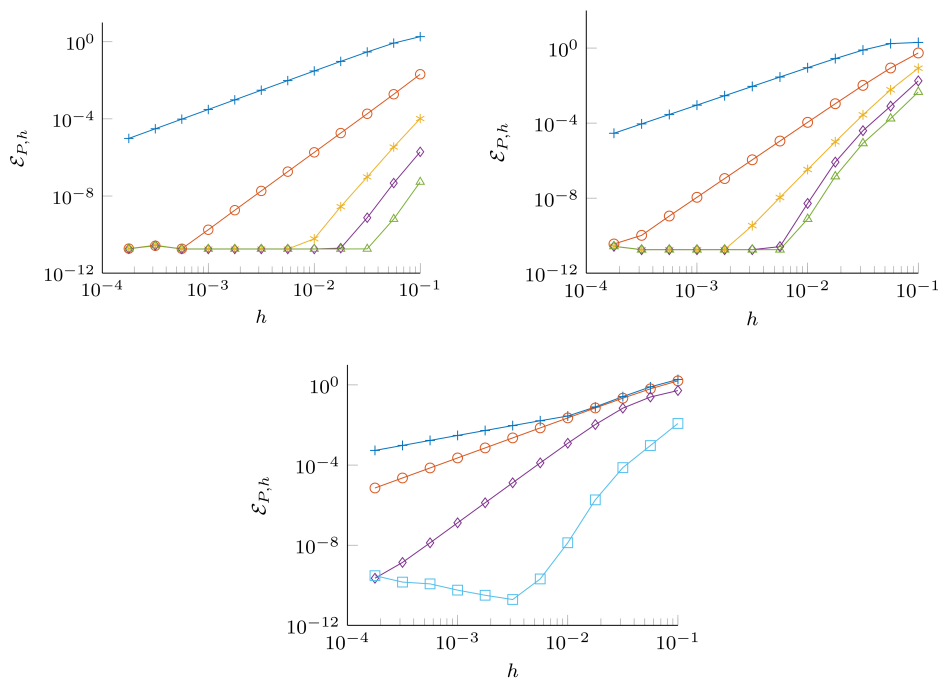


FIGURE 4.2 – Évolution de l’erreur de phase  $\|\psi(t_n) - \psi_n\|_{L^2}$  en fonction du pas de temps pour les méthodes de Runge–Kutta exponentielles (a), de Lawson aux points de Gauss (b) et de splitting (c).

$2s$ , les méthodes de Lawson à  $s$  étages aux points de Gauss sont d’ordre  $2s$ , en accord avec le théorème 4.3.3.3. On remarque que les constantes d’ordre des méthodes de Runge–Kutta exponentielles sont par ailleurs sensiblement plus basses, ce qui les rend compétitives en temps de calcul, malgré leur caractère implicite (voir [BDLV17]). D’un point de vue plus qualitatif, on remarque que les méthodes de Lawson aux points de Gauss préservent exactement la norme 2 des solutions, en accord avec le théorème 4.3.3.2. Les propriétés de préservation de l’énergie en temps long par les méthodes de Runge–Kutta aux points de Gauss sont excellentes. Celles des méthodes de Lawson sont également intéressantes, même si des pas de temps plus petits sont nécessaires pour observer une certaine stabilité [BDLV17].



#### 4.3.4.2 Un exemple de condensat en rotation en dimension 2

On s'intéresse maintenant à la simulation d'un condensat plan ( $d = 2$ ) en rotation décrit par l'équation (4.6) soumis à un potentiel de la forme (4.7). Afin de reproduire une expérience similaire à celle effectuée dans [BMTZ13] (voir Figure 10), on prend comme paramètres  $\beta = 1000$ ,  $\Omega = 0.9$ ,  $\gamma_x = 1.05$  et  $\gamma_y = 0.95$ . Le domaine numérique est  $\mathbb{T}_\delta^d = [-16, 16]^2$  discrétisé avec  $2^9$  modes dans chaque direction et l'on prend un pas de temps  $h = 10^{-3}$  pour atteindre le temps final  $T = 7$ . On initialise le calcul numérique avec une donnée calculée avec la toolbox GPESLab<sup>1</sup>. On applique la méthode de Runge–Kutta exponentielle aux points de Gauss à 3 points, dont on pense et vérifie numériquement qu'elle est d'ordre 6. On montre en figure (4.3) un exemple du comportement numérique ainsi obtenu.

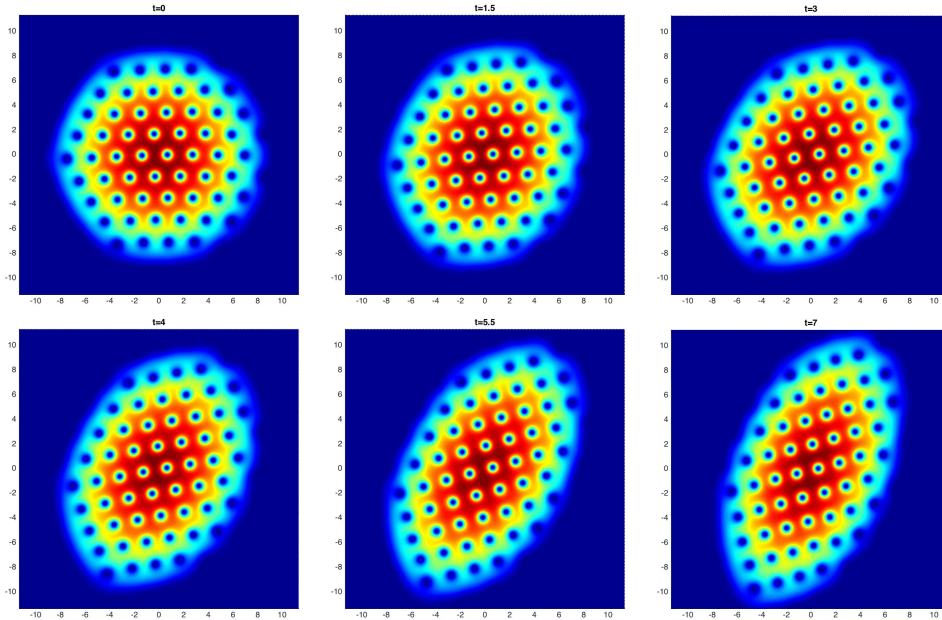


FIGURE 4.3 – Densité  $|\varphi(t, \mathbf{x})|^2$  du condensat approchée par une méthode de Runge–Kutta exponentielle à 3 étages.

Nous avons par ailleurs mené dans [BDLV17] d'autres expériences numériques illustrant la diversité des problèmes traitables en 1d et en 2d par les méthodes que nous avons développées et analysées, et nous avons montré numériquement la robustesse des résultats obtenus pour ces méthodes.

#### 4.3.4.3 Conclusions et perspectives

Nous avons appliqué et analysé deux classes de méthodes exponentielles à des équations de Schrödinger non-linéaires non-autonomes, pouvant résulter de la modélisation de condensats de Bose–Einstein en rotation. Nous avons illustré nos résultats

1. <http://gpelab.math.cnrs.fr>

qualitatifs et quantitatifs sur des exemples numériques en dimension 1 et 2 et montré la robustesse des méthodes considérées.

Aucune des méthodes présentées ci-dessus, cependant, ne préserve exactement l'énergie de l'équation de NLS, lorsque cette équation est autonome. De plus, les méthodes exponentielles ci-dessus sont toutes implicites. Deux axes de recherche principaux semblent très intéressants à ce stade. D'une part, on souhaite développer des méthodes d'intégration en temps préservant à la fois la norme 2 de la solution et l'énergie, généralisant ainsi la méthode de relaxation [Bes04]. D'autre part, on souhaite également développer des méthodes d'ordre élevé, ne préservant éventuellement pas l'énergie de manière exacte, mais étant au plus linéairement implicites.



# Comportement qualitatif en temps long de méthodes numériques

---

## Sommaire

---

<b>5.1</b>	<b>Contexte scientifique et problématiques . . . . .</b>	<b>60</b>
<b>5.2</b>	<b>Analyse en temps long du splitting de Lie pour Schrödinger</b>	<b>61</b>
5.2.1	Introduction . . . . .	61
5.2.2	Le résultat principal . . . . .	62
5.2.3	Illustrations numériques . . . . .	64
<b>5.3</b>	<b>Temps long pour le splitting de Lie : le cas totalement discrétisé . . . . .</b>	<b>65</b>
5.3.1	Introduction . . . . .	65
5.3.2	Résultats d'approximation . . . . .	66
5.3.3	Un résultat de forme normale totalement discrétisé . . . . .	68
5.3.4	Conséquence du résultat précédent sur la préservation en temps long de la régularité Gevrey des solutions totalement discrétisées . . . . .	69
<b>5.4</b>	<b>Analyse en temps long de méthodes avec sous-cyclage . . . . .</b>	<b>70</b>
5.4.1	Introduction . . . . .	70
5.4.2	Erreur asymptotique d'une méthode numérique . . . . .	71
5.4.3	Comparaison de méthodes de splitting avec et sans sous-cyclage sur un système d'EDO linéaires multi-échelles . . . . .	72
5.4.4	Comparaison de méthodes de splitting avec et sans sous-cyclage sur un système d'EDP linéaires multi-échelles . . . . .	76
5.4.5	Conclusions et perspectives . . . . .	80
<b>5.5</b>	<b>Convergence exponentielle de solutions discrétisées de F.–P.</b>	<b>80</b>
5.5.1	Problématique . . . . .	80
5.5.2	Discrétisations de l'équation de Fokker–Planck homogène en domaine non-borné en vitesse . . . . .	81
5.5.3	Discrétisations de l'équation de Fokker–Planck inhomogène en domaine non-borné en vitesse . . . . .	86
5.5.4	Expériences numériques . . . . .	91
5.5.5	Conclusions et perspectives . . . . .	91

---

## 5.1 Contexte scientifique et problématiques

On regroupe dans cette section les travaux d’analyse numérique d’intégration en temps long publiés dans [DF07b] (annoncés dans [DF07a]), [CD09], et [DL16] et ceux disponibles dans [DHL18]. La problématique est la suivante. On considère des problèmes d’évolution en temps (des EDO, des EDP), dont les solutions vérifient certaines propriétés qualitatives en temps long, par exemple : la régularité spatiale des solutions est préservée [DF07b], les solutions convergent vers un état d’équilibre du système [DL16], la convergence des solutions vers l’état d’équilibre est exponentiellement rapide [DHL18]. On s’intéresse à des méthodes d’intégration en temps de ces problèmes et l’on se pose la question de la préservation de ces propriétés qualitatives en temps grand par les méthodes numériques introduites.

En Section 5.2, on considère une méthode de splitting, dite “de Lie–Trotter” pour intégrer l’équation de Schrödinger linéaire avec un petit potentiel en dimension 1 d’espace. On s’intéresse à la préservation de la régularité de la solution numérique, mesurée, par exemple, en termes de contrôle de la croissance en temps des normes de Sobolev associées. On montre que, sous une hypothèse de non-résonance sur le pas de temps, on peut contrôler un nombre asymptotiquement grand de modes sur des temps exponentiellement longs en la taille du potentiel. Pour cela, on étend certaines méthodes de perturbation classiques en dimension finie à ce contexte de dimension infinie. On illustre numériquement la pertinence de la condition de non-résonance.

En Section 5.3, on montre comment les résultats présentés en Section 5.2 peuvent être étendus par au moins deux aspects : il est possible de sortir de la classe de régularité spatiale analytique utilisée en Section 5.2 d’une part (on travaillera notamment avec des échelles de régularité de type Gevrey) et il est également possible de considérer des situations totalement discrétisées (splitting de Lie–Trotter en temps *et* discrétisation spectrale en espace).

En section 5.4, on étudie le comportement en temps long de méthodes de splitting avec sous-cyclage appliquées à des problèmes multi-échelles convergeant vers un état d’équilibre. On montre en particulier comment il est possible que l’ordre asymptotique soit supérieur à l’ordre local des méthodes considérées.

En section 5.5, on introduit des méthodes de discrétisation de l’équation de Fokker–Planck inhomogène posée sur le produit du tore de dimension 1 (en espace) et de la droite (en vitesse). On montre comment il est alors possible d’utiliser des techniques hypocoercives, bien connues dans le cas continu, pour prouver le comportement qualitatif en temps long des méthodes numériques, à savoir la convergence exponentielle des solutions vers l’état d’équilibre du système associé à la donnée initiale.

## 5.2 Comportement en temps long de méthodes de splitting pour l'équation de Schrödinger linéaire

### 5.2.1 Introduction

On considère l'équation de Schrödinger linéaire

$$i\frac{\partial\varphi}{\partial t}(x,t) = -\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}(x,t) + V(x)\varphi(x,t), \quad \text{avec } \varphi(x,0) = \varphi^0(x), \quad (5.1)$$

en dimension 1 d'espace, où la variable spatiale  $x$  est périodique. Le potentiel  $V$  est réel, et est une fonction assez régulière de la variable d'espace. La donnée initiale  $\varphi^0$  est également suffisamment lisse. L'équation (5.1) est hamiltonienne, d'Hamiltonien

$$H(\varphi) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{T}} |\partial_x \varphi(x)|^2 dx + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{T}} V|\varphi(x)|^2 dx.$$

Pour intégrer numériquement cette équation, on considère la méthode de décomposition (méthode “de splitting”) de Lie–Trotter en posant pour un certain pas de temps  $h > 0$  et  $n \in \mathbb{N}$

$$\varphi_{n+1} = \exp(ih\Delta) \exp(-ihV)\varphi_n, \quad (5.2)$$

où  $\exp(ih\Delta)\varphi$  est la solution au temps  $h$  de l'équation

$$i\partial_t\psi(t) = -\Delta\psi(t), \quad \text{with } \psi(0) = \varphi, \quad (5.3)$$

et de la même manière,  $\exp(-ihV)\varphi$  est la solution au temps  $h$  de l'équation

$$i\partial_t\psi(t) = V\psi(t), \quad \text{with } \psi(0) = \varphi. \quad (5.4)$$

Les méthodes de décomposition sont très utilisées dans la pratique car elles présentent de nombreux intérêts. D'une part, après discrétisation spatiale, l'utilisation de la transformée de Fourier rapide permet l'intégration de deux problèmes diagonaux (5.3) et (5.4) avec un coût compétitif. D'autre part, chacune des deux équations (5.3) et (5.4) préserve la norme 2 de la solution, ce qui assure que leur composition aussi. Cela reproduit une propriété important de préservation de l'équation continue (5.1).

Cependant, les méthodes de décomposition, et plus généralement les méthodes exponentielles, présentent parfois un phénomène de résonance, pour certains pas de temps. En dimension finie, lorsque l'on intègre une équation différentielle, ces phénomènes de résonance sont bien compris et peuvent être contrôlés, et le comportement qualitatif en temps long de la solution numérique peut être décrit de manière assez satisfaisante et précise. Par exemple, en utilisant la formule de Baker–Campbell–Hausdorff, on peut montrer que, pour un pas de temps suffisamment petit dépendant de la plus grande valeur propre du système, on peut définir un Hamiltonien modifié pour le propagateur de la méthode de splitting, et l'on montre la

préservation de l'énergie  $H$  par la méthode numérique, au moins sur des temps exponentiellement longs par rapport au pas de temps (voir [HLW06], section X). En dimension infinie, en revanche, pour pouvoir reproduire un argument du même type, il faut pouvoir disposer d'un contrôle *a priori* de la régularité de la solution (par exemple, d'une norme de Sobolev) au moins en temps long. Dans ce travail, nous avons montré comment, par une méthode de forme normale et sous une condition de non-résonance du pas de temps, il est possible de prouver un résultat de préservation de la régularité par la méthode numérique (5.2) appliquée à l'équation (5.1) sur des temps exponentiellement grands. Pour cela, nous développons une approche perturbative, en introduisant un "petit" paramètre  $\lambda$  devant le potentiel et nous établissons les résultats dans l'asymptotique des petites valeurs de  $\lambda$ .

On présente en section 5.2.2 le résultat principal que nous avons obtenu et on l'illustre en section 5.2.3.

### 5.2.2 Le résultat principal

On considère la famille de propagateurs indexée par  $\lambda \in \mathbb{R}$

$$L(\lambda) = \exp(ih\Delta) \exp(-ih\lambda V), \tag{5.5}$$

de sorte que  $\lambda = 0$  correspond au propagateur de l'équation de Schrödinger libre et  $\lambda = 1$  correspond au propagateur de la méthode Lie–Trotter (5.2). Ces opérateurs agissent unitairement sur  $L^2$  du cercle  $\mathbb{T}$  et on les considère comme agissant "côté Fourier" sur les fonctions  $e_k : x \mapsto e^{ikx}$  ( $k \in \mathbb{Z}$ ). On montre que l'opérateur  $L(\lambda)$  est unitairement équivalent à un opérateur quasi-croix, c'est-à-dire à un opérateur mixant uniquement les modes d'indices  $\pm k$  pour  $|k| \leq \lambda^{-\sigma}$  pour un certain  $\sigma > 0$ . Ce résultat vaut sous une condition de non-résonance pour le pas de temps  $h$  : il existe  $\gamma > 0$  et  $\nu > 1$  tels que

$$\forall k \in \mathbb{Z}, \quad k \neq 0, \quad \left| \frac{1 - e^{ikh}}{h} \right| \geq \gamma |k|^{-\nu}. \tag{5.6}$$

Pour  $h_0 > 0$  petit, l'ensemble des  $h \in ]0, h_0[$  ne vérifiant pas (5.6) a une mesure de Lebesgue en  $\mathcal{O}(h_0^{r+1})$  pour un certain  $r > 1$  [HLW06]), de sorte que les petits pas de temps résonnants sont assez rares. L'une des conséquences de ce résultat est la préservation de la régularité de la solution numérique sur des temps exponentiellement longs par rapport à  $\lambda$ .

Un opérateur linéaire continu  $S$  sur  $L^2(\mathbb{T})$  est complètement déterminé par ses coefficients généralisés  $S_{k,\ell} = \langle e_k, S e_\ell \rangle$  ( $k, \ell \in \mathbb{Z}$ ). Pour  $\rho > 0$ , on désigne par  $\mathcal{A}_\rho$  l'ensemble des opérateurs continus  $S$  sur  $L^2(\mathbb{T})$  tels que  $\sup_{(k,\ell) \in \mathbb{Z}^2} |S_{k,\ell}| e^{\rho|k-\ell|} < +\infty$  dont le module des coefficients généralisés "décroit" au moins avec l'exposant  $\rho$  quand on s'éloigne de la diagonale. On suppose que le potentiel réel périodique  $V$  est lisse au sens où il s'étend en une fonction analytique sur une bande contenant l'adhérence de la bande de la forme  $\{z \in \mathbb{C} \mid |\text{Im}(z)| < \rho_V\}$  pour un certain  $\rho_V > 0$ . On en déduit que les puissances de  $V$  sont des opérateurs de multiplication tels que

pour tout  $n \in \mathbb{N}$  et tout  $k \in \mathbb{Z}$ ,  $|(\widehat{V^n})_k| \leq M_V^n e^{\rho_V |k|}$ , où  $(\widehat{V^n})_k$  désigne le  $k$ ième coefficient de Fourier de la fonction  $V^n$  et  $M_V$  est la valeur maximale du module de l'extension de  $V$  à l'adhérence de la bande  $\{z \in \mathbb{C} \mid |\operatorname{Im}(z)| < \rho_V\}$ . Pour  $K > 0$  on note  $I_K$  l'ensemble des indices  $(k, \ell) \in \mathbb{Z}^2$  tels que  $|k| \leq K$  ou  $|\ell| \leq K$ . On note enfin  $\mathcal{X}_\rho^K$  l'ensemble des opérateurs  $S$  de  $\mathcal{A}_\rho$  qui sont quasi-croix d'ordre  $K$ , c'est-à-dire qui vérifient

$$\forall (k, \ell) \in \mathbb{Z}^2, \quad \left( |S_{k,\ell}| > 0 \implies (|k| = |\ell| \text{ ou } (k, \ell) \notin I_K) \right).$$

On note conséquemment pour  $\varphi \in L^2(\mathbb{T})$

$$\forall k \in \mathbb{N}^*, \quad |\varphi|_k = (|\widehat{\varphi}_k|^2 + |\widehat{\varphi}_{-k}|^2)^{\frac{1}{2}}, \quad (5.7)$$

et pour  $k = 0$ ,  $|\varphi|_0 = |\widehat{\varphi}_0|$ .

Le résultat principal obtenu est le théorème de conjugaison suivant pour la famille de propagateurs  $L(\lambda)$  définie en (5.5).

**Théorème 5.2.2.1** *Sous les hypothèses introduites précédemment sur  $V$ ,  $\gamma > 0$  et  $\nu > 1$ , il existe  $\lambda_0 > 0$ ,  $\sigma > 0$  et  $c > 0$  dépendant uniquement de  $V$ ,  $\rho_V$ ,  $\gamma$  and  $\nu$ , tels que pour tout pas de temps  $h \in (0, 1)$  vérifiant (5.6), il existe des familles d'opérateurs unitaires  $Q(\lambda)$  et  $\Sigma(\lambda)$  analytiques en  $\lambda$  pour  $|\lambda| < \lambda_0$  telles que pour tout  $\lambda \in (0, \lambda_0)$ ,*

$$Q(\lambda) \in \mathcal{A}_{\rho_V/4} \quad \text{et} \quad \Sigma(\lambda) \in \mathcal{X}_{\rho_V/4}^K \quad \text{avec} \quad K = \lambda^{-\sigma},$$

où  $\sigma = 1/(32(\nu + 1)) > 0$ ,

$$\|Q(\lambda) - \operatorname{Id}\|_{\rho_V/4} \leq \lambda^{1/2} \quad \text{et} \quad \|\Sigma(\lambda) - e^{ih\Delta}\|_{\rho_V/4} \leq h\lambda^{1/2},$$

et telles que l'on a l'égalité :

$$Q(\lambda)L(\lambda)Q(\lambda)^* = \Sigma(\lambda) + R(\lambda),$$

où le reste  $R(\lambda)$  vérifie pour  $\lambda \in (0, \lambda_0)$ ,

$$\|R(\lambda)\|_{\rho_V/5} \leq \exp(-c\lambda^{-\sigma}).$$

Ce théorème permet de conclure quant à la préservation de la régularité de la solution numérique en temps exponentiel via, par exemple, les trois résultats du corollaire suivant.

**Corollaire 5.2.2.1** *Avec les notations et les hypothèses du théorème 5.2.2.1, en notant pour tout  $n \in \mathbb{N}$ ,  $\varphi^n = L(\lambda)^n \varphi^0$ , on a*

(i) *il existe  $C > 0$  dépendant uniquement de  $V$ ,  $\rho_V$ ,  $\gamma$  et  $\nu$  tel que pour tout  $h \in (0, 1)$*



## 64 Chapitre 5. Comportement en temps long de méthodes numériques

vérifiant (5.6), tout  $\lambda \in (0, \lambda_0)$ , tout  $n \leq \exp(c\lambda^{-\sigma}/2)$ , et tout  $\varphi^0 \in L^2(\mathbb{T})$ ,

$$\forall k \in \mathbb{N}, \quad k \leq \lambda^{-\sigma}, \quad \left| |\varphi^n|_k - |\varphi^0|_k \right| \leq C\lambda^{1/2} \|\varphi^0\|_{L^2(\mathbb{T})}.$$

(ii) Soient  $s$  et  $s'$  tels que  $s > 1/2$  et  $s - s' \geq 1/2$ . Il existe  $c_s > 0$  dépendant uniquement de  $V$ ,  $\rho_V$ ,  $\gamma$ ,  $\nu$  et  $s$  tel que pour tout  $h \in (0, 1)$  satisfaisant (5.6), tout  $\lambda \in (0, \lambda_0)$ , tout  $n \leq \exp(c\lambda^{-\sigma}/2)$  et tout  $\varphi^0 \in L^2(\mathbb{T})$  tel que  $\sup_{k \geq 0} |\varphi^0|_k (1+k)^s < +\infty$ , on a

$$\sup_{0 \leq k \leq \lambda^{-\sigma}} \left( (1+k)^{s'} \left| |\varphi^n|_k - |\varphi^0|_k \right| \right) \leq c_s \lambda^{1/2} \sup_{k \geq 0} (|\widehat{\varphi^0}_k| + |\widehat{\varphi^0}_{-k}|) (1+k)^s.$$

(iii) Pour tout  $\rho \in (0, \rho_V/5)$ , il existe des constantes strictement positives  $\mu_0$  et  $C$  dépendant uniquement de  $V$ ,  $\rho_V$ ,  $\gamma$ ,  $\nu$  et  $\rho$  telles que pour tout  $h \in (0, 1)$  satisfaisant (5.6), tout  $\lambda \in (0, \lambda_0)$ , tout  $n \leq \exp(c\lambda^{-\sigma}/2)$ , tout  $\mu \in (0, \mu_0)$  et tout  $\varphi^0 \in L^2(\mathbb{T})$  tel que  $\sup_{k \in \mathbb{N}} |\varphi^0|_k e^{\rho k} < +\infty$ ,

$$\sup_{0 \leq k \leq \lambda^{-\sigma}} \left( e^{\mu k} \left| |\varphi^n|_k - |\varphi^0|_k \right| \right) \leq C\lambda^{1/2} \sup_{k \in \mathbb{N}} |\varphi^0|_k e^{\rho k}.$$

On a ainsi un contrôle en temps exponentiellement long par rapport à  $\lambda$  de la "croissance" de semi-normes de type Sobolev ou de type analytique de la solution numérique, lesquelles semi-normes approchent de mieux en mieux les normes correspondantes quand  $\lambda$  est petit.

La preuve du théorème 5.2.2.1 est assez technique et procède en plusieurs étapes. On commence par développer formellement en séries entières les opérateurs inconnus  $Q$  et  $\Sigma$  vérifiant pour tout  $\lambda$ ,

$$L(\lambda) = Q^*(\lambda)\Sigma(\lambda)Q(\lambda),$$

avec  $Q(0) = \text{Id}$ ,  $\Sigma(0) = L(0)$ . On dérive cette relation par rapport à  $\lambda$  et l'on trouve que les coefficients  $S_n$  de  $\Sigma$  et  $X_n$  de  $Q$  sont solution d'une équation homologique faisant intervenir les coefficients précédents. Sous la condition de non-résonance (5.6), on montre que l'équation homologique admet une solution dans les bons espaces (suffisamment "décroissants" hors-diagonale, avec la forme de quasi-croix). Ensuite, après un nombre fini d'étapes, on procède à une estimation des restes et l'on termine la preuve en optimisant convenablement les constantes.

### 5.2.3 Illustrations numériques

On considère le cas où le potentiel  $V$  et la donnée initiale  $\varphi_0$  sont

$$V(x) = \frac{3}{5 - 4 \cos(x)} \quad \text{et} \quad \varphi^0(x) = \frac{2}{2 - \cos(x)}.$$

### 5.3. Temps long pour le splitting de Lie : le cas totalement discrétisé 65

On effectue des simulations numériques pour deux pas de temps différents :

$$h = 0.2 \quad \text{et} \quad h = \frac{2\pi}{6^2 - 2^2} = 0.196 \dots$$

Le premier pas de temps vérifie la condition de non-résonance, alors que le second est résonnant. On utilise la FFT avec  $2^7$  modes pour calculer la solution approchée de l'équation (5.1) par la méthode définie par  $L(\lambda)$  lorsque  $\lambda = 0.1$ . On trace en Figure 5.1 les 5 premières énergies  $|\varphi^n|_k$  définies en (5.7) pour  $k = 0, \dots, 4$  en échelle logarithmique en fonction du temps. On constate que les propriétés de préservation sont perdues lorsque l'on viole la condition de non-résonance (5.6). On trace en Figure 5.2 la totalité des énergies discrètes en fonction du temps, toujours en échelle logarithmique, avec  $2^9$  modes, pour  $\lambda = 0.01$ . On constate la croissance de certaines énergies correspondant à des fréquences élevées lorsque la condition de non-résonance (5.6) n'est pas vérifiée (la norme  $L^2$  est, elle, préservée par la méthode).

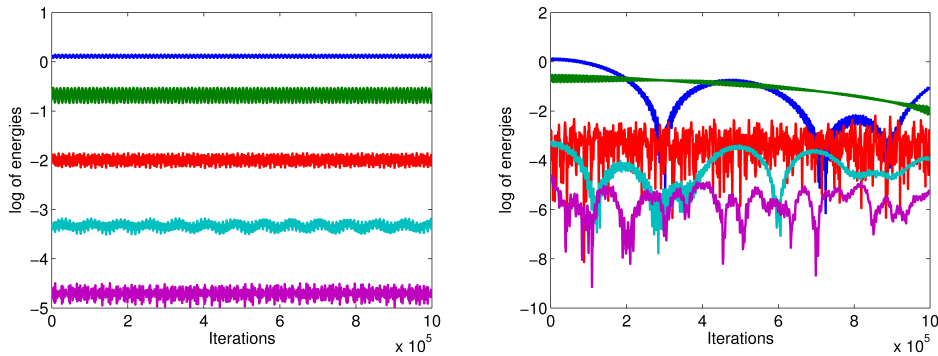


FIGURE 5.1 – Énergies (5.7) des 5 premiers modes en échelle logarithmique en fonction du temps pour  $\lambda = 0.1$ . Pas de temps non-résonnant (gauche) et résonnant (droite).

## 5.3 Comportement en temps long de méthodes de splitting pour l'équation de Schrödinger linéaire dans le cas totalement discrétisé

### 5.3.1 Introduction

On présente dans cette Section comment il est possible d'étendre les résultats de la section précédente aux échelles de régularité spatiale Gevrey, d'une part, et au contexte totalement discrétisé d'autre part. Ces résultats ont été publiés dans [CD09].

On commence par introduire en Section 5.3.2 quelques résultats d'approximation pour introduire la discrétisation des fonctions périodiques sur le tore  $\mathbb{T}^d =$

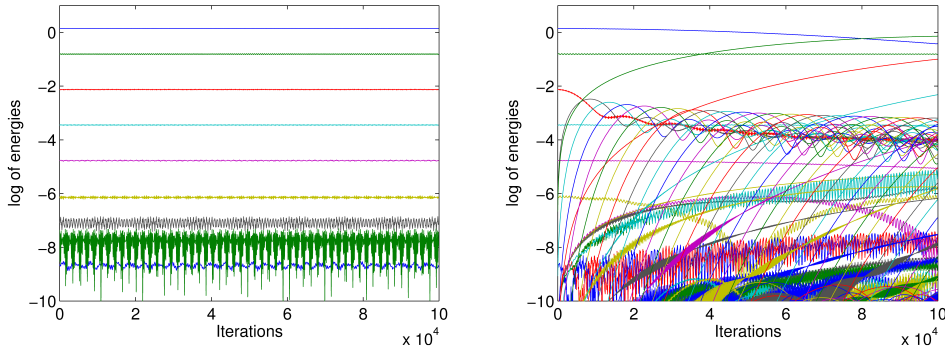


FIGURE 5.2 – Toutes les énergies numériques (5.7), en échelle logarithmique, en fonction du temps, pour  $\lambda = 0.01$ . Pas de temps non-résonnant (gauche) et résonnant (droite).

$\mathbb{R}^d/[0, 2\pi]^d$  de dimension  $d \geq 1$ . On introduit ensuite le propagateur de Lie–Trotter totalement discrétisé en section 5.3.3 et l’on montre qu’il est possible de le mettre sous une forme normale adaptée, dans l’esprit de ce qui a été présenté en Section 5.2. Enfin, on montre en Section 5.3.4 comment il est possible de déduire du théorème de forme normale précédent des propriétés de préservation en temps long de la régularité Gevrey par la méthode de Lie–Trotter de manière indépendante du pas de discrétisation spatiale.

### 5.3.2 Résultats d’approximation

Pour tout  $M \in \mathbb{N}$ , on note

$$\mathcal{B}_M := \{k \in \mathbb{Z}^d \mid \forall i \in \{0, \dots, d\}, -M \leq k_i \leq M\}.$$

Pour chaque  $k \in \mathcal{B}_M$ , on note  $x_k = \frac{2\pi}{2M+1}k \in [-\pi; \pi]^d$ . Pour toute fonction  $u \in L^1(\mathbb{T}^d)$ , on note ses coefficients de Fourier

$$\forall k \in \mathbb{Z}^d, \quad \hat{u}_k = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{T}^d} u(x) e^{-ikx} dx,$$

où  $kx$  dénote le produit scalaire usuel de  $\mathbb{R}^d$ . Pour tout  $z = (z_1, \dots, z_d) \in \mathbb{C}^d$ , on note

$$|z| = \sqrt{|z_1|^2 + \dots + |z_d|^2} \quad \text{et} \quad |z|_\infty = \max\{|z_1|, \dots, |z_d|\}.$$

Dans toute cette section, par souci de lisibilité, on utilise des caractères gras pour les objets discrétisés, c’est-à-dire les matrices de  $\mathbb{C}^{(2M+1)^d}$  (en majuscules) et les vecteurs de  $\mathbb{C}^{(2M+1)^d}$  (en minuscules), dont on estimera les normes de manière indépendante de  $M$ . On note également  $\mathbf{W} = [\mathbf{W}_{k,\ell}]_{(k,\ell) \in \mathcal{B}_M \times \mathcal{B}_M}$  la matrice associée

### 5.3. Temps long pour le splitting de Lie : le cas totalement discrétisé 67

à la transformation de Fourier discrète

$$\mathbf{W}_{k,\ell} = \frac{1}{(2M+1)^{d/2}} e^{-ikx_\ell}, \quad \text{lorsque } k, \ell \in \mathcal{B}_M.$$

L'opérateur  $\mathbf{W}$  est unitaire :

$$(\mathbf{W}^*)\mathbf{W} = \text{Id}_{(2M+1)^d}. \quad (5.8)$$

Ainsi, lorsque  $V$  est une fonction de  $\mathbb{T}^d$  dans  $\mathbb{C}$ , on peut définir l'opérateur de multiplication par  $V$

$$\forall k, \ell \in \mathcal{B}_M, \quad \mathbf{V}_{k,\ell} = \begin{cases} 0 & \text{si } k \neq \ell \\ V(x_k) & \text{si } k = \ell \end{cases},$$

et son action côté Fourier s'écrit alors

$$(\mathbf{W}\mathbf{V}\mathbf{W}^*)_{k,\ell} = \frac{1}{(2M+1)^d} \sum_{p \in \mathcal{B}_M} V(x_p) e^{-i(k-l)x_p}, \quad \text{lorsque } k, \ell \in \mathcal{B}_M.$$

On peut alors définir les classes de régularité Gevrey et montrer ensuite le lemme d'approximation 5.3.2.1 qui quantifie la qualité de l'approximation des coefficients de Fourier de  $V$  par  $\mathbf{W}\mathbf{V}\mathbf{W}^*$  lorsque  $V$  est une fonction Gevrey.

**Définition 5.3.2.1** Soit  $V \in L^1(\mathbb{T}^d, \mathbb{C})$ ,  $\rho_V > 0$  et  $\alpha \geq 1$ . On dit que  $V$  est  $(\rho_V, \alpha)$ -Gevrey s'il existe  $\delta > 0$  tel que pour tout  $k \in \mathbb{Z}^d$ ,  $|\hat{V}_k| \leq M_V e^{-(\rho_V + \delta)|k|^{1/\alpha}}$ . Lorsque  $V$  est  $(\rho_V, \alpha)$ -Gevrey, on définit sa norme en posant

$$\|V\|_{\rho_V, \alpha} = \sup_{p \in \mathbb{Z}^d} |\hat{V}_p| e^{\rho_V |p|^{1/\alpha}}.$$

**Lemme 5.3.2.1** Soit  $V$  une fonction  $(\rho_V, \alpha)$ -Gevrey. Il existe une constante  $M_V^{(1)} \geq 0$  telle que

$$\forall M \in \mathbb{N}, \forall k, \ell \in \mathcal{B}_M, \quad \left| \hat{V}_{k-\ell} - (\mathbf{W}\mathbf{V}\mathbf{W}^*)_{k,\ell} \right| \leq \frac{2\pi}{2M+1} M_V^{(1)} e^{-\rho_V |k-\ell|^{1/\alpha}}.$$

On déduit de ces résultats que l'opérateur de multiplication par  $V$  et ses puissances sont  $(\rho_V, \alpha)$ -Gevrey avec des normes d'opérateurs majorées indépendamment de  $M$  au sens suivant :

**Définition 5.3.2.2** Soit  $M \in \mathbb{N}$ ,  $\rho > 0$ ,  $\alpha \geq 1$ . Un opérateur  $\mathbf{A} = (\mathbf{A}_{k,\ell})_{k,\ell \in \mathcal{B}_M} \in \mathbb{C}^{(2M+1)^{2d}}$ , est dit  $(\rho, \alpha)$ -Gevrey lorsque

$$\|\mathbf{A}\|_{\rho, \alpha} := \sup_{k, \ell \in \mathcal{B}_M} |\mathbf{A}_{k,\ell}| e^{\rho |k-\ell|^{1/\alpha}} < +\infty.$$

**Corollaire 5.3.2.1** *Soit  $V$  une fonction  $(\rho_V, \alpha)$ -Gevrey. Il existe une constante  $M_V^{(2)} \geq 0$  telle que*

$$\forall M \in \mathbb{N}, \quad \|\mathbf{WVW}^*\|_{\rho_V, \alpha} \leq M_V^{(2)}.$$

**Corollaire 5.3.2.2** *Soit  $V$  une fonction  $(\rho_V, \alpha)$ -Gevrey. Il existe une constante  $M_V^{(3)} \geq 0$  telle que*

$$\forall M \in \mathbb{N}, \forall n \in \mathbb{N}^*, \quad \|(\mathbf{WVW}^*)^n\|_{\rho_V, \alpha} \leq (M_V^{(3)})^n. \quad (5.9)$$

### 5.3.3 Un résultat de forme normale totalement discrétisé

Adaptant la méthode de forme normale décrite dans le cas continu en espace en Section (5.2.2), on démontre le théorème de forme normale 5.3.3.1 pour la méthode de Lie–Trotter dans le cas totalement discrétisé qui permettra de démontrer les estimations de préservation en temps long de la régularité Gevrey de la solution totalement discrétisée en Section 5.3.4.

Pour  $M \in \mathbb{N}$ , on note  $\Delta$  l’approximation spectrale du Laplacien sur  $\mathbb{T}^d$  dont les coefficients sont donnés par

$$\forall k, \ell \in \mathcal{B}_M, \quad \Delta_{k, \ell} = \begin{cases} 0 & \text{if } k \neq \ell \\ -|k|^2 & \text{if } k = \ell \end{cases}.$$

Pour tout  $\lambda \in \mathbb{R}$  et tout  $h > 0$ , on définit le propagateur de Lie–Trotter totalement discrétisé

$$\mathbf{L}(\lambda) = e^{ih\Delta} \mathbf{W} e^{-ih\lambda \mathbf{V}} \mathbf{W}^* = e^{ih\Delta} e^{-ih\lambda \mathbf{WVW}^*}, \quad (5.10)$$

pour l’intégration numérique de l’équation (5.1) avec un paramètre  $\lambda$  devant le potentiel. Dans toute la suite, on fait une hypothèse de régularité sur le potentiel  $V$  intervenant dans l’équation (5.1).

**Hypothèse 5.3.3.1** *Le fonction  $V$  est  $(\rho_V, \alpha)$ -Gevrey pour un certain  $\rho_V > 0$  et un certain  $\alpha \geq 1$ .*

On fera, comme dans la Section 5.2, l’hypothèse qu’il existe  $\gamma > 0$  et  $\nu > 1$  tels que le pas de temps  $h \in ]0, 1[$  vérifie (5.6). Sous ces hypothèses, on montre le

**Théorème 5.3.3.1** *Il existe des constantes strictement positives  $\lambda_0$ ,  $\sigma$  et  $c$  dépendant uniquement de  $V$ ,  $M_V^{(3)}$ ,  $\rho_V$ ,  $\alpha$ ,  $\gamma$ ,  $\nu$  et  $d$  telles que pour tout  $h \in (0, 1)$  vérifiant (5.6) et tout  $M \in \mathbb{N}$ , il existe des familles d’opérateurs  $L^2$ -unitaires  $\mathbf{Q}(\lambda)$  et  $\Sigma(\lambda)$  analytiques en  $\lambda$  dans le disque ouvert  $|\lambda| < \lambda_0$  telles que pour tout  $\lambda \in ]0, \lambda_0[$ , on a*

$$\mathbf{Q}(\lambda) \mathbf{L}(\lambda) \mathbf{Q}(\lambda)^* = \Sigma(\lambda) + \mathbf{R}(\lambda), \quad (5.11)$$

où pour tout  $M \in \mathbb{N}$ , le reste  $\mathbf{R}(\lambda)$  vérifie pour tout  $\lambda \in ]0, \lambda_0[$ ,

$$\|\mathbf{R}(\lambda)\|_{\rho_V/5, \alpha} \leq \exp(-c\lambda^{-\sigma}). \quad (5.12)$$

### 5.3. Temps long pour le splitting de Lie : le cas totalement discrétisé 69

De plus, on a pour  $\lambda \in ]0, \lambda_0[$

$$\|\mathbf{Q}(\lambda) - \text{Id}_{(2M+1)^d}\|_{\rho_V/4, \alpha} \leq \lambda^{1/2} \quad \text{and} \quad \|\Sigma(\lambda) - e^{ih\Delta}\|_{\rho_V/4, \alpha} \leq h\lambda^{1/2}, \quad (5.13)$$

et l'opérateur  $\Sigma(\lambda)$  est quasi-croix avec un paramètre qui dépend de  $\lambda$ .

#### 5.3.4 Conséquence du résultat précédent sur la préservation en temps long de la régularité Gevrey des solutions totalement discrétisées

On décrit maintenant les conséquences du théorème 5.3.3.1 sur la propagation en temps long de la régularité Gevrey des solutions de (5.1) par la méthode de Lie–Trotter totalement discrétisée (5.10). Le résultat principal est le théorème 5.3.4.1.

Pour toute fonction  $u \in L^1(\mathbb{T}^d)$  et tout  $M \in \mathbb{N}$ , on considère comme en Section 5.3.2 l'approximation des ses coefficients de Fourier fournie par le vecteur  $\mathbf{u} \in \mathbb{C}^{(2M+1)^d}$  suivant :

$$\forall n \in \mathcal{B}_M, \quad \mathbf{u}_n = \frac{1}{(2M+1)^d} \sum_{p \in \mathcal{B}_M} u(x_p) e^{-inx_p}. \quad (5.14)$$

Spécifions comment on mesure la régularité Gevrey dans le contexte totalement discrétisé puis dans le contexte continu.

**Définition 5.3.4.1** Pour tout  $M \in \mathbb{N}$ , tout  $\rho > 0$  et tout  $\alpha \geq 1$ , on définit sur l'espace  $\mathbb{C}^{(2M+1)^d}$  la norme du vecteur  $\mathbf{u} \in \mathbb{C}^{(2M+1)^d}$  en posant

$$\|\mathbf{u}\|_{\rho, \alpha} = \sup \{ |\mathbf{u}_n| e^{\rho|n|^{1/\alpha}} \mid n \in \mathcal{B}_M \}.$$

**Définition 5.3.4.2** Pour tout  $\rho > 0$  et tout  $\alpha \geq 1$ , on définit sur l'espace des fonctions  $(\rho, \alpha)$ -Gevrey sur  $\mathbb{T}^d$  la norme

$$\|u\|_{\rho, \alpha} = \sup \{ |\hat{u}_n| e^{\rho|n|^{1/\alpha}} \mid n \in \mathbb{Z}^d \}.$$

On a alors le résultat de bonne approximation suivant

**Lemme 5.3.4.1** Fixons  $\rho > 0$  and  $\alpha \geq 1$ . Pour tout  $\mu \in (0, \rho)$ , il existe une constante strictement positive  $C$  dépendant uniquement de  $\rho$ ,  $\mu$ ,  $\alpha$  et  $d$  telle que pour tout fonction  $u$  dans l'espace des fonctions  $(\rho, \alpha)$ -Gevrey à valeurs complexes, on a

$$\forall M \in \mathbb{N}, \quad \|\mathbf{u}\|_{\mu, \alpha} \leq C \|u\|_{\rho, \alpha}.$$

D'un point de vue discret, on sépare dans l'analyse l'énergie de  $\mathbf{u}$  en fonction du niveau d'énergie  $|k|$  par la

**Définition 5.3.4.3** Pour tous  $M \in \mathbb{N}$ ,  $k = (k_1, \dots, k_d) \in \mathbb{Z}^d$  et  $\mathbf{u} \in \mathbb{C}^{(2M+1)^d}$ , on définit

$$|\mathbf{u}|_{|k|} = \sqrt{\sum_{p \in \mathbb{Z}^d \text{ s.t. } |p|=|k|} |\mathbf{u}_p|^2},$$

et

$$\|\mathbf{u}\| = \sqrt{\sum_{p \in \mathcal{B}_M} |\mathbf{u}_p|^2}.$$

Avec ces notations, on montre, à l'aide du théorème de forme normale totalement discrétisé 5.3.3.1 le résultat suivant de préservation de la régularité Gevrey en temps long par la méthode de Lie–Trotter appliquée à l'équation (5.1) pour des pas de temps non-résonnants :

**Théorème 5.3.4.1** *Il existe une constante strictement positive  $\mu_0$  dépendant uniquement de  $V$ ,  $M_V^{(3)}$ ,  $\rho_V$ ,  $\alpha$ ,  $\gamma$ ,  $\nu$ ,  $d$  et  $\lambda_0$  telle que pour tout  $\rho \in (0, \rho_V)$ , et tout  $\mu \in (0, \mu_0)$ , il existe une constante strictement positive  $C$  telle que pour tout  $\lambda \in (0, \lambda_0)$ , tout  $h \in (0, 1)$  vérifiant (5.6), et tout  $n \leq e^{c\lambda^{-\sigma}/2}$ , on a*

$$\forall M \in \mathbb{N}, \quad \sup_{k \in \mathcal{B}_M \text{ s.t. } k \leq \lambda^{-\sigma}} \left| |\mathbf{u}^n|_{|k|} - |\mathbf{u}^0|_{|k|} \right| e^{\mu|k|^{1/\alpha}} \leq C\lambda^{1/2} \|\mathbf{u}_0\|_{\rho, \alpha}. \quad (5.15)$$

Ce résultat exprime la préservation de la régularité Gevrey de la solution numérique en temps exponentiellement long par rapport à  $\lambda > 0$  et vaut pour tout paramètre de discrétisation spatiale  $M \in \mathbb{N}$ . On peut d'ailleurs, via le lemme 5.3.4.1, remplacer  $\|\mathbf{u}_0\|_{\rho, \alpha}$  par  $\|u_0\|_{\rho, \alpha}$  dans le membre de droite de l'inégalité (5.15).

## 5.4 Comportement en temps long de méthodes de splitting avec sous-cyclage pour des problèmes multi-échelles

### 5.4.1 Introduction

On souhaite intégrer un système d'évolution, constitué d'équations différentielles ou d'équations aux dérivées partielles présentant plusieurs échelles. On suppose que l'on dispose d'une décomposition de l'espace des phases en "variables rapides" et en "variables lentes". Bien souvent, on ne dispose pas de schéma semi-implicite inconditionnellement stable. Une possibilité est alors d'intégrer séparément les équations lentes et les équations rapides, en intégrant les équations rapides sur des pas de temps bien plus petits. On compose ensuite les flots numériques obtenus pour former ce qu'on appelle classiquement une méthode de splitting avec sous-cyclage. L'analyse de ce type de méthodes sur des horizons de temps finis est assez bien comprise [McL02]. En revanche, la question du comportement en temps long de ce type de méthodes est encore largement ouverte. On s'intéresse dans cette section au comportement en temps long de ce type de méthodes dans le cas où les solutions exactes convergent vers un équilibre du système. On introduit la notion d'ordre asymptotique d'une méthode numérique (Section 5.4.2) dans ce contexte, et l'on analyse, sur des exemples de systèmes d'EDO (Section 5.4.3) et EDP (Section 5.4.4) linéaires, le comportement de l'ordre asymptotique de certaines méthodes de splitting, avec ou sans sous-cyclage. On illustre numériquement les résultats théoriques obtenus.

### 5.4.2 Erreur asymptotique d'une méthode numérique

Formellement, les problèmes d'évolution que l'on regarde se placent dans un espace de Banach  $X$  dans lequel le problème de Cauchy

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}W(t) = f(W(t)), & t > 0 \\ W(0) = W^0, \end{cases} \quad (5.16)$$

(où  $f : D(f) \subset X \rightarrow X$  n'est pas nécessairement linéaire et  $W^0 \in D(f)$ ) est globalement bien posé en temps positif. On suppose de plus que ce problème présente deux échelles de temps caractéristiques car on peut l'écrire sous la forme

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}W(t) = \frac{T_{\text{obs}}}{T_s}f_s(W(t)) + \frac{T_{\text{obs}}}{T_f}f_f(W(t)), & t > 0 \\ W(0) = W^0, \end{cases} \quad (5.17)$$

où  $T_{\text{obs}} > 0$  est un temps d'observation,  $T_s > 0$  est le temps caractéristique des phénomènes lents du système et  $T_f > 0$  est le temps caractéristique des phénomènes rapides. On désigne par  $N$  le quotient  $T_s/T_f$ , de sorte que  $N \gg 1$ . On suppose que le système (5.16) admet un état d'équilibre asymptotique  $W_{\text{ex}}^\infty \in X$ .

Pour  $\delta t > 0$  fixé suffisamment petit, on dispose d'une méthode numérique à un pas  $G(\delta t) : X \rightarrow X$  et l'on définit la solution numérique de donnée initiale  $W^0$  en posant pour tout  $n \geq 0$ ,  $W^{n+1} = G(\delta t)(W^n)$ . Supposant que la méthode numérique a un état d'équilibre asymptotique, on définit

$$W_{\text{num}}^\infty = \lim_{n \rightarrow \infty} W^n, \quad (5.18)$$

qui, bien sûr, dépend de  $\delta t$ . On peut alors définir l'erreur asymptotique du schéma numérique :

**Définition 5.4.2.1** *On appelle erreur asymptotique de la méthode  $G(\delta t)$*

$$\varepsilon^{\text{as}} = W_{\text{num}}^\infty - W_{\text{ex}}^\infty.$$

*On dit que la méthode  $G$  est d'ordre asymptotique au moins égal à  $p \in \mathbb{N}$  lorsque, quand  $\delta t$  tend vers 0,*

$$\|\varepsilon^{\text{as}}\|_X = \mathcal{O}(\delta t^p).$$

*On appelle ordre asymptotique de la méthode le plus grand  $p$  comme ci-dessus.*

Après changement de variable temporel, on peut écrire le système (5.17) sous la forme

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}W(t) = f_s(W(t)) + Nf_f(W(t)), & t > 0 \\ W(0) = W^0. \end{cases} \quad (5.19)$$

On notera dans la suite  $\Phi_f(\delta t)$  (respectivement  $\Phi_s(\delta t)$ ) une approximation du flot



exact  $\varphi_f(\delta t)$  (resp.  $\varphi_s(\delta t)$ ) du système

$$\frac{d}{dt}W(t) = Nf_f(W(t)) \quad \left( \text{resp. } \frac{d}{dt}W(t) = f_s(W(t)) \right).$$

Une méthode de splitting classique correspond alors à une composition de la forme

$$\Phi_c(\delta t) = \Pi_{i=1}^k (\Phi_s(b_i \delta t) \circ \Phi_f(a_i \delta t)), \quad (5.20)$$

où  $a_1, \dots, a_k, b_1, \dots, b_k \in \mathbb{R}$ . Une méthode de splitting avec sous-cyclage correspond à une composition de la forme

$$\Phi_{sc}(\delta t) = \Pi_{i=1}^k \left( \Phi_s(b_i \delta t) \circ (\Phi_f(a_i \delta t / N))^N \right). \quad (5.21)$$

Concernant l'ordre en temps fini pour ce type de méthodes appliquées à des systèmes d'EDO, on a le

**Théorème 5.4.2.1** *Supposons que  $X = \mathbb{R}^d$  pour un certain  $d \in \mathbb{N}^*$ . Considérons un système de la forme (5.19) avec  $D(f) = X$ . Supposons, avec les notations précédentes, que  $\Phi_f(\delta t)$  et  $\Phi_s(\delta t)$  sont d'ordre respectif  $p_f$  et  $p_s$ . Supposons de plus que la méthode de splitting  $\Phi_c(\delta t)$  définie par  $a_1, \dots, a_n, b_1, \dots, b_n \in \mathbb{R}$  via la relation (5.20) est d'ordre  $p_{ex}$  lorsqu'on y implante les flots exacts  $\varphi_f(\delta t)$  et  $\varphi_s(\delta t)$ . Alors, la méthode  $\Phi_c(\delta t)$  est d'ordre au moins  $\min(p_f, p_s, p_{ex})$ , et il en est de même de la méthode avec sous-cyclage  $\Phi_{sc}(\delta t)$  définie en (5.21).*

On propose maintenant une étude détaillée de l'ordre asymptotique de méthodes de ces deux types (méthodes de splitting avec et sans sous-cyclage) sur deux exemples : un exemple de système d'EDO linéaires multi-échelles en Section 5.4.3 et un exemple de système d'EDP linéaires de réaction-diffusion en Section 5.4.4.

### 5.4.3 Comparaison de méthodes de splitting avec et sans sous-cyclage sur un système d'EDO linéaires multi-échelles

Le premier exemple que nous considérons est le système d'EDO linéaires

$$\begin{cases} u' = -Nc(u - v) \\ v' = c(u - v), \end{cases} \quad (5.22)$$

où  $c > 0$  est une vitesse et  $N \in \mathbb{N}$  est grand. Afin d'écrire les solutions exactes de ce système, on introduit la matrice

$$A = \begin{pmatrix} -N & N \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Elle est diagonalisable et ses valeurs propres et projecteurs spectraux correspondants sont donnés par

$$(-(N+1), P_{\text{ex}} = -A/(N+1)) \text{ et } (0, Q_{\text{ex}} = (1, 1)^{\text{t}}(1, N)/(N+1)).$$

Ainsi, les solutions exactes du système (5.22) sont données, pour  $t \in \mathbb{R}$ , par

$$W(t) := (u(t), v(t))^{\text{t}} = \left( e^{-(N+1)ct} P_{\text{ex}} + Q_{\text{ex}} \right) (u^0, v^0)^{\text{t}},$$

pour les données initiales  $u^0 \in \mathbb{R}$  et  $v^0 \in \mathbb{R}$  au temps  $t = 0$ . En particulier, toutes les solutions convergent vers l'état d'équilibre  $Q_{\text{ex}}(u^0, v^0)^{\text{t}}$  lorsque  $t$  tend vers  $+\infty$ . On note pour la suite pour  $t \geq 0$

$$F(t) = e^{ctA} = e^{-(N+1)ct} P_{\text{ex}} + Q_{\text{ex}},$$

la matrice associée au flot exact du système (5.22). Le système (5.22) se met sous la forme (5.19) en posant

$$W = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad \mathbf{f}_s \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ c(u-v) \end{pmatrix}, \quad \text{et} \quad \mathbf{f}_f \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -c(u-v) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Les méthodes de splitting correspondantes pour chacun des systèmes lent et rapide ont ainsi des matrices de la forme

$$M_f(\lambda_f) := \begin{pmatrix} \lambda_f & 1 - \lambda_f \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad M_s(\lambda_s) := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 - \lambda_s & \lambda_s \end{pmatrix}, \quad (5.23)$$

où  $\lambda_f$  et  $\lambda_s$  sont des fonctions de  $\delta t$  à valeurs dans  $(0, 1)$  qui dépendent des méthodes élémentaires choisies. En particulier, en tant que produit de matrices de la forme (5.23), la matrice  $G(\delta t)$  se met sous la forme

$$G(\delta t) = \begin{pmatrix} 1 - \alpha(\delta t) & \alpha(\delta t) \\ \beta(\delta t) & 1 - \beta(\delta t) \end{pmatrix}, \quad (5.24)$$

où  $\alpha$  and  $\beta$  sont des fonctions à valeurs réelles. De plus, la décomposition spectrale de la matrice  $G(\delta t)$  s'écrit

$$G(\delta t) = \mu(\delta t)P(\delta t) + Q(\delta t), \quad (5.25)$$

où  $P(\delta t)$  est la matrice du projecteur spectral de  $G(\delta t)$  associée à la valeur propre  $\mu(\delta t) = 1 - \alpha(\delta t) - \beta(\delta t) \in ]0, 1[$  et  $Q(\delta t)$  est celle associée à la valeur propre 1. En particulier,

$$Q(\delta t) = (1, 1)^{\text{t}}(\beta(\delta t), \alpha(\delta t))/(\alpha(\delta t) + \beta(\delta t)). \quad (5.26)$$

On en déduit que, sur cet exemple, toute méthode de décomposition projette  $(u_0, v_0)^{\text{t}}$  sur la droite d'équation  $u = v$  quand le temps tend vers l'infini, comme le

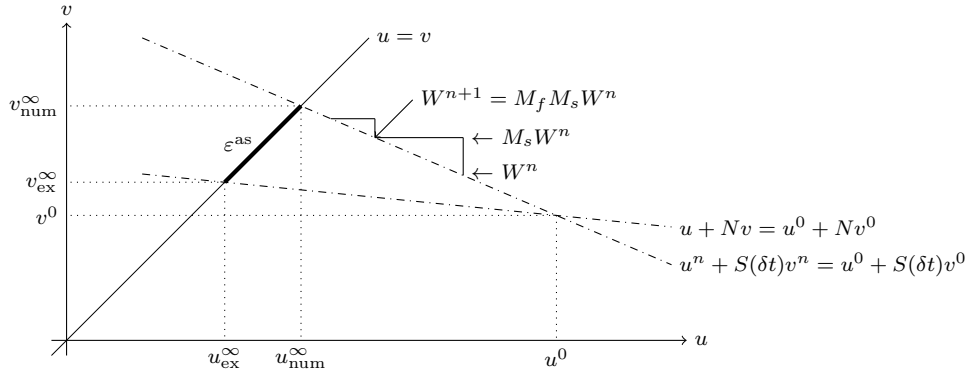


FIGURE 5.3 – Évolution de la solution exacte et de la solution numérique dans le plan de phase  $\mathbb{R}_u \times \mathbb{R}_v$ . On a noté  $W^n = (u^n, v^n)^t$ .

flot exact. On observe de plus que l'on a pour tout  $t \geq 0$ ,  $n \in \mathbb{N}$  et  $\delta t > 0$  assez petit

$$u(t) + Nv(t) = u_0 + Nv_0 \quad \text{et} \quad u_n + S(\delta t)v_n = u_0 + S(\delta t)v_0,$$

avec  $S(\delta t) = \alpha(\delta t)/\beta(\delta t)$ , ce qui permet de relier l'erreur asymptotique (voir la définition 5.4.2.1) à la différence  $S(\delta t) - N$ , comme on le comprend en Figure 5.3.

Étant données des méthodes élémentaires définies par  $\lambda_f$  et  $\lambda_s$  via (5.23), on considère les 6 méthodes de splitting suivantes, avec et sans sous-cyclage

- **Schéma #1** : (splitting de Lie - temps lent - sous-cyclé)

$$G_1(\delta t) = M_s(\lambda_s(\delta t))M_f(\lambda_f(\delta t/N))^N$$

- **Schéma #2** : (splitting de Lie - temps rapide - sans sous-cyclage)

$$G_2(\delta t) = (M_s(\lambda_s(\delta t/N))M_f(\lambda_f(\delta t/N)))^N$$

- **Schéma #3** : (splitting de Strang - temps lent - sous-cyclé)

$$G_3(\delta t) = M_s(\lambda_s(\delta t/2)) M_f(\lambda_f(\delta t/N))^N M_s(\lambda_s(\delta t/2))$$

- **Schéma #4** : (splitting de Strang - temps rapide - sans sous-cyclage)

$$G_4(\delta t) = (M_s(\lambda_s(\delta t/(2N))) M_f(\lambda_f(\delta t/N)) M_s(\lambda_s(\delta t/(2N))))^N$$

- **Schéma #5** : (splitting à poids ([CFH05]) - temps lent - sous-cyclé)

$$G_5(\delta t) = \frac{1}{2} (M_s(\lambda_s(\delta t))M_f(\lambda_f(\delta t/N))^N + M_f(\lambda_f(\delta t/N))^N M_s(\lambda_s(\delta t)))$$

— **Schéma #6** : (splitting à poids - temps rapide - sans sous-cyclage)

$$G_6(\delta t) = \frac{1}{2^N} (M_s(\lambda_s(\delta t/N))M_f(\lambda_f(\delta t/N)) + M_f(\lambda_f(\delta t/N))M_s(\lambda_s(\delta t/N)))^N$$

On prouve alors les résultats suivants quant à l'ordre asymptotique de ces méthodes de splitting appliquées au système (5.22) :

**Proposition 5.4.3.1 (ordre asymptotique des méthodes de splitting de Lie)**

Désignons par  $G(\delta t)$  l'un des schémas #1 et #2.

Alors

1. si  $G(\delta t)$  est composé de deux méthodes d'ordres au moins 1, alors il est d'ordre au moins 1 et son ordre asymptotique est au moins 1 également,
2. si  $G(\delta t)$  est composé de deux méthodes d'ordres au moins 2, alors il est d'ordre asymptotique au plus 1,
3. il existe des méthodes d'ordre 1 telles que le schéma  $G(\delta t)$  correspondant est d'ordre asymptotique au moins 2 (même si l'ordre classique est 1).

**Proposition 5.4.3.2 (ordre asymptotique des méthodes de splitting de Strang)**

Désignons par  $G(\delta t)$  l'un des schémas #3 et #4.

Alors

1. si  $G(\delta t)$  est composé de deux méthodes d'ordre au moins 2, alors son ordre est au moins 2 et son ordre asymptotique est au moins égal à 2,
2. si  $G(\delta t)$  est composé d'au moins un schéma d'ordre 1, alors il est d'ordre 1, mais il existe une famille à un paramètre de schémas d'ordres 1 tels que l'ordre asymptotique du schéma de Strang correspondant est au moins 2.

**Proposition 5.4.3.3 (ordre asymptotique des méthodes de splitting à poids)**

Désignons par  $G(\delta t)$  l'un des schémas #5 et #6.

Alors

1. si  $G(\delta t)$  est composé de deux méthodes d'ordre au moins 2, alors il est d'ordre au moins 2 et d'ordre asymptotique au moins 2 également,
2. il existe des schémas d'ordre 1 tels que la méthode de splitting à poids correspondante est d'ordre au moins 2 (même si elle est d'ordre classique égal à 1),
3. dans le cas sous-cyclé (Schéma #5), il existe une famille à un paramètre indépendante de  $N$  de couples de schémas d'ordres 1 telle que la méthode de splitting à poids correspondante est d'ordre asymptotique 2.

Sur cet exemple, on a ainsi montré que l'ordre asymptotique d'une méthode de splitting peut être supérieur à l'ordre local classique de la méthode. On a montré également qu'il est possible, en utilisant des procédures de sous-cyclage, d'obtenir des familles entières de méthodes d'ordre asymptotique élevé (ici, 2) en ne combinant

que des méthodes d'ordre faible (ici, 1), et cela *indépendamment du paramètre  $N$  du système* mesurant le ratio des échelles temporelles.

Afin d'illustrer numériquement les résultats précédents, on vérifie qu'ils perdurent quand on applique les méthodes décrites précédemment au problème suivant, qui est une version non-linéaire du système (5.22) :

$$\begin{cases} u' = -Nc(u - v) - N(u - v)^2 \\ v' = c(u - v) + (u - v)^2. \end{cases} \quad (5.27)$$

À cette fin, on applique les 6 schémas précédents avec des  $\theta$ -méthodes de paramètres  $\theta_f$  et  $\theta_s$  et l'on calcule numériquement l'ordre asymptotique des méthodes de splitting correspondantes. On rassemble les résultats obtenus en Table 5.1.

$(\theta_f, \theta_s)$	#1	#2	#3	#4	#5	#6
(1.0, 0.0)	0.8642	–	0.7700	0.9787	1.2941	1.0001
(0.0, 0.0)	0.8693	1.0072	1.4769	1.0409	<u>1.9647</u>	1.0055
(0.0, 1.0)	0.8404	1.0000	1.1860	1.0229	0.8734	1.0002
(0.5, 0.5)	0.8534	1.0000	<u>1.8313</u>	<u>1.9984</u>	<u>1.8888</u>	<u>2.4817</u>
(0.0, 0.25)	0.8617	1.0053	<u>1.8674</u>	1.0354	1.8373	1.0042
$(\frac{N+1}{2N}, 0.75)$	0.8463	0.9975	1.3994	<u>1.9926</u>	1.8184	0.9955

TABLE 5.1 – Ordre asymptotique des 6 méthodes de splitting composées avec des  $\theta$ -méthodes de paramètres  $(\theta_f, \theta_s)$ , obtenus numériquement par intégration de (5.27). Les nombres soulignés correspondent à un ordre asymptotique supérieur ou égal à 2.

On constate ainsi que les résultats démontrés dans le cadre linéaire persistent numériquement dans le cadre non-linéaire : il est difficile de construire une méthode de splitting de Lie d'ordre asymptotique 2 avec des méthodes d'ordre 1 et impossible avec des méthodes d'ordre 2 (Proposition 5.4.3.1 et colonnes 1 et 2 de la Table 5.1) ; les schémas de Strang sont d'ordre asymptotique au moins un, ils sont d'ordre asymptotique 2 lorsque les méthodes sont d'ordre 2 et il est possible d'en construire d'ordre asymptotique 2 avec des méthodes d'ordre 1, de manière indépendante de  $N$  dans le cas sous-cyclé (Proposition 5.4.3.2 et colonnes 3 et 4 de la Table 5.1) ; les schémas à poids sont d'ordre asymptotique 2 dès que les deux méthodes sont d'ordre 2 et il est possible, dans le cas sous-cyclé, de fabriquer des méthodes d'ordre asymptotique 2 à partir de méthodes d'ordre 1 (Proposition 5.4.3.3 et colonnes 5 et 6 de la Table 5.1).

#### 5.4.4 Comparaison de méthodes de splitting avec et sans sous-cyclage sur un système d'EDP linéaires multi-échelles

On s'intéresse dans cette section au comportement asymptotique de méthodes de splitting avec sous-cyclage appliquées au système d'équations aux dérivées partielles

linéaires suivant, modélisant un couplage de réaction-diffusion dans un domaine borné  $(0, L)$  ( $L > 0$  fixé) de dimension 1. On considère des conditions de Dirichlet homogènes, puis inhomogènes. Les méthodes numériques sont considérées dans le cas totalement discrétisé : en temps comme en espace. On montre en particulier, dans le cas homogène, qu'une méthode de splitting de Lie avec sous-cyclage converge exponentiellement vite en temps vers l'état d'équilibre nul, et l'on compare le taux au taux de convergence des solutions du problème continu. Dans le cas inhomogène, on montre que, sous CFL, l'erreur asymptotique produite par la méthode de splitting de Lie sous-cyclée correspondante est d'ordre  $\delta x^2$  où  $\delta x > 0$  est le pas de discrétisation spatiale.

À la suite de l'exemple étudié en Section 5.4.3, le second exemple sur lequel nous étudions l'ordre asymptotique de méthodes de splitting sous-cyclées est le système de réaction-diffusion

$$\begin{cases} \partial_t u = \nu_1 \Delta u + c_1(v - u) \\ \partial_t v = \nu_2 \Delta v + c_2(u - v) \end{cases} \quad t > 0, x \in (0, L), \quad (5.28)$$

avec des conditions de Dirichlet

$$u(t, 0) = u_l, \quad u(t, L) = u_r, \quad v(t, 0) = v_l, \quad v(t, L) = v_r, \quad (5.29)$$

et des conditions initiales  $u^0$  et  $v^0$  dans  $L^2(0, L)$ . On suppose que les coefficients strictement positifs  $\nu_1, \nu_2, c_1$  et  $c_2$  sont tels que

$$\frac{\nu_1}{\nu_2} = \frac{c_1}{c_2} = N \in \mathbb{N}^*, \quad (5.30)$$

avec  $N \gg 1$ , ce qui découple naturellement les équations "lentes" et "rapides" comme dans la section précédente et permet de poser  $\nu = \nu_2$  et  $c = c_2$  pour écrire le système (5.28) sous la forme

$$\begin{cases} \partial_t u = N\nu \Delta u + Nc(v - u) \\ \partial_t v = \nu \Delta v + c(u - v) \end{cases} \quad t > 0, x \in (0, L). \quad (5.31)$$

Ainsi, avec les notations de la section 5.4.2, on a

$$X = L^2(0, L)^2, \quad W = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix},$$

$$f_s \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \nu \Delta v + c(u - v) \end{pmatrix}, \quad \text{et} \quad f_f \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nu \Delta u + c(v - u) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

D'un point de vue qualitatif, ce système est exponentiellement convergent vers son unique état d'équilibre, quelles que soient les données initiales, comme on le montre dans les deux résultats suivants.

**Proposition 5.4.4.1** *Le système (5.31) avec les conditions (5.29) admet un unique*

état d'équilibre donné par

$$\begin{cases} u_{\text{ex}}^\infty : x \mapsto \frac{u_l+v_l}{2} + \frac{(u_r+v_r-u_l-v_l)x}{2L} + \frac{(u_l-v_l)[\cosh(x/\alpha)-\cosh(L/\alpha)\sinh(x/\alpha)/\sinh(L/\alpha)]}{2} \\ \quad + \frac{(u_r-v_r)\sinh(x/\alpha)/\sinh(L/\alpha)}{2} \\ v_{\text{ex}}^\infty : x \mapsto \frac{u_l+v_l}{2} + \frac{(u_r+v_r-u_l-v_l)x}{2L} - \frac{(u_l-v_l)[\cosh(x/\alpha)-\cosh(L/\alpha)\sinh(x/\alpha)/\sinh(L/\alpha)]}{2} \\ \quad - \frac{(u_r-v_r)\sinh(x/\alpha)/\sinh(L/\alpha)}{2} \end{cases} \quad (5.32)$$

où  $\alpha = \sqrt{\nu/(2c)}$ .

**Théorème 5.4.4.1** Fixons  $u_l, u_r, v_l$  et  $v_r$  dans  $\mathbb{R}$ . Quelles que soient les fonctions  $u_0$  et  $v_0$  dans  $L^2(0, L)$ , la solution maximale  $(u, v)$  du système d'EDP linéaire (5.31) est définie sur  $[0, +\infty[$  et elle converge vers la solution stationnaire  $(u_{\text{ex}}^\infty, v_{\text{ex}}^\infty)$  définie en (5.32) exponentiellement vite au sens suivant : pour tout  $t > 0$ , on a

$$\int_0^L (|u - u_{\text{ex}}^\infty|^2 + N|v - v_{\text{ex}}^\infty|^2)(t)dx \leq \left( \int_0^L (|u - u_{\text{ex}}^\infty|^2 + N|v - v_{\text{ex}}^\infty|^2)(0)dx \right) e^{-\frac{2\pi^2\nu}{L^2}t}. \quad (5.33)$$

On discrétise maintenant le système (5.31) par différences finies en espace, et par méthodes de splitting lent-rapide avec sous-cyclage en temps et l'on étudie le comportement asymptotique des méthodes numériques en temps grand. Pour ce qui concerne la discrétisation en espace, on introduit un entier  $J \in \mathbb{N}^*$ , on pose  $\delta x = L/(J+1)$  et l'on introduit la matrice carrée tridiagonale  $A$  de taille  $J$  avec des 2 sur la diagonale et des  $-1$  sur la sur- et la sous-diagonale. Les valeurs propres de cette matrice diagonalisable sont donnés pour  $j \in \{1, \dots, J\}$  par  $\lambda_j = 4 \sin^2\left(\frac{j\pi}{2(J+1)}\right)$ . Ainsi,  $A/\delta x^2$  correspond à la discrétisation du Laplacien de Dirichlet sur  $[0, L]$  aux points  $x_j = Lj/(J+1)$  ( $j \in \{1, \dots, J\}$ ). Concernant la discrétisation en temps, on introduit les schémas de base intégrant les équations rapides et lentes en posant pour  $\delta t > 0$

$$\Phi_{f,\delta t/N}(u^n, v^n) = \left[ \left( I + \theta_f \delta t \left( cI + \nu \frac{1}{(\delta x)^2} A \right) \right)^{-1} \left( \left( I - (1-\theta_f) \delta t \left( cI + \nu \frac{1}{(\delta x)^2} A \right) \right) u^n + c\delta t v^n \right), v^n \right], \quad (5.34)$$

et

$$\Phi_{s,\delta t}(u^n, v^n) = \left[ u^n, \left( I + \theta_s \delta t \left( cI + \nu \frac{1}{(\delta x)^2} A \right) \right)^{-1} \left( \left( I - (1-\theta_s) \delta t \left( cI + \nu \frac{1}{(\delta x)^2} A \right) \right) v^n + c\delta t u^n \right) \right], \quad (5.35)$$

où  $I$  désigne la matrice identité. Ceci correspond à l'utilisation de deux  $\theta$ -schémas de paramètres  $\theta_f \in [0, 1]$  et  $\theta_s \in [0, 1]$ . On assemble ces méthodes et l'on considère, par exemple, la méthode de splitting de Lie-Trotter totalement discrétisée avec sous-cyclage suivante :

$$\Psi_{\text{Lie},\delta t} = \Phi_{s,\delta t} \circ \Phi_{f,\delta t/N}^N. \quad (5.36)$$

On travaille par la suite sous la condition de stabilité CFL

$$\delta t \leq \frac{1}{c + 4\nu/(\delta x)^2}. \quad (5.37)$$

Remarquons que, puisque l'on a choisi d'utiliser des méthodes avec sous-cyclage, la condition de stabilité (5.37) ne fait pas intervenir explicitement le paramètre  $N$ .

On peut alors montrer le premier résultat concernant le cas homogène :

**Théorème 5.4.4.2** *Soit  $c, \nu > 0$ ,  $N \geq 2$  et  $u_r = u_l = v_r = v_l = 0$ . Considérons la méthode de splitting de Lie avec sous-cyclage définie par (5.36), (5.35) et (5.34). Soit  $J \in \mathbb{N}^*$ . Il existe des constantes  $C, \gamma, h > 0$  telles que pour tous  $U^0, V^0 \in \mathbb{R}^J$ , tout  $\delta t \in ]0, h[$  et tout  $n \in \mathbb{N}$ , on a*

$$\|\Psi_{\text{Lie}, \delta t}^n(U^0, V^0)\|_2 \leq C e^{-\gamma n \delta t} \|(U^0, V^0)\|_2. \quad (5.38)$$

Quitte à réduire  $h$ , on peut imposer  $\gamma \geq N\nu\lambda_1/((N+1)(\delta x)^2)$ . Le taux de décroissance exponentielle exact  $\nu\pi^2/L^2$  (voir (5.33) dans le Théorème 5.4.4.1) est ainsi de même ordre que l'ordre asymptotique numérique  $N\nu\pi^2/(L^2(N+1))$ .

La preuve de ce résultat, donnée sous forme plus générale dans [DL16], utilise un contrôle précis des propriétés spectrales des matrices (en général non-symétriques) intervenant dans l'écriture de la méthode  $\Psi_{\text{Lie}, \delta t}$ .

Dans le cas inhomogène, on peut adapter l'écriture de la méthode (5.36) afin d'incorporer les conditions aux limites à chaque pas de temps et montrer les deux résultats suivants relatifs au comportement asymptotique des méthodes obtenues.

**Proposition 5.4.4.2** *Soit  $\delta t, \delta x > 0$  vérifiant la condition (5.37). La méthode adaptée de (5.36) basée sur des  $\theta$ -schémas admet un unique état d'équilibre  $W_{\text{num}}^\infty(\delta t)$  qui s'écrit comme la solution d'un système linéaire de taille  $2J$  faisant intervenir  $\delta t$  et les valeurs  $u_l, u_r, v_l$  et  $v_r$ .*

**Théorème 5.4.4.3** *Il existe une constante  $C > 0$  telle que pour tout  $\delta t, \delta x > 0$  satisfaisant la condition (5.37), on a*

$$\left\| \begin{pmatrix} \Pi_{\delta x}(u_{\text{ex}}^\infty) \\ \Pi_{\delta x}(v_{\text{ex}}^\infty) \end{pmatrix} - W_{\text{num}}^\infty(\delta t) \right\|_2 \leq C(\delta x^2),$$

où, pour  $w \in C^0([0, L])$  on a posé  $\Pi_{\delta x}(w) = (w(x_1), \dots, w(x_J))^t$ .

En particulier, ce théorème montre qu'il est possible d'utiliser des méthodes de splitting avec sous-cyclage sur des systèmes d'EDP multi-échelles (ayant ainsi une CFL ne faisant pas intervenir le ratio  $N$  des échelles) et de garantir d'une part la convergence de ces méthodes dans le même régime de vitesse (ici : convergence exponentielle à un taux comparable) vers un état d'équilibre qui est une approximation raisonnable de l'état d'équilibre choisi (ici : une approximation d'ordre 1 en  $\delta t$  et d'ordre 2 en  $\delta x$ , sous CFL).



### 5.4.5 Conclusions et perspectives

On a montré sur deux exemples linéaires qu’il est possible d’intégrer des systèmes d’EDO ou d’EDP d’évolution multi-échelles par des méthodes de splitting faisant intervenir du sous-cyclage. Un des avantages est que cela permet d’assurer une stabilité à moindre coût des méthodes obtenues (conditions de stabilité indépendantes du paramètre de ratio d’échelles  $N$ ). Une étude plus systématique de ce type de méthodes pour des systèmes plus généraux, si elle est souhaitable, semble cependant, dans une large mesure, hors de portée, tant la diversité est grande entre les modèles (existence de points d’équilibres multiples, modes de convergence différents, prise en compte des non-linéarités) et les méthodes (méthodes préservant certains invariants). Une piste de recherche possible et plus atteignable peut être de considérer des systèmes de type hyperbolique-parabolique, où la nature des échelles différentes n’est plus juste un ratio de vitesses mais trouve sa source dans des phénomènes physiques différents.

## 5.5 Convergence exponentielle vers l’équilibre pour des solutions discrétisées d’équations de Fokker–Planck

### 5.5.1 Problématique

Cette section présente les travaux développés dans [DHL18]. On considère des discrétisations de l’équation de Fokker–Planck

$$\partial_t F + v \partial_x F - \partial_v (\partial_v + v) F = 0, \quad F|_{t=0} = F^0, \quad (5.39)$$

où  $F = F(t, x, v)$  est l’inconnue avec  $t \geq 0$ ,  $x$  dans le tore  $\mathbb{T}$  de dimension 1, et  $v \in \mathbb{R}$  (cas non-borné en vitesse) ou  $v \in (-v_{\max}, v_{\max})$ . Cette équation est posée *a priori* pour une donnée initiale  $F^0 \geq 0$ , d’intégrale égale à 1. La positivité de  $F^0$  est alors préservée par le flot associé à l’équation de Fokker–Planck linéaire (5.39) et la valeur de l’intégrale de  $F$  par rapport à  $x$  et  $v$  également (sous réserve des conditions aux bords en vitesse). Dans ce contexte, on parle de fonctions *homogènes* lorsqu’elles ne dépendent pas de la variable d’espace  $x$ . En ce sens et par extension, l’équation de Fokker–Planck (5.39) est inhomogène. Sa version homogène correspond à la recherche de solutions  $F$  indépendantes de  $x$  et le deuxième terme de (5.39) est alors identiquement nul. Il est bien connu que les solutions de l’équation de Fokker–Planck inhomogène (5.39), pour des données initiales dans un sous-espace de  $L^1$  bien choisi, convergent exponentiellement vite vers un état d’équilibre homogène. Celui-ci s’écrit, dans le cas non-borné en vitesse  $(x, v) \mapsto e^{-v^2/2}/\sqrt{2\pi}$ .

Dans [DHL18], on propose une discrétisation de l’opérateur  $\partial_v$  dans le cas non-borné en vitesse, puis dans le cas borné en vitesse (avec des conditions de bord appropriées) et une discrétisation de l’opérateur  $\partial_x$  qui assurent à la fois la préservation de la masse et la convergence exponentielle vers un état d’équilibre des solutions en temps continu. On s’intéresse également à des schémas discrétisés en

temps pour cette équation, dont on montre le même bon comportement qualitatif en temps long (préservation de la masse et convergence exponentielle vers l'équilibre). Les méthodes de preuve consistent à reproduire au niveau discret les éléments de structure utiles au niveau continu : espaces fonctionnels hilbertiens adaptés, basés sur la connaissance de l'état d'équilibre discret, inégalités fonctionnelles (notamment l'inégalité de Poincaré), qui permettent d'utiliser les techniques classiques (dans le cas continu) d'hypocoercivité. Afin d'introduire les éléments de discrétisation et de comportement qualitatif avec une progression de complexité graduée, on s'intéresse également à la version homogène, bien plus élémentaire, de l'équation (5.39), qui s'écrit

$$\partial_t F - \partial_v(\partial_v + v)F = 0, \quad F|_{t=0} = F^0. \quad (5.40)$$

Le plan de cette section est le suivant. On considère uniquement le cas non-borné en vitesse (le cas borné en vitesse est traité en détail dans [DHL18], et il s'agit essentiellement de vérifier que, pour un bon choix de discrétisation en vitesse, tout se passe "bien" comme en domaine non-borné). On étudie en Section 5.5.2 des discrétisations de l'équation homogène (5.40). Puis on s'intéresse au cas non-homogène en Section 5.5.3. Chacune de ces sections reprend rapidement les résultats au niveau continu avant de s'intéresser à des discrétisations en vitesse, en espace et/ou en temps. On illustre par ailleurs numériquement les résultats théoriques à de nombreuses reprises.

### 5.5.2 Discrétisations de l'équation de Fokker–Planck homogène en domaine non-borné en vitesse

Le cas totalement continu en  $(t, v)$

On considère l'équation de Fokker–Planck homogène (5.40). Celle-ci possède pour seuls états d'équilibre dans  $L^1(\mathbb{R})$  les fonctions  $v \mapsto ce^{-v^2/2}$  où  $c \in \mathbb{R}$ . On note  $\mu$  l'unique état positif d'intégrale égale à un (correspondant à  $c = 1/\sqrt{2\pi}$ ). On l'appelle dans ce contexte la Maxwellienne de l'équation (5.40). Ces états d'équilibre permettent, par changement de variable  $F = \mu + \mu f$ , de définir une équation remise à l'échelle

$$\partial_t f + (-\partial_v + v)\partial_v f = 0. \quad (5.41)$$

Cette équation est plus naturellement posée pour une inconnue  $f(t, \cdot) \in L^2(\mu dv) \leftrightarrow L^1(\mu dv)$ . Les états d'équilibre de cette équation remise à l'échelle (5.41) dans  $L^2(\mu dv)$  sont alors les fonctions constantes. Par ailleurs, le fait que  $\int_{\mathbb{R}} F(v)dv = 1$  se traduit par le fait que la valeur moyenne  $\langle f^0 \rangle = \int_{\mathbb{R}} f(v)\mu(v)dv$  de  $f$  est nulle.

L'étude de l'opérateur  $(-\partial_v + v)\partial_v$  dans  $L^2(\mu dv)$  et dans  $H^1(\mu dv)$  montre que l'équation (5.41) est globalement bien posée pour  $f^0 \in L^2(\mu dv)$  comme pour  $f^0 \in H^1(\mu dv)$ . À l'aide d'une inégalité de Poincaré dans  $H^1(\mu dv)$ , on montre alors le résultat suivant de convergence vers l'équilibre des solutions de (5.41).

**Théorème 5.5.1** *Pour tout  $f^0 \in L^2(\mu dv)$  tel que  $\langle f^0 \rangle = 0$ , on note  $f$  la solution*

## 82 Chapitre 5. Comportement en temps long de méthodes numériques

dans  $\mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, L^2(\mu dv))$  de (5.41). Pour tout  $t \geq 0$ , on a  $\langle f(t) \rangle = 0$  et de plus

$$\forall t \geq 0, \quad \|f(t)\|_{L^2(\mu dv)}^2 \leq e^{-2t} \|f^0\|_{L^2(\mu dv)}^2. \quad (5.42)$$

Si de plus  $f^0 \in H^1(\mu dv)$ , alors  $f \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, H^1(\mu dv))$  et l'on a

$$\forall t \geq 0, \quad \|f(t)\|_{H^1(\mu dv)}^2 \leq e^{-t} \|f^0\|_{H^1(\mu dv)}^2. \quad (5.43)$$

On déduit sans peine de ce résultat le comportement en temps long des solutions de l'équation (5.41) dont la moyenne n'est pas nulle, puis celui des solutions de (5.40) lorsque l'on suppose que  $F^0 \in \mu L^2(\mu dv) \hookrightarrow L^1(dv)$ .

### Discrétisation en vitesse

On se fixe  $\delta v > 0$ , que l'on souhaite pouvoir rendre arbitrairement petit, et on discrétise l'espace  $\mathbb{R}$  des vitesses en posant pour tout  $i \in \mathbb{Z}$ ,  $v_i = i\delta v$ . On introduit l'espace  $\ell^1(\mathbb{Z}, \delta v)$  des séries  $G$  de terme général  $(G_i)_{i \in \mathbb{Z}}$  absolument sommables, muni de la norme  $\|G\|_{\ell^1(\mathbb{Z}, \delta v)} = \delta v \sum_{i \in \mathbb{Z}} |G_i|$ , ainsi que l'espace  $\ell^1(\mathbb{Z}^*, \delta v)$  des séries  $G$  de terme général  $(G_i)_{i \in \mathbb{Z}^*}$  absolument sommables, muni de la norme  $\|G\|_{\ell^1(\mathbb{Z}^*, \delta v)} = \delta v \sum_{i \in \mathbb{Z}^*} |G_i|$ . On propose la définition suivante de l'opérateur  $D_v$  discrétisant la dérivation en vitesse  $\partial_v$  et de l'opérateur discret de multiplication par  $v$  :

**Définition 5.5.2** Pour tout  $G \in \ell^1(\mathbb{Z}, \delta v)$ , on définit  $D_v G \in \ell^1(\mathbb{Z}^*, \delta v)$  par les formules

$$(D_v G)_i = \frac{G_{i+1} - G_i}{\delta v} \text{ for } i < 0, \quad (D_v G)_i = \frac{G_i - G_{i-1}}{\delta v} \text{ for } i > 0,$$

et l'on définit également  $vG \in \ell^1(\mathbb{Z}^*, \delta v)$  par la formule

$$(vG)_i = v_i G_i \text{ for } i \neq 0,$$

lorsque cette dernière série est absolument convergente.

Un des avantages de la définition précédente est qu'elle assure l'existence d'un bon état d'équilibre discret pour l'équation discrétisée à venir :

**Lemme 5.5.3** Fixons  $\delta v > 0$ . Il existe une unique solution  $\mu^{\delta v}$ , positive, normalisée dans  $\ell^1(\mathbb{Z}, \delta v)$  à l'équation (d'inconnue  $\nu \in \ell^1(\mathbb{Z}, \delta v)$ )  $(D_v + v)\nu = 0$ . Par ailleurs, il existe une unique constante positive  $c_{\delta v}$  telle que

$$\mu_i^{\delta v} = \frac{c_{\delta v}}{\prod_{\ell=0}^{|i|} (1 + v_\ell \delta v)}, \quad i \in \mathbb{Z}.$$

De plus,  $\mu^{\delta v}$  est paire.

De même que  $\mu$  est l'unique solution positive, normalisée dans  $L^1(dv)$  de l'équation  $(\partial_v + v)\mu = 0$ , la suite  $\mu^{\delta v}$  est l'unique solution positive normalisée dans  $\ell^1(\mathbb{Z}, \delta v)$  de l'équation  $(D_v + v)\mu^{\delta v} = 0$ . On vérifie par ailleurs que la Maxwellienne numérique

$\mu^{\delta v}$  est une bonne approximation de la Maxwellienne continue  $\mu$  lorsque  $\delta v$  est petit au sens où l'on a

$$\sup_{i \in \mathbb{Z}} |\mu_i^{\delta v} - \mu(v_i)| \xrightarrow{\delta v \rightarrow 0} 0.$$

Afin de discrétiser l'opérateur  $-\partial_v(\partial_v + v)$ , on introduit l'opérateur "adjoint" (voir (5.47) pour un sens précis)  $D_v^\sharp$  de  $D_v + v$ . On introduit de même l'opérateur adjoint  $v^\sharp$  de la multiplication par  $v$ .

**Définition 5.5.4** Soit  $G \in \ell^1(\mathbb{Z}^*, \delta v)$ . On définit  $D_v^\sharp G \in \ell^1(\mathbb{Z}, \delta v)$  en posant<sup>1</sup>

$$\begin{aligned} (D_v^\sharp G)_i &= \frac{G_i - G_{i-1}}{\delta v} \text{ pour } i < 0, & (D_v^\sharp G)_i &= \frac{G_{i+1} - G_i}{\delta v} \text{ pour } i > 0 \\ \text{et} & & (D_v^\sharp G)_0 &= \frac{G_1 - G_{-1}}{\delta v}. \end{aligned} \quad (5.44)$$

On définit également l'opérateur  $v^\sharp$  de  $\ell^1(\mathbb{Z}^*, \delta v)$  dans  $\ell^1(\mathbb{Z}, \delta v)$  en posant pour  $G \in \ell^1(\mathbb{Z}^*, \delta v)$ ,

$$\forall i \neq 0, \quad (v^\sharp G)_i = v_i G_i \quad \text{and} \quad (v^\sharp G)_0 = 0.$$

Tout ceci permet d'introduire la version discrétisée en vitesse de l'équation (5.40).

**Définition 5.5.5** Pour  $F^0 \in \ell^1(\mathbb{Z}, \delta v)$  fixée, on appelle équation de Fokker-Planck homogène discrétisée en vitesse le problème de Cauchy : trouver  $F \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, \ell^1(\mathbb{Z}, \delta v))$  telle que

$$\forall t \geq 0, \quad \partial_t F - D_v^\sharp(D_v + v)F = 0, \quad \text{et} \quad F|_{t=0} = F^0, \quad (5.45)$$

au sens des distributions.

De même que dans le contexte continu en vitesse, rappelé ci-dessus, on peut, lorsque  $F^0$  est de masse 1, effectuer le changement d'inconnue  $F = \mu^{\delta v} + \mu^{\delta v} f$ , de sorte que  $F \in \ell^1(\mathbb{Z}, \delta v) \iff f \in \ell^1(\mathbb{Z}, \mu^{\delta v} \delta v)$ . On vérifie alors que, pour  $F \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, \ell^1(\mathbb{Z}, \delta v))$ , la fonction  $f$ , définie pour  $t \geq 0$  par  $f(t, \cdot) = (F(t, \cdot) - \mu^{\delta v})/\mu^{\delta v}$ , vérifie

$$\forall t \geq 0, \quad \partial_t f + (-D_v^\sharp + v^\sharp)D_v f = 0.$$

Comme dans le cas continu en vitesse, on se ramène ainsi à une équation remise à l'échelle, analogue de (5.41) :

**Définition 5.5.6** Pour  $f^0 \in \ell^1(\mathbb{Z}, \mu^{\delta v} \delta v)$ , on appelle équation de Fokker-Planck remise à l'échelle, homogène, discrétisée en vitesse, le problème de Cauchy : trouver  $f \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, \ell^1(\mathbb{Z}, \mu^{\delta v} \delta v))$  telle que

$$\forall t \geq 0, \quad \partial_t f + (-D_v^\sharp + v^\sharp)D_v f = 0, \quad \text{et} \quad f|_{t=0} = f^0, \quad (5.46)$$

au sens des distributions.

---

1. La définition de  $(D_v^\sharp G)_0$  n'est pas une typo.

C'est pour traiter directement de cette équation discrétisée et remise à l'échelle qu'on introduit le cadre fonctionnel hilbertien suivant.

**Définition 5.5.7** On définit l'espace  $\ell^2(\mu^{\delta v} \delta v)$  comme le sous-espace de  $\mathbb{R}^{\mathbb{Z}}$  des suites  $g = (g_i)_{i \in \mathbb{Z}}$  telles que

$$\|g\|_{\ell^2(\mu^{\delta v} \delta v)}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \delta v \sum_{i \in \mathbb{Z}} (g_i)^2 \mu_i^{\delta v} < \infty.$$

Ceci définit une norme hilbertienne (au carré) sur  $\ell^2(\mu^{\delta v} \delta v)$ , et le produit scalaire correspondant est noté  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ . On définit de plus la moyenne de  $g \in \ell^2(\mu^{\delta v} \delta v)$  en posant

$$\langle g \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i \in \mathbb{Z}} g_i \mu_i^h \delta v = \langle g, 1 \rangle_{\ell^2(\mu^{\delta v} \delta v)}.$$

On introduit enfin une Maxwellienne discrète décalée qui permet ensuite d'introduire un analogue discret de l'espace  $H^1(\mu \delta v)$  dans lequel la convergence exponentielle vers l'équilibre a lieu dans le cas continu en vitesse (voir (5.43)).

**Définition 5.5.8** On définit la Maxwellienne discrète décalée  $\mu^\# \in \ell^1(\mathbb{Z}^*, \delta v)$  en posant

$$\mu_i^\# = \mu_{i+1}^{\delta v} \text{ pour } i < 0, \quad \mu_i^\# = \mu_{i-1}^{\delta v} \text{ pour } i > 0.$$

On définit le sous-espace  $\ell^2(\mu^\# \delta v)$  de  $\mathbb{R}^{\mathbb{Z}^*}$  formé des suites  $g \in \ell^1(\mathbb{Z}^*, \mu^\# \delta v)$  telles que

$$\|g\|_{\ell^2(\mu^\# \delta v)}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \delta v \sum_{i \in \mathbb{Z}^*} (g_i)^2 \mu_i^\# < \infty.$$

Ceci définit une norme (au carré) sur  $\ell^2(\mu^\# \delta v)$ , et l'on note le produit scalaire correspondant par  $\langle \cdot, \cdot \rangle_\#$ . Enfin, on introduit le sous-espace

$$\mathbf{h}^1(\mu^{\delta v} \delta v) = \left\{ g \in \ell^2(\mu^{\delta v} \delta v) \mid D_v g \in \ell^2(\mu^\# \delta v) \right\}.$$

**Remarque :** Dans les discrétisations par différences finies classiques, en général, les opérateurs de dérivation discrétisés sont des opérateurs linéaires bornés, de norme tendant vers  $+\infty$  lorsque les paramètres de discrétisation tendent vers 0. Ici, l'opérateur  $D_v$  est non-borné de  $\ell^2(\mu^\# \delta v)$  dans  $\ell^2(\mu^{\delta v} \delta v)$ , de domaine  $\mathbf{h}^1(\mu^{\delta v} \delta v)$ .

#### Conséquences de la discrétisation en vitesse

Les définitions précédentes permettent d'assurer les propriétés suivantes pour l'opérateur apparaissant dans l'équation (5.46).

**Proposition 5.5.9** Fixons  $\delta v > 0$ .

1. Définissons l'opérateur  $P^\delta = (-D_v^\# + v^\#)D_v$ , de domaine

$$D(P^\delta) = \left\{ g \in \ell^2(\mu^{\delta v} \delta v), \mid (-D_v^\# + v^\#)D_v f \in \ell^2(\mu^{\delta v} \delta v) \right\}.$$

L'opérateur  $P^\delta$  est auto-adjoint, non-négatif, de domaine dense et maximal accréatif dans  $\ell^2(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)$ . De plus, pour tout couple  $h \in \ell^2(\mu^\sharp\delta\nu)$ ,  $g \in \ell^2(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)$  pour lequel cela fait sens, on a

$$\langle (-D_v^\sharp + v^\sharp)h, g \rangle = \langle h, D_v g \rangle_\sharp, \quad \text{et} \quad \langle (-D_v^\sharp + v^\sharp)D_v g, g \rangle = \|D_v g\|_{\ell^2(\mu^\sharp\delta\nu)}^2. \quad (5.47)$$

2. Pour tout  $f^0 \in D(P^\delta)$ , il existe une unique solution de (5.46) dans  $\mathcal{C}^1(\mathbb{R}^+, \ell^2(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)) \cap \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, D(P^\delta))$ , et le semi-groupe associé permet de définir naturellement une solution unique dans  $\mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, \ell^2(\mu^{\delta\nu}\delta\nu))$  lorsque  $f^0 \in \ell^2(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)$ .
3. Les propriétés précédentes sont encore vraies lorsque l'on considère l'opérateur  $P^\delta$  à valeurs dans  $\mathbf{h}^1(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)$ , avec domaine  $D_{\mathbf{h}^1(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)}(P^\delta)$ . En particulier, cela permet de définir une unique solution de l'équation (5.46) dans  $\mathcal{C}^1(\mathbb{R}^+, \mathbf{h}^1(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)) \cap \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, D_{\mathbf{h}^1(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)}(P^\delta))$  lorsque  $f_0 \in D_{\mathbf{h}^1(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)}(P^\delta)$  et une solution à l'aide du semi-groupe  $f \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, \mathbf{h}^1(\mu^{\delta\nu}\delta\nu))$  lorsque  $f^0 \in \mathbf{h}^1(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)$ .
4. Les suites constantes sont les seuls équilibres de l'équation (5.46) et le semi-groupe préserve la masse : on a pour tout  $t \geq 0$ ,  $\langle f(t) \rangle = \langle f^0 \rangle$ .

Les choix de discrétisation précédents permettent aussi de montrer l'inégalité de Poincaré discrète en vitesse suivante

**Proposition 5.5.10 (Inégalité de Poincaré homogène discrète)** *Pour tout  $g \in \mathbf{h}^1(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)$ , on a*

$$\|g - \langle g \rangle\|_{\ell^2(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)}^2 \leq \|D_v g\|_{\ell^2(\mu^\sharp\delta\nu)}^2.$$

Avec ces outils, on peut montrer l'analogie du résultat de convergence exponentielle vers l'équilibre des solutions dans le cas continu en vitesse (Théorème 5.5.1) pour les solutions de l'équation discrétisée (5.46). Introduisons les deux entropies

$$\mathcal{F}^\delta(g) = \|g\|_{\ell^2(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)}^2, \quad \mathcal{G}^\delta(g) = \|g\|_{\ell^2(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)}^2 + \|D_v g\|_{\ell^2(\mu^\sharp\delta\nu)}^2, \quad (5.48)$$

définies respectivement pour  $g \in \ell^2(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)$  et  $g \in \mathbf{h}^1(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)$ .

**Théorème 5.5.11** *Soit  $f^0 \in \ell^2(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)$  telle que  $\langle f^0 \rangle = 0$ . La solution  $f$  de l'équation de Fokker-Planck linéaire, homogène, remise à l'échelle (5.46) dans  $\mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, \ell^2(\mu^{\delta\nu}\delta\nu))$  avec donnée initiale  $f^0$  vérifie pour tout  $t \geq 0$ ,*

$$\mathcal{F}^\delta(f(t)) \leq e^{-2t} \mathcal{F}^\delta(f^0).$$

*Si de plus  $f^0 \in \mathbf{h}^1(\mu^{\delta\nu}\delta\nu)$ , alors  $f \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, \mathbf{h}^1(\mu^{\delta\nu}\delta\nu))$  vérifie de plus pour tout  $t \geq 0$*

$$\mathcal{G}^\delta(f(t)) \leq e^{-t} \mathcal{G}^\delta(f^0).$$

Ceci, bien sûr, conduit à des estimations de convergence exponentielle pour les solutions de l'équation originale discrétisée (5.45), dans des sous-espaces de Hilbert

adaptés de  $\ell^1(\mathbb{Z}, \delta v)$ . Le comportement typiquement coercif du problème continu est ainsi transmis du problème continu en vitesse au problème discrétisé en vitesse. On peut également envisager des discrétisations en temps du problème discrétisé en vitesse (5.41) pour lesquelles les solutions discrétisées en temps convergent également exponentiellement rapidement vers l'équilibre (par exemple par la méthode d'Euler implicite, comme il est détaillé dans [DHL18]). De manière plus importante, on peut étendre ces discrétisations au cas inhomogène de l'équation (5.39), de sorte que le comportement hypocoercif des solutions du problème continu se transmet du problème discrétisé. C'est l'objet de la section suivante.

### 5.5.3 Discrétisations de l'équation de Fokker–Planck inhomogène en domaine non-borné en vitesse

On s'intéresse dans cette section à des discrétisations de l'équation de Fokker–Planck inhomogène (5.39). En particulier, on montre comment il est possible, dans le cas inhomogène, de discrétiser l'équation en vitesse, en espace, et même éventuellement en temps de manière à ce que les solutions discrétisées héritent des propriétés des solutions continues. Concrètement, on rend ainsi possible l'utilisation des techniques d'hypocoercivité, bien connues dans le cas continu, aux niveaux discrets, et l'on montre que les solutions discrétisées convergent exponentiellement vite en temps vers un état d'équilibre discret. On commence par rappeler les résultats et les idées principales dans le cas continu en vitesse, en espace et en temps. Puis on introduit la discrétisation en vitesse et en espace, avant conclure par un résultat dans le cas totalement discrétisé (en temps, en vitesse et en espace).

Le cas continu en vitesse, en espace et en temps

On considère l'équation inhomogène continue (5.39). Celle-ci possède pour seuls états d'équilibre les fonctions  $(x, v) \mapsto ce^{-v^2/2}$  où  $c \in \mathbb{R}$ . On note  $\mu$  la fonction  $(x, v) \mapsto e^{-v^2/2}/\sqrt{2\pi}$ , *i.e.* la Maxwellienne continue de masse 1. Supposant la masse de  $F^0$  égale à 1, on introduit le changement d'inconnue  $f = (F - \mu)/\mu$ . On travaille alors dans le sous-espace hilbertien  $\mu L^2(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)$  de  $L^1(dv dx)$  pour  $F$  (qui correspond à  $L^2(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)$  pour  $f$ ). Dans ces espaces,  $F$  est solution de (5.39) si et seulement si  $f$  est solution de l'équation de Fokker–Planck inhomogène remise à l'échelle

$$\partial_t f + v \partial_x f + (-\partial_v + v) \partial_v f = 0, \quad f|_{t=0} = f^0, \quad (5.49)$$

où  $f^0 = (F^0 - \mu)/\mu$ . L'opérateur  $P = v \partial_x + (-\partial_v + v) \partial_v$  associé à cette équation est non-négatif dans  $L^2(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)$ . Il est de plus maximal accréatif dans  $L^2(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)$  comme dans  $H^1(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)$ . Comme dans le cas homogène, le théorème de Hille–Yosida assure que pour toute donnée initiale  $f^0 \in D(P)$  (respectivement  $D_{H^1(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)}(P)$ ), il existe une unique solution à (5.49) dans  $\mathcal{C}^1(\mathbb{R}^+, L^2(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)) \cap \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, D(P))$  (resp.  $\mathcal{C}^1(\mathbb{R}^+, H^1(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)) \cap \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, D_{H^1(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)}(P))$ ). Comme précédemment dans le cas homogène, le semi-groupe permet de définir une unique solution de (5.49) dans  $\mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, L^2(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx))$  (respectivement  $\mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, H^1(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx))$ ).

lorsque  $f^0 \in L^2(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)$  (resp.  $H^1(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)$ ). Afin de démontrer la convergence exponentielle vers l'équilibre, on introduit l'entropie définie pour  $g \in H^1(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)$  et  $C > D > E > 1$  à choisir plus tard par

$$\mathcal{H}(g) = C \|g\|^2 + D \|\partial_v g\|^2 + E \langle \partial_v g, \partial_x g \rangle + \|\partial_x g\|^2. \quad (5.50)$$

Lorsque de plus  $E^2 < D$ , cette entropie est (le carré d') une norme sur  $H^1(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)$ , équivalente à la norme  $H^1$ . La stratégie hypocoercive consiste à dériver la fonction  $t \mapsto \mathcal{H}(f(t))$  le long d'une solution  $f \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^+, H^1(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx))$  de moyenne nulle, à contrôler le terme de dissipation d'entropie qui apparaît dans la dérivation pour montrer que, pour un bon choix de constantes  $C > D > E > 1$ , on peut appliquer un lemme de Gronwall au problème pour conclure que  $t \mapsto \mathcal{H}(f(t))$  décroît exponentiellement vite vers 0. On en déduit le résultat pour tout  $f^0 \in H^1(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)$  par densité. C'est l'idée de la preuve du théorème suivant.

**Théorème 5.5.12** *Supposons que  $C > D > E > 1$  sont tels que  $E^2 < D$  et  $(2D + E)^2 < 2C$ . Soit  $f^0 \in H^1(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)$  tel que  $\langle f^0 \rangle = 0$  et notons  $f$  la solution correspondante dans  $\mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, H^1(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx))$  de l'équation (5.49). Posons  $\kappa = \frac{E}{16C}$ . On a pour tout  $t \geq 0$ ,*

$$\mathcal{H}(f(t)) \leq \mathcal{H}(f^0) e^{-2\kappa t}. \quad (5.51)$$

Outre le fait que l'adjoint de  $\partial_v$  est  $(-\partial_v + v)$ , la preuve de ce résultat utilise fortement, lorsque l'on écrit le terme de dissipation d'entropie, les relations de commutation continues

$$[\partial_v, X_0] = \partial_x, \quad [\partial_x, X_0] = 0, \quad \text{et} \quad [\partial_v, (-\partial_v + v)] = 1, \quad (5.52)$$

où l'on a posé  $X_0 = v\partial_x$ . Celles-ci ne seront plus vérifiées exactement dans le problème discrétisé à venir. Indiquons le corollaire immédiat du théorème 5.5.12, conséquence de l'équivalence entre la norme  $\sqrt{\mathcal{H}}$  et la norme  $\|\cdot\|_{H^1(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)}$ .

**Corollaire 5.5.13** *Soient  $C > D > E > 1$  choisis comme dans le Théorème 5.5.12. Posons  $\kappa = E/(16C)$ . Soit  $f^0 \in H^1(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)$  telle que  $\langle f^0 \rangle = 0$ . Notons  $f$  la solution correspondante dans  $\mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, H^1(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx))$  de l'équation (5.49). On a pour tout  $t \geq 0$ ,*

$$\|f(t)\|_{H^1(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)} \leq 2\sqrt{C} e^{-\kappa t} \|f^0\|_{H^1(\mathbb{T} \times \mathbb{R}, \mu dv dx)}. \quad (5.53)$$

#### Le cas discrétisé en espace et en vitesse

On propose la discrétisation suivante des opérateurs  $\partial_v$  sur  $\mathbb{R}$  et  $\partial_x$  sur  $\mathbb{T}$ . On se donne à nouveau  $\delta v > 0$  et l'on considère les vitesses discrètes  $v_i = i\delta v$  pour  $i \in \mathbb{Z}$ . On se donne un entier impair  $N$  et l'on pose  $\delta x = 2\pi/N$ ,  $x_j = j\delta x$  pour  $j \in \{0, \dots, N-1\}$ , et l'on périodise cette suite de sorte qu'elle admet pour ensemble d'indices  $\mathcal{J} = \mathbb{Z}/(N\mathbb{Z})$ . On généralise l'opérateur de dérivation discrète en vitesse introduit dans le contexte homogène de la Définition 5.5.2.



**Définition 5.5.14** Pour tout  $G \in \ell^1(\mathcal{J} \times \mathbb{Z}, \delta v)$ , on définit  $D_v G \in \ell^1(\mathcal{J} \times \mathbb{Z}^*, \delta v)$  par les formules

$$(D_v G)_{i,j} = \frac{G_{i+1,j} - G_{i,j}}{\delta v} \text{ pour } i < 0, j \in \mathcal{J},$$

et

$$(D_v G)_{i,j} = \frac{G_{i,j} - G_{i-1,j}}{\delta v} \text{ pour } i > 0, j \in \mathcal{J}.$$

On généralise de même au contexte inhomogène l'opérateur  $v^\sharp$  de multiplication discrète par  $v$ , et l'opérateur  $D_v^\sharp$ , la Maxwellienne discrète  $\mu^{\delta v}$  et sa version translaturée  $\mu^\sharp$  en faisant jouer à  $j \in \mathcal{J}$  le rôle d'un paramètre. On discrétise l'opérateur de dérivation spatiale par l'opérateur de différences finies centrées suivant.

**Définition 5.5.15** Pour tout  $G \in \ell^1(\mathcal{J} \times \mathbb{Z}, \delta v)$  (ou  $G \in \ell^1(\mathcal{J} \times \mathbb{Z}^*, \delta v)$ ), on pose pour tout  $(i, j)$ ,

$$(D_x G)_{j,i} = \frac{G_{j+1,i} - G_{j-1,i}}{2\delta x}.$$

On considère la version discrétisée suivante de l'équation de Fokker-Planck inhomogène (5.39) :

$$\partial_t F + v D_x F - D_v^\sharp (D_v + v) F = 0, \quad F|_{t=0} = F^0, \quad (5.54)$$

où  $F^0 \in (\mathbb{R}^+)^{\mathcal{J} \times \mathbb{Z}}$  est donnée, de masse  $\|F^0\|_{\ell^1(\mathcal{J} \times \mathbb{Z})} = \delta x \delta v \sum_{j,i} |F_{j,i}^0| = 1$ . Le changement d'inconnue  $F = \mu^{\delta v} + \mu^{\delta v} f$  conduit, comme dans le cas homogène précédent, à l'équation remise à l'échelle

$$\partial_t f + v D_x f + (-D_v^\sharp + v^\sharp) D_v f = 0, \quad (5.55)$$

avec la donnée initiale correspondante. Comme dans le cas homogène, on va travailler avec des solutions à valeurs dans un sous-espace hilbertien de  $\ell^1(\mathcal{J} \times \mathbb{Z})$ , dans lequel l'opérateur d'évolution de l'équation remise à l'échelle (5.55) a de bonnes propriétés (voir la Proposition 5.5.17).

**Définition 5.5.16** On note  $\ell^2(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)$  le sous-espace de  $\mathbb{R}^{\mathcal{J} \times \mathbb{Z}}$  formé des suites réelles  $f$  telles que

$$\|f\|_{\ell^2(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{j \in \mathcal{J}, i \in \mathbb{Z}} (f_{j,i})^2 \mu_i^{\delta v} \delta v \delta x < \infty.$$

On définit ainsi une norme hilbertienne sur  $\ell^2(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)$ , et l'on note  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  le produit scalaire correspondant. Pour  $f \in \ell^2(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)$ , on définit sa moyenne en posant

$$\langle f \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{j \in \mathcal{J}, i \in \mathbb{Z}} f_{j,i} \mu_i^{\delta v} \delta v \delta x = \langle f, 1 \rangle.$$

De même, on note  $\ell^2(\mu^\sharp \delta v \delta x)$  le sous-espace de  $\mathbb{R}^{\mathcal{J} \times \mathbb{Z}^*}$  formé des suites réelles  $g$  telles

que

$$\|g\|_{\ell^2(\mu^\sharp \delta v \delta x)}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{j \in \mathcal{J}, i \in \mathbb{Z}^*} (g_{j,i})^2 \mu_i^\sharp \delta v \delta x < \infty.$$

On définit ainsi une norme hilbertienne, et l'on note le produit scalaire correspondant par  $\langle \cdot, \cdot \rangle_\sharp$ . Enfin, on définit

$$\mathbf{h}^1(\mu^{\delta v} \delta v \delta x) = \left\{ f \in \ell^2(\mu^{\delta v} \delta v \delta x), \text{ t.q. } D_v f \in \ell^2(\mu^\sharp \delta v \delta x), D_x f \in \ell^2(\mu^{\delta v} \delta v \delta x) \right\},$$

muni de la norme

$$\|f\|_{\mathbf{h}^1(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)}^2 = \|f\|_{\ell^2(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)}^2 + \|D_v f\|_{\ell^2(\mu^\sharp \delta v \delta x)}^2 + \|D_x f\|_{\ell^2(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)}^2.$$

On peut alors établir quelques bonnes propriétés de l'opérateur d'évolution discrétisé  $P^\delta = X_0^\delta + (-D_v^\sharp + v^\sharp)D_v$  de l'équation de Fokker–Planck remise à l'échelle (5.55) :

**Proposition 5.5.17** *On a*

1. L'opérateur  $P^\delta$ , de domaine  $D(P^\delta)$  sur  $\ell^2(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)$ , est maximal accréatif dans  $\ell^2(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)$ .
2. L'opérateur  $(-D_v^\sharp + v^\sharp)D_v$  est formellement auto-adjoint et l'opérateur  $X_0^\delta$  est formellement anti-auto-adjoint dans  $\ell^2(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)$ . De plus, pour tous  $g \in \ell^2(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)$  et  $h \in \ell^2(\mu^\sharp \delta v \delta x)$  pour lesquels cela a un sens, on a

$$\left\langle (-D_v^\sharp + v^\sharp)h, g \right\rangle = \langle h, D_v g \rangle_\sharp, \quad (5.56)$$

$$\left\langle P^\delta g, g \right\rangle = \left\langle (-D_v^\sharp + v^\sharp)D_v g, g \right\rangle = \|D_v g\|_\sharp^2. \quad (5.57)$$

3. Pour toute donnée initiale  $f^0 \in D(P^\delta)$ , il existe une unique solution de (5.55) dans  $\mathcal{C}^1(\mathbb{R}^+, \ell^2(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)) \cap \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, D(P^\delta))$ . Le semi-groupe associé définit naturellement une solution unique de (5.55) dans  $\mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, \ell^2(\mu^{\delta v} \delta v \delta x))$  lorsque  $f^0 \in \ell^2(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)$ .
4. Les propriétés précédentes restent vraies lorsque l'on considère l'opérateur  $P^\delta$  dans  $\mathbf{h}^1(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)$ , avec domaine  $D_{\mathbf{h}^1(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)}(P^\delta)$ . En particulier, on définit une unique solution de (5.55) dans  $\mathcal{C}^1(\mathbb{R}^+, \mathbf{h}^1(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)) \cap \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, D_{\mathbf{h}^1(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)}(P^\delta))$  lorsque  $f_0 \in D_{\mathbf{h}^1(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)}(P^\delta)$ , et une solution (unique)  $f \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^+, \mathbf{h}^1(\mu^{\delta v} \delta v \delta x))$  au sens du semi-groupe lorsque  $f^0 \in \mathbf{h}^1(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)$ .
5. Les suites constantes sont les seuls états d'équilibre de l'équation (5.55) et l'évolution de cette équation préserve la masse : pour tout  $t \geq 0$ ,  $\langle f(t) \rangle = \langle f^0 \rangle$ .

On introduit désormais l'entropie discrétisée définie pour  $g \in \mathbf{h}^1(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)$  par

$$\mathcal{H}^\delta(g) = C \|g\|^2 + D \|D_v g\|_\sharp^2 + E \langle D_v g, S D_x g \rangle_\sharp + \|D_x g\|^2, \quad (5.58)$$

pour  $C > D > E > 1$  à préciser. Comme dans le cas continu en  $(x, v)$ , nous allons montrer que, pour un bon choix de constantes  $C > D > E > 1$ , cette entropie  $t \mapsto \mathcal{H}^\delta(f(t))$  décroît exponentiellement le long des solutions de l'équation de Fokker–Planck inhomogène remise à l'échelle (5.55) lorsque l'inconnue est à moyenne nulle. Pour de bonnes valeurs de  $C > D > E > 1$ , cette entropie est par ailleurs également équivalente au carré de la norme  $H^1$ . Cette démarche est la base de la preuve du Théorème 5.5.19. Par ailleurs, un outil fondamental dans le contrôle du terme de dissipation d'entropie dans cette preuve est l'inégalité de Poincaré discrète inhomogène suivante.

**Lemme 5.5.18 (Inégalité de Poincaré discrète inhomogène)** *Pour tous  $\delta x, \delta v > 0$  comme précédemment, et tout  $g \in \mathbf{h}^1(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)$ , on a*

$$\|g - \langle g \rangle\|_{\ell^2(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)}^2 \leq \|D_v g\|_{\ell^2(\mu^\sharp \delta v \delta x)}^2 + \|D_x g\|_{\ell^2(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)}^2.$$

L'inégalité de Poincaré ci-dessus est l'un des ingrédients fondamentaux du théorème suivant. L'étude attentive de l'équivalent des relations de commutation (5.52) est également d'une importance cruciale.

**Théorème 5.5.19** *Il existe des constantes positives explicites  $C > D > E > 1$ ,  $\delta v_0 > 0$  et  $\kappa_d > 0$  telles que pour toute donnée initiale  $f^0 \in \mathbf{h}^1(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)$  de moyenne nulle ( $\langle f^0 \rangle = 0$ ), la solution  $f \in C^0(\mathbb{R}^+, \mathbf{h}^1(\mu^{\delta v} \delta v \delta x))$  de l'équation (5.55) correspondant à  $f^0$  satisfait*

$$\forall t \geq 0, \quad \forall \delta v \in (0, \delta v_0), \quad \forall \delta x > 0, \quad \mathcal{H}^\delta(f(t)) \leq \mathcal{H}^\delta(f^0) e^{-2\kappa_d t}. \quad (5.59)$$

Le cas discrétisé en temps, en espace et en vitesse

On considère maintenant la discrétisation temporelle de l'équation discrétisée en vitesse et en espace (5.55) par la méthode d'Euler implicite. On se donne  $\delta t > 0$  et une donnée initiale  $f^0 \in \ell^1(\mathcal{J} \times \mathbb{Z}, \mu^{\delta v} \delta v \delta x)$ , et l'on considère la suite de fonctions  $f = (f^n)_{n \in \mathbb{N}} \in (\ell^1(\mathcal{J} \times \mathbb{Z}, \mu^{\delta v} \delta v \delta x))^{\mathbb{N}}$  définie par le schéma

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad f^{n+1} = f^n - \delta t (v D_x f^{n+1} + (-D_v^\sharp + v^\sharp) D_v f^{n+1}). \quad (5.60)$$

Le principal résultat que l'on montre concernant le retour à l'équilibre des solutions de l'équation totalement discrétisée (5.60) est le théorème suivant, dont la preuve repose sur une adaptation attentive au contexte discrétisé en temps de l'analyse menée pour démontrer le théorème 5.5.19.

**Théorème 5.5.20** *Choisissons  $C > D > E > 1$ ,  $\delta v_0 > 0$  et  $\kappa_d$  comme dans le Théorème 5.5.19. Pour tous  $f^0 \in \mathbf{h}^1(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)$ ,  $\delta t > 0$ ,  $\delta v \in (0, \delta v_0)$ , et  $\delta x > 0$ , le schéma (5.60) avec  $f^0$  pour donnée initiale est bien posé dans  $\mathbf{h}^1(\mu^{\delta v} \delta v \delta x)$ . De plus, il préserve la masse totale. Si l'on suppose que  $\langle f^0 \rangle = 0$  alors la suite  $(f^n)_{n \in \mathbb{N}}$  définie par le schéma (5.60) avec  $f^0$  pour donnée initiale vérifie pour tout  $n \geq 0$ ,*

$$\mathcal{H}^\delta(f^n) \leq (1 + 2\kappa_d \delta t)^{-n} \mathcal{H}^\delta(f^0).$$

#### 5.5.4 Expériences numériques

On présente dans cette section des résultats numériques obtenus en dimension 1 d’espace, avec un domaine de vitesse borné, qui est une adaptation du cas non-borné décrit précédemment dans le manuscrit.

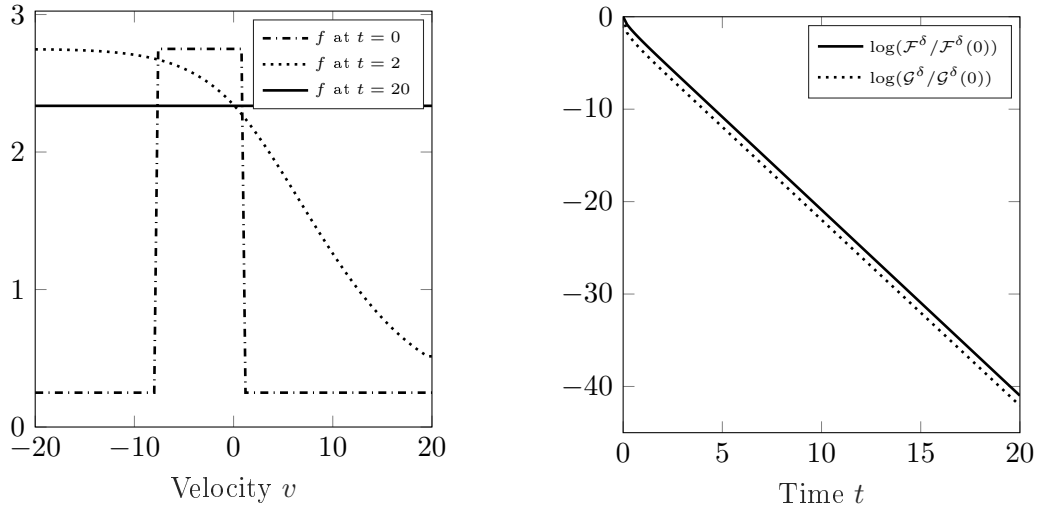
Dans le cas homogène de l’équation (5.41), on montre en figure 5.4 le bon comportement des méthodes que nous avons introduites et analysées pour le cas d’une donnée initiale en escalier en vitesse. En particulier, on constate la convergence exponentielle vers 0 des entropies définies en (5.48). On illustre ainsi numériquement le théorème 5.5.11, dans un cadre borné en vitesses. On constate également que le taux de convergence est numériquement optimal pour  $\mathcal{F}^\delta$ , et est correct mais sous-optimal (sur cet exemple) pour  $\mathcal{G}^\delta$ .

Dans le cas inhomogène de l’équation (5.55), on montre en figure 5.5 le bon comportement des méthodes que nous avons introduites et analysées pour le cas d’une donnée initiale aléatoire. On vérifie numériquement dans ce cas la validité du théorème 5.5.20 dans un contexte borné en vitesses.

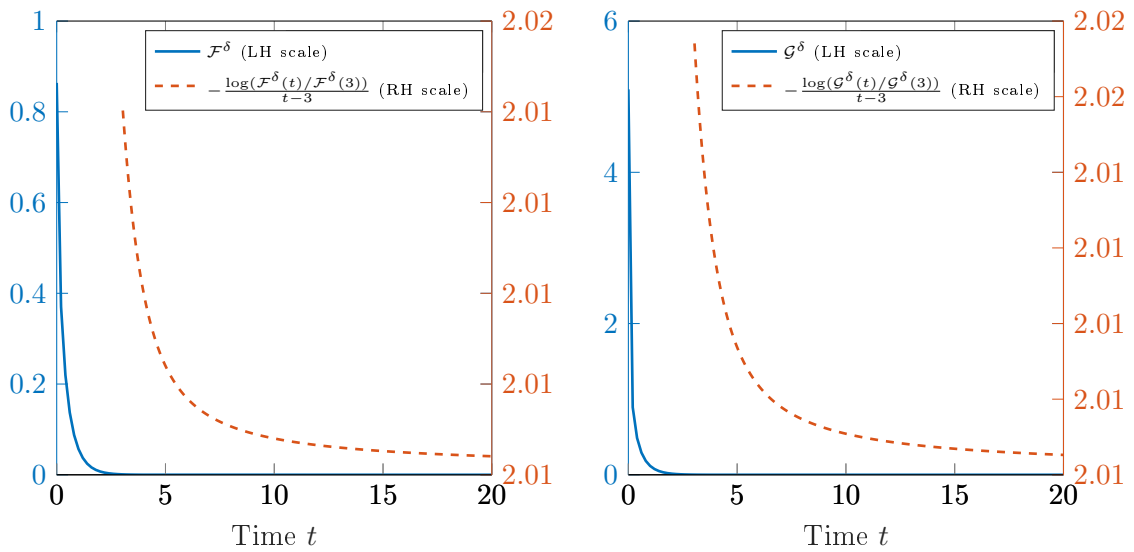
#### 5.5.5 Conclusions et perspectives

Il existe de nombreux travaux concernant l’équation de Fokker–Planck homogène totalement discrétisée (voir par exemple [CC70], ou [BCF12] pour une méthode volumes finis permettant de traiter également des problèmes paraboliques dégénérés *non-linéaires*). On trouve aussi des résultats intéressants pour les systèmes de convection-diffusion forcés à la frontière, discrétisés par des méthodes de volumes finis dans [FH17]. On sait par ailleurs que des discrétisations inappropriées peuvent conduire à un comportement qualitatif asymptotique en temps incorrect [PT17]. De même, il existe une littérature abondante concernant le retour à l’équilibre des solutions continues de l’équation de Fokker–Planck inhomogène (voir par exemple [Vil09]). Pour la première fois, nous avons appliqué des techniques hypocoercives en temps long à des équations de Fokker–Planck discrétisées, et démontré qu’il est possible, pour de bons choix de discrétisation, de construire des méthodes reproduisant en temps long le comportement qualitatif des solutions de l’équation de Fokker–Planck *inhomogène*.

Ce travail ouvre la voie au traitement de nombreuses questions connexes. On peut par exemple s’intéresser à des discrétisations conduisant au bon comportement qualitatif numérique vis-à-vis d’autres entropies (typiquement  $L^1 \log L^1$ ). On peut également considérer la question du développement de telles discrétisations pour des équations cinétiques avec des noyaux de collision non-linéaires (et envisager des équations de type Boltzmann, par exemple).

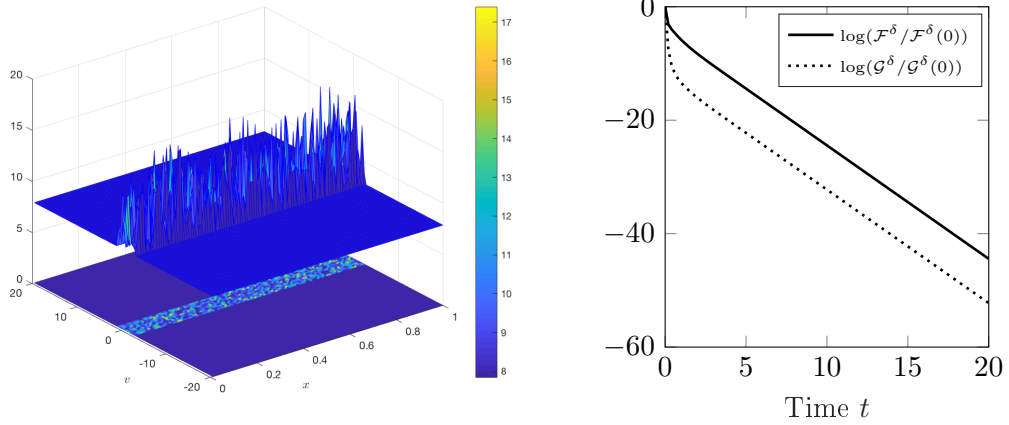


(a) Évolution de  $f$  dans le cas homogène (5.41) à 3 instants différents; le domaine des vitesses est  $(-20, 20)$  et les paramètres de discrétisation sont  $\delta v = 0.4$  et  $\delta t = 0.01$ . (b) Entropies normalisées  $\mathcal{F}^\delta$  et  $\mathcal{G}^\delta$  en échelle logarithmique (voir (5.48)).



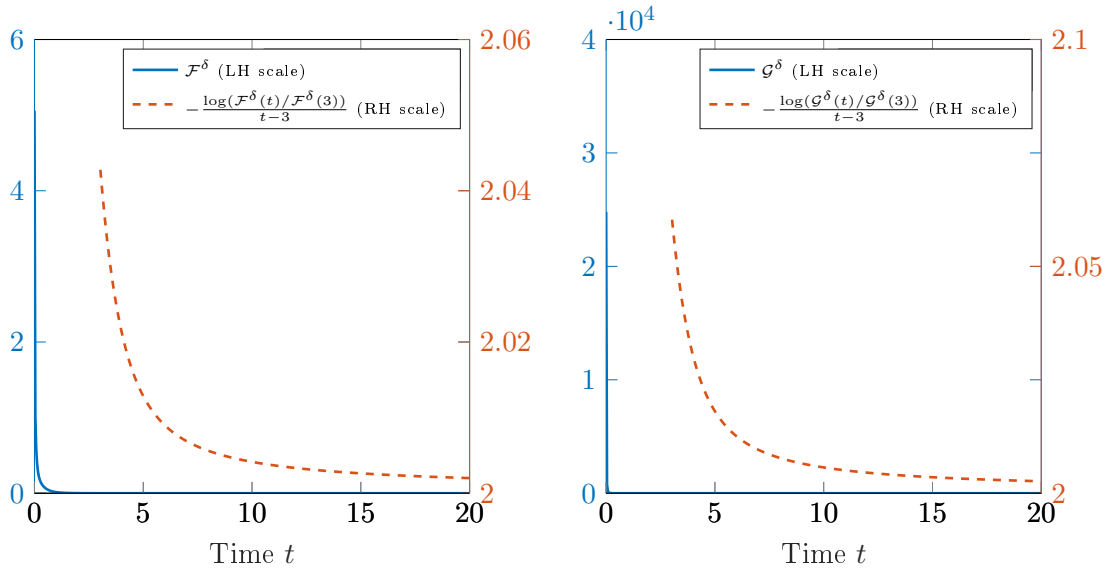
(c) Évolution des entropies  $\mathcal{F}^\delta$  (à gauche), et  $\mathcal{G}^\delta$  (à droite) définies en (5.48). L'échelle linéaire de gauche (en bleu) montre une décroissance exponentielle, précisée par l'échelle logarithmique de droite (en rouge).

FIGURE 5.4 – Simulation numérique de l'équation de Fokker-Planck homogène (5.41) avec donnée initiale en escalier.



(a) Donnée initiale  $f^0$ ; le domaine des vitesses est  $(-20, 20)$ , et celui en espace est  $(0, 1)$ ; les paramètres de discrétisation sont  $\delta v = 0.4$ ,  $\delta x = 0.01$  et  $\delta t = 0.0005$ .

(b) Entropies  $\mathcal{F}^\delta$  (trait plein) et  $\mathcal{G}^\delta$  (pointillés) en échelle logarithmique.



(c) Évolution des entropies  $\mathcal{F}^\delta$  (carré de la norme 2, à gauche), et  $\mathcal{G}^\delta$  (carré de la norme  $H^1$  en  $(x, v)$ , à droite). L'échelle linéaire de gauche (en bleu) montre une décroissance exponentielle, précisée par l'échelle logarithmique de droite (en rouge).

FIGURE 5.5 – Simulation numérique de l'équation de Fokker–Planck inhomogène (5.55) par le schéma (5.60) avec une donnée initiale aléatoire.



# Modélisation des quantum dots en 2D : au-delà du régime de réponse linéaire

---

## A.1 Introduction

On présente dans cette annexe les résultats publiés dans [GHJ<sup>+</sup>14]. Un quantum dot est un couple d'électrons en interaction Coulombienne dans un potentiel très confinant. On s'intéresse ici à la réponse à une forte et courte excitation par un champ magnétique appliqué à ce couple d'électrons, en dépassant le régime de la réponse linéaire. On compare numériquement le comportement de différents modèles : d'une part, on intègre numériquement la totalité de la dynamique, en dimension grande (modèle "configuration interaction", CI). D'autre part, on considère trois modèles à champ moyen (un modèle issu de la théorie de fonctionnelle de densité (DFT), puis une approximation d'Hartree (HA) et enfin un modèle de Schrödinger–Poisson non-linéaire (NLSP)) ainsi qu'un modèle de Hubbard. On caractérise dans ces modèles la réponse du quantum dot par le comportement en temps de la quantité "étalement moyen"  $\sqrt{\langle r^2 \rangle}$  en fonction de la taille de l'excitation magnétique initiale  $V_t$ . On discute finalement des résultats obtenus et l'on compare les approches. Ma contribution principale à ce travail a été l'intégration numérique du système de Schrödinger–Poisson non-linéaire dans ce contexte. C'est pourquoi, après avoir présenté la forme du pulse initial auquel on soumet le quantum dot, je ne décris que le modèle de Schrödinger–Poisson dans cette annexe, avant de passer aux principales conclusions de notre travail. Tous les détails concernant les autres modèles et les références nécessaires sont présentés dans [GHJ<sup>+</sup>14].

## A.2 Description du pulse initial

Dès l'instant  $t = 0$ , on soumet le quantum dot à un pulse magnétique térahertz de la forme

$$W(t, r) = V_t e^{-sr^2 - \Gamma t} \sin(\omega_1 t) \sin(\omega t) \theta(\pi - \omega_1 t),$$

où  $\theta$  est la fonction de Heaviside valant 1 sur  $\mathbb{R}^+$  et nulle sur  $\mathbb{R}^- \setminus \{0\}$ . Le quantum dot est placé dans un potentiel parabolique confinant de la forme

$$V_{\text{par}}(r) = \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 r^2,$$



avec  $\hbar\omega_0 = 3.37$  meV. À ce potentiel, on ajoute un potentiel localisé de la forme

$$V_c(r) = V_0 e^{-\gamma r^2},$$

où  $V_0 = 3.0$  meV,  $a = \sqrt{\hbar/(m^*\omega_0)}$ ,  $a^2\gamma = 1.0$ . On se place dans le cas où  $m^* = 0.067m_e$  (GaAs, avec une constante diélectrique  $\kappa = 12.4$ ). On choisit  $sa^2 = 0.8$ ,  $\hbar\omega_1 = 0.658$  meV,  $\hbar\omega = 2.63$  meV et  $\Gamma = 2$  ps<sup>-1</sup>. Ainsi, le pulse initial  $W$  dure environ 3 ps : initialement nul, il retourne à zéro en 3 ps et demeure nul pour le reste du temps. En espace, il est de forme Gaussienne. Il est d’abord positif, puis il change de signe avant 3 ps. Ainsi, le quantum dot est soumis initialement à une compression radiale suivie d’une courte expansion radiale, et l’on mesure son comportement (pendant et) après excitation par intégration numérique de chacun des modèles considérés afin de les comparer.

### A.3 Modélisation du quantum dot par un système de Schrödinger–Poisson non-linéaire

La modélisation d’un quantum dot plan par un système de Schrödinger–Poisson non-linéaire est introduite, par exemple, dans [RG12]. On présente dans cette section comment on a adimensionné l’équation et calculé l’étalement moyen du quantum dot par ce modèle, avant de présenter les résultats numériques. Une discussion des résultats obtenus comparés à ceux produits par les autres modèles envisagés est présentée en Section A.4.

Dans le plan complexe, on dénote par  $z_1 = x_1 + iy_1$  et  $z_2 = x_2 + iy_2$  les variables respectivement dédiées à chaque électron. La fonction d’onde associée au système “quantum dot” est alors, pour des raisons de symétrie, de la forme

$$\Psi_{\text{pair}}(t, z_1, z_2) = \psi(t, z_1)\psi(t, z_2).$$

La condition de normalisation associée est alors

$$\int_{\mathbb{R}^2} \int_{\mathbb{R}^2} |\Psi_{\text{pair}}(t, z_1, z_2)|^2 dz_2 dz_1 = \left( \int_{\mathbb{R}^2} |\psi(t, z)|^2 dz \right)^2 = 1. \quad (\text{A.1})$$

Le comportement temporel du quantum dot est alors décrit par le système de Schrödinger–Poisson non-linéaire

$$\begin{cases} i\hbar\partial_t\psi(t, z) & = H\psi(t, z) \\ \Delta\Phi(t, z) & = -2\pi\mathcal{N}\hbar\omega|\psi^2|(t, z), \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

où le paramètre sans dimension  $\mathcal{N}$  mesure la taille de la répulsion entre les électrons, et l’Hamiltonien  $H$  est défini par

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta + \Phi + \frac{1}{2}m^*\omega_0^2(x^2 + y^2).$$

À l'aide du paramètre de confinement parabolique  $a$  et de sa pulsation  $\omega_0$ , on effectue le changement de variables

$$X = \frac{x}{a}, \quad Y = \frac{y}{a}, \quad \tau = \omega_0 t, \quad \text{et} \quad \psi(t, x, y) = \sqrt{\frac{2m^*\omega_0}{\mathcal{N}\hbar}} u(\tau, X, Y).$$

Ainsi, le système (A.2) devient

$$\begin{cases} i\hbar\partial_\tau u + \Delta u - Vu & = 0 \\ \Delta V - 1 + |u|^2 & = 0 \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

Le lien entre le potentiel  $\Phi + V_{\text{par}}$  et le potentiel effectif à champ moyen  $V$  est donné par la relation

$$V = \frac{V_{\text{par}} + \Phi}{\hbar\omega_0} = \frac{1}{4}(X^2 + Y^2) + \frac{\Phi}{\hbar\omega_0},$$

et la condition de normalisation (A.1) devient

$$\int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} |u(\tau, X, Y)|^2 dY dX = \mathcal{N}.$$

Afin de mesurer l'étalement du système, on introduit l'affixe moyenne  $\hat{z} = \frac{1}{2}(z_1 + z_2)$ , l'abscisse moyenne  $\hat{x} = \frac{1}{2}(x_1 + x_2)$  et l'ordonnée moyenne  $\hat{y} = \frac{1}{2}(y_1 + y_2)$ . Ainsi  $\hat{z}\hat{z} = \hat{x}^2 + \hat{y}^2$  et donc

$$\langle\langle \hat{z}\hat{z} \rangle\rangle = \frac{1}{2} (\langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle x \rangle^2 + \langle y \rangle^2).$$

L'étalement moyen  $\sqrt{\langle\langle \hat{z}\hat{z} \rangle\rangle}$  peut alors être calculé en considérant

$$R(\tau) = \frac{\sqrt{2}}{2} \left( \langle X^2 \rangle_{u(\tau)} + \langle Y^2 \rangle_{u(\tau)} + \langle X \rangle_{u(\tau)}^2 + \langle Y \rangle_{u(\tau)}^2 \right),$$

où pour chaque observable  $A$  on a posé

$$\langle A \rangle_{u(\tau)} = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} A |u(\tau, X, Y)|^2 dX dY.$$

Initialement, à  $t = 0$ , on considère un quantum dot dans l'état fondamental du système non-perturbé, que l'on calcule numériquement. On calcule ensuite numériquement également les solutions de (A.2), puis les valeurs de  $\tau \mapsto R(\tau)^2$  obtenues pour différentes valeurs de  $V_t$ , et l'on représente enfin la transformée de Fourier temporelle de ce signal pour différentes valeurs de  $V_t$  (voir Figure A.1) de 0 à 200 meV. En interprétant le spectre de Fourier, on fait les remarques suivantes : le pic central (attendu dans le cadre de la réponse linéaire) se désintègre vers  $V_t = 40$  meV et des plusieurs pics de moindre intensité apparaissent vers  $V_t = 60$  meV dans le modèle avec pic central dans le potentiel ( $V_c \neq 0$ , partie droite de la Figure A.1) ; dans le modèle sans pic central dans le potentiel ( $V_c \equiv 0$ , partie gauche de la Figure A.1), la

désintégration du pic central apparaît plus tôt et il y a sensiblement moins de pics ensuite.

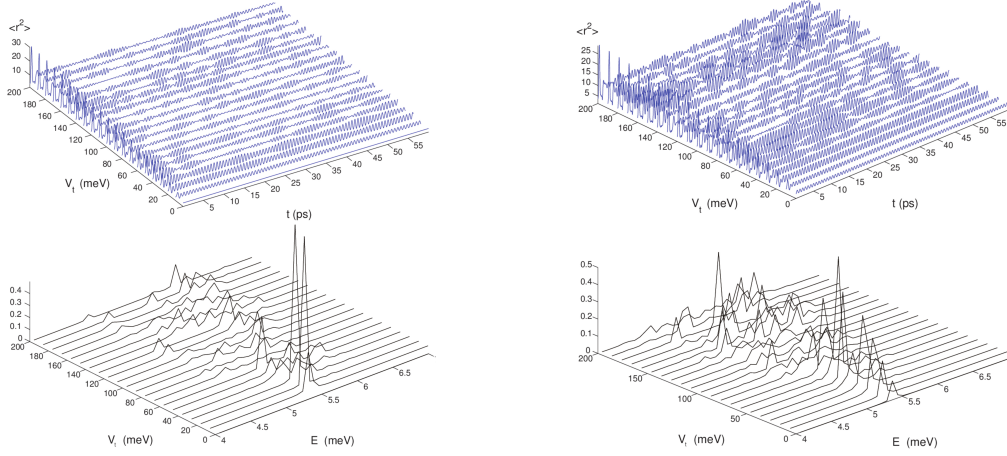


FIGURE A.1 – Évolution temporelle (en haut) et spectre de Fourier (en bas) de la valeur moyenne de  $R^2$  pour le modèle de Schrödinger–Poisson non-linéaire pour différentes valeurs de  $V_t$  de 0 à 200 meV : sans pic central dans le potentiel ( $V_0 = 0.0$  meV, à gauche), avec un pic central dans le potentiel ( $V_0 = 3.0$  meV, à droite)

#### A.4 Comparaison entre les modèles de quantum dots et conclusions

Dans le régime de la réponse linéaire (faibles valeurs de  $V_t$ ), et en l’absence de pic central dans le potentiel ( $V_0 = 0.0$  meV), tous les modèles envisagés présentent des oscillations de l’étalement similaires. En particulier, on constate la présence d’un seul pic, d’intensité proportionnelle à  $V_t$ . Cependant, le modèle de Schrödinger–Poisson présente une fréquence d’oscillations inférieure d’environ 0.5 meV, vraisemblablement due à la faiblesse de la répulsivité logarithmique dans le modèle 2D. Dans le régime de la réponse linéaire, en présence de pic central dans le potentiel, la totalité des approches à champ moyen (DFT, HA, NLSP) présente un shift qui varie pour le pic central, de quelques dixièmes de meV.

Pour des valeurs de  $V_t$  plus élevées, le quantum dot quitte le régime de réponse linéaire quel que soit le modèle considéré : l’énergie moyenne du système augmente, l’étalement moyen devient plus important, dépassant sensiblement l’étalement moyen initial, et des modes d’énergies plus élevées sont excités (dans la plupart des modèles, mais pas pour HA). Ceci est vérifié en particulier même pour le modèle purement linéaire CI. Pour les modèles CI, NLSP et de Hubbard, l’ajout d’un pic central dans le potentiel de confinement permet d’exciter sensiblement plus de modes, pour des valeurs importantes de  $V_t$ . Pour le modèle HA, en revanche, pour toutes les valeurs d’excitation  $V_t$  testées, et même avec un pic central dans le poten-

#### **A.4. Comparaison entre les modèles de quantum dots et conclusions 99**

tiel, nous avons obtenu un seul pic dans la réponse du système. Le comportement de la hauteur du pic en fonction de  $V_t$  est quand même sensiblement non-linéaire dans ce cas. Pour des valeurs importantes de  $V_t$  (au-delà de 60 meV), le modèle DFT ne produit plus de solutions stables sur un intervalle de temps suffisamment grand. Dans cette gamme de valeurs d'excitation, le modèle de Schrödinger–Poisson produit des occupations de modes élevés dès  $V_t = 60$  meV, alors que le modèle CI ne les fait apparaître que bien au-delà. La réponse à une forte excitation pour ces deux modèles en particulier est donc qualitativement comparable mais quantitativement un peu différente. La nature intrinsèquement non-linéaire du modèle à champ moyen est sans doute une des causes de cette différence, d'autant qu'une approche par champ moyen pour un système d'uniquement 2 électrons peut être critiquée.



# Comportement en temps long d'EDP linéaires sur une demi-droite ou un segment lorsque les données aux bords sont périodiques en temps

---

## B.1 Introduction

On présente dans cette annexe les résultats publiés dans [Duj09a]. On s'intéresse à deux types de problèmes d'évolution linéaires avec données aux bords en dimension 1 : ceux posés sur une demi-droite et ceux posés sur un intervalle borné. La problématique est la suivante : supposons les données aux bords périodiques en temps, que peut-on dire de la solution de ces problèmes en temps grand ? Est-elle périodique ? Est-elle équivalente à une fonction périodique ?

Sur une demi-droite, les problèmes envisagés sont de la forme

$$\begin{cases} \partial_t q + \omega(-i\partial_x)q = 0 & t > 0, \quad x > 0 \\ q(0, x) = q_0(x) & x > 0 \\ \partial_x^j q(t, 0) = f_j(t) & t > 0, \quad 0 \leq j \leq N-1, \end{cases} \quad (\text{B.1})$$

où  $\omega$  est un polynôme de degré  $n \in \mathbb{N}^*$ ,  $q_0$  est une donnée initiale régulière,  $N \in \{1, \dots, n\}$  est le nombre de conditions au bord tel que le problème est bien posé (voir [FS99]), et les  $N$  fonctions  $(f_j)_{0 \leq j \leq N-1}$  sont suffisamment régulières. On suppose que les fonctions  $f_0, \dots, f_{N-1}$  sont périodiques, de même période  $T > 0$ , et l'on se pose la question de l'existence d'un profil  $q_p$  tel que

- pour tout  $x \geq 0$ ,  $t \mapsto q_p(t, x)$  est une fonction périodique,
- pour tout  $x \geq 0$ ,  $|q(t, x) - q_p(t, x)| \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} 0$ .

L'existence d'un profil périodique pour l'équation de KdV linéarisée (correspondant à  $\omega(k) = -ik^3$ ) est démontrée dans [BF08] lorsque la donnée initiale est nulle. En Section B.2, on montre comment on peut utiliser la méthode introduite dans [Fok97] pour répondre plus généralement à cette question. Précisément, on montre comment, lorsque  $q_0 \equiv 0$ , dans le cas de l'équation de Schrödinger linéaire ( $\omega(k) = ik^2$ ), dans le cas de l'équation de la chaleur linéaire ( $\omega(k) = k^2$ ) et dans le cas de l'équation de

KdV linéarisée, on peut montrer l'existence d'un profil périodique  $q_p$  indépendant de la donnée initiale, donner une formule explicite pour ce profil en fonction des données au bord (voir la Section B.2).

Sur un segment de la forme  $[0, L]$  ( $L > 0$ ), on considère des problèmes d'évolution linéaires de la forme

$$\begin{cases} \partial_t q + \omega(-i\partial_x)q = 0 & t > 0, \quad x \in (0, L) \\ q(0, x) = q_0(x) & x \in (0, L) \\ \partial_x^j q(t, 0) = f_j(t) & t > 0, \quad 0 \leq j \leq N_1 - 1 \\ \partial_x^j q(t, L) = g_j(t) & t > 0, \quad 0 \leq j \leq N_2 - 1, \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

où  $\omega$  est un polynôme de degré  $n \in \mathbb{N}^*$ ,  $q_0$  est une donnée initiale suffisamment régulière,  $N_1, N_2 \in \{1, \dots, n\}$  sont les nombres de données au bord respectivement en  $x = 0$  et en  $x = L$  tels que le problème est bien posé (voir [FP05]), et les  $N_1 + N_2$  fonctions  $(f_j)_{0 \leq j \leq N_1 - 1}$  et  $(g_j)_{0 \leq j \leq N_2 - 1}$  are  $N_1 + N_2$  sont suffisamment régulières et compatibles avec  $q_0$ . On suppose que les fonctions  $f_0, \dots, f_{N_1 - 1}$  et  $g_0, \dots, g_{N_2 - 1}$  sont périodiques de même période  $T > 0$  et l'on se pose la question de l'existence d'un profil asymptotique  $q_p$  tel que

- pour tout  $x \in [0, L]$ ,  $t \mapsto q_p(t, x)$  est une fonction périodique,
- pour tout  $x \in [0, L]$ ,  $|q(t, x) - q_p(t, x)| \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} 0$ .

Dans le cas de l'équation de Schrödinger linéaire, on présente en Section B.3 des conditions suffisantes reliant la période  $T$  de l'excitation à la longueur  $L$  du segment pour garantir l'existence d'un profil périodique, ou pour assurer l'existence de solutions pour lesquelles il n'existe pas de profil périodique. Ces résultats sont obtenus en utilisant à nouveau la méthode introduite dans [BF08].

## B.2 Comportement en temps long d'EDP linéaires sur une demi-droite

On considère l'équation de Schrödinger linéaire sur une demi-droite posée sous la forme :

$$\begin{cases} i\partial_t q + \partial_{xx} q = 0 & t > 0, x > 0 \\ q(0, x) = 0 & x > 0 \\ q(t, 0) = f_0(t) & t > 0. \end{cases} \quad (\text{B.3})$$

Ce problème est de la forme (B.1) avec  $\omega(k) = ik^2$ , et  $N = 1$  dans ce cas. Par linéarité du problème, on se place dans le cas où  $q_0 \equiv 0$ . De plus, on suppose que  $f_0$  est une fonction périodique et régulière du temps. La méthode introduite dans [BF08] consiste à introduire la fonction auxiliaire

$$\forall t > 0, \forall \kappa \in \mathbb{C}, \quad \tilde{f}_0(t, \kappa) = \int_0^t e^{\kappa s} f_0(s) ds, \quad (\text{B.4})$$

puis à obtenir la représentation intégrale suivante de la solution du problème (B.3) :

**Théorème B.2.0.1** *Si  $f_0$  est une fonction périodique et régulière du temps, alors la solution  $q$  du problème (B.3) avec  $q_0 \equiv 0$  est donnée par*

$$\forall t, x > 0, \quad q(t, x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} 2ke^{ikx-ik^2t} \tilde{f}_0(t, \omega(k)) dk. \quad (\text{B.5})$$

Par linéarité du problème (B.3) lorsque  $q_0 \equiv 0$ , on peut supposer la donnée au bord  $f_0$   $2\pi$ -périodique. L'hypothèse de régularité de cette fonction permet de l'écrire

$$\forall t \in \mathbb{R}, \quad f_0(t) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \hat{f}_n e^{int}, \quad (\text{B.6})$$

où les coefficients de Fourier  $(\hat{f}_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  tendent vers 0 rapidement lorsque  $|n|$  tend vers  $+\infty$ . Introduisant les 6 chemins  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \Gamma_1, \Gamma_2$  et  $\Gamma_3$  tracés dans  $\mathbb{C}$  définis comme suit :

$$\forall r \in (-\infty, 0), \quad \gamma_1(r) = (r + \sqrt{2})e^{-i\frac{\pi}{4}} \quad \text{et} \quad \Gamma_1(r) = -i + re^{-i\frac{\pi}{4}} \quad (\text{B.7})$$

$$\forall r \in (0, +\infty), \quad \gamma_2(r) = -i + (r + 1) \quad \text{et} \quad \Gamma_2(r) = -i + r$$

$$\forall r \in (0, +\infty), \quad \gamma_3(r) = (r + \sqrt{2})e^{-i\frac{\pi}{4}} \quad \text{et} \quad \Gamma_3(r) = -i + re^{-i\frac{\pi}{4}}, \quad (\text{B.8})$$

et utilisant la représentation (B.5), on peut écrire la solution  $f$  de (B.3) sous la forme suivante.

**Lemme B.2.0.1** *La solution  $q$  du problème (B.3) avec la donnée au bord  $2\pi$ -périodique  $f_0$  sous la forme (B.6) vérifie pour tous  $t, x > 0$  :*

$$q(t, x) = \frac{1}{2i\pi} \sum_{n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}} \hat{f}_n \int_{\gamma_1 + \gamma_2} 2ke^{ikx} \frac{e^{int} - e^{-ik^2t}}{(n + k^2)} dk + \frac{1}{2i\pi} \hat{f}_0 \int_{\Gamma_1 + \Gamma_2} 2e^{ikx} \frac{1 - e^{-ik^2t}}{k} dk. \quad (\text{B.9})$$

On en déduit l'existence et une formule explicite pour le profil périodique de la solution du problème (B.3) lorsque  $q_0 \equiv 0$  :

**Théorème B.2.0.2** *Lorsque  $f_0$  est une fonction régulière et  $2\pi$ -périodique écrite sous la forme (B.6), la solution du problème (B.3) avec  $q_0 \equiv 0$  vérifie pour tout  $x > 0$ ,*

$$q(t, x) \underset{t \rightarrow +\infty}{\sim} \hat{f}_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (\hat{f}_n e^{-x\sqrt{n}} e^{int} + \hat{f}_{-n} e^{ix\sqrt{n}} e^{-int}). \quad (\text{B.10})$$

**Remarque :** Le symbole  $\underset{t \rightarrow +\infty}{\sim}$  dans (B.10) signifie exactement que la différence entre le membre de gauche et le membre de droite tend vers 0 à  $x > 0$  fixé lorsque  $t$  tend vers  $+\infty$ , comme annoncé en Section B.1. Poussant un peu plus loin l'analyse, on montre sans peine que cette convergence est en fait uniforme sur les compacts de  $]-, +\infty[$ .

On obtient des résultats similaires par la même méthode pour l'équation de la chaleur linéaire et pour l'équation de Schrödinger linéarisée, comme on le décrit maintenant succinctement.



Considérons l'équation de la chaleur linéaire dans une demi-droite sous la forme

$$\begin{cases} \partial_t q - \partial_{xx} q = 0 & t > 0, x > 0 \\ q(0, x) = 0 & x > 0 \\ q(t, 0) = f_0(t) & t > 0. \end{cases} \quad (\text{B.11})$$

Lorsque la donnée au bord  $f_0$  est régulière et  $2\pi$ -périodique, la solution du problème (B.11) admet le profil suivant :

**Théorème B.2.0.3** *Lorsque la fonction  $f_0$  est régulière et  $2\pi$ -périodique, écrite sous la forme (B.6), la solution  $q$  du problème (B.11) vérifie pour tout  $x > 0$ ,*

$$q(t, x) \underset{t \rightarrow +\infty}{\sim} \hat{f}_0 + \sum_{n=1}^{\infty} e^{-x\sqrt{n}\frac{\sqrt{2}}{2}} \left( \hat{f}_n e^{-ix\sqrt{n}\frac{\sqrt{2}}{2}} e^{int} + \hat{f}_{-n} e^{ix\sqrt{n}\frac{\sqrt{2}}{2}} e^{-int} \right). \quad (\text{B.12})$$

Considérons l'équation de KdV linéarisée

$$\begin{cases} \partial_t q + \partial_{xxx} q = 0 & t > 0, x > 0 \\ q(0, x) = 0 & x > 0 \\ q(t, 0) = f_0(t) & t > 0. \end{cases} \quad (\text{B.13})$$

Supposons à nouveau la donnée  $f_0$  régulière et  $2\pi$ -périodique. La solution de ce problème admet le profil asymptotique périodique suivant :

**Théorème B.2.0.4** *Supposons  $f_0$  régulière et  $2\pi$ -périodique. La solution du problème (B.13) admet un profil asymptotique périodique au sens où pour tout  $x > 0$ ,*

$$q(t, x) \underset{t \rightarrow +\infty}{\sim} \hat{f}_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left( \hat{f}_n e^{i\alpha \sqrt[3]{n}x} e^{int} + \hat{f}_{-n} e^{-i\alpha \sqrt[3]{n}x} e^{-int} \right), \quad (\text{B.14})$$

où  $\alpha = e^{i\frac{\pi}{3}}$ .

### B.3 Comportement en temps long d'EDP linéaires sur un segment : l'exemple de l'équation de Schrödinger

On considère dans cette section l'équation de Schrödinger linéaire

$$\begin{cases} i\partial_t q + \partial_{xx} q = 0 & t > 0, x \in (0, L) \\ q(0, x) = 0 & x \in (0, L) \\ q(t, 0) = f_0(t) & t > 0 \\ q(t, L) = g_0(t) & t > 0, \end{cases} \quad (\text{B.15})$$

où les données au bord  $f_0$  et  $g_0$  sont régulières et périodiques en temps. Il s'agit d'un problème de la forme (B.2) avec  $N_1 = N_2 = 1$ ,  $q_0 \equiv 0$ , et  $\omega(k) = ik^2$ . Les principaux résultats ci-dessous (Théorèmes B.3.0.1 et B.3.0.2) se placent dans le cas  $g_0 \equiv 0$  et

indiquent que, en général et contrairement aux problèmes précédents posés sur une demi-droite, la solution de ce type de problème d'évolution avec données aux bords périodiques n'admet pas de profil asymptotique. Plus précisément, supposant  $f_0 \neq 0$  et notant  $T > 0$  sa plus petite période on distingue les deux cas suivants : lorsque  $T$  et  $L^2/\pi$  sont rationnellement dépendants, la solution est soit périodique (c'est le seul cas où elle admet un profil périodique), soit sa norme  $L^2$  tend vers  $+\infty$  ; lorsque  $T$  et  $L^2/\pi$  sont rationnellement indépendants, la solution n'admet *jamais* de profil périodique.

Suivant la méthode développée dans [FP05], on introduit les fonctions auxiliaires

$$\tilde{f}_0(t, k) = \int_0^t e^{ik^2s} f_0(s) ds \quad \text{et} \quad \tilde{g}_0(t, k) = \int_0^t e^{ik^2s} g_0(s) ds, \quad (\text{B.16})$$

pour  $k \in \mathbb{C}$  et  $t \geq 0$ , puis la fonction  $N$  définie sur le même domaine par

$$N(t, k) = k(\tilde{f}_0(t, k) - e^{-ikL}\tilde{g}_0(t, k)).$$

Posant pour tout  $m \in \mathbb{Z}$ ,  $k_m = m\pi/L$ , on obtient par cette méthode la représentation suivante de la solution  $q$  du problème (B.15) valable pour  $t > 0$  et  $x \in ]0, L[$ ,

$$q(t, x) = \frac{i}{4L} \sum_{m \in \mathbb{Z}} \sin(k_m x) e^{-ik_m^2 t} [N(t, k_m) - N(t, -k_m)]. \quad (\text{B.17})$$

Dans le cas où  $T$  et  $L^2/\pi$  sont rationnellement dépendants, on a le

**Théorème B.3.0.1** *Soit  $T > 0$  une période de la fonction  $f_0$ . Écrivons les coefficients de Fourier de  $f$  correspondant à  $T$  de sorte que*

$$\forall t \in \mathbb{R}, \quad f_0(t) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \hat{f}_n e^{2i\pi n \frac{t}{T}}. \quad (\text{B.18})$$

*Supposons que  $T$  et  $L^2/\pi$  sont rationnellement dépendants et écrivons*

$$\alpha \frac{2\pi}{T} + \beta \frac{\pi^2}{L^2} = 0, \quad (\text{B.19})$$

*avec  $(\alpha, \beta) \in (\mathbb{Z} \setminus \{0\})^2$  premiers entre eux,  $\alpha \geq 1$ ,  $\beta \leq -1$ . Notons*

$$R = \left\{ (n, m) \in \mathbb{Z} \times \mathbb{Z} \mid \alpha m^2 - \beta n = 0 \right\}.$$

*S'il existe  $(n, m) \in R$  tel que  $\hat{f}_n \neq 0$ , alors la solution  $q$  du problème (B.15) tend vers l'infini au sens où*

$$\|q(t)\|_{L^2(0, L)} \xrightarrow[t \rightarrow +\infty]{} +\infty,$$

*et donc elle n'admet pas de profil périodique. Sinon, la fonction  $q$  est une fonction périodique de période  $(2L^2/\pi) \times \max(1, -\alpha/\beta)$ .*

Dans le cas où  $T$  et  $L^2/\pi$  sont rationnellement indépendants, on a le

**Théorème B.3.0.2** *Soit  $q$  la solution du problème (B.15) pour une donnée au bord  $f_0 \not\equiv 0$  de plus petite période  $T > 0$  et pour  $g_0 \equiv 0$ . Si  $T$  et  $L^2/\pi$  sont rationnellement indépendants, alors pour tout  $x \in (0, L)$ , la fonction  $t \mapsto q(t, x)$  n'admet pas de profil périodique.*

# Bibliographie

- [AB12] A. Armaroli et F. Biancalana. Tunable modulational instability sidebands via parametric resonance in periodically tapered optical fibers. *Opt. Express*, 20(22) :25096–25110, Oct 2012. doi:10.1364/OE.20.025096. 10, 12
- [AD15] X. Antoine et R. Duboscq. *Modeling and Computation of Bose–Einstein Condensates : Stationary States, Nucleation, Dynamics, Stochasticity*, pages 49–145. Springer International Publishing, Cham, 2015. doi:10.1007/978-3-319-19015-0\_2. 51
- [Agr07] G. Agrawal. *Nonlinear fiber optics*. Quantum electronics—principles and applications. Elsevier / Academic Press, 4th ed edition, 2007. URL : <http://www.sciencedirect.com/science/book/9780123695161>. 7
- [BB12] K. Burrage et P. M. Burrage. Low rank Runge–Kutta methods, symplecticity and stochastic Hamiltonian problems with additive noise. *J. Comput. Appl. Math.*, 236(16) :3920–3930, 2012. doi:10.1016/j.cam.2012.03.007. 36
- [BCF12] M. Bessemoulin-Chatard et F. Filbet. A finite volume scheme for nonlinear degenerate parabolic equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 34(5) :B559–B583, 2012. doi:10.1137/110853807. 91
- [BdBD15] R. Belaouar, A. de Bouard, et A. Debussche. Numerical analysis of the nonlinear Schrödinger equation with white noise dispersion. *Stoch. Partial Differ. Equ. Anal. Comput.*, 3(1) :103–132, 2015. doi:10.1007/s40072-015-0044-z. 43, 44, 46
- [BDLV17] C. Besse, G. Dujardin, et I. Lacroix-Violet. High order exponential integrators for nonlinear Schrödinger equations with application to rotating Bose–Einstein condensates. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 55(3) :1387–1411, 2017. doi:10.1137/15M1029047. 2, 5, 47, 55, 56
- [Bes04] C. Besse. A relaxation scheme for the nonlinear Schrödinger equation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 42(3) :934–952, 2004. doi:10.1137/S0036142901396521. 57
- [BF67] T. B. Benjamin et J. E. Feir. The disintegration of wave trains on deep water. Part 1. Theory. *Journal of Fluid Mechanics*, 27 :417–430, 1967. doi:10.1017/S002211206700045X. 9
- [BF08] J. L. Bona et A. S. Fokas. Initial-boundary-value problems for linear and integrable nonlinear dispersive partial differential equations. *Nonlinearity*, 21(10) :T195, 2008. URL : <http://stacks.iop.org/0951-7715/21/i=10/a=T03>. 101, 102

- [BMTZ13] W. Bao, D. Marahrens, Q. Tang, et Y. Zhang. A simple and efficient numerical method for computing the dynamics of rotating Bose–Einstein condensates via rotating lagrangian coordinates. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 35(6) :A2671–A2695, 2013. doi:10.1137/1309111111. 50, 51, 56
- [BRO09] N. Bou-Rabee et H. Owhadi. Stochastic variational integrators. *IMA J. Numer. Anal.*, 29(2) :421–443, 2009. doi:10.1093/imanum/drn018. 36
- [BZ05] W. Bao et Y. Zhang. Dynamics of the ground state and central vortex states in Bose–Einstein condensation. *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, 15(12) :1863–1896, 2005. doi:10.1142/S021820250500100X. 51
- [CBK97] C. B. Clausen, O. Bang, et Y. S. Kivshar. Spatial solitons and induced kerr effects in quasi-phase-matched quadratic media. *Phys. Rev. Lett.*, 78 :4749–4752, Jun 1997. doi:10.1103/PhysRevLett.78.4749. 21
- [CC70] J. S. Chang et G. Cooper. A practical difference scheme for Fokker-Planck equations. *Journal of Computational Physics*, 6(1) :1 – 16, 1970. doi:10.1016/0021-9991(70)90001-X. 91
- [CD09] F. Castella et G. Dujardin. Propagation of Gevrey regularity over long times for the fully discrete Lie–Trotter splitting scheme applied to the linear Schrödinger equation. *ESAIM : M2AN*, 43(4) :651–676, 2009. doi:10.1051/m2an/2009028. 2, 4, 60, 65
- [CD14] D. Cohen et G. Dujardin. Energy–preserving integrators for stochastic Poisson systems. *Communications in Mathematical Sciences*, 12(8) :1523–1539, 2014. doi:10.4310/CMS.2014.v12.n8.a7. 2, 4, 35, 37, 38
- [CD17] D. Cohen et G. Dujardin. Exponential integrators for nonlinear Schrödinger equations with white noise dispersion. *Stochastics and Partial Differential Equations : Analysis and Computations*, 5(4) :592–613, Dec 2017. doi:10.1007/s40072-017-0098-1. 2, 5, 35, 42
- [CDS08] F. Castella, G. Dujardin, et B. Sericola. Moments’ analysis in homogeneous Markov reward models. *Methodology and Computing in Applied Probability*, 11(4) :583, May 2008. doi:10.1007/s11009-008-9075-5. 4
- [CFH05] P. Csomós, I. Faragó, et Á. Havasi. Weighted sequential splittings and their analysis. *Computers & Mathematics with Applications*, 50(7) :1017–1031, 2005. doi:10.1016/j.camwa.2005.08.004. 74
- [CH11] D. Cohen et E. Hairer. Linear energy–preserving integrators for Poisson systems. *BIT*, 51(1) :91–101, 2011. doi:10.1007/s10543-011-0310-z. 36, 41, 42
- [CHLZ17] J. Cui, J. Hong, Z. Liu, et W. Zhou. Stochastic symplectic and multi-symplectic methods for nonlinear Schrödinger equation with white

- noise dispersion. *Journal of Computational Physics*, 342 :267 – 285, 2017. doi:10.1016/j.jcp.2017.04.029. 43
- [CKC<sup>+</sup>15] F. Copie, A. Kudlinski, M. Conforti, G. Martinelli, et A. Mussot. Modulation instability in amplitude modulated dispersion oscillating fibers. *Opt. Express*, 23(4) :3869–3875, Feb 2015. doi:10.1364/OE.23.003869. 17
- [CMK<sup>+</sup>16] M. Conforti, A. Mussot, A. Kudlinski, S. Rota Nodari, G. Dujardin, S. De Bièvre, A. Armaroli, et S. Trillo. Heteroclinic structure of parametric resonance in the nonlinear Schrödinger equation. *Phys. Rev. Lett.*, 117 :013901, Jun 2016. doi:10.1103/PhysRevLett.117.013901. 3, 5, 20
- [CND<sup>+</sup>15] M. Conforti, S. Rota Nodari, G. Dujardin, A. Kudlinski, A. Mussot, S. Trillo, et S. De Bièvre. Modulation instability in periodically dispersion kicked optical fibers. In *2015 European Conference on Lasers and Electro-Optics - European Quantum Electronics Conference*, page EF P 17. Optical Society of America, 2015. URL : [http://www.osapublishing.org/abstract.cfm?URI=EQEC-2015-EF\\_P\\_17](http://www.osapublishing.org/abstract.cfm?URI=EQEC-2015-EF_P_17). 3, 5
- [dBD10] A. de Bouard et A. Debussche. The nonlinear Schrödinger equation with white noise dispersion. *J. Funct. Anal.*, 259(5) :1300–1321, 2010. doi:10.1016/j.jfa.2010.04.002. 43
- [DF07a] G. Dujardin et E. Faou. Long time behavior of splitting methods applied to the linear Schrödinger equation. *C.R. Acad. Sci. Paris, Sér. I*, 344(2) :89–92, 2007. doi:10.1016/j.crma.2006.11.024. 4, 60
- [DF07b] G. Dujardin et E. Faou. Normal form and long time analysis of splitting schemes for the linear Schrödinger equation with small potential. *Numer. Math.*, 108(2) :223–262, 2007. doi:10.1007/s00211-007-0119-5. 2, 4, 60
- [DHL18] G. Dujardin, F. Hérau, et P. Lafitte. Coercivity, hypocoercivity, exponential time decay and simulations for discrete Fokker–Planck equations. submitted, 2018. URL : <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01702545/>. 3, 5, 60, 80, 81, 86
- [DKB<sup>+</sup>12] M. Droques, A. Kudlinski, G. Bouwmans, G. Martinelli, et A. Mussot. Experimental demonstration of modulation instability in an optical fiber with a periodic dispersion landscape. *Opt. Lett.*, 37(23) :4832–4834, Dec 2012. doi:10.1364/OL.37.004832. 10, 14, 30
- [DKB<sup>+</sup>13a] M. Droques, A. Kudlinski, G. Bouwmans, G. Martinelli, et A. Mussot. Dynamics of the modulation instability spectrum in optical fibers with oscillating dispersion. *Phys. Rev. A*, 87 :013813, Jan 2013. doi:10.1103/PhysRevA.87.013813. 10, 12, 14
- [DKB<sup>+</sup>13b] M. Droques, A. Kudlinski, G. Bouwmans, G. Martinelli, A. Mussot, A. Armaroli, et F. Biancalana. Fourth-order dispersion mediated modulation instability in dispersion oscillating fibers. *Opt. Lett.*,

- 38(17) :3464–3467, Sep 2013. doi:10.1364/OL.38.003464. 10, 12, 14, 17
- [DL16] G. Dujardin et P. Lafitte. Asymptotic behaviour of splitting schemes involving time-subcycling techniques. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 36(4) :1804–1841, 2016. doi:10.1093/imanum/drv059. 3, 5, 60, 79
- [DT11] A. Debussche et Y. Tsutsumi. 1D quintic nonlinear Schrödinger equation with white noise dispersion. *J. Math. Pures Appl. (9)*, 96(4) :363–376, 2011. doi:10.1016/j.matpur.2011.02.002. 43
- [Duj09a] G. Dujardin. Asymptotics of linear initial boundary value problems with periodic boundary data on the half-line and finite intervals. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 465(2111) :3341–3360, 2009. doi:10.1098/rspa.2009.0194. 4, 101
- [Duj09b] G. Dujardin. Exponential Runge–Kutta methods for the Schrödinger equation. *Applied Numerical Mathematics*, 59(8) :1839 – 1857, 2009. doi:10.1016/j.apnum.2009.02.002. 2, 4, 47, 48
- [FFS<sup>+</sup>13] C. Finot, J. Fatome, A. Sysoliatin, A. Kosolapov, et S. Wabnitz. Competing four-wave mixing processes in dispersion oscillating telecom fiber. *Opt. Lett.*, 38(24) :5361–5364, Dec 2013. doi:10.1364/OL.38.005361. 10
- [FH17] F. Filbet et M. Herda. A finite volume scheme for boundary-driven convection–diffusion equations with relative entropy structure. *Numerische Mathematik*, 137(3) :535–577, Nov 2017. doi:10.1007/s00211-017-0885-7. 91
- [FL09] E. Faou et T. Lelièvre. Conservative stochastic differential equations : mathematical and numerical analysis. *Math. Comp.*, 78(268) :2047–2074, 2009. doi:10.1090/S0025-5718-09-02220-0. 36
- [Fok97] A. S. Fokas. A unified transform method for solving linear and certain nonlinear pdes. *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 453(1962) :1411–1443, 1997. doi:10.1098/rspa.1997.0077. 101
- [FP05] A. S. Fokas et B. Pelloni. A transform method for linear evolution pdes on a finite interval. *IMA Journal of Applied Mathematics*, 70(4) :564–587, 2005. doi:10.1093/imamat/hxh047. 102, 105
- [FS99] A. S. Fokas et L.-Y. Sung. Initial-boundary value problems for linear dispersive evolution equations on the half-line. Department of Mathematics, University of South Carolina. Industrial Mathematics Institute Preprint Series, 1999. URL : <http://imi.cas.sc.edu/papers/209/>. 101

- [Gar02] J. Garnier. Stabilization of dispersion-managed solitons in random optical fibers by strong dispersion management. *Optics Communications*, 206(4-6) :411–438, 2002. doi:10.1016/S0030-4018(02)01404-9. 43
- [GHJ<sup>+</sup>14] V. Guðmundsson, S. Hauksson, A. Johnsen, G. Reinisch, A. Manolescu, C. Besse, et G. Dujardin. Excitation of radial collective modes in a quantum dot : Beyond linear response. *Annalen der Physik*, 526(5-6) :235–248, 2014. doi:10.1002/andp.201400048. 4, 95
- [GLL12] B. Guo, L. Ling, et Q. P. Liu. Nonlinear Schrödinger equation : Generalized Darboux transformation and rogue wave solutions. *Phys. Rev. E*, 85 :026607, Feb 2012. doi:10.1103/PhysRevE.85.026607. 28
- [Hai11] E. Hairer. Energy-preserving variant of collocation methods. *JNAIAM. J. Numer. Anal. Ind. Appl. Math.*, 5(1-2) :73–84, 2011. URL : <http://www.unige.ch/~hairer/preprints/crete.pdf>. 36
- [HLW06] E. Hairer, C. Lubich, et G. Wanner. *Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations.*, volume 31. Springer, Berlin, 2006. doi:10.1007/3-540-30666-8. 62
- [HO05] M. Hochbruck et A. Ostermann. Exponential Runge–Kutta methods for parabolic problems. *Applied Numerical Mathematics*, 53(2) :323 – 339, 2005. Tenth Seminar on Numerical Solution of Differential and Differential-Algebraic Equations (NUMDIFF-10). doi:<http://dx.doi.org/10.1016/j.apnum.2004.08.005>. 47
- [HZZ11] J. Hong, S. Zhai, et J. Zhang. Discrete gradient approach to stochastic differential equations with a conserved quantity. *SIAM J. Numer. Anal.*, 49(5) :2017–2038, 2011. doi:10.1137/090771880. 38
- [KP92] P. E. Kloeden et E. Platen. *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations*, volume 23 of *Applications of Mathematics (New York)*. Springer-Verlag, Berlin, 1992. doi:10.1007/978-3-662-12616-5. 38
- [KP03] C. Kharif et E. Pelinovsky. Physical mechanisms of the rogue wave phenomenon. *European Journal of Mechanics - B/Fluids*, 22(6) :603 – 634, 2003. doi:10.1016/j.euromechflu.2003.09.002. 27
- [Law67] J.D. Lawson. Generalized Runge–Kutta processes for stable systems with large Lipschitz constants. *SIAM J. Numer. Anal.*, 4 :372–380, 1967. doi:10.1137/0704033. 52
- [Mar06] R. Marty. On a splitting scheme for the nonlinear Schrödinger equation in a random medium. *Commun. Math. Sci.*, 4(4) :679–705, 2006. URL : <http://projecteuclid.org/euclid.cms/1175797606>. 43
- [McL02] R. I. McLachlan. Families of high-order composition methods. *Numerical Algorithms*, 31(1-4) :233–246, 2002. doi:10.1023/A:1021195019574. 70
- [MDD12] Q. Ma, D. Ding, et X. Ding. Symplectic conditions and stochastic generating functions of stochastic Runge–Kutta methods for stochastic



- Hamiltonian systems with multiplicative noise. *Appl. Math. Comput.*, 219(2) :635–643, 2012. doi:10.1016/j.amc.2012.06.053. 36
- [Mis10] T. Misawa. Symplectic integrators to stochastic Hamiltonian dynamical systems derived from composition methods. *Math. Probl. Eng.*, pages Art. ID 384937, 12, 2010. doi:10.1155/2010/384937. 36
- [MRT02] G. N. Milstein, Yu. M. Repin, et M. V. Tretyakov. Numerical methods for stochastic systems preserving symplectic structure. *SIAM J. Numer. Anal.*, 40(4) :1583–1604 (electronic), 2002. doi:10.1137/S0036142901395588. 36, 37, 38
- [Pla84] E. Platen. *Zur zeitdiskreten approximation von Itoprozessen*. PhD thesis, Diss. B. Imath. Akad. des Wiss. der DDR, Berlin, 1984. 38
- [PT17] L. Pareschi et Rey. T. Residual equilibrium schemes for time dependent partial differential equations. *Computers & Fluids*, 156 :329 – 342, 2017. Ninth International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD9). doi:10.1016/j.compfluid.2017.07.013. 91
- [RG12] G. Reinisch et V. Guðmundsson. Nonlinear Schrödinger–Poisson theory for quantum-dot helium. *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 241(9) :902 – 907, 2012. doi:https://doi.org/10.1016/j.physd.2012.02.004. 96
- [RNCD<sup>+</sup>15] S. Rota Nodari, M. Conforti, G. Dujardin, A. Kudlinski, A. Mussot, S. Trillo, et S. De Bièvre. Modulational instability in dispersion-kicked optical fibers. *Phys. Rev. A*, 92 :013810, Jul 2015. doi:10.1103/PhysRevA.92.013810. 3, 5, 10, 16
- [SG10] V. I. Shrira et V. V. Geogjaev. What makes the Peregrine soliton so special as a prototype of freak waves? *Journal of Engineering Mathematics*, 67(1) :11–22, Jun 2010. doi:10.1007/s10665-009-9347-2. 27
- [TCT<sup>+</sup>15] C. G. L. Tiofack, S. Coulibaly, M. Taki, S. De Bièvre, et G. Dujardin. Comb generation using multiple compression points of Peregrine rogue waves in periodically modulated nonlinear Schrödinger equations. *Phys. Rev. A*, 92 :043837, Oct 2015. doi:10.1103/PhysRevA.92.043837. 3, 5, 27
- [TCT<sup>+</sup>17] C.G.L. Tiofack, S. Coulibaly, M. Taki, S. De Bièvre, et G. Dujardin. Periodic modulations controlling Kuznetsov–Ma soliton formation in nonlinear Schrödinger equations. *Physics Letters A*, 381(24) :1999 – 2003, 2017. doi:10.1016/j.physleta.2017.04.029. 3, 5, 31
- [Vil09] C. Villani. *Hypocoercivity*, volume 202,950. Memoirs of the American Mathematical Society, 2009. doi:10.1090/S0065-9266-09-00567-5. 91
- [Wan07] L.J. Wang. *Variational integrators and generating functions for stochastic Hamiltonian systems*. PhD thesis, Karlsruhe Institute of Technology, 2007. doi:10.5445/KSP/1000007007. 36

- 
- [WHSB09] L. Wang, J. Hong, R. Scherer, et F. Bai. Dynamics and variational integrators of stochastic Hamiltonian systems. *Int. J. Numer. Anal. Model.*, 6(4) :586–602, 2009. URL : <http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.642.929&rep=rep1&type=pdf>. 36



---

**Résumé :** Je regroupe dans ce manuscrit d'habilitation à diriger les recherches l'ensemble des travaux que j'ai réalisés au sein d'Inria. Il s'agit de questions de comportement de méthodes numériques d'intégration de problèmes d'évolution en temps issus de la modélisation, déterministe ou stochastique, de systèmes physiques. On aborde des questions quantitatives, proposant et analysant des méthodes d'ordre élevé pour des équations de Schrödinger non-linéaires permettant par exemple de simuler efficacement des condensats de Bose–Einstein en rotation. On considère aussi des méthodes numériques appliquées à des problèmes stochastiques (équations différentielles de Poisson, équation de Schrödinger non-linéaire avec dispersion aléatoire), en proposant et analysant des méthodes d'ordre 1.

On aborde également des questions qualitatives, en analysant le comportement en temps long de méthodes numériques. On s'intéresse notamment à la préservation de la régularité des solutions de l'équation de Schrödinger linéaire par des méthodes de décomposition en temps. On propose une étude des méthodes de décomposition avec sous-cyclage pour l'intégration en temps de problèmes multi-échelles, montrant sur des exemples qu'il est possible que l'ordre asymptotique d'une méthode soit strictement supérieur à son ordre local. Enfin, on propose des discrétisations en espace, en vitesse et en temps de l'équation de Fokker–Planck inhomogène et l'on montre qu'il est possible d'utiliser au niveau discret des méthodes hypocoercives garantissant la convergence exponentielle des solutions numériques vers un état d'équilibre.

On aborde enfin des questions plus directement en lien avec la physique. On utilise des méthodes numériques pour simuler le phénomène d'instabilité modulationnelle dans les fibres optiques à dispersion variable en dispersion normale et valider une analyse théorique de ce phénomène. On étudie le comportement vis-à-vis des paramètres de dispersion des solitons de Peregrine et de Kuznetsov–Ma dans des fibres en dispersion anormale. Enfin, on compare la réponse d'un quantum dot de deux électrons prévue par plusieurs modèles physiques à une forte et courte excitation magnétique, au-delà de la réponse linéaire.

**Mots clés :** Méthodes numériques, comportement asymptotique, simulations en temps long, équations de Schrödinger

---

---

**Abstract :** This manuscript gathers my research results obtained at Inria. It mainly deals with the behaviour of numerical methods for the time-integration of evolution problems coming from physics, no matter whether they are deterministic or stochastic.

We deal with quantitative questions. We propose and analyse high order numerical methods for nonlinear Schrödinger equations that allow, for example, to simulate efficiently rotating Bose–Einstein condensates. We propose numerical methods of order 1 for the numerical integration of stochastic Poisson systems, as well as nonlinear Schrödinger equations with random dispersion.

We also deal with quantitative questions. We analyse the long time behaviour of numerical schemes. For example, we prove the preservation of the regularity of numerical solutions of the linear Schrödinger equation by splitting methods, with a non-resonance condition on the time step. We propose splitting techniques with subcycling for multiscale problems, the solutions of which converge in time to an equilibrium. We prove that one can reach higher asymptotic order than expected with such methods. We also extend hypocoercive techniques to discrete functional frameworks to prove that some new discretizations of the inhomogeneous Fokker–Planck equation actually converge exponentially fast to equilibrium.

The other questions are directly connected to physics. We use numerical simulations to validate theoretical models of modulational instability in optical fibers with normal dispersion. We study the behaviour of Peregrine and Kuznetsov–Ma solitons as a function of physical parameters in optical fibers with anomalous varying dispersion, as a toy model for rogue waves. Last, we compare numerically the difference between several physical models of a quantum dot of electrons in a confining magnetic field when submitted to a strong and fast excitation.

**Keywords :** Numerical methods, asymptotic behaviour, long time simulations, Schrödinger equations

---