



HAL
open science

Comportements asymptotiques, conditions aux limites et analyse numérique pour des modèles fluides

Ingrid Lacroix-Violet

► **To cite this version:**

Ingrid Lacroix-Violet. Comportements asymptotiques, conditions aux limites et analyse numérique pour des modèles fluides. Equations aux dérivées partielles [math.AP]. Université de Lille / Laboratoire Paul Painlevé, 2017. tel-02417631

HAL Id: tel-02417631

<https://hal.science/tel-02417631>

Submitted on 18 Dec 2019

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
(U.F.R. Polytech' Lille)

ÉCOLE DOCTORALE DES SCIENCES POUR L'INGÉNIEUR
N° : 072

HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

(Spécialité : MATHÉMATIQUES APPLIQUÉES)

par

Ingrid LACROIX-VIOLET
Maître de conférence

COMPORTEMENTS ASYMPTOTIQUES, CONDITIONS AUX LIMITES ET ANALYSE NUMÉRIQUE POUR DES MODÈLES FLUIDES

Rapporteurs :

Xavier Antoine, Université de Lorraine
Laurent Chupin, Université Clermont Auvergne
Eduard Feireisl, Institute of Mathematics AS, Czech Republic

Soutenance le 24/11/2017 devant le jury :

Xavier Antoine, Université de Lorraine
Sylvie Benzoni-Gavage, Université de Lyon (Université Lyon 1)
Rémi Carles, Université Montpellier
Claire Chainais-Hillairet, Université de Lille
Laurent Chupin, Université Clermont Auvergne
Frédéric Lagoutière, Université de Lyon (Université Lyon 1)

REMERCIEMENTS

Tout d'abord, je tiens à remercier Xavier Antoine, Laurent Chupin et Eduard Feireisl d'avoir accepté de consacrer de leur temps précieux à l'évaluation de mes travaux. Je remercie également Sylvie Benzoni-Gavage, Rémi Carles et Frédéric Lagoutière d'avoir bien voulu faire partie du jury.

Je remercie chaleureusement tous mes collaborateurs qui ont contribué aux résultats présentés dans ce mémoire : Alexis, Christophe, Claire, Didier, Guillaume, Julien, Karim, Marguerite, Sonia, Stéphane et Thierry.

Pendant ces dix ans à Lille j'ai pu échanger et travailler avec des collègues formidables aussi bien au laboratoire Paul Painlevé qu'à l'école Polytech'Lille. Ils sont nombreux ceux, qui des secrétaires aux enseignants-chercheurs, m'ont permis de travailler dans des conditions optimales, je les en remercie tous. Je souhaite adresser un merci tout particulier à Anne, Aziz, Claire, Claudine, Dorothee, Gabriel et Guillaume pour leur amitié, leur écoute, leurs conseils et leur soutien dans les bons comme dans les mauvais jours.

Je n'oublie pas de dire un grand merci à tous mes amis pour tous les moments de détente passés à leur côtés. Leur amitié m'a apporté une aide indirecte mais précieuse.

Enfin je ne peux finir sans adresser un merci très spécial à toute ma famille et en particulier à mon fils, mon petit rayon de soleil, et à mon mari, pour leur amour, leur patience, leur compréhension et leur soutien inconditionnel.

RÉSUMÉ

Durant ma thèse, j'ai considéré deux systèmes différents utilisés dans la modélisation mathématique et la simulation numérique des semi-conducteurs et des plasmas : le système d'Euler-Poisson stationnaire et le système de dérive-diffusion quantique. Plus précisément, j'ai obtenu des résultats d'existence de solutions et étudié des limites de paramètres pour ces systèmes. J'ai également réalisé des simulations numériques du modèle d'Euler-Poisson stationnaire.

Depuis ma thèse, mes recherches portent sur des questions aussi bien théoriques (recherche d'inégalités d'entropie, existence de solutions, limites de paramètres) que numériques (construction de conditions aux limites adaptées, dérivation, convergence et comportement asymptotique de schémas numériques). Les travaux plus théoriques concernent l'équation des milieux poreux, le modèle de Navier-Stokes quantique et un modèle de corrosion qui a également fait l'objet d'une étude numérique. D'un point de vue plus numérique, je me suis intéressée à la construction de conditions aux limites pour différents modèles et de différentes manières, ainsi qu'à l'équation de Gross-Pitaevskii.

Dans ce manuscrit je présente plus en détail mes travaux concernant les modèles de Navier-Stokes quantique et de corrosion, la construction de conditions aux limites numériquement adaptées et l'équation de Gross-Pitaevskii.

En collaboration avec D. Bresch, M. Gisclon et A. Vasseur, je me suis intéressée à des questions d'existence de solution, de limite semi-classique et de limite de faible viscosité pour le modèle de Navier-Stokes quantique. Ces résultats utilisent différentes techniques telles que l'ajout d'un terme de pression froide dans les équations, l'utilisation de solutions re-normalisées en vitesse, des inégalités d'entropie relative...

Avec C. Chainais-Hillairet, j'ai montré l'existence de solutions pour le modèle de corrosion DPCM stationnaire puis évolutif. Il s'agit d'un modèle de dérive-diffusion dont l'originalité réside dans les conditions aux limites qui sont de type Robin-Fourier et induisent un couplage fort. Avec P.L. Colin, nous avons ensuite montré la convergence et étudié le comportement asymptotique d'un schéma numérique volumes finis bien adapté au modèle.

Je me suis également intéressée à la construction de conditions aux limites adaptées à un modèle fluide macroscopique lorsque celui-ci est vu comme la limite hydrodynamique d'un modèle cinétique pour lequel les conditions aux limites sont connues. Par ailleurs, j'ai aussi travaillé à la construction de conditions aux limites artificielles permettant de réduire à un domaine borné un problème initialement posé en domaine non borné. Avec C. Besse, J. Coatleven, S. Fliss et K. Ramdani, nous avons proposé une méthode permettant de construire l'opérateur Dirichlet-to-Neumann (DtN) pour des milieux périodiques localement perturbés à symétrie hexagonale ; avec C. Besse et M. Ehrhardt, nous avons dérivé les conditions aux limites adaptées à l'équation KdV complètement discrétisée.

Enfin, avec C. Besse et G. Dujardin, nous avons développé une classe d'intégrateurs exponentiels d'ordre élevé pour l'équation de Gross-Pitaevskii (utilisée dans la modélisation des condensats de Bose-Einstein). Nous avons également, pour le même problème, étudié des schémas numériques qui permettent de préserver l'énergie.

Sommaire

1	Introduction	9
1.1	Mes travaux de thèse	9
1.2	Fonctionnelles de Lyapunov type gradient pour l'équation des milieux poreux	11
1.3	Analyse mathématique du modèle de Navier-Stokes quantique	12
1.4	Analyse mathématique et numérique d'un modèle de corrosion	13
1.5	Construction de conditions aux limites appropriées	14
1.6	Simulation numérique des condensats de Bose-Einstein	16
2	Analyse mathématique du modèle de Navier-Stokes quantique	19
2.1	Présentation du problème	19
2.2	Existence de solution et limite semi-classique	21
2.3	La limite de faible viscosité	30
3	Analyse mathématique et numérique d'un modèle de corrosion	39
3.1	Présentation du problème	40
3.2	Existence de solutions	42
3.3	Convergence d'un schéma volume fini	44
4	Construction de conditions aux limites appropriées	49
4.1	Du microscopique vers le macroscopique : un modèle de charge et décharge de satellites	49
4.2	Réduction de modèles initialement posés en domaines non bornés	59
5	Simulation numérique des condensats de Bose-Einstein	75
5.1	Présentation du problème	75
5.2	Méthodes numériques d'ordre élevé	77
5.3	Méthodes numériques préservant l'énergie	86
6	Conclusion et perspectives	95
	Références	98

Chapitre 1

Introduction

Après avoir obtenu ma thèse en 2006 sous la co-direction de Yue-Jun Peng (Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand) et Ansgar Jüngel (Technische Universität, Vienne, Autriche), j'ai été nommée maître de conférences en octobre 2007 à l'Université de Lille 1. Depuis que je suis maître de conférences, j'ai eu l'occasion de participer à plusieurs projets scientifiques et à deux encadrements de thèse. Ces participations ont été l'occasion pour moi de développer des thématiques de recherches abordées pendant ma thèse mais également de me tourner vers d'autres sujets de recherche. Le but de ce chapitre est de donner un résumé de l'ensemble de mes travaux de recherche, dont certains seront développés dans les chapitres suivants.

1.1 Mes travaux de thèse

Ma thèse a concerné deux systèmes différents utilisés pour la modélisation mathématique et la simulation numérique des semiconducteurs [112] et des plasmas [57] : le système d'Euler-Poisson stationnaire et le système de dérive-diffusion quantique. Plus précisément, j'ai obtenu des résultats d'existence de solutions et étudié des limites de paramètres pour ces systèmes. J'ai également réalisé des simulations numériques du modèle d'Euler-Poisson stationnaire.

1.1.1 Le système d'Euler-Poisson

Le système hydrodynamique d'Euler-Poisson consiste en deux équations non linéaires données par la conservation de la masse et de la quantité de mouvement, appelées les équations d'Euler, plus une équation de Poisson pour le potentiel électrostatique.

J'ai étudié le cas stationnaire pour un flot potentiel. Dans le système apparaissent trois paramètres physiques (la masse d'électron, la longueur de Debye et le temps de relaxation) qui sont petits comparés à la longueur caractéristique. Il était donc important d'étudier les limites asymptotiques du système lorsqu'ils tendent indépendamment vers zéro. Le système considéré est en général complété par des conditions aux limites de Dirichlet. L'existence de solutions, pour de telles conditions aux limites, avait été démontrée sous une condition

de petitesse des données [64]. Dans [116] Y.J. Peng avait démontré que cette condition de petitesse des données pouvait être remplacée de manière équivalente par une condition de petitesse sur la masse d'électron. Ces deux conditions de petitesse permettent de satisfaire la condition d'ellipticité du système, qui est équivalente à la condition de flot subsonique dans l'appareil.

Avec Y.J. Peng, dans le cas uni-dimensionnel, nous avons démontré l'existence et l'unicité de solutions supersoniques [118]. De telles solutions correspondent ici à de grandes densités de courant.

Pour un flot subsonique, nous avons étudié la limite de masse d'électron et du temps de relaxation en utilisant une méthode de développements asymptotiques [117]. Pour chacune des limites nous avons démontré l'existence et l'unicité des profils ainsi qu'une estimation d'erreur pour un développement asymptotique d'ordre quelconque. Ces résultats nous ont donné une approche nouvelle pour la convergence du système d'Euler-Poisson vers les équations d'Euler incompressibles.

Toujours dans le cas subsonique, je me suis ensuite intéressée à la limite de quasi-neutralité correspondant au cas où la longueur de Debye tend vers 0, et qui était plus délicate. En effet, sans hypothèse de compatibilité, des couches limites peuvent apparaître et compliquent l'étude rigoureuse de cette limite. Toujours en utilisant la méthode des développements asymptotiques j'ai obtenu le résultat suivant : existence et unicité des profils et estimation d'erreur pour un développement asymptotique d'ordre quelconque dans le même espace que celui d'existence des solutions [133]. Ce résultat utilise tout de même une condition de compatibilité aux ordres 0 et 1 du développement asymptotique. Il donne cependant une approche nouvelle dans la démonstration de l'existence de solutions pour le système (dans le cas où la condition de compatibilité générale n'est pas satisfaite) et la limite de quasi-neutralité.

Enfin, dans un travail commun avec C. Chainais et Y.J. Peng, nous avons implémenté un schéma numérique qui permet de calculer la solution du système [51]. Le cas test étudié est celui de la diode balistique pour lequel nous avons calculé les courbes courant/tension. De plus cette méthode nous permet de faire numériquement apparaître la condition nécessaire de petitesse de la masse d'électron pour l'existence de solutions régulières. Avec la même méthode nous pouvons également obtenir la solution numérique dans le cas stationnaire bipolaire pour un flot potentiel. Notre schéma est un schéma itératif utilisant soit la méthode des volumes finis classiques (VF4) couplée à une formule de reconstruction d'un vecteur à partir de ses flux donnée dans [70], soit une méthode de volumes finis mixtes présentée par J. Droniou et R. Eymard dans [70] pour laquelle la reconstruction du vecteur à partir de ses flux est intrinsèque au schéma.

1.1.2 Le modèle de dérive-diffusion quantique

De nos jours, la miniaturisation des semiconducteurs est de plus en plus importante. Il est donc nécessaire d'étudier aussi des modèles qui permettent de prendre en compte les phénomènes quantiques dus à la petitesse des appareils. Les modèles fluides quantiques ont donc fait l'objet d'une grande attention dans les dernières décennies.

Le modèle de dérive-diffusion quantique est une extension simple du modèle de dérive-

diffusion classique utilisé dans la théorie des semiconducteurs et des plasmas. Il est composé d'une équation de convection-diffusion pour chacune des deux espèces, dans lesquelles un terme quantique (le potentiel de Bohm) a été ajouté; et d'une équation de Poisson pour le potentiel électrostatique, dans laquelle intervient un profil de dopage. Ces équations sont complétées par une condition initiale et des conditions aux limites de type Dirichlet-Neumann. Dans la littérature il n'existait que des résultats dans le cas uni-polaire et pour des conditions aux limites différentes [98] ou pour un champ électrique et une température nuls [97].

Avec A. Jüngel, nous avons démontré pour le système bi-polaire l'existence de solutions régulières dans le cas d'un profil de dopage général, ainsi que sa limite de quasi-neutralité, pour un profil de dopage nul [100]. La preuve de ce résultat utilise des estimations a priori uniformes pour les équations semi-discrétisées. Elles sont obtenues en utilisant des fonctionnelles d'entropie et en faisant clairement apparaître les quantités uniformément bornées. Le terme de dérive, dans lequel apparaît le potentiel électrostatique, est estimé en utilisant une nouvelle borne pour l'énergie électrique. Comme le potentiel électrostatique n'est pas une fonction test admissible, une fonction auxiliaire est construite avec beaucoup de précautions.

Nous avons ensuite étudié la régularité des solutions pour l'équation limite ainsi obtenue dans le cas de pressions nulles [99]. Dans ce cas, l'équation est celle bien connue de Derrida-Lebowitz-Speer-Spohn (équation DLSS). Nous avons pu obtenir de nouvelles propriétés de régularité des solutions de cette équation. Pour se faire, nous avons utilisé une ré-écriture de l'équation, une semi-discrétisation en temps et une méthode de construction algorithmique d'entropies présentée dans [96]. Cette méthode est fondée sur des intégrations par parties systématiques formulées comme des problèmes de décision polynomiaux. Ces nouvelles régularités ainsi obtenues, nous ont permis de démontrer la positivité des solutions de cette équation au moins pour des temps assez longs.

1.2 Fonctionnelles de Lyapunov type gradient pour l'équation des milieux poreux

Dans la continuité du dernier travail réalisé pendant ma thèse avec A. Jüngel, nous avons répondu à la question : sous quelles conditions l'équation des milieux poreux, avec convection et des conditions aux limites périodiques, possède-t-elle des fonctionnelles de Lyapunov type gradient (entropie d'ordre 1) (voir [101]) ?

Nous avons en effet montré que les sommes pondérées d'entropies d'ordre 1 et 0 sont des fonctionnelles de Lyapunov si le poids de l'entropie d'ordre 0 est assez grand suivant la force de la convection. Ceci donne de nouvelles estimations a priori pour l'équation des milieux poreux avec convection. La preuve est basée sur une extension de la méthode de construction algorithmique d'entropie [96], méthode que nous avons utilisée pour la régularité des solutions de l'équation DLSS.

1.3 Analyse mathématique du modèle de Navier-Stokes quantique

Dans les dernières décennies, les modèles fluides quantiques ont fait l'objet d'une grande attention. Le modèle de Navier-Stokes quantique correspond au modèle classique de Navier-Stokes avec une viscosité qui dépend de la densité, auquel est ajouté le même terme de correction quantique que pour le modèle de dérive-diffusion quantique. Pour ce modèle peu de résultats existent dans la littérature. A. Jüngel a démontré dans [95] un résultat d'existence de solutions en utilisant une définition de solutions faibles consistant à multiplier l'équation des moments par le produit de la densité et d'une fonction test. Ce résultat qui n'est valable que pour certaines valeurs de la constante de Planck et de la constante de viscosité a été par la suite étendu par J. Dong [68] et F. Jiang [93] de sorte que le résultat reste valable quelle que soit la valeur de ces paramètres. Cependant une hypothèse importante de la démonstration est que la pression, considérée comme étant $p(n) = n^\gamma$ où n est la densité, doit avoir un exposant γ strictement plus grand que la dimension, au moins en dimension 3. Il s'agit là d'une hypothèse qui n'est pas physiquement acceptable. De plus, pour ce système je m'intéressais à la limite semi-classique, qui conduit formellement au modèle de Navier-Stokes classique. Or les estimations obtenues dans [95, 68, 93] ne permettent pas de faire ce passage à la limite du fait de leur dépendance en la constante de Planck.

Avec M. Giscon [87], je me suis donc intéressée à l'introduction dans le problème d'un terme de pression froide, suivant en cela les idées développées par [38]. Cette méthode nous a permis de montrer un résultat d'existence de solutions faibles globales en un sens plus classique et sans l'hypothèse $\gamma > 3$. Ceci nous a également permis d'obtenir des estimations, suffisamment indépendantes de la constante de Planck pour pouvoir passer à la limite semi-classique et obtenir la convergence vers le système de Navier-Stokes classique avec une viscosité qui dépend de la densité.

En parallèle, A. Vasseur et Y.J. Yue [132], ont obtenu un résultat tout à fait similaire pour l'existence de solutions mais en ajoutant dans leur cas des termes de traînée au modèle de Navier-Sokes quantique. Ils ont ensuite utilisé ce résultat dans [131] afin d'obtenir l'existence de solutions faibles globales pour les équations de Navier-Stokes classiques avec une viscosité dépendant de la densité en passant à la limite à la fois sur la constante de Planck et sur les coefficients de traînée. Notons que pour obtenir leur résultat ils avaient besoin de passer en premier lieu à la limite sur la constante de Planck. Partant de ces résultats, je me suis alors demandée, en collaboration avec A. Vasseur, si nous pourrions adapter leur méthode afin de pouvoir passer à la limite sur les coefficients de traînée sans passer au préalable à la limite sur la constante de Planck. En utilisant une méthode basée sur la construction de solutions faibles renormalisées en la variable de vitesse (suivant en cela les idées présentées dans [131]), nous avons pu obtenir un tel résultat [104]. Ceci permet donc de démontrer un résultat d'existence de solutions faibles globales à la fois en un sens classique et sans hypothèse sur γ mais également sans ajout de termes supplémentaires tels que des termes de traînée ou de pression froide. De plus la construction étant uniforme par rapport à la constante de Planck, nous obtenons également ainsi la limite semi-classique.

Enfin, partant de cette construction de solutions faibles globales, en collaboration avec D. Bresch et M. Gisclon, je me suis intéressée à la limite de faible viscosité. Formellement, dans cette limite, le système obtenu est celui d'Euler quantique. Plus précisément, nous avons utilisé la notion de solutions dissipatives introduite par P.L. Lions dans le cas incompressible (voir [108]) et qui a ensuite été étendue au cas compressible (voir [79, 78, 16, 128] pour le cas de viscosités constantes et [91, 42] pour des viscosités dépendant de la densité). En particulier, nous avons démontré, grâce à des inégalités d'entropie relative, qu'une solution faible de Navier-Stokes quantique, qui en est aussi une solution dissipative, converge (à sous-suite près) vers une solution dissipative du modèle d'Euler quantique [41]. Ce résultat passe entre autre par l'extension de l'entropie relative introduite récemment dans [42], pour les équations de Navier-Stokes compressibles, au cas plus général des modèles de Navier-Stokes-Korteweg et Euler-Korteweg, modèles plus généraux incluant notamment les modèles quantiques.

Tous ces résultats sont présentés plus en détail dans le chapitre 2.

1.4 Analyse mathématique et numérique d'un modèle de corrosion

Le modèle étudié dans cette partie est proche de celui étudié pendant ma thèse avec Ansgar Jüngel. En effet les équations sont celles du modèle de dérive-diffusion classique. Il s'agit d'un modèle qui a beaucoup été étudié dans le contexte des semiconducteurs et des plasmas. Ici, il est considéré dans le cadre de l'étude de l'enfouissement des déchets nucléaires. L'originalité réside alors dans les conditions aux limites qui sont utilisées. En effet elles sont de type Robin et induisent un couplage fort. De plus il est à noter que, dans les équations adimensionnées étudiées, un très petit paramètre se trouve devant le terme de dérivée en temps de l'une des équations, paramètre qui est noté ε .

Une fois de plus j'ai commencé par m'intéresser à des questions d'existence de solutions pour ce modèle. En particulier avec C. Chainais-Hillairet, nous avons démontré dans [49], un résultat d'existence de solutions faibles globales pour le modèle stationnaire avec des techniques analogues à celles utilisées pour les modèles de semiconducteurs. Nous nous sommes ensuite intéressées au modèle évolutif. Pour celui-ci, nous avons considéré une semi-discrétisation en temps permettant de découpler les équations. Par des arguments classiques (théorème de Lax-Milgram, équivalence des normes, changement de variables de Slotboom), nous avons alors démontré l'existence de solutions du problème semi-discret. Des estimations a priori et des théorèmes classiques de compacité permettent ensuite de passer à la limite et d'obtenir l'existence de solutions faibles globales pour le modèle évolutif [50].

En collaboration avec C. Chainais-Hillairet et P.L. Colin, nous avons fait, par la suite, une étude plus numérique de ce même modèle évolutif. En particulier nous nous sommes intéressés à la convergence d'un schéma complètement discret associé au problème, déjà présenté dans la littérature, mais dont la convergence n'avait pas encore été démontrée [48]. Il s'agit d'un schéma Euler implicite en temps et volumes finis en espace où les flux

de convection-diffusion sont approchés par des flux de Scharfetter-Gummel. Là encore, la démonstration de ce résultat est basée sur des arguments classiques de compacité pour lesquels il faut démontrer au préalable des estimations sur la solution approchée. Cependant, du fait de la particularité des conditions aux limites, des théorèmes de convergence des traces doivent également être utilisés.

Enfin, bien que le résultat précédent n'ait été démontré que pour $\varepsilon > 0$, nous avons fait une étude numérique du comportement asymptotique du schéma et observer qu'il préserve l'asymptotique $\varepsilon \rightarrow 0$. Nous avons également considéré d'autres schémas numériques possibles et étudié entre autre numériquement leur comportement asymptotique [60].

Je présente dans le chapitre 3 plus en détail le résultat d'existence de solutions ainsi que l'étude du schéma Euler implicite en temps et volumes finis en espace pour le modèle évolutif.

1.5 Construction de conditions aux limites appropriées

1.5.1 Modèle de charge et décharge de satellites

Un satellite évolue dans le plasma atmosphérique et interagit avec lui. Ces interactions complexes, dues aux différentes propriétés des diélectriques à la surface du satellite, peuvent induire l'apparition d'importantes différences de potentiel qui peuvent produire des arcs électriques. Ces phénomènes sont à l'origine d'importants dommages irréversibles sur les dispositifs internes ou les panneaux solaires du satellite. Par conséquent, la prévention de l'apparition de charges excessives a motivé une recherche intense en ingénierie spatiale afin d'obtenir des procédures efficaces de simulations numériques (voir [111, 58, 121]).

Le modèle initial est clairement basé sur les équations de Vlasov-Maxwell-Boltzmann qui décrivent à la fois le mouvement des particules chargées et les variations des champs électro-magnétiques. Le système non linéaire d'EDP est complété par des conditions aux limites adéquates sur la surface du satellite et des conditions d'équilibre à l'infini. Le phénomène de charge est précisément gouverné par les conditions aux limites à la surface du satellite pour les champs électro-magnétiques et les densités. Leurs expressions, qui comportent les propriétés des diélectriques à la surface, rendent le problème vraiment non standard. De plus, tenir compte des caractéristiques du plasma environnant peut permettre de réduire la complexité du modèle et il existe une hiérarchie de modèles possibles.

Avec C. Besse, S. Borghol, J.P. Dudon et T. Goudon, nous nous sommes intéressés au cas des orbites basses terrestres (Low Earth Orbit, LEO) *i.e.* une altitude de 100 à 2000 km. Comme le plasma y est dense avec un libre parcours moyen petit, l'utilisation de modèles hydrodynamiques devient raisonnable, au moins pour une première approximation. Ceci est intéressant d'un point de vue numérique puisque cela permet de réduire le nombre d'inconnues. Le modèle alors obtenu correspond aux équations d'Euler complétées d'une équation de Poisson pour le potentiel électrique.

Nous avons d'abord dérivé, analysé et effectué des simulations numériques pour un modèle 1-d simplifié caricatural. Bien que très simple ce modèle était intéressant car il

permettait de mettre en évidence les difficultés mathématiques et d'évaluer facilement l'efficacité des schémas numériques [23].

Nous nous sommes ensuite intéressés à la dérivation de conditions aux limites adéquates pour les quantités macroscopiques du modèle. C'est un problème délicat dû à deux grandes difficultés : le système étant hyperbolique, on ne doit prescrire que les flux entrants, et, l'état Maxwellien n'étant pas compatible avec la condition aux limites cinétique, une couche limite peut apparaître.

Nous avons considéré en première étape une simplification du modèle [24]. Il s'agissait des équations d'Euler évolutives sans prise en compte du champ électrique. En utilisant notamment les idées développées par F. Coron, F. Golse et C. Sulem dans [61] et C. Bardos, F. Golse et Y. Sone dans [15], et une linéarisation locale des équations, nous avons obtenu des conditions aux limites de type Maxwell évolutives en temps pour les quantités macroscopiques du système d'Euler. Le nombre de conditions aux limites nécessaires dépendant du nombre de caractéristiques entrantes et sortantes du problème, plusieurs cas doivent être distingués suivant le signe des valeurs propres du système. Nous avons comparé les résultats obtenus par la résolution du système d'Euler complété des conditions aux limites que nous avons développées et ceux obtenus par la résolution de l'équation cinétique (qui donne le système d'Euler en limite fluide) couplée à une condition de réflexion spéculaire, ou de réflexion diffuse, avec ou sans terme source. Les résultats obtenus montrent que les conditions aux limites ainsi dérivées permettent de reproduire grâce à un modèle macroscopique les phénomènes observés au niveau cinétique. Ce travail sera présenté plus en détail dans le chapitre 4.

De plus, dans le cadre d'un projet au CEMRACS 2010, nous avons ensuite appliqué ces conditions aux limites, et plus particulièrement la théorie dont elles découlent, au système d'Euler linéaire. Nous y avons également ajouté le couplage avec l'équation de Poisson et ainsi ajouté le champ électrique dans le cas non linéaire [26].

1.5.2 Conditions aux limites artificielles

Lorsqu'un problème physique est défini sur un domaine non borné, nous devons, pour la simulation numérique, réduire celui-ci à un domaine borné muni de conditions aux limites adaptées. Une méthode usuelle est l'introduction de conditions aux limites artificielles permettant de conserver les caractéristiques du problème. De telles conditions sont construites de façon à approcher au mieux la solution exacte du problème restreinte au domaine de calcul. Elles sont dites absorbantes si elles conduisent à un problème avec valeurs initiales bien posé pour lequel une énergie est absorbée à la frontière. Si la solution approchée coïncide sur le domaine de calcul avec la solution exacte du problème posé sur le domaine tout entier, elles sont dites transparentes.

En collaboration avec C. Besse, J. Coatleven, S. Fliss et K. Ramdani [27], j'ai proposé, pour l'équation de Helmholtz, une méthode permettant de construire l'opérateur Dirichlet-to-Neumann (DtN) pour des milieux périodiques localement perturbés à symétrie hexagonale. L'approche utilisée est adaptée de celle adoptée dans [82] dans le cas des réseaux carrés, dont l'une des principales hypothèses concernait les périodes correspondantes qui doivent être commensurables, hypothèse non satisfaite dans le cas de réseaux

hexagonaux. Cette approche permet d'obtenir une factorisation de l'opérateur DtN faisant intervenir deux opérateurs non locaux. Le premier est un opérateur de type DtN pour un problème de demi-espace. Le second est un opérateur de type Dirichlet-to-Dirichlet (DtD) lié aux propriétés de symétrie du problème. L'opérateur DtN de demi-espace est caractérisé par une transformée de Floquet-Bloch, une famille de problèmes de bande et une famille d'équations de Riccati stationnaires. L'opérateur DtD, quant à lui, est la solution d'une équation linéaire qui peut être reformulée comme un ensemble d'équations intégrales non standard.

Avec C. Besse et M. Ehrhardt [31], je me suis ensuite intéressée à l'équation linéaire de KdV en une dimension d'espace qui, bien que simple, a beaucoup d'applications. Pour obtenir des conditions aux limites artificielles numériques, plusieurs choix sont possibles. Une première possibilité consiste à dériver les conditions aux limites artificielles au niveau continu puis à les discrétiser pour les utiliser dans un schéma numérique. L'autre possibilité, que nous avons choisie, consiste à commencer par discrétiser en temps et en espace le problème et à dériver seulement ensuite les conditions aux limites qui devront être utilisées dans les simulations numériques. En particulier, nous avons construit les conditions aux limites adaptées pour deux schémas numériques, les schémas de Crank-Nicolson à droite et centré. Pour cela, nous avons commencé par étendre la construction faite au niveau continu dans [137].

Ces deux résultats seront présentés plus en détail dans le chapitre 4.

1.6 Simulation numérique des condensats de Bose-Einstein

La modélisation des condensats de Bose-Einstein fait intervenir une équation de Schrödinger non linéaire, appelée dans ce contexte équation de Gross-Pitaevskii. Lorsqu'on souhaite modéliser des condensats en rotation, l'ajout d'un terme de moment angulaire vient compliquer la situation aussi bien dans le cas dynamique que stationnaire.

Dans le problème dynamique, la présence du terme de rotation rend plus complexe l'intégration temporelle. Avec C. Besse et G. Dujardin [30], nous avons développé une classe d'intégrateurs exponentiels d'ordre élevé, en tirant partie d'un changement de variables permettant de revenir aux coordonnées Lagrangiennes (*i.e.* dans le repère lié au condensat en rotation).

De plus, l'équation de Gross-Pitaevskii est une équation qui a plusieurs invariants, tels que la masse et l'énergie. Avec C. Besse, S. Descombes et G. Dujardin [28], je m'intéresse donc, dans un travail encore en cours, à des schémas numériques qui permettent eux aussi de préserver une discrétisation de celles-ci. En particulier, nous considérons deux méthodes : la méthode de relaxation proposée par C. Besse dans [21] pour une non linéarité cubique et la méthode de Crank-Nicolson proposée dans [65]. Pour la première, nous démontrons que c'est une méthode d'ordre 2, résultat qui n'avait jusqu'à présent été obtenu que numériquement. Nous proposons également une généralisation, préservant également les invariants, au cas de non linéarités quelconques. Pour la seconde, nous nous intéressons

à sa composition par la méthode présentée par exemple dans [129], composition qui permet de monter en ordre tout en gardant les propriétés de préservation des invariants de la méthode.

Ces résultats seront présentés plus en détail dans le chapitre 5.

Chapitre 2

Analyse mathématique du modèle de Navier-Stokes quantique

Dans les dernières décennies, les modèles fluides quantiques ont fait l'objet d'une grande attention due à la diversité de leurs applications possibles. En effet, de tels modèles peuvent être utilisés pour décrire des superfluides [109], des semiconducteurs quantiques [80], des gaz de Bose à faibles interactions [89] et les trajectoires quantiques en mécanique Bohmienne [135]. Récemment des modèles fluides quantiques dissipatifs ont été obtenus. En particulier, sous certaines hypothèses et en utilisant des développements de Chapman-Enskog dans l'équation de Wigner, dans [43] les auteurs ont obtenu le modèle appelé modèle de Navier-Stokes quantique. Celui-ci correspond en fait au modèle de Navier-Stokes classique auquel un terme de correction quantique a été ajouté. Les principales difficultés d'un tel modèle sont la structure fortement non linéaire du terme d'ordre trois de correction quantique et la démonstration de la positivité de la densité de particule. Notons que formellement, la limite semi-classique de ce modèle conduit aux équations de Navier-Stokes compressibles classiques avec une viscosité dépendante de la densité, et, la limite de faible viscosité conduit, quant à elle, au système d'Euler quantique.

2.1 Présentation du problème

Le modèle de Navier-Stokes quantique compressible considéré ici est le suivant, pour $x \in \Omega$ et $t > 0$

$$\partial_t n + \operatorname{div}(n u) = 0, \quad (2.1a)$$

$$\partial_t(n u) + \operatorname{div}(n u \otimes u) + \nabla(p(n)) - 2\varepsilon^2 n \nabla \left(\frac{\Delta \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right) = 2\nu \operatorname{div}(n D(u)), \quad (2.1b)$$

$$n|_{t=0} = n_0, \quad (n u)|_{t=0} = n_0 u_0. \quad (2.1c)$$

Les inconnues du modèle sont la densité de particules n et la vitesse des particules u . Ici $\Omega = \mathbb{T}^d$ correspond au tore de dimension d (avec $1 \leq d \leq 3$), et le terme $u \otimes u$ correspond à la matrice de composantes $u_i u_j$. La fonction $p(n) = n^\gamma$ avec $\gamma > 1$ est la

fonction pression et $D(u)$ représente la partie symétrique du gradient de vitesse, c'est-à-dire $D(u) = (\nabla u + {}^t \nabla u)/2$. Finalement, les paramètres physiques sont la constante de Planck $\varepsilon > 0$ et la constante de viscosité $\nu > 0$.

La correction quantique $(\Delta\sqrt{n})/\sqrt{n}$ peut être interprétée comme un potentiel quantique appelé le potentiel de Bohm et bien connu en mécanique quantique. Ce potentiel de Bohm vient de la formulation dynamique fluide de l'équation de Schrödinger pour une seule particule. La non localité des mécaniques quantiques est approchée par le fait que l'équation d'état ne dépend pas seulement de la densité de particule mais aussi de ses gradients. Ces équations ont été utilisées pour modéliser des champs d'émissions dans des métaux et des tunnels dans des structures métal-isolant-métal et pour simuler des appareils semiconducteurs très petits.

Notons que dans ce problème, les estimations a priori fournissent des contrôles sur le gradient de certaines quantités, ce qui permet d'avoir de la compacité sur la densité n et le moment nu . Cependant il n'est possible d'obtenir un contrôle de nu^2 que dans $L^\infty(\mathbb{R}^+, L^1(\Omega))$. Celui-ci ne permet pas d'empêcher les phénomènes de concentration dans la construction des solutions dans le terme $nu \otimes u$.

Dans [95], en suivant les idées introduites dans [39], et en utilisant une définition de solution faible qui consiste à multiplier l'équation des moments (2.1b) par $n\phi$ avec ϕ une fonction test, A. Jüngel a démontré l'existence globale de solution au problème lorsque $\varepsilon > \nu$. Dans [68], J. Dong a étendu ce résultat au cas $\varepsilon = \nu$, et, dans [93], F. Jiang a montré que le même résultat reste valable lorsque $\nu > \varepsilon$. Le premier problème d'une telle formulation est qu'elle nécessite, dans la démonstration, l'hypothèse $\gamma > 3$ pour $d = 3$ qui n'est pas une hypothèse physiquement acceptable. De plus, les estimations a priori sur la solution dépendent de ε et ν et ne permettent pas de passer à la limite sur l'un ou l'autre des paramètres.

Une autre méthode consiste à introduire des termes supplémentaires tels que des termes de traînée ou une pression froide. Cette dernière est une fonction croissante appropriée vérifiant $\lim_{n \rightarrow 0} p_c(n) = +\infty$. Après avoir été introduite dans [38], cette idée a été développée dans [136] pour les équations classiques ($\varepsilon = 0$) avec des réactions chimiques. En collaboration avec M. Gisclon [87], en ajoutant un terme de pression froide à (2.1), nous avons pu démontrer à la fois l'existence de solutions faibles globales (en un sens plus classique et sans l'hypothèse $\gamma > 3$ pour $d = 3$) et la limite semi-classique ($\varepsilon \rightarrow 0$) du problème.

Dans [132], les auteurs ont utilisé l'ajout de termes de traînée pour obtenir un résultat d'existence analogue, résultat qu'ils ont ensuite utilisé dans [131] pour obtenir l'existence de solutions faibles globales pour les équations de Navier-Stokes compressibles dégénérées en passant à la limite à la fois sur ε et sur les coefficients de traînée. Notons que pour démontrer un tel résultat, ils ont besoin de passer à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ avant de passer à la limite sur les coefficients de traînée.

En collaboration avec A. Vasseur [104], nous avons récemment pu démontrer un résultat d'existence de solutions faibles globales pour (2.1) sans ajout de termes supplémentaires. Nous avons pour cela utilisé une méthode basée sur la construction de solutions faibles renormalisées en la variable de vitesse, suivant en cela les idées présentées dans [131]. Notons que la construction étant uniforme en ε , nous avons également pu obtenir ainsi la limite semi-classique.

Partant de cette construction de solutions faibles globales pour (2.1), nous avons démontré, en collaboration avec D. Bresch et M. Gisclon, l'existence d'une solution dissipative au modèle d'Euler quantique en passant à la limite ν tend vers 0 dans le modèle de Navier-Stokes quantique. La notion de solutions dissipatives est un concept qui a été introduit par P.L. Lions dans le cas incompressible (voir [108]) et qui a ensuite été étendu au cas compressible (voir [79, 78, 16, 128] pour le cas de viscosités constantes et [91, 42] pour des viscosités dépendant de la densité). Afin de définir ce qu'est une solution dissipative pour (2.1) et pour le système limite d'Euler quantique, nous avons dans [41] étendu l'entropie relative introduite récemment dans [42], pour les équations de Navier-Stokes compressibles, au cas plus général des modèles de Navier-Stokes-Korteweg et Euler-Korteweg qui sont des modèles incluant les modèles quantiques.

2.2 Existence de solution et limite semi-classique

Dans cette partie, je présente les résultats obtenus avec ajout d'un terme de pression froide ([87]) et sans ajout d'un tel terme ([104]).

2.2.1 Existence de solutions et limite semi-classique avec ajout d'un terme de pression froide.

Le modèle considéré ici est le modèle (2.1) auquel nous avons ajouté un terme de pression froide, c'est-à-dire pour $x \in \Omega$ et $t > 0$:

$$\partial_t n + \operatorname{div}(n u) = 0, \quad (2.2a)$$

$$\partial_t(n u) + \operatorname{div}(n u \otimes u) + \nabla(p(n) + p_c(n)) - 2\varepsilon^2 n \nabla \left(\frac{\Delta \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right) = 2\nu \operatorname{div}(n D(u)), \quad (2.2b)$$

complété des mêmes conditions initiales et avec :

$$p'_c(n) = \begin{cases} cn^{-4k-1} & \text{pour } n \leq 1, k > 1 \\ n^{\gamma-1}, & \text{pour } n > 1, \gamma > 1 \end{cases},$$

où c est une constante positive.

Définition 2.1. *Le couple (n, u) est une solution faible de (2.2), (2.1c) si l'équation de continuité*

$$\begin{cases} \partial_t n + \operatorname{div}(\sqrt{n} \sqrt{n} u) = 0, \\ n(0, x) = n_0(x) \end{cases} \quad (2.3)$$

est satisfaite au sens des distributions et si pour toute fonction test régulière à support compacte ϕ telle que $\phi(T, \cdot) = 0$ la formulation faible suivante de l'équation des moments

est vérifiée :

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} n_0 u_0 \cdot \phi(\cdot, 0) dx + \int_0^T \int_{\Omega} (nu \cdot \partial_t \phi + n(u \otimes u) : \nabla \phi) dx dt + \int_0^T \int_{\Omega} (p(n) + p_c(n)) \operatorname{div} \phi dx dt \\ &= 2\varepsilon^2 \int_0^T \int_{\Omega} (\sqrt{n} \nabla \sqrt{n} \cdot \nabla \operatorname{div} \phi + 2\nabla \sqrt{n} \otimes \nabla \sqrt{n} : \nabla \phi) dx dt + 2\nu \int_0^T \int_{\Omega} n D(u) : \nabla \phi dx dt. \end{aligned} \quad (2.4)$$

On note

$$E_{\varepsilon}(n, u) = \frac{n}{2} |u|^2 + H(n) + H_c(n) + 2\varepsilon^2 |\nabla \sqrt{n}|^2, \quad (2.5)$$

l'énergie du système (donnée par la somme des énergies cinétique, interne et quantique) dans laquelle H et H_c sont les enthalpies définies par :

$$H''(n) = \frac{p'(n)}{n} \quad \text{et} \quad H_c''(n) = \frac{p'_c(n)}{n}.$$

Notons que puisque $p(n) = n^{\gamma}$, on a : $H(n) = \frac{n^{\gamma}}{\gamma - 1} = \frac{p(n)}{\gamma - 1}$.

Dans [87], nous avons démontré le résultat d'existence suivant :

Théorème 2.1. *Soient $\nu > 0$, $\varepsilon > 0$, $1 \leq d \leq 3$, $T > 0$, $\gamma \geq 1$. Soit (n_0, u_0) tel que $n_0 \geq 0$ et $E_{\varepsilon}(n_0, u_0) < \infty$. Alors il existe une solution faible (n, u) du système (2.2), (2.1c) au sens de la définition 2.1 telle que*

$$\begin{aligned} & n \geq 0 \text{ dans } \mathbb{T}^3, \sqrt{n} \in L^{\infty}(0, T; H^1(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^2(\Omega)), \\ & n \in L^{\infty}(0, T; L^{\gamma}(\Omega)), n^{\gamma} \in L^{5/3}(0, T; L^{5/3}(\Omega)), \\ & \sqrt{n}u \in L^{\infty}(0, T; L^2(\Omega)), n|\nabla u| \in L^2(0, T; L^2(\Omega)), \sqrt{n}|\nabla u| \in L^2(0, T; L^2(\Omega)), \\ & \nabla \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \right) \in L^2(0, T; L^2(\Omega)). \end{aligned}$$

Remarque 2.1. *Bien que le résultat soit valable pour $1 \leq d \leq 3$, dans la démonstration nous nous sommes focalisées uniquement sur le cas $d = 3$. En effet c'est le cas le plus intéressant en terme de difficulté et l'hypothèse $\gamma > 3$ que nous voulions supprimer n'était nécessaire dans [95] que dans ce cas là.*

La démonstration du théorème 2.1 est assez classique et utilise des estimations a priori ainsi qu'une construction de solutions approchées via la méthode de Faedo-Galerkin. Enfin en utilisant de nouveau les estimations a priori et le lemme d'Aubin-Simon [124], on montre la stabilité des solutions ainsi construites.

Plus précisément, on peut montrer l'égalité d'énergie-dissipation :

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega} E_{\varepsilon}(n, u) dx + \nu \int_{\Omega} n |D(u)|^2 dx = 0, \quad (2.6)$$

ainsi que l'égalité d'entropie :

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \int_{\Omega} \left(\frac{n}{2} |u + \nu \nabla \log n|^2 + H(n) + H_c(n) + (2\varepsilon^2 + 4\nu^2) |\nabla \sqrt{n}|^2 \right) dx \\ & + \nu \int_{\Omega} \left(H''(n) |\nabla n|^2 + H_c''(n) |\nabla n|^2 + \varepsilon^2 n |\nabla^2 \log n|^2 + 2n |\nabla u|^2 \right) dx = 0. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Celles-ci nous permettent, entre autre, d'obtenir les estimations indépendantes de ε suivantes :

- p et p_c sont dans $L^{5/3}(0, T; L^{5/3}(\Omega))$,
- $\nabla u \in L^p(0, T; L^q(\Omega))$, $u \in L^p(0, T; L^{q^*}(\Omega))$ avec : $p = 8k/(4k+1)$, $q = 24k/(12k+1)$ et $q^* = 24k/(4k+1)$,
- $\nabla(1/\sqrt{n}) \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$.

De plus, on peut également montrer via les estimations précédentes et l'injection de Sobolev de $H^1(\Omega)$ dans $L^6(\Omega)$ pour $d = 3$, l'estimation clé suivante :

$$\sqrt{n}u \in L^{p'}(0, T; L^{q'}(\Omega)), \quad \text{avec } p', q' > 2.$$

On introduit ensuite la vitesse effective $w = u + \nu \nabla \log(n)$ et on ajoute un terme régularisant pour obtenir le système suivant : pour $x \in \Omega$ et $t > 0$:

$$\partial_t n + \operatorname{div}(n w) = \nu \Delta n, \quad (2.8a)$$

$$\begin{aligned} \partial_t(n w) + \operatorname{div}(n w \otimes w) + \nabla_x(p(n) + p_c(n)) - 2\varepsilon_0 n \nabla \left(\frac{\Delta \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right) \\ = \nu \Delta(n w) + \delta(\Delta w - w), \end{aligned} \quad (2.8b)$$

$$n|_{t=0} = n_0, \quad (n w)|_{t=0} = n_0 w_0, \quad (2.8c)$$

avec $w_0 = u_0 + \nu \nabla \log(n_0)$ et $\varepsilon_0 = \varepsilon^2 - \nu^2$.

Reste à construire une suite de solutions approchées pour (2.8). Pour cela, nous avons suivi les idées développées dans [95] et utilisé une méthode de Faedo-Galerkin. On définit l'espace de dimension fini $X_N = \operatorname{Vect} \{e_1, \dots, e_N\}$, $N \in \mathbb{N}^*$ où les e_i sont les vecteurs d'une base orthonormale de $L^2(\Omega)$. En utilisant le théorème de point fixe de Banach et l'estimation d'énergie, on peut démontrer l'existence d'une suite de solutions globales (n_N^δ, w_N^δ) . Grâce aux estimations a priori, à des estimations sur les dérivées et à l'utilisation du lemme d'Aubin-Simon [124], nous obtenons les convergences fortes nécessaires aux passages à la limite N tend vers l'infini puis δ tend vers 0 (à sous-suites près).

Remarque 2.2. L'estimation $\sqrt{n}w$ dans $L^{p'}(0, T; L^{q'}(\Omega))$ avec $p', q' > 2$ permet d'obtenir une convergence forte de $\sqrt{n_N^\delta} w_N^\delta$ dans $L^2(0, T; L^2(\Omega))$ et ainsi de passer à la limite, par exemple, dans le terme $n_N^\delta w_N^\delta \otimes w_N^\delta$.

Reste finalement à montrer la stabilité des solutions, c'est-à-dire, à montrer qu'une suite de solutions faibles globales $(n_\tau, u_\tau)_\tau$, vérifiant uniformément les inégalités d'énergie et d'entropie, converge (à une sous-suite près) vers une solution (n, u) satisfaisant elle aussi les mêmes inégalités. En particulier, il faut pouvoir passer à la limite dans les termes :

$$n_\tau u_\tau, n_\tau u_\tau \otimes u_\tau, n_\tau D(u_\tau), p(n_\tau), p_c(n_\tau), \nabla \sqrt{n_\tau} \otimes \sqrt{n_\tau}.$$

Ceci est possible grâce au résultat suivant, obtenu une fois de plus via les estimations a priori et le lemme d'Aubin-Simon [124].

Proposition 2.1. *Sous les hypothèses du théorème 2.1, à ε fixé, on a :*

$$\begin{aligned}\sqrt{n_\tau} &\rightarrow \sqrt{n}, & \text{fortement dans } L^2(0, T; H^1(\Omega)), \\ p(n_\tau) &\rightarrow p(n), & \text{fortement dans } L^1(0, T; L^1(\Omega)), \\ p_c(n_\tau) &\rightarrow p_c(n), & \text{fortement dans } L^1(0, T; L^1(\Omega)), \\ 1/\sqrt{n_\tau} &\rightarrow 1/\sqrt{n}, & \text{presque partout,} \\ \sqrt{n_\tau} u_\tau &\rightarrow \sqrt{n} u, & \text{fortement dans } L^2(0, T; L^2(\Omega)).\end{aligned}$$

Considérons maintenant une suite de solutions $(n_\varepsilon, u_\varepsilon)_\varepsilon$ de (2.2) au sens de la définition 2.1. On peut montrer qu'à une sous-suite près, $(n_\varepsilon, u_\varepsilon)_\varepsilon$ converge lorsque ε tend vers 0 vers (n^0, u^0) solution de :

$$\partial_t n^0 + \operatorname{div}(n^0 u^0) = 0, \quad (2.9a)$$

$$\partial_t(n^0 u^0) + \operatorname{div}(n^0 u^0 \otimes u^0) + \nabla(p(n^0) + p_c(n^0)) = 2\nu \operatorname{div}(n^0 D(u^0)), \quad (2.9b)$$

$$n^0|_{t=0} = n_0, \quad (n^0 u^0)|_{t=0} = n_0 u_0, \quad (2.9c)$$

au sens de la définition :

Définition 2.2. *Le couple (n^0, u^0) est une solution faible de (2.9) si l'équation de continuité*

$$\begin{cases} \partial_t n^0 + \operatorname{div}(\sqrt{n^0} \sqrt{n^0} u^0) = 0, \\ n^0(0, x) = n_0(x) \end{cases} \quad (2.10)$$

est satisfaite au sens des distributions et si pour toute fonction test régulière ϕ à support compacte telle que $\phi(T, \cdot) = 0$ la formulation faible suivante de l'équation des moments est vérifiée :

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} n_0 u_0 \cdot \phi(\cdot, 0) dx + \int_0^T \int_{\Omega} (n^0 u^0 \cdot \partial_t \phi + n^0 (u^0 \otimes u^0) : \nabla \phi) dx dt \\ + \int_0^T \int_{\Omega} (p(n^0) + p_c(n^0)) \operatorname{div} \phi dx dt = 2\nu \int_0^T \int_{\Omega} n^0 D(u^0) : \nabla \phi dx dt. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Plus précisément, le résultat obtenu est le suivant :

Théorème 2.2. *Soient $1 \leq d \leq 3$, $T > 0$, $0 < \varepsilon < \nu, \gamma \geq 1$. Soit (n_0, u_0) telle que $n_0 \geq 0$ et $E_\varepsilon(n_0, u_0) < \infty$. Alors pour $(n^\varepsilon, u^\varepsilon)$ solution de (2.2) on a (à une sous-suite près), lorsque ε tend vers 0 :*

$$\begin{aligned}\sqrt{n^\varepsilon} &\rightarrow \sqrt{n^0} & \text{fortement dans } L^2(0, T; L^2(\Omega)), \\ \frac{1}{\sqrt{n^\varepsilon}} &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{n^0}} & \text{presque partout,} \\ \sqrt{n^\varepsilon} u^\varepsilon &\rightarrow \sqrt{n^0} u^0 & \text{fortement dans } L^2(0, T; L^2(\Omega)), \\ u^\varepsilon &\rightharpoonup u^0, & \text{faiblement dans } L^p(0, T; L^{q^*}(\Omega)),\end{aligned}$$

avec $p = \frac{8k}{4k+1}, q^* = \frac{24k}{4k+1}$ et (n^0, u^0) solution de (2.9).

En utilisant les estimations a priori, nous pouvons montrer les mêmes convergences que pour la stabilité. La seule différence est que cette fois $(\sqrt{n_\varepsilon})_\varepsilon$ converge fortement dans $L^2(0, T; L^2(\Omega))$ et non dans $L^2(0, T; H^1(\Omega))$. En effet, cette dernière est obtenue via une estimation qui dépend mal de ε . Nous avons donc cette fois les convergences suivantes :

Proposition 2.2. *Sous les hypothèses du théorème 2.2, on a, lorsque ε tend vers 0,*

$$\begin{aligned} \sqrt{n^\varepsilon} &\rightarrow \sqrt{n}, & \text{fortement dans } L^2(0, T; L^2(\Omega)), \\ p(n^\varepsilon) &\rightarrow p(n), & \text{fortement dans } L^1(0, T; L^1(\Omega)), \\ p_c(n^\varepsilon) &\rightarrow p_c(n), & \text{fortement dans } L^1(0, T; L^1(\Omega)), \\ 1/\sqrt{n^\varepsilon} &\rightarrow 1/\sqrt{n}, & \text{presque partout,} \\ \sqrt{n^\varepsilon} u^\varepsilon &\rightarrow \sqrt{n} u, & \text{fortement dans } L^2(0, T; L^2(\Omega)). \end{aligned}$$

Cette proposition permet de passer à la limite dans les deuxième et troisième intégrales à gauche et la dernière à droite de l'équation (2.4). En utilisant le fait que $\sqrt{n} \in L^2(0, T; L^2(\Omega))$ et $\nabla \sqrt{n} \in L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$, on peut montrer que :

$$2\varepsilon^2 \int_0^T \int_\Omega \sqrt{n} \nabla \sqrt{n} \cdot \nabla \operatorname{div} \phi + 4\varepsilon^2 \int_0^T \int_\Omega \nabla \sqrt{n} \otimes \nabla \sqrt{n} : \nabla \phi \leq C\varepsilon^2,$$

avec C une constante indépendante de ε . Cette dernière nous permet d'obtenir leur convergence vers 0 lorsque ε tend vers 0.

2.2.2 Existence de solutions et limite semi-classique sans ajout d'un terme de pression froide.

Avec A. Vasseur, nous avons montré dans [104] l'existence de solution du système (2.1) sans ajout de terme de pression froide (ou de traînée). Notons que ce résultat est également valable si nous ajoutons au modèles des termes sources mais que, par souci de simplification de la présentation, je les prendrai nuls ici.

Le système (2.1) est ré-écrit sous la forme :

$$\partial_t n + \operatorname{div}(n u) = 0, \tag{2.12a}$$

$$\partial_t(n u) + \operatorname{div}(n u \otimes u) + \nabla(p(n)) - 2 \operatorname{div} \left(\sqrt{\nu n} \mathbb{S}_\nu + \sqrt{\varepsilon^2 n} \mathbb{S}_\varepsilon \right) = 0, \tag{2.12b}$$

$$n|_{t=0} = n_0, \quad (n u)|_{t=0} = n_0 u_0, \tag{2.12c}$$

où :

$$\sqrt{\nu n} \mathbb{S}_\nu = \nu n D(u), \quad \operatorname{div} \left(\sqrt{\varepsilon^2 n} \mathbb{S}_\varepsilon \right) = \varepsilon^2 n \nabla \left(\frac{\Delta \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right). \tag{2.13}$$

La relation (2.13) est démontrée ainsi. Pour la partie quantique, on montre que :

$$2\sqrt{\varepsilon^2 n} \mathbb{S}_\varepsilon = 2\varepsilon^2 \left(\sqrt{n} \left(\nabla^2 \sqrt{n} - 4(\nabla n^{1/4} \otimes \nabla n^{1/4}) \right) \right). \tag{2.14}$$

Pour la partie visqueuse, \mathbb{S}_ν est la partie symétrique de \mathbb{T}_ν avec :

$$\sqrt{\nu n} \mathbb{T}_\nu = \nu \nabla(nu) - 2\nu \sqrt{n} u \cdot \nabla \sqrt{n}. \quad (2.15)$$

Dès que n est régulière et loin de zéro, la partie quantique de (2.13) est équivalente à (2.14) et la fonction \mathbb{T}_ν est formellement $\sqrt{\nu n} \nabla u$. Cependant les estimations a priori ne permettent pas de définir $1/\sqrt{n}$ et ∇u (sans ajout de termes supplémentaires). On définit l'énergie du système (correspondant à (2.5) sans terme de pression froide) par :

$$E(\sqrt{n}, \sqrt{nu}) = \int_{\Omega} \left(n \frac{|u|^2}{2} + \frac{n^\gamma}{\gamma - 1} + 2\varepsilon^2 |\nabla \sqrt{n}|^2 \right) dx,$$

et la dissipation associée :

$$D_E(\mathbb{S}_\nu) = 2 \int_{\Omega} |\mathbb{S}_\nu|^2 dx,$$

qui est formellement :

$$2\nu \int_{\Omega} n |D(u)|^2 dx.$$

On définit également l'entropie BD [36, 39] :

$$\mathcal{E}_{BD}(n, u) = \int_{\Omega} \left(n \frac{|u + \nu \nabla \ln n|^2}{2} + \frac{n^\gamma}{\gamma - 1} + 2\varepsilon^2 |\nabla \sqrt{n}|^2 \right) dx,$$

et sa dissipation associée :

$$\mathcal{D}_{BD}(n, u) = \nu \int_{\Omega} \left(\frac{4}{\gamma} |\nabla n^{\gamma/2}|^2 + \varepsilon^2 n |\nabla^2 \ln n|^2 + 2n |A(u)|^2 \right) dx,$$

où $A(u)$ est la partie anti-symétrique de ∇u . La fonction $\ln n$ n'est pas contrôlée par les estimations a priori. On peut cependant utiliser deux autres quantités \mathcal{E}_0 et \mathcal{D}_ξ^0 :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\sqrt{n}, \sqrt{nu}) &= \int_{\Omega} \left(n \frac{|u|^2}{2} + (2\varepsilon^2 + 4\nu^2) |\nabla \sqrt{n}|^2 + n^\gamma \right) dx, \\ \mathcal{D}_\xi^0(\sqrt{n}, \sqrt{nu}) &= \int_{\Omega} \left(\nu |\nabla n^{\gamma/2}|^2 + \nu \varepsilon^2 \left(|\nabla n^{1/4}|^4 + |\nabla^2 \sqrt{n}|^2 \right) + |\mathbb{T}_\nu|^2 \right) dx. \end{aligned}$$

Par [95], les fonctions \mathcal{E}_0 et \mathcal{D}_ξ^0 sont équivalentes respectivement à $E(\sqrt{n}, \sqrt{nu}) + \mathcal{E}_{BD}(\sqrt{n}, \sqrt{nu})$ et $D_E(\mathbb{S}_\nu) + \mathcal{D}_{BD}(n, u)$ dès que chaque terme peut-être défini et que \mathbb{S}_ν est la partie symétrique de $\mathbb{T}_\nu = \sqrt{\nu n} \nabla u$. Plus précisément, il existe une constante universelle C_* telle que pour tout (n, u) :

$$\begin{aligned} \frac{1}{C_*} (E(\sqrt{n}, \sqrt{nu}) + \mathcal{E}_{BD}(n, u)) &\leq \mathcal{E}(\sqrt{n}, \sqrt{nu}) \leq C_* (E(\sqrt{n}, \sqrt{nu}) + \mathcal{E}_{BD}(n, u)), \\ \frac{1}{C_*} (D_E(\mathbb{S}_\nu) + \mathcal{D}_{BD}(n, u)) &\leq \mathcal{D}_\xi^0(\sqrt{n}, \sqrt{nu}, \mathbb{T}_\nu) \leq C_* (D_E(\mathbb{S}_\nu) + \mathcal{D}_{BD}(n, u)). \end{aligned}$$

Le but ici est de construire des solutions faibles du système (2.12) en utilisant les estimations a priori fournies par les inégalités d'énergie et d'entropie BD. L'idée essentielle est

d'introduire un notion un peu plus forte de solutions faibles que nous appelons les solutions renormalisées. Elles sont définies de la façon suivante (voir la définition 2.4 pour plus de précision). Pour toute fonction $\varphi \in W^{2,\infty}(\mathbb{R}^d)$, il existe deux mesures $\overline{R}_\varphi, R_\varphi \in \mathcal{M}(\mathbb{R}^+ \times \Omega)$ telles que l'équation suivante est vérifiée au sens des distributions :

$$\partial_t(n\varphi(u)) + \operatorname{div}(nu\varphi(u)) + \varphi'(u) \cdot \nabla n^\gamma - 2 \operatorname{div}(\sqrt{n}\varphi'(u)(\sqrt{\nu}\mathbb{S}_\nu + \sqrt{\varepsilon^2}\mathbb{S}_\varepsilon)) = R_\varphi, \quad (2.16)$$

avec \mathbb{S}_ε qui vérifie (2.14), \mathbb{S}_ν la partie symétrique de \mathbb{T}_ν tel que pour tout i, j, k entre 1 et d :

$$\sqrt{\nu n}\varphi'_i(u)[\mathbb{T}_\nu]_{jk} = \nu\partial_j(n\varphi'_i(u)u_k) - 2\sqrt{n}u_k\varphi'_i(u)\partial_j\sqrt{n} + \overline{R}_\varphi, \quad (2.17)$$

et

$$\|R_\varphi\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R}^+ \times \Omega)} + \|\overline{R}_\varphi\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R}^+ \times \Omega)} \leq C\|\varphi''\|_{L^\infty}.$$

Notons qu'en prenant une suite de fonctions φ_n telle que $\varphi_n(y)$ converge vers y_i mais $\|\varphi''\|_{L^\infty}$ converge vers 0, on retrouve formellement (2.12).

Le résultat principal est le suivant :

Théorème 2.3. *1. Il existe une constante universelle $\overline{C}_\star > 0$ telle que ce qui suit soit vrai. Soit $\sqrt{n_0}, \sqrt{n_0}u_0$ telle que \mathcal{E}_0 soit bornée. Alors, pour tout $\varepsilon \geq 0$, il existe une solution renormalisée (\sqrt{n}, \sqrt{nu}) de (2.12) avec :*

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_0(\sqrt{n}(t), \sqrt{n}(t)u(t)) &\leq \mathcal{E}_0(\sqrt{n_0}, \sqrt{n_0}u_0), \quad \text{pour } t > 0, \\ \int_0^\infty \mathcal{D}_\varepsilon^0(\sqrt{n}(t), \sqrt{n}(t)u(t)) dt &\leq \mathcal{E}_0(\sqrt{n_0}, \sqrt{n_0}u_0). \end{aligned}$$

De plus, pour toute fonction $\varphi \in W^{2,\infty}(\mathbb{R}^d)$,

$$\|R_\varphi\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R}^+ \times \Omega)} + \|\overline{R}_\varphi\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R}^+ \times \Omega)} \leq \overline{C}_\star\|\varphi''\|_{L^\infty}\mathcal{E}_0(\sqrt{n_0}, \sqrt{n_0}u_0).$$

Enfin, $n \in C^0(\mathbb{R}^+; L^p(\Omega))$ pour $1 \leq p < \sup(3, \gamma)$, et $nu \in C^0(\mathbb{R}^+; L^{3/2}(\Omega) - \text{faible}) \cap C^0(\mathbb{R}^+; L^{\frac{2\gamma}{\gamma+1}}(\Omega) - \text{faible})$.

2. Toute solution renormalisée de (2.12) est une solution faible de (2.12) avec la même valeur initiale.
3. Considérons une suite $\varepsilon_m \geq 0$, convergeant vers $\varepsilon \geq 0$, $\nu_m > 0$ convergeant vers $\nu > 0$, $(\sqrt{n_{0,m}}, \sqrt{n_{0,m}}u_{0,m})$ telle que $\mathcal{E}_0(\sqrt{n_{0,m}}, \sqrt{n_{0,m}}u_{0,m})$ soit uniformément bornée, et une solution faible renormalisée $(\sqrt{n_m}, \sqrt{n_m}u_m)$ de (2.12). Alors, il existe une sous-suite (toujours notée avec l'indice m), et (\sqrt{n}, \sqrt{nu}) une solution renormalisée de (2.12) de valeur initiale $(\sqrt{n_0}, \sqrt{n_0}u_0)$ et une constante de Planck ε , telle que n_m converge vers n dans $C^0(\mathbb{R}^+; L^p(\Omega))$ pour $1 \leq p < \sup(3, \gamma)$, et n_mu_m converge vers nu dans $C^0(\mathbb{R}^+; L^{3/2}(\Omega) - \text{faible}) \cap C^0(\mathbb{R}^+; L^{\frac{2\gamma}{\gamma+1}}(\Omega) - \text{faible})$. La fonction $\mathbb{T}_{\nu,m}$ converge faiblement dans $L^2(\mathbb{R}^+ \times \Omega)$ vers \mathbb{T}_ν . De plus, pour toute fonction $\varphi \in W^{2,\infty}(\mathbb{R}^d)$, $\sqrt{n_m}\varphi(u_m)$ converge fortement dans $L^p_{\text{loc}}(\mathbb{R}^+ \times \Omega)$ vers $\sqrt{n}\varphi(u)$ pour $1 \leq p < 6$.

La partie stabilité du théorème inclut le cas de la limite semi-classique ε_m^2 tend vers 0. On obtient donc le corollaire suivant :

Corollaire 2.1. *Limite semi-classique.* Considérons $(\sqrt{n_0}, \sqrt{n_0}u_0)$ tel que \mathcal{E}_0 soit bornée, et une solution renormalisée $(\sqrt{n_\varepsilon}, \sqrt{n_\varepsilon}u_\varepsilon)$ de (2.12) avec $\varepsilon > 0$. Alors, il existe une sous-suite (encore notée avec l'indice ε), et $(\sqrt{n}, \sqrt{n}u)$ une solution renormalisée des équations de Navier-Stokes ((2.12) avec $\varepsilon = 0$) avec la même valeur initiale telle que n_ε converge vers n dans $C^0(\mathbb{R}^+; L^p(\Omega))$ pour $1 \leq p < \sup(3, \gamma)$, et $n_\varepsilon u_\varepsilon$ converge vers nu dans $C^0(\mathbb{R}^+; L^{3/2}(\Omega) - \text{faible}) \cap C^0(\mathbb{R}^+; L^{\frac{2\gamma}{\gamma+1}}(\Omega) - \text{faible})$. La fonction $\mathbb{T}_{\nu, \varepsilon}$ converge faiblement dans $L^2(\mathbb{R}^+ \times \Omega)$ vers \mathbb{T}_ν . De plus, pour toute fonction $\varphi \in W^{2, \infty}(\mathbb{R}^d)$, $\sqrt{n_\varepsilon}\varphi(u_\varepsilon)$ converge fortement dans $L^p_{\text{loc}}(\mathbb{R}^+ \times \Omega)$ vers $\sqrt{n}\varphi(u)$ pour $1 \leq p < 6$.

Pour démontrer ces résultats, on introduit le problème :

$$\begin{aligned} n_t + \operatorname{div}(nu) &= 0, \\ (nu)_t + \operatorname{div}(nu \otimes u) + \nabla n^\gamma - 2 \operatorname{div}(\sqrt{\nu n} \mathbb{S}_\nu + \sqrt{\varepsilon n} \mathbb{S}_\varepsilon) &= -r_0 u - r_1 \rho |u|^2 u, \end{aligned} \quad (2.18)$$

pour lequel l'existence de solution a été démontrée dans [132]. L'énergie et l'entropie BD fournissent des contrôles sur

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_r(\sqrt{n}, \sqrt{n}u) &= \int_{\Omega} \left(n \frac{|u|^2}{2} + (2\varepsilon^2 + 4\nu^2) |\nabla \sqrt{n}|^2 + n^\gamma + r_0(n - \ln n) \right) dx, \\ \mathcal{D}_{\mathcal{E}}^r(\sqrt{n}, \sqrt{n}u) &= \int_{\Omega} \left(\nu |\nabla n^{\gamma/2}|^2 + \nu \varepsilon^2 (|\nabla n^{1/4}|^4 + |\nabla^2 \sqrt{n}|^2) + |\mathbb{T}_\nu|^2 + r_0 |u|^2 + r_1 n |u|^4 \right) dx. \end{aligned}$$

et on obtient ainsi les estimations a priori suivantes :

$$\begin{aligned} \sqrt{n} &\in L^\infty(\mathbb{R}^+; L^2(\Omega)), & \nabla \sqrt{n} &\in L^\infty(\mathbb{R}^+; L^2(\Omega)), & \nabla n^{\gamma/2} &\in L^2(\mathbb{R}^+; L^2(\Omega)) \\ \sqrt{n}u &\in L^\infty(\mathbb{R}^+; L^2(\Omega)), & \mathbb{T}_\nu &\in L^2(\mathbb{R}^+; L^2(\Omega)), & \varepsilon \nabla^2 \sqrt{n} &\in L^2(\mathbb{R}^+; L^2(\Omega)), \\ \varepsilon^{1/2} \nabla n^{1/4} &\in L^4(\mathbb{R}^+; L^4(\Omega)), & r_1^{1/4} n^{1/4} u &\in L^4(\mathbb{R}^+; L^4(\Omega)), \\ r_0^{1/2} u &\in L^2(\mathbb{R}^+; L^2(\Omega)), & r_0 \ln n &\in L^\infty(\mathbb{R}^+; L^1(\Omega)). \end{aligned} \quad (2.19)$$

On définit les notions de solutions faibles et solutions faibles renormalisées de (2.18) comme suit.

Définition 2.3. *On dit que $(\sqrt{n}, \sqrt{n}u)$ est une solution faible de (2.18), si elle vérifie les estimations a priori (2.19), et si pour toute fonction $\psi \in \mathcal{C}_c^\infty(\mathbb{R}^+ \times \Omega)$:*

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \int_{\Omega} (n\psi_t + nu \cdot \nabla \psi) dx dt &= 0, \\ \int_0^\infty \int_{\Omega} (nu\psi_t + (nu \otimes u - 2\sqrt{\nu n} \mathbb{S}_\nu - 2\sqrt{\varepsilon n} \mathbb{S}_\varepsilon) \cdot \nabla \psi + F\psi) dx dt &= 0, \end{aligned}$$

avec \mathbb{S}_ν la partie symétrique de \mathbb{T}_ν vérifiant (2.15), \mathbb{S}_ε vérifiant (2.14), et

$$F = -2n^{\gamma/2} \nabla n^{\gamma/2} - r_0 u - r_1 n |u|^2 u, \quad (2.20)$$

et pour tout $\bar{\psi} \in C_c^\infty(\mathbb{R})$:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow 0} \int_{\Omega} n(t, x) \bar{\psi}(x) dx &= \int_{\Omega} n_0(x) \bar{\psi}(x) dx, \\ \lim_{t \rightarrow 0} \int_{\Omega} n(t, x) u(t, x) \bar{\psi}(x) dx &= \int_{\Omega} n_0(x) u_0(x) \bar{\psi}(x) dx. \end{aligned}$$

Définition 2.4. On dit que (\sqrt{n}, \sqrt{nu}) est une solution faible renormalisée de (2.18), si elle vérifie les estimations a priori (2.19), et si pour toute fonction $\varphi \in W^{2,\infty}(\mathbb{R}^d)$, il existe deux mesures $R_\varphi, \bar{R}_\varphi \in \mathcal{M}(\mathbb{R}^+ \times \Omega)$, telles que

$$\|R_\varphi\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R}^+ \times \Omega)} + \|\bar{R}_\varphi\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R}^+ \times \Omega)} \leq C \|\varphi''\|_{L^\infty(\mathbb{R})},$$

où la constante C ne dépend que de la solution (\sqrt{n}, \sqrt{nu}) , et si pour toute fonction $\psi \in C_c^\infty(\mathbb{R}^+ \times \Omega)$,

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \int_{\Omega} (n\psi_t + nu \cdot \nabla \psi) dx dt &= 0, \\ \int_0^\infty \int_{\Omega} \left(n\varphi(u)\psi_t + \left(n\varphi(u)u - (2\sqrt{\nu n}S_\nu + 2\sqrt{\varepsilon^2 n}S_\varepsilon)\varphi'(u) \right) \cdot \nabla \psi \right. \\ &\quad \left. + F \cdot \varphi'(u)\psi \right) dx dt = \langle R_\varphi, \psi \rangle, \end{aligned}$$

avec S_ν la partie symétrique de \mathbb{T}_ν vérifiant (2.17), S_ε vérifiant (2.14), F donnée par (2.20), et pour tout $\bar{\psi} \in C_c^\infty(\mathbb{R})$:

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow 0} \int_{\Omega} n(t, x) \bar{\psi}(x) dx &= \int_{\Omega} n_0(x) \bar{\psi}(x) dx, \\ \lim_{t \rightarrow 0} \int_{\Omega} n(t, x) u(t, x) \bar{\psi}(x) dx &= \int_{\Omega} n_0(x) u_0(x) \bar{\psi}(x) dx. \end{aligned}$$

On peut démontrer le résultat suivant :

Théorème 2.4. 1. Il existe une constante universelle $\bar{C}_\star > 0$ telle que la suite soit vraie. Soit $(\sqrt{n_0}, \sqrt{n_0}u_0)$ tel que \mathcal{E}_r soit bornée. Alors, pour tout $\varepsilon \geq 0$, $r_0 \geq 0$, $r_1 \geq 0$, il existe une solution renormalisée (\sqrt{n}, \sqrt{nu}) de (2.18) avec

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_r(\sqrt{n}(t), \sqrt{n}(t)u(t)) &\leq \mathcal{E}_r(\sqrt{n_0}, \sqrt{n_0}u_0), \quad \text{pour } t > 0, \\ \int_0^\infty \mathcal{D}_\varepsilon^r(\sqrt{n}(t), \sqrt{n}(t)u(t)) dt &\leq \mathcal{E}_r(\sqrt{n_0}, \sqrt{n_0}u_0). \end{aligned}$$

De plus, pour toute fonction $\varphi \in W^{2,\infty}(\mathbb{R}^d)$,

$$\|R_\varphi\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R}^+ \times \Omega)} + \|\bar{R}_\varphi\|_{\mathcal{M}(\mathbb{R}^+ \times \Omega)} \leq \bar{C}_\star \|\varphi''\|_{L^\infty} \mathcal{E}_0(\sqrt{n_0}, \sqrt{n_0}u_0).$$

Enfin, $n \in C^0(\mathbb{R}^+; L^p(\Omega))$ pour $1 \leq p < \sup(3, \gamma)$, et $nu \in C^0(\mathbb{R}^+; L^{3/2}(\Omega) - \text{faible}) \cap C^0(\mathbb{R}^+; L^{\frac{2\gamma}{\gamma+1}}(\Omega) - \text{faible})$.

2. Toute solution renormalisée de (2.18) est une solution faible de (2.18) avec la même valeur initiale.
3. Si $r_0 > 0$, $r_1 > 0$, et $\varepsilon > 0$, alors toute solution faible de (2.18) est aussi une solution renormalisée de (2.18) avec la même valeur initiale.
4. Considérons des suites $\varepsilon_m \geq 0$, $r_{0,m} \geq 0$, $r_{1,m} \geq 0$, $\nu_m > 0$, convergeant respectivement vers $\varepsilon \geq 0$, $r_0 \geq 0$, $r_1 \geq 0$, et $\nu > 0$, $(\sqrt{n_{0,m}}, \sqrt{n_{0,m}}u_{0,m})$ telle que $\mathcal{E}_{r_m}(\sqrt{n_{0,m}}, \sqrt{n_{0,m}}u_{0,m})$ soit uniformément bornée, et une suite de solutions faibles renormalisées associée $(\sqrt{n_m}, \sqrt{n_m}u_m)$ de (2.18). Alors, il existe une sous-suite (encore notée avec l'indice m), et $(\sqrt{n}, \sqrt{n}u)$ une solution renormalisée de (2.18) avec valeur initiale $(\sqrt{n_0}, \sqrt{n_0}u_0)$, constante de Planck ε , et les coefficients de traînée r_0, r_1 telle que n_m converge vers n dans $C^0(\mathbb{R}^+; L^p_{\text{loc}}(\Omega))$ pour $1 \leq p < \sup(3, \gamma)$, et $n_m u_m$ converge vers nu dans $C^0(\mathbb{R}^+; L^{3/2}(\Omega) - \text{faible}) \cap C^0(\mathbb{R}^+; L^{\frac{2\gamma}{\gamma+1}}(\Omega) - \text{faible})$. La fonction $\mathcal{T}_{\nu, m}$ converge faiblement dans $L^2(\mathbb{R}^+ \times \Omega)$ vers \mathcal{T}_ν . De plus, pour toute fonction $\varphi \in W^{2,\infty}(\mathbb{R}^d)$, $\sqrt{n_m}\varphi(u_m)$ converge fortement dans $L^p_{\text{loc}}(\mathbb{R}^+ \times \Omega)$ vers $\sqrt{n}\varphi(u)$ pour $1 \leq p < 10\gamma/3$.

Il est important de voir que ce théorème et le résultat de [132] implique le théorème 2.3. En effet, [132] donne la construction de solutions faibles de (2.18) avec r_0, r_1 et ε strictement positifs. La partie (3) du théorème 2.4 assure que celle-ci est aussi une solution renormalisée. En considérant des suites $r_{0,m}, r_{1,m} \geq 0$ convergeant vers 0, la partie (4) de ce même théorème fournit à la limite une solution renormalisée de (2.12).

La partie (2) du théorème 2.4 est facile à obtenir. La partie (4) s'obtient de façon classique en utilisant les estimations a priori et le lemme d'Aubin-Simon. La partie (1) est une conséquence de [132] et des parties (3) et (4). Enfin, pour démontrer la partie (3), on part de [132] qui donne l'existence d'une solution faible de (2.18). Cependant, les solutions ainsi obtenues n'ont pas la régularité suffisante. Pour palier à ce problème, on introduit une fonction cut-off. A l'aide de celle-ci et de u , on définit une nouvelle variable v . En utilisant des estimations de commutateur à la Di Perna Lions, on obtient les équations satisfaites par n et v . On peut alors passer à la limite sur le paramètre de cut-off et obtenir le résultat.

2.3 La limite de faible viscosité

Formellement, lorsque ν tend vers 0, le système (2.1) tend vers le système d'Euler quantique :

$$\partial_t n + \text{div}(nu) = 0, \quad (2.21a)$$

$$\partial_t(nu) + \text{div}(nu \otimes u) + \nabla p(n) = 2\varepsilon^2 n \nabla \left(\frac{\Delta \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right). \quad (2.21b)$$

Pour ce système, l'existence globale de solutions faibles a été démontrée dans [5, 6] puis dans [44] en supposant irrotationnelle la vitesse initiale, c'est-à-dire en supposant $\text{rot}(n_0 u_0) = 0$. L'existence de solutions fortes locales a également été démontrée (voir [20]) et le caractère

globalement bien posé a récemment été obtenu pour des données irrotationnelles petites dans [10] en supposant une condition naturelle de stabilité sur la pression.

Les modèles de Navier-Stokes quantique et d'Euler quantique appartiennent à des classes de modèles plus générales qui sont les systèmes de Navier-Stokes-Korteweg et d'Euler-Korteweg. Le but ici est d'étendre à ces deux modèles de Korteweg une entropie relative proposée dans [42] pour les équations de Navier-Stokes compressible avec viscosité dépendante de la densité. Ceci nous permet de définir ce que nous appelons des solutions dissipatives pour chacun des systèmes, suivant en cela le concept introduit par P. L. Lions dans le cas incompressible [108] et ensuite étendu au cas compressible (voir [16, 79, 78, 128] pour le cas de viscosités constantes et [42, 91] pour le cas de viscosités dépendant de la densité). Ces résultats nous permettent alors de montrer que dans le cas quantique, une solution faible de (2.1) (dont l'existence est démontrée au paragraphe précédent) qui est également une solution dissipative converge vers une solution dissipative de (2.21) dans la limite ν tend vers 0. Plus précisément, le théorème que nous montrons est le suivant :

Théorème 2.5. *Soit n_0 et u_0 assez régulières. Soit (n^ν, u^ν) une solution faible entropique du système de Navier-Stokes quantique (2.1). Soit (n, u) la limite faible de (n^ν, u^ν) lorsque ν tend vers 0 dans le sens suivant :*

$$\begin{aligned} n^\nu &\rightharpoonup n \text{ faible } \star \text{ dans } L^\infty(0, T; L^\gamma(\Omega)), \\ \sqrt{n^\nu} w^\nu &\rightharpoonup \sqrt{nu} \text{ faible } \star \text{ dans } L^\infty(0, T; L^2(\Omega)), \\ \sqrt{n^\nu} \bar{v}^\nu &\rightharpoonup \varepsilon \sqrt{nv} \text{ faible } \star \text{ dans } L^\infty(0, T; L^2(\Omega)), \end{aligned}$$

avec $nv = \nabla n$. Alors (n, u) est une solution dissipative du système d'Euler quantique (2.21) au sens de la définition 2.5 avec $K(n) = 1/n$.

Ce théorème est directement obtenu en remarquant que toute solution faible entropique est une solution dissipative pour le système de Navier-Stokes quantique et en passant à la limite ν tend vers 0 dans l'inégalité d'entropie relative définissant la notion de solution dissipative pour celui-ci afin de montrer qu'à la limite on obtient celle utilisée pour définir la notion de solution dissipative pour le système d'Euler quantique. Il s'agit donc essentiellement d'obtenir les inégalités d'entropie relative pour chacun des modèles et de donner les définitions de ce qui est appelé solution dissipative pour chacun d'entre eux. Comme dit précédemment nous établissons en fait ces inégalités sur les formulations augmentées des généralisations Korteweg de ces systèmes.

Introduisons donc maintenant les deux systèmes de Korteweg considérés. Ils sont, comme dans la partie précédente, complétés de la condition initiale suivante :

$$n|_{t=0} = n_0, \quad (nu)|_{t=0} = n_0 u_0 \quad \text{pour } x \in \Omega. \quad (2.22)$$

Le système d'Euler-Korteweg est donné par :

$$\partial_t n + \operatorname{div} J = 0, \quad (2.23a)$$

$$\partial_t J + \operatorname{div} \left(\frac{J \otimes J}{n} \right) + \nabla(p(n)) = \varepsilon^2 n \nabla \left(K(n) \Delta n + \frac{1}{2} K'(n) |\nabla n|^2 \right), \quad (2.23b)$$

où $J = J(t, x) = n(t, x)u(t, x)$, $K : (0, \infty) \rightarrow (0, \infty)$ est une fonction régulière telle que $K(n)$ se comporte comme n^s pour $s \in \mathbb{R}$. Comme dit dans [67], on a :

$$n \nabla \left(K(n) \Delta n + \frac{1}{2} K'(n) |\nabla n|^2 \right) = \operatorname{div}(\mathbb{K}),$$

avec

$$\mathbb{K} = \left(n \operatorname{div}(K(n) \nabla n) + \frac{1}{2} (K(n) - n K'(n)) |\nabla n|^2 \right) \mathbb{I}_{\mathbb{R}^d} - K(n) \nabla n \otimes \nabla n.$$

En suivant les idées développées dans [35], avec

$$\mu'(n) = \sqrt{n K(n)}, \quad (2.24)$$

on peut définir la vitesse de dérive v suivante :

$$v = \sqrt{\frac{K(n)}{n}} \nabla n = \frac{\nabla(\mu(n))}{n},$$

et montrer la généralisation de l'identité de Bohm :

$$\operatorname{div}(\mathbb{K}) = \operatorname{div}(\mu(n) \nabla v) + \frac{1}{2} \nabla(\lambda(n) \operatorname{div} v),$$

où

$$\lambda(n) = 2(\mu'(n)n - \mu(n)).$$

On définit alors la formulation augmentée de (2.23) suivante :

$$\partial_t n + \operatorname{div}(n u) = 0, \quad (2.25a)$$

$$\partial_t(n u) + \operatorname{div}(n u \otimes u) + \nabla p(n) = \varepsilon^2 \left[\operatorname{div}(\mu(n) \nabla v) + \frac{1}{2} \nabla(\lambda(n) \operatorname{div} v) \right], \quad (2.25b)$$

$$\partial_t(n v) + \operatorname{div}(n v \otimes u) + \operatorname{div}(\mu(n) {}^t \nabla u) + \frac{1}{2} \nabla(\lambda(n) \operatorname{div} u) = 0, \quad (2.25c)$$

que nous appelons dans la suite système d'Euler-Korteweg augmenté.

Remarque 2.3. Notons que la relation entre λ et μ est exactement la relation BD trouvée dans [37] dans le cadre de Navier-Stokes. De plus, dans toute la suite nous considérons $K(n) = \frac{(s+3)^2}{4} n^s$ avec $s \in \mathbb{R}$ afin d'avoir $\mu(n) = n^{(s+3)/2}$. La constante multiplicative dans la définition de K n'affecte pas la généralité des résultats puisqu'il suffirait de modifier la définition de ε .

En posant $K(n) = 1/n$ (qui conduit à $\mu(n) = n$, $\lambda(n) = 0$ et $v = \nabla \log n$), (2.25) devient :

$$\partial_t n + \operatorname{div}(n u) = 0, \quad (2.26a)$$

$$\partial_t(n u) + \operatorname{div}(n u \otimes u) + \nabla(p(n)) = \varepsilon^2 \operatorname{div}(n \nabla v), \quad (2.26b)$$

$$\partial_t(n v) + \operatorname{div}(n v \otimes u) + \operatorname{div}(n {}^t \nabla u) = 0, \quad (2.26c)$$

qui correspond à la formulation augmentée de (2.21) et sera donc appelée Euler-quantique augmenté.

Le système de Navier-Stokes-Korteweg, quant à lui, peut être écrit :

$$\partial_t n + \operatorname{div}(nu) = 0, \quad (2.27a)$$

$$\begin{aligned} & \partial_t(nu) + \operatorname{div}(nu \otimes u) + \nabla p(n) - 2\nu \operatorname{div}(\mu(n)D(u)) - \nu \nabla(\lambda(n) \operatorname{div} u) \\ & = \varepsilon^2 \left[\operatorname{div}(\mu(n)^t \nabla v) + \frac{1}{2} \nabla(\lambda(n) \operatorname{div} v) \right], \end{aligned} \quad (2.27b)$$

avec v , μ et λ définis ci-dessus. En multipliant (2.27a) par $\mu'(n)$ et en en prenant le gradient, nous avons l'équation suivante sur v :

$$\partial_t(nv) + \operatorname{div}(nv \otimes u) + \operatorname{div}(\mu(n)^t \nabla u) + \frac{1}{2} \nabla(\lambda(n) \operatorname{div} u) = 0. \quad (2.28)$$

En définissant la vitesse effective $w = u + \nu v$ et en utilisant les équations (2.27b) et (2.28) nous obtenons la formulation augmentée :

$$\partial_t n + \operatorname{div}(nu) = 0, \quad (2.29a)$$

$$\begin{aligned} & \partial_t(nw) + \operatorname{div}(nw \otimes u) + \nabla(p(n)) - \nu \operatorname{div}(\mu(n)\nabla w) - \frac{\nu}{2} \nabla(\lambda(n) \operatorname{div} w) \\ & = (\varepsilon^2 - \nu^2) \left[\operatorname{div}(\mu(n)\nabla v) + \frac{1}{2} \nabla(\lambda(n) \operatorname{div} v) \right], \end{aligned} \quad (2.29b)$$

$$\partial_t(nv) + \operatorname{div}(nv \otimes u) + \operatorname{div}(\mu(n)^t \nabla u) + \frac{1}{2} \nabla(\lambda(n) \operatorname{div} u) = 0. \quad (2.29c)$$

Une fois de plus, en prenant $K(n) = 1/n$ dans (2.29), on obtient la formulation augmentée du système de Navier-Stokes quantique :

$$\partial_t n + \operatorname{div}(nu) = 0, \quad (2.30a)$$

$$\partial_t(nw) + \operatorname{div}(nw \otimes u) + \nabla(p(n)) - \nu \operatorname{div}(n\nabla w) = (\varepsilon^2 - \nu^2) \operatorname{div}(n\nabla v), \quad (2.30b)$$

$$\partial_t(nv) + \operatorname{div}(nv \otimes u) + \operatorname{div}(n^t \nabla u) = 0. \quad (2.30c)$$

Notons que dans la limite ν tend vers 0, la variable vraiment intéressante est en fait \bar{v} définie par : $\bar{v} = \sqrt{\varepsilon^2 - \nu^2} v$ sous l'hypothèse $\varepsilon > \nu$. Le système (2.29) devient alors :

$$\partial_t n + \operatorname{div}(nu) = 0, \quad (2.31a)$$

$$\begin{aligned} & \partial_t(nw) + \operatorname{div}(nw \otimes u) + \nabla p(n) - \nu \operatorname{div}(\mu(n)\nabla w) - \frac{\nu}{2} \nabla(\lambda(n) \operatorname{div} w) \\ & = \sqrt{\varepsilon^2 - \nu^2} \left(\operatorname{div}(\mu(n)\nabla \bar{v}) + \frac{1}{2} \nabla(\lambda(n) \operatorname{div} \bar{v}) \right), \end{aligned} \quad (2.31b)$$

$$\begin{aligned} & \partial_t(n\bar{v}) + \operatorname{div}(n\bar{v} \otimes u) - \nu \operatorname{div}(\mu(n)\nabla \bar{v}) - \frac{\nu}{2} \nabla(\lambda(n) \operatorname{div} \bar{v}) \\ & + \sqrt{\varepsilon^2 - \nu^2} \left(\operatorname{div}(\mu(n)^t \nabla w) + \frac{1}{2} \nabla(\lambda(n) \operatorname{div} w) \right) = 0, \end{aligned} \quad (2.31c)$$

que nous appellerons système de Navier-Stokes-Korteweg augmenté dans toute la suite

Rappelons que par [67] et [40], nous pouvons montrer les estimations d'énergie suivantes.

Proposition 2.3. *Toute solution faible (n, u, v) de (2.25) vérifie :*

$$E_{EuK}(n, u, v)(t) \leq E_{EuK}(n, u, v)(0), \quad (2.32)$$

avec :

$$E_{EuK}(t) = E_{EuK}(n, u, v) = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} n |u|^2 + \frac{1}{2} \varepsilon^2 K(n) |\nabla n|^2 + H(n) \right).$$

Proposition 2.4. *Soit (n, \bar{v}, w) une solution faible de (2.31). On a :*

$$\begin{aligned} E_{NSK}(t) + \nu \int_0^t \int_{\Omega} \mu'(n) H''(n) |\nabla n|^2 \\ + \nu \int_0^t \int_{\Omega} \left(\mu(n) (|\nabla w|^2 + |\nabla \bar{v}|^2) + \frac{\lambda(n)}{2} (|\operatorname{div} \bar{v}|^2 + |\operatorname{div} w|^2) \right) \\ \leq E_{NSK}(0), \end{aligned} \quad (2.33)$$

avec :

$$E_{NSK}(t) = \int_{\Omega} \left(\frac{n}{2} |\bar{v}|^2 + \frac{n}{2} |w|^2 + H(n) \right),$$

Dans toute la suite, on notera $H(n|r)$ l'enthalpie modulée définie par :

$$H(n|r) = H(n) - H(r) - H'(r)(n - r),$$

avec r une fonction régulière bornée de (t, x) sur $\mathbb{R}^+ \times \Omega$.

Nous définissons $\mathcal{E}_{EuK}(\rho, u, v|r, U, V)$ et $\mathcal{E}_{NSK}(\rho, \bar{v}, w|r, \bar{V}, W)$ les fonctionnelles d'entropie relatives respectivement associées aux systèmes d'Euler-Korteweg augmenté (2.25) et de Navier-Stokes-Korteweg augmenté (2.31) par :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{EuK}(t) &= \mathcal{E}_{EuK}(n, u, v|r, U, V)(t) \\ &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} n \left(|u - U|^2 + \varepsilon^2 \left| \sqrt{\frac{K(n)}{n}} \nabla n - \sqrt{\frac{K(r)}{r}} \nabla r \right|^2 \right) + \int_{\Omega} H(n|r) \\ &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} n (|u - U|^2 + \varepsilon^2 |v - V|^2) + \int_{\Omega} H(n|r), \end{aligned} \quad (2.34)$$

et

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{NSK}(t) &= \mathcal{E}_{NSK}(n, \bar{v}, w|r, \bar{V}, W) \\ &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} n (|\bar{v} - \bar{V}|^2 + |w - W|^2) + \int_{\Omega} H(n|r) \\ &\quad + \nu \int_0^t \int_{\Omega} \mu(n) (|\nabla \bar{v} - \nabla \bar{V}|^2 + |\nabla w - \nabla W|^2) \\ &\quad + \frac{\nu}{2} \int_0^t \int_{\Omega} \lambda(n) ((\operatorname{div} \bar{v} - \operatorname{div} \bar{V})^2 + (\operatorname{div} w - \operatorname{div} W)^2). \end{aligned} \quad (2.35)$$

De telles énergies mesurent la distance entre une solution faible entropique (n, u, v) (respectivement (n, \bar{v}, w)) et n'importe quelle fonction test assez régulière (r, U, V) (resp. (r, \bar{V}, W)).

Soit U une fonction donnée assez régulière et r une solution forte de :

$$\partial_t r + \operatorname{div}(rU) = 0. \quad (2.36)$$

On introduit la fonction \mathcal{E} données par :

$$r (\partial_t U + U \cdot \nabla U) + \nabla p(r) - \varepsilon^2 \operatorname{div}(\mu(r) {}^t \nabla V) + \frac{1}{2} \nabla(\lambda(r) \operatorname{div} V) = \mathcal{E}(r, U), \quad (2.37)$$

En utilisant $r V = \nabla(\mu(r))$ et l'équation (2.36) nous obtenons :

$$r (\partial_t V + U \cdot \nabla V) + \operatorname{div}(\mu(r) {}^t \nabla U) + \frac{1}{2} \nabla(\lambda(r) \operatorname{div} U) = 0. \quad (2.38)$$

On définit alors la notion de solution dissipative pour le système d'Euler-Korteweg de la façon suivante.

Définition 2.5. Soit $\mu(n) = n^{(s+3)/2}$ (i.e. $K(n) = \frac{(s+3)^2}{4} n^s$) avec $\gamma \geq s + 2$ et $s \geq -1$. Soit n_0 et u_0 des fonctions assez régulières. Le couple (n, u) est une solution dissipative du système d'Euler-Korteweg (2.23) complété de la condition initiale (2.22), si le triplet (n, u, v) avec $n v = \nabla(\mu(n))$ vérifie :

$$\mathcal{E}_{EuK}(t) \leq \mathcal{E}_{EuK}(0) \exp(C t) + b_{EuK}(t) + C \int_0^t b_{EuK}(\xi) \exp(C(t - \xi)) d\xi,$$

avec $C = C(\varepsilon^2, r, U, V)$ une constante uniformément bornée sur $\mathbb{R}^+ \times \Omega$, et

$$b_{EuK}(t) = \int_0^t \int_{\Omega} \frac{n}{r} |\mathcal{E} \cdot (U - u)|,$$

pour toute solution forte (r, U, V) de (2.36)-(2.38).

On introduit ensuite \mathcal{E}^ν donnée par :

$$\begin{aligned} r (\partial_t U + U \cdot \nabla U) + \nabla p(r) - 2\nu \operatorname{div}(\mu(r) D(U)) - \nu \nabla(\lambda(r) \operatorname{div} U) \\ + \varepsilon^2 \left[(\operatorname{div}(\mu(r) {}^t \nabla V) + \frac{1}{2} \nabla(\lambda(r) \operatorname{div} V)) \right] = \mathcal{E}^\nu(r, U). \end{aligned} \quad (2.39)$$

En utilisant

$$rV = \nabla\mu(r), \quad \bar{V} = \sqrt{\varepsilon^2 - \nu^2} V, \quad W = U + \nu V,$$

et l'équation (2.36), nous avons :

$$\begin{aligned} r (\partial_t W + U \cdot \nabla W) + \nabla p(r) - \nu \operatorname{div}(\mu(r) \nabla W) \\ - \frac{\nu}{2} \nabla(\lambda(r) \operatorname{div} W) - \sqrt{\varepsilon^2 - \nu^2} \left(\operatorname{div}(\mu(r) \nabla \bar{V}) + \frac{1}{2} \nabla(\lambda(r) \operatorname{div} \bar{V}) \right) = \mathcal{E}^\nu(r, U), \end{aligned} \quad (2.40)$$

$$r (\partial_t \bar{V} + U \cdot \nabla \bar{V}) + \sqrt{\varepsilon^2 - \nu^2} \left(\operatorname{div}(\mu(r) {}^t \nabla U) + \frac{1}{2} \nabla(\lambda(r) \operatorname{div} U) \right) = 0. \quad (2.41)$$

On définit alors la notion de solution dissipative pour le système de Navier-Stokes-Korteweg de la façon suivante.

Définition 2.6. Soit $\mu(n) = n^{(s+3)/2}$, $\gamma \geq s+2$ et $s \geq -1$. Soit n_0 et u_0 des fonctions assez régulières. Le couple (n, u) est une solution dissipative de (2.27) complétée de la condition initiale (2.22) si le triplet (n, \bar{v}, w) (avec $n v = \nabla \mu(n)$, $\bar{v} = \sqrt{\varepsilon^2 - \nu^2} v$, $w = u + \nu v$) vérifie pour toute solution forte (r, U) de (2.36), (2.39) (ou en d'autres termes pour tout triplet (r, \bar{V}, W) solution forte de (2.36), (2.40)-(2.41))

$$\mathcal{E}_{NSK}(t) \leq \mathcal{E}_{NSK}(0) \exp(F^\nu t) + F^\nu \int_0^t b_{NSK}(\xi) \exp(F^\nu (t - \xi)) d\xi + b_{NSK}(t),$$

avec

$$F^\nu = C \left(1 + \frac{\nu}{\varepsilon^2 - \nu^2} \right), \quad b_{NSK}(t) = \int_0^t \int_\Omega \left[\frac{n}{r} \mathcal{E}^\nu \cdot (W - w) \right],$$

et $C = C(r, U, \bar{V}, W)$ une constante uniformément bornée sur $\mathbb{R}^+ \times \Omega$.

On peut montrer que pour chacun des modèles toute solution faible est également une solution dissipative. En effet on a les résultats suivants pour chacun des deux modèles.

Théorème 2.6. Supposons $\mu(n) = n^{(s+3)/2}$ avec $\gamma \geq s+2$ et $s \geq -1$. Soit (n, u, v) une solution faible de (2.25) et (r, U, V) une solution forte de (2.36)-(2.38) avec $\mathcal{E}(r, U) = 0$. Alors :

$$\mathcal{E}_{EuK}(t) \leq \mathcal{E}_{EuK}(0) + C \int_0^t \mathcal{E}_{EuK}(\xi) d\xi,$$

où $C = C(r, U, V)$ est une constante uniformément bornée sur $\mathbb{R}^+ \times \Omega$.

Théorème 2.7. Supposons $\mu(n) = n^{(s+3)/2}$ avec $\gamma \geq s+2$ et $s \geq -1$. Soit (n, \bar{v}, w) une solution faible du système (2.31) et (r, \bar{V}, W) une solution forte de (2.36), (2.40)-(2.41) avec $\mathcal{E}^\nu(r, U) = 0$. Alors

$$\mathcal{E}_{NSK}(t) \leq \mathcal{E}_{NSK}(0) + F^\nu \int_0^t \mathcal{E}_{NSK}(\xi) d\xi,$$

avec F^ν donnée dans la définition 2.6.

Ces deux résultats donnent, par application du lemme de Gronwall les corollaires suivants.

Corollaire 2.1. Sous les hypothèses du théorème 2.6, on a :

$$\mathcal{E}_{EuK}(t) \leq \mathcal{E}_{EuK}(0) \exp(C t),$$

où $C = C(r, U, V)$ est une constante uniformément bornée sur $\mathbb{R}^+ \times \Omega$.

Corollaire 2.2. Sous les hypothèses du théorème 2.7, on a :

$$\mathcal{E}_{NSK}(t) \leq \mathcal{E}_{NSK}(0) \exp(F^\nu t),$$

où F^ν est donnée dans la définition 2.6.

Les principaux ingrédients des démonstrations des théorèmes 2.6 et 2.7 sont les inégalités d'énergie (2.32) et (2.33), des intégrations par partie, l'inégalité de Young, l'inégalité (4.1) de [78] concernant l'enthalpie modulée et surtout des lemmes techniques permettant par exemple de relier une modulation de la pression et de sa dérivée, ou encore la différence $\mu'(n) - \mu'(r)$ à l'enthalpie modulée. Enfin, pour le théorème 2.7, l'élément clé est une généralisation à $\mu(n) = n^{(s+3)/2}$ de la relation (5) établie dans [42] pour le cas $\mu(n) = n$. Cette relation, très importante, permet de contrôler des termes venant de la pression.

Chapitre 3

Analyse mathématique et numérique d'un modèle de corrosion

A la demande de l'agence nationale pour la gestion des déchets radioactifs, l'ANDRA, des recherches sont menées afin d'étudier la fiabilité de l'enfouissement des déchets nucléaires. Le concept du stockage est le suivant : les déchets sont confinés dans une capsule d'acier cylindrique puis déposés dans une couche d'argile à plusieurs centaines de mètres de profondeur. Les déchets ainsi traités étant des déchets à haute activité et longue vie, il est nécessaire de prendre en compte la dégradation des capsules d'acier utilisées pour le confinement. Celle-ci est due à un processus de corrosion.

Dans ce contexte, le modèle DPCM (Diffusion Poisson Coupled Model) a été développé par Bataillon *et al* [18]. Il permet de décrire les processus de corrosion à la surface de la capsule d'acier. Il suppose que le métal est recouvert d'une couche dense d'oxyde en contact avec l'argile. Le modèle décrit l'évolution de cette couche d'oxyde. Bien que, dans le cadre du stockage, les capsules soient cylindriques, la couche d'oxyde étant très mince (par rapport à la taille de la surface exposée) et les hétérogénéités n'étant pas prises en compte, le modèle DPCM est un modèle 1D.

Il est composé d'équations de dérive-diffusion pour le transport des charges (trois espèces sont considérées : les électrons, les cations Fe^{3+} et les lacunes d'oxygène), couplées à une équation de Poisson pour le potentiel électrostatique. Les interactions (réactions électrochimiques et chutes de potentiel) entre la couche d'oxyde et les autres couches (métal et argile) sont décrites par les lois de Butler-Volmer. Le modèle inclut des équations de déplacements des interfaces.

Des méthodes numériques pour ce modèle ont été élaborées et étudiées par Bataillon *et al* dans [17]. Des expériences numériques avec des valeurs physiques des paramètres ont montré la capacité du modèle à reproduire les comportements physiques attendus. Cependant, des questions théoriques (telles que l'existence de solution ou leur comportement en temps long) et des questions numériques (telles que la convergence du schéma ou le fait qu'il préserve l'asymptotique) n'avaient pas encore été étudiées.

Dans ce chapitre, nous considérons une version simplifiée du modèle DPCM, déjà introduite dans [17]. Dans ce cas particulier, seules deux espèces sont prises en compte :

les électrons et les cations Fe^{3+} . Le déplacement des interfaces n'étant dû qu'aux lacunes d'oxygène dans le modèle DPCM complet et celles-ci n'étant pas prises en compte dans le modèle simplifié, ce dernier est posé sur un domaine fixe. De telles simplifications nous ont permis de démontrer l'existence de solutions faibles globales et de voir comment traiter les conditions aux limites pour l'analyse du schéma numérique introduit dans [17].

3.1 Présentation du problème

Les inconnues du modèle sont les densités d'électrons N et de cations Fe^{3+} P et le potentiel électrique Ψ . Les densités de courant sont respectivement notées J_N et J_P . Elles contiennent un terme de convection et un terme de diffusion. Comme nous ne prenons pas en compte les équations de mouvement des interfaces, le domaine décrivant la couche d'oxyde est l'intervalle $(0, 1)$. Le modèle consiste en deux équations de dérive-diffusion pour les densités couplées à l'équation de Poisson pour le potentiel électrique. Soit $T > 0$, le modèle s'écrit :

$$\partial_t P + \partial_x J_P = 0, \quad J_P = -\partial_x P - 3P\partial_x \Psi, \quad \text{dans } (0, 1) \times (0, T), \quad (3.1a)$$

$$\varepsilon \partial_t N + \partial_x J_N = 0, \quad J_N = -\partial_x N + N\partial_x \Psi, \quad \text{dans } (0, 1) \times (0, T), \quad (3.1b)$$

$$-\lambda^2 \partial_{xx}^2 \Psi = 3P - N + \rho_{hl}, \quad \text{dans } (0, 1) \times (0, T), \quad (3.1c)$$

où λ est la longueur de Debye adimensionnée et ρ_{hl} une constante donnant la densité nette de charge des espèces ioniques dans la matrice hôte. Le paramètre ε représente le quotient des coefficients de mobilité des électrons et des cations et il est donc très petit devant 1.

Comme les équations (3.1a) et (3.1b) pour les densités de charge ont la même forme, dans la suite nous utiliserons plutôt la forme plus synthétique suivante :

$$\varepsilon_u \partial_t u + \partial_x J_u = 0, \quad J_u = -\partial_x u - z_u u \partial_x \Psi, \quad \text{dans } (0, 1) \times (0, T). \quad (3.2)$$

Pour $u = P, N$, on a respectivement $z_u = 3, -1$ et $\varepsilon_u = 1, \varepsilon$.

Regardons maintenant de plus près les conditions aux limites. Des charges sont créées et utilisées aux deux interfaces $x = 0$ et $x = 1$. Les réactions électrochimiques aux interfaces sont décrites par les lois de Butler-Volmer. Elles conduisent à des conditions aux limites de type Robin pour N et P qui, comme dans [17], ont exactement la même forme. Par conséquent, pour $u = P, N$, on a :

$$-J_u = r_u^0(u, \Psi) \quad \text{sur } \{x = 0\} \times (0, T), \quad (3.3a)$$

$$J_u = r_u^1(u, \Psi, V) \quad \text{sur } \{x = 1\} \times (0, T), \quad (3.3b)$$

où V est un potentiel appliqué donné (ici nous ne considérons que le cas potentiostatique) et r_u^0 et r_u^1 sont des fonctions linéaires et croissantes par rapport à u . Plus précisément, du fait des réactions électrochimiques aux interfaces, nous avons pour $u = P, N$:

$$r_u^0(s, x) = \beta_u^0(x)s - \gamma_u^0(x), \quad (3.4a)$$

$$r_u^1(s, x, V) = \beta_u^1(V - x)s - \gamma_u^1(V - x), \quad (3.4b)$$

où les fonctions $(\beta_u^i)_{i=0,1}, (\gamma_u^i)_{i=0,1}$ sont données. Celles-ci dépendent de beaucoup de paramètres : les coefficients d'interface cinétique $(m_u^i, k_u^i)_{i=0,1}$, les coefficients de transfert $(a_u^i, b_u^i)_{i=0,1}$, l'occupation maximale pour les cations octaédriques dans le réseau hôte P^{max} et la densité d'électrons d'état dans le métal N^{max} . Pour $u = P, N$, les fonctions $(\beta_u^i)_{i=0,1}, (\gamma_u^i)_{i=0,1}$ sont données par :

$$\beta_u^i(x) = m_u^i e^{-z_u b_u^i x} + k_u^i e^{z_u a_u^i x}, \quad i = 0, 1, \quad (3.5a)$$

$$\gamma_u^0(x) = m_u^0 u^{max} e^{-z_u b_u^0 x}, \quad \gamma_u^1(x) = k_u^1 u^{max} e^{z_u a_u^1 x}. \quad (3.5b)$$

Dans tout le chapitre nous supposerons que les coefficients cinétiques d'interface et les coefficients de transfert sont des constantes données vérifiant :

$$m_u^0, k_u^0, m_u^1, k_u^1 > 0, \quad \text{pour } u = P, N, \quad (3.6)$$

$$a_u^0, b_u^0, a_u^1, b_u^1 \in [0, 1], \quad \text{pour } u = P, N. \quad (3.7)$$

On suppose également que ρ_{hl} ne dépend pas de x et que

$$3P^{max} - N^{max} + \rho_{hl} = 0. \quad (3.8)$$

En effet, dans les applications (voir [18]), le scaling du modèle conduit à $\rho_{hl} = -5$, $P^{max} = 2$ et $N^{max} = 1$, de sorte que la relation (3.8) est satisfaite.

Les conditions aux limites pour l'équation de Poisson prennent en compte le fait que le métal comme la solution peuvent être chargés puisqu'ils sont respectivement des conducteurs électronique et ionique. Une telle accumulation de charges induit un champ électrique donné par la loi de Gauss. Ces accumulations dépendent de la différence de potentiel à l'interface donnée par la loi usuelle d'Helmholtz qui relie la différence de potentiel à la capacitance. Les paramètres $\Delta\Psi_0^{pzc}$ et $\Delta\Psi_1^{pzc}$ sont les différences de potentiel correspondant à la non accumulation de charges respectivement dans le métal et dans la solution. Finalement, les conditions aux limites pour le potentiel électrique sont données par :

$$\Psi - \alpha_0 \partial_x \Psi = \Delta\Psi_0^{pzc}, \quad \text{sur } \{x = 0\} \times (0, T), \quad (3.9a)$$

$$\Psi + \alpha_1 \partial_x \Psi = V - \Delta\Psi_1^{pzc}, \quad \text{sur } \{x = 1\} \times (0, T), \quad (3.9b)$$

où α_0 et α_1 sont des paramètres positifs sans dimension venant du scaling utilisé.

Le système est complété de conditions initiales données dans $L^\infty(0, 1)$:

$$u(x, 0) = u^0(x), \quad \text{pour } u = P, N. \quad (3.10)$$

De plus, nous supposons qu'elles vérifient :

$$0 \leq u^0 \leq u^{max}, \quad \text{p.p. sur } (0, 1), \quad \text{pour } u = P, N. \quad (3.11)$$

Dans toute la suite du chapitre nous noterons (\mathcal{P}) le modèle de corrosion donné par (3.1), (3.4), (3.5), (3.9) et (3.10).

3.2 Existence de solutions

En collaboration avec C. Chainais-Hilliaret, nous avons montré dans [50], l'existence de solutions faibles bornées pour le modèle de corrosion (\mathcal{P}). Le résultat obtenu est le suivant :

Théorème 3.1. *Supposons que les conditions (3.6), (3.7), (3.8) et (3.11) soient vérifiées. Supposons de plus que :*

$$-\frac{1}{3a_P^0} (1 + \log(a_P^0 k_P^0 \alpha_0)) \leq \Delta \Psi_0^{pzc} \leq \frac{1}{a_N^0} (1 + \log(a_N^0 k_N^0 \alpha_0)), \quad (3.12a)$$

$$-\frac{1}{b_N^1} (1 + \log(b_N^1 m_N^1 \alpha_1)) \leq \Delta \Psi_1^{pzc} \leq \frac{1}{3b_P^1} (1 + \log(b_P^1 m_P^1 \alpha_1)). \quad (3.12b)$$

Alors le problème (\mathcal{P}) admet une solution faible (N, P, Ψ) définie par :

- $P, N \in L^\infty([0, T] \times (0, 1)) \cap L^2(0, T; H^1(0, 1))$ pour tout $T > 0$,
- $\Psi \in L^2(0, T; H^1(0, 1))$ pour tout $T > 0$

et, pour $u = N, P, \forall \varphi \in L^2(0, T; H^1(0, 1))$,

$$\begin{aligned} & -\varepsilon_u \int_0^T \int_0^1 u \partial_t \varphi dx dt - \varepsilon_u \int_0^1 u_0(x) \varphi(0, x) dx - \int_0^T \int_0^1 (-\partial_x u - z_u u \partial_x \Psi) \partial_x \varphi dx dt \\ & + \int_0^T [(\beta_u^1(V - \Psi(t, 1))u(t, 1) - \gamma_u^1(V - \Psi(t, 1))) \varphi(t, 1) \\ & + (\beta_u^0(\Psi(t, 0))u(t, 0) - \gamma_u^0(\Psi(t, 0))) \varphi(t, 0)] dt = 0, \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} & \lambda^2 \int_0^T \int_0^1 \partial_x \Psi \partial_x \varphi dx dt - \int_0^T \frac{\lambda^2}{\alpha_1} (V - \Psi(t, 1) - \Delta \Psi_1^{pzc}) \varphi(t, 1) dt \\ & + \int_0^T \frac{\lambda^2}{\alpha_0} (\Psi(t, 0) - \Delta \Psi_0^{pzc}) \varphi(t, 0) dt = \int_0^T \int_0^1 (3P - N + \rho_{hl}) \varphi dx dt. \end{aligned} \quad (3.14)$$

De plus les densités N et P vérifient pour tout $t \in [0, T]$ et $x \in (0, 1)$:

$$0 \leq P(t, x) \leq P^m, \quad 0 \leq N(t, x) \leq N^m. \quad (3.15)$$

La démonstration de ce résultat repose sur l'existence d'une solution pour le schéma semi-discrétisé en temps associé au problème, puis à l'obtention d'estimations a priori permettant de passer à la limite. Plus précisément, le schéma semi-discret en temps que nous considérons est le suivant. Nous introduisons $(t_k)_{0 \leq k \leq K}$ une subdivision de l'intervalle en temps $[0, T]$ pour T fixé. Le pas de temps est noté dans la suite Δt ($\Delta t = T/K$) et nous avons $t_k = k\Delta t$ pour tout $0 \leq k \leq K$. En posant comme condition initiale :

$$P^0 = P_0, N^0 = N_0, \quad (3.16)$$

pour tout $0 \leq k \leq K - 1$, nous considérons le système :

$$-\lambda^2 \partial_{xx} \Psi^k = 3P^k - N^k + \rho_{hl}, \quad \text{dans } (0, 1), \quad (3.17)$$

$$\frac{\varepsilon_u}{\Delta t} (u^{k+1} - u^k) + \partial_x J_u^k = 0, \quad J_u^k = -\partial_x u^{k+1} - z_u u^{k+1} \partial_x \Psi^k, \quad \text{dans } (0,1), \quad (3.18)$$

avec : $u = P, N$. Il est complété par les conditions aux bords :

$$\Psi^k - \alpha_0 \partial_x \Psi^k = \Delta \Psi_0^{pzc}, \quad \text{en } x = 0, \quad (3.19a)$$

$$\Psi^k + \alpha_1 \partial_x \Psi^k = V - \Delta \Psi_1^{pzc}, \quad \text{en } x = 1, \quad (3.19b)$$

$$-J_u^k = \beta_u^0(\Psi^k) u^{k+1} - \gamma_u^0(\Psi^k), \quad \text{en } x = 0, \quad \text{pour } u = P, N, \quad (3.20a)$$

$$J_u^k = \beta_u^1(V - \Psi^k) u^{k+1} - \gamma_u^1(V - \Psi^k), \quad \text{en } x = 1, \quad \text{pour } u = P, N. \quad (3.20b)$$

Pour ce système semi-discret, nous pouvons montrer le résultat suivant donnant l'existence d'une unique solution.

Théorème 3.2. *Sous les hypothèses du théorème 3.2, le schéma semi-discret (3.16)–(3.20) admet une unique solution faible $((\Psi^k)_{0 \leq k \leq K-1}, (P^k, N^k)_{0 \leq k \leq K})$ avec $\Psi^k \in H^1(0, 1)$ pour tout $0 \leq k \leq K - 1$ et $P^k, N^k \in H^1(0, 1)$ pour tout $1 \leq k \leq K$.*

Pour démontrer ce théorème, nous commençons par remarquer que le système (3.17)–(3.20) est découplé. En effet, connaissant u^k (pour $u = N, P$), Ψ^k est définie comme la solution du problème (3.17), (3.19) dont l'équation (3.17) est une équation elliptique classique. De ce fait si le terme de droite est dans $L^2(0, 1)$ alors en utilisant une équivalence de norme dans $H^1(0, 1)$ et, en appliquant le théorème de Lax-Milgram à la formulation variationnelle associée, on peut facilement montrer l'existence d'une unique solution $\Psi^k \in H^1(0, 1)$. L'injection de $H^1(0, 1)$ dans $C^0([0, 1])$ permet de donner un sens aux conditions aux limites (3.20). Alors Ψ^k étant connu, u^{k+1} (pour $u = N, P$) est obtenu comme la solution du système (3.18), (3.20) dont l'équation (3.18) est une équation de convection-diffusion. En utilisant le changement de variable de Slotboom, on transforme celle-ci en une équation elliptique classique pour laquelle on peut à nouveau montrer l'existence d'une solution à la formulation variationnelle associée.

Grâce au problème semi-discret (3.16)–(3.20) et au théorème 3.2, nous pouvons définir une solution approchée du modèle (\mathcal{P}) constante par morceaux en temps. Elle est notée $(P_{\Delta t}, N_{\Delta t}, \Psi_{\Delta t})$ et est définie par :

$$P_{\Delta t}(t, x) = P^k(x), \quad N_{\Delta t}(t, x) = N^k(x), \quad \forall (t, x) \in (t_{k-1}, t_k] \times (0, 1), \quad \forall 1 \leq k \leq K, \quad (3.21a)$$

$$\Psi_{\Delta t}(t, x) = \Psi^{k-1}(x), \quad \forall (t, x) \in (t_{k-1}, t_k] \times (0, 1), \quad \forall 1 \leq k \leq K. \quad (3.21b)$$

Le but est ensuite de montrer que lorsque Δt tend vers 0, la suite de solutions approchées $(P_{\Delta t}, N_{\Delta t}, \Psi_{\Delta t})_{\Delta t}$ tend vers (P, N, Ψ) vérifiant (3.13)–(3.14). Pour ce faire, nous commençons par montrer des estimations a priori : des estimations L^∞ pour $N_{\Delta t}$ et $P_{\Delta t}$, et, des estimations $L^2(0, T, H^1(0, 1))$ pour $\Psi_{\Delta t}$, $N_{\Delta t}$ et $P_{\Delta t}$. En introduisant ensuite un opérateur de décalage, nous montrons des estimations sur les translatées en temps. Enfin, en utilisant des arguments de compacité à la Aubin-Simon (voir [124]), nous établissons les convergences suivantes :

Proposition 3.1. *Supposons les hypothèses du théorème 3.2 vérifiées. Soit $(P_{\Delta t}, N_{\Delta t}, \Psi_{\Delta t})_{\Delta t}$ une suite de solutions approchées donnée par le schéma semi-discret (3.16)-(3.20) et (3.21). Alors, il existe*

$$(P, N) \in L^\infty([0, T] \times (0, 1)) \cap L^2(0, T, H^1(0, 1)) \text{ et } \Psi \in L^2(0, T, H^1(0, 1)),$$

tels que, à une sous-suite près, lorsque $\Delta t \rightarrow 0$:

- $\Psi_{\Delta t} \rightarrow \Psi$ fortement dans $L^2(0, T; \mathcal{C}([0, 1]))$,
- $u_{\Delta t} \rightarrow u$ fortement dans $L^2(0, T; \mathcal{C}([0, 1]))$, pour $u = N, P$,
- $\partial_x u_{\Delta t} \rightharpoonup \partial_x u$ faiblement dans $L^2(0, T; L^2(0, 1))$, pour $u = N, P$,
- $\partial_x \Psi_{\Delta t} \rightharpoonup \partial_x \Psi$ faiblement dans $L^2(0, T; L^2(0, 1))$.

Des arguments classiques permettent d'obtenir que la limite (P, N, Ψ) vérifie (3.13)-(3.14). Les estimations (3.15) sont une conséquence directe du passage à la limite dans les estimations a priori L^∞ obtenues pour $N_{\Delta t}$ et $P_{\Delta t}$.

Remarque 3.1. *Il est à noter que les hypothèses (3.12) sur les paramètres du modèle n'ont pas de sens physique. En effet, elles relient les paramètres $(a_u^i, b_u^i, m_u^i, k_u^i)$ pour $u = N, P$ et $i = 0, 1$) venant de la cinétique des réactions chimiques avec les paramètres $(\alpha_i, \Delta \Psi_i^{pzc})$ pour $i = 0, 1$) donnés par la physique du problème. Il est tout de même possible d'ajuster les paramètres de sorte que ces conditions soient satisfaites mais elles ne le sont pas toujours (voir par exemple les cas tests proposés dans [17]). Ces hypothèses sont mathématiquement nécessaires dans la démonstration du théorème 3.2, puisqu'elles permettent d'assurer des propriétés de négativité de certaines fonctions sur toute la droite réelle. Notons cependant qu'elles pourraient être un peu relâchées puisque pour la démonstration seules des propriétés de négativité en certains points, et non sur toute la droite réelle, sont requises.*

3.3 Convergence d'un schéma volume fini

En collaboration avec C. Chainais-Hillairet et P.L. Colin nous avons utilisé les mêmes idées que celles présentées dans la section précédente pour montrer la convergence d'un schéma complètement discret [48]. Celui-ci correspond à une discrétisation Euler implicite en temps et volumes finis en espace où les flux de convection-diffusion sont approchés par des flux de Scharfetter-Gummel. De plus, bien que le résultat de convergence ne soit obtenu que pour $\varepsilon > 0$, nous montrons numériquement que le schéma présenté préserve l'asymptotique dans la limite ε tend vers 0. Rappelons que ce paramètre intervient dans l'équation sur N devant le terme de dérivée en temps.

Comme dans la section précédente, nous introduisons $(t_k)_{0 \leq k \leq K}$ une subdivision de l'intervalle en temps $[0, T]$ pour T fixé. Le pas de temps est noté dans la suite Δt ($\Delta t = T/K$) et nous avons $t_k = k\Delta t$ pour tout $0 \leq k \leq K$. Nous introduisons également \mathcal{T} une subdivision de l'intervalle $[0, 1]$ constituée d'une famille de sous-intervalles $(x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}})$ où $i \in \llbracket 1; I \rrbracket$ et

$$0 = x_{1/2} < x_{3/2} < \cdots < x_{I-1/2} < x_{I+1/2} = 1.$$

Nous définissons $x_i = \frac{x_{i+1/2} + x_{i-1/2}}{2}$, pour $i \in \llbracket 1; I \rrbracket$ et $x_0 = x_{1/2} = 0$, $x_{I+1} = x_{I+1/2} = 1$. De plus, nous posons :

$$\begin{aligned} h_i &= x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}, & \forall i \in \llbracket 1; I \rrbracket, \\ h_{i+\frac{1}{2}} &= x_{i+1} - x_i, & \forall i \in \llbracket 0; I \rrbracket. \end{aligned}$$

La taille de la subdivision est donnée par : $h = \max \{h_i, i \in \llbracket 1; I \rrbracket\}$. Le schéma que nous avons considéré est le suivant : pour $i \in \llbracket 1; I \rrbracket$, $k \in \llbracket 0; K-1 \rrbracket$, et $u = N, P$,

$$-\lambda^2 \left(d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} - d\Psi_{i-\frac{1}{2}}^{k+1} \right) = h_i \left(3P_i^{k+1} - N_i^{k+1} + \rho_{hl} \right), \quad (3.22a)$$

$$\varepsilon_u h_i \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t} + \mathcal{F}_{u, i+\frac{1}{2}}^{k+1} - \mathcal{F}_{u, i-\frac{1}{2}}^{k+1} = 0. \quad (3.22b)$$

Les flux numériques sont définis pour $i \in \llbracket 0; I \rrbracket$ par :

$$d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} = \frac{\Psi_{i+1}^{k+1} - \Psi_i^{k+1}}{h_{i+\frac{1}{2}}}, \quad (3.23a)$$

$$\mathcal{F}_{u, i+\frac{1}{2}}^{k+1} = \frac{B \left(z_u h_{i+\frac{1}{2}} d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} \right) u_i^{k+1} - B \left(-z_u h_{i+\frac{1}{2}} d\Psi_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} \right) u_{i+1}^{k+1}}{h_{i+\frac{1}{2}}}, \quad (3.23b)$$

où B est la fonction de Bernoulli :

$$B(x) = \frac{x}{e^x - 1}, \quad \forall x \neq 0 \quad \text{et} \quad B(0) = 1.$$

Le schéma est complété par les conditions aux limites discrètes suivantes : pour $k \in \llbracket 0; K-1 \rrbracket$,

$$\Psi_0^{k+1} - \alpha_0 d\Psi_{\frac{1}{2}}^{k+1} = \Delta \Psi_0^{pzc}, \quad (3.24a)$$

$$\Psi_{I+1}^{k+1} + \alpha_1 d\Psi_{I+\frac{1}{2}}^{k+1} = V - \Delta \Psi_1^{pzc}, \quad (3.24b)$$

$$-\mathcal{F}_{u, \frac{1}{2}}^{k+1} = \beta_u^0 \left(\Psi_0^{k+1} \right) u_0^{k+1} - \gamma_u^0 \left(\Psi_0^{k+1} \right), \quad (3.24c)$$

$$\mathcal{F}_{u, I+\frac{1}{2}}^{k+1} = \beta_u^1 \left(V - \Psi_{I+1}^{k+1} \right) u_{I+1}^{k+1} - \gamma_u^1 \left(V - \Psi_{I+1}^{k+1} \right), \quad (3.24d)$$

et par la condition initiale : pour $i \in \llbracket 1; I \rrbracket$,

$$u_i^0 = \frac{1}{h_i} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u^0(x) dx. \quad (3.25)$$

Le schéma (3.22)-(3.25) sera noté dans toute la suite (\mathcal{S}).

Remarque 3.2. Prendre B comme étant la fonction de Bernoulli dans la définition des flux conduit à une approximation de Scharfetter-Gummel des flux de convection-diffusion. Ceux-ci ont été introduits par Il'in dans [92], et, Scharfetter et Gummel dans [123], pour la simulation numérique du système de dérive-diffusion utilisé dans la modélisation des semiconducteurs. Lazarov, Mishev et Vassilevsky dans [105] ont établi qu'ils permettent d'obtenir une approximation d'ordre 2 en espace. Le caractère dissipatif du schéma de Scharfetter-Gummel associé à une discrétisation Euler implicite en temps a été démontré dans [84] et dans [56]. La propriété principale de ces flux est qu'ils préservent généralement les états stationnaires.

Dans [17], l'existence de solutions pour le schéma (\mathcal{S}) a été démontrée sous des hypothèses analogues à celles utilisées pour le résultat d'existence du modèle continu donné dans la section précédente dans le cas $\varepsilon > 0$. Nous avons étendu celui-ci au cas $\varepsilon = 0$. L'existence de solution au schéma étant établie, nous pouvons définir une solution approchée constante par maille. Pour une subdivision \mathcal{T} de taille h donnée et pour un pas de temps Δt fixé, nous définissons, pour $w = N, P$ ou Ψ ,

$$w_h^k = \sum_{i=1}^I w_i^k \mathbb{1}_{(x_{i-1/2}, x_{i+1/2})} + w_0^k \mathbb{1}_{\{x=0\}} + w_{I+1}^k \mathbb{1}_{\{x=1\}}, \quad \text{for } k \in \llbracket 0; K \rrbracket, \quad (3.26)$$

$$w_{h, \Delta t} = \sum_{k=0}^{K-1} w_h^{k+1} \mathbb{1}_{[t^k, t^{k+1})}. \quad (3.27)$$

Pour une suite de subdivisions et de pas de temps $(\mathcal{T}_m, \Delta t_m)_m$ telle que $h_m \rightarrow 0$ et $\Delta t_m \rightarrow 0$ lorsque $m \rightarrow +\infty$, nous pouvons définir une suite de solutions approchées $(P_m, N_m, \Psi_m)_m$ avec $w_m = w_{h_m, \Delta t_m}$ pour $w = P, N$ ou Ψ . Il est alors possible de démontrer la convergence d'une telle suite vers une solution faible du modèle (\mathcal{P}) .

Théorème 3.3. Soit $\varepsilon > 0$, $\alpha_0 > 0$, $\alpha_1 > 0$. Supposons (3.6), (3.7), (3.8), (3.11), (3.12) vérifiées. Alors, il existe P, N et $\Psi \in L^2(0, T; H^1(0, 1))$ telles que, à une sous-suite près, lorsque $m \rightarrow +\infty$,

$$\begin{aligned} P_m &\rightarrow P \quad \text{fortement dans } L^2(0, T; L^2(0, 1)), \\ N_m &\rightarrow N \quad \text{fortement dans } L^2(0, T; L^2(0, 1)), \\ \Psi_m &\rightarrow \Psi \quad \text{fortement dans } L^2(0, T; L^2(0, 1)), \end{aligned}$$

où (P, N, Ψ) est une solution faible de (\mathcal{P}) au sens de la définition donnée dans le théorème 3.1.

La démonstration de ce résultat est basée sur des arguments classiques de compacité pour lesquels il faut démontrer au préalable des estimations sur la solution approchée. A cause des conditions aux limites particulières du problème, des résultats supplémentaires de convergences des traces doivent être utilisés. Ils sont obtenus en suivant les idées développées dans [34].

Bien que le théorème de convergence ne puisse être démontré que pour $\varepsilon > 0$, nous avons également regardé numériquement le comportement du schéma lorsque ε tend vers

0. Pour cela nous avons utilisé un cas test proche d'un cas réel donné dans [17]. Dans le cas test utilisé, le potentiel V correspond à un potentiel appliqué. Les valeurs des paramètres que nous avons utilisées sont présentées dans le tableau 3.1. Notons que les choix faits

λ^2	α_0	α_1	P^m	N^m	k_P^0	k_N^0	k_P^1	k_N^1
$1.1 \cdot 10^{-3}$	0.177	0.089	2	1	10^8	10^{-18}	10^{11}	26.8
m_P^0	m_N^0	m_P^1	m_N^1	a_P^0	a_N^0	b_P^0	b_N^0	a_P^1
0	$1.45 \cdot 10^{-24}$	10^8	26.8	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
a_N^1	b_P^1	b_N^1	$\Delta\Psi_0^{pzc}$	$\Delta\Psi_1^{pzc}$	V	ρ_{hl}		
0.5	0.5	0.5	-0.866	0	0.5	-5		

TABLE 3.1 – Table des valeurs des paramètres.

permettent de vérifier toutes les hypothèses à l'exception de l'inégalité de droite dans (3.12b). Cependant nous avons pu observer que numériquement les bornes L^∞ données dans (3.15) sont tout de même satisfaites tout au long de la simulation. Nous nous sommes intéressés aux erreurs L^2 en espace et en temps pour différentes valeurs de ε . Pour ce faire, la solution exacte n'étant pas accessible, nous avons calculé une solution de référence sur grille fine ($\Delta x = 1/4000$ et $\Delta t = 10^{-6}$). L'état stationnaire étant très vite atteint, les simulations numériques ont été arrêtées à $T = 10^{-3}$. Les résultats numériques obtenus par P.L. Colin ont montré que l'ordre de convergence du schéma était bien celui attendu (2 en espace et 1 en temps) et ce quelque soit les valeurs de ε choisies (y compris pour $\varepsilon = 0$). Je présente en figure 3.1, les courbes de l'erreur L^2 en espace au temps final en fonction des valeurs de ε , et ce, pour différentes valeurs du pas de temps. Elles illustrent clairement que le schéma préserve l'asymptotique $\varepsilon \rightarrow 0$.

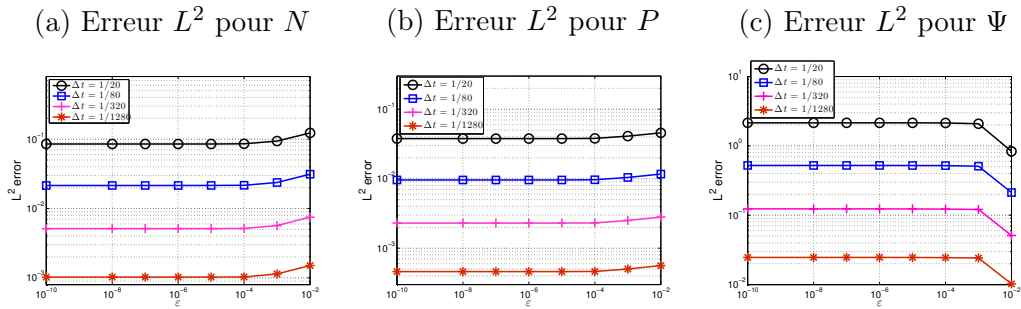


FIGURE 3.1 – Erreur L^2 en espace au temps final $T = 10^{-3}$ sur les densités et le potentiel électrique en fonction des valeurs de ε et pour différents pas de temps.

L'étude théorique de l'asymptotique $\varepsilon \rightarrow 0$ a été réalisée dans la thèse de P.L. Colin [60]. Le système considéré est le système de dérive-diffusion avec conditions aux limites de Dirichlet–Neumann.

Chapitre 4

Construction de conditions aux limites appropriées

Ce chapitre est consacré à la présentation de trois travaux concernant la construction de conditions aux limites pour la simulation numérique de trois problèmes physiques différents. Dans un premier temps, nous verrons comment obtenir des conditions aux limites appropriées pour un modèle macroscopique lorsque celui-ci est vu comme la limite hydrodynamique d'un modèle cinétique pour lequel les conditions aux limites sont bien connues [24]. Dans un second temps, nous nous intéresserons à la construction de conditions aux limites adaptées à la simulation numérique d'un problème posé en domaine non borné [27, 31].

4.1 Du microscopique vers le macroscopique : un modèle de charge et décharge de satellites

Un satellite évolue dans le plasma atmosphérique et interagit avec lui. Ces interactions complexes, dues aux différentes propriétés des diélectriques à la surface du satellite, peuvent induire l'apparition d'importantes différences de potentiel et ainsi produire des arcs électriques. Ces phénomènes sont à l'origine d'importants dommages irréversibles sur les dispositifs internes ou les panneaux solaires du satellite. Par conséquent, la prévention de l'apparition de charges excessives a motivé une recherche intense en ingénierie spatiale afin d'obtenir des procédures efficaces de simulations numériques (voir [111, 58, 121]).

Le modèle initial est clairement basé sur les équations de Vlasov- Maxwell- Boltzmann (ou Fokker-Planck) qui décrivent à la fois le mouvement des particules chargées et les variations des champs électro-magnétiques. Le système non linéaire d'EDP est complété par des conditions aux limites adéquates sur la surface du satellite et des conditions d'équilibre à l'infini. Le phénomène de charge est précisément gouverné par les conditions aux limites à la surface du satellite pour les champs électro-magnétiques et les densités. Leurs expressions, qui comportent les propriétés des diélectriques à la surface, rendent le problème vraiment non standard. De plus, tenir compte des caractéristiques du plasma environnant peut

permettre de réduire la complexité du modèle. Il existe donc une hiérarchie de modèles possibles.

L'environnement le plus étudié est relié aux Orbites GEostationnaire (GEO) qui permettent plusieurs simplifications basées sur des considérations asymptotiques. Dans ces orbites, le plasma peut-être considéré comme non collisionnel. De plus, la longueur de Debye est grande et l'évolution des particules chargées se fait dans une échelle de temps plus grande que celle de l'évolution du potentiel électrique à la frontière. On peut donc décrire la charge d'un satellite en GEO par les équations stationnaires de Vlasov-Poisson complétées par des conditions aux limites adaptées. Nous renvoyons à [54] pour une introduction à ce modèle. Le modèle est également souvent utilisé dans les codes GEO [52, 58, 53, 29].

En collaboration avec C. Besse, S. Borghol, J.P. Dudon et T. Goudon, nous nous sommes intéressés au cas des orbites basses terrestres (Low Earth Orbit, LEO) *i.e.* une altitude de 100 à 2000 km (au lieu de 36000 km pour GEO). Comme le plasma y est plus dense avec un libre parcours moyen plus petit, l'utilisation de modèles hydrodynamiques devient raisonnable, au moins pour une première approximation. Ceci est intéressant d'un point de vue numérique puisque cela permet de réduire le nombre d'inconnues. Le modèle obtenu correspond aux équations d'Euler qui doivent être complétées par des conditions aux limites appropriées. Leur obtention est un problème délicat dû à deux grandes difficultés : le système étant hyperbolique, on ne doit prescrire que les flux entrants, et, nous devons prendre en compte la formation d'une couche limite due au fait que les flux cinétiques entrants peuvent être loin de l'équilibre thermodynamique.

Pour étudier cette question, nous nous sommes placés dans un cadre simplifié (1-d et unipolaire) et avons considéré l'équation BGK satisfaite par la fonction de distribution des particules $F(t, x, v) \geq 0$ avec (t, x, v) respectivement les variables de temps, espace et vitesse :

$$\partial_t F + v \partial_x F = \frac{1}{\tau} (M_{U(t,x)} - F), \quad (t, x, v) \in (0, \infty) \times (-\omega, \omega) \times \mathbb{R}. \quad (4.1)$$

Dans cette équation $U = (\rho, u, \theta)$ est donné par les moments de F :

$$\rho = \int_{\mathbb{R}} F dv, \quad \rho u = \int_{\mathbb{R}} v F dv, \quad \rho u^2 + \rho \theta = \int_{\mathbb{R}} |v|^2 F dv,$$

et la Maxwellienne $M_U(v)$ par :

$$M_U(v) = \frac{\rho}{\sqrt{2\pi\theta}} \exp\left(-\frac{|v-u|^2}{2\theta}\right).$$

L'équation (4.1) est complétée des conditions aux limites :

$$\gamma^{inc} F(t, -\omega, v) = \Phi^G(t, v) \text{ pour } v > 0, \quad \gamma^{inc} F(t, \omega, v) = \Phi^D(t, v) \text{ pour } v < 0, \quad (4.2)$$

où γ^{inc} est l'opérateur de trace entrante et Φ^G, Φ^D des fonctions données respectivement sur les bords gauche et droit du domaine en espace. La limite hydrodynamique associée à

(4.1) est donnée par les équations d'Euler :

$$\partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0, \quad (4.3a)$$

$$\partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + \rho \theta) = 0, \quad (4.3b)$$

$$\partial_t \left(\frac{\rho u^2 + \rho \theta}{2} \right) + \partial_x \left(\left(\frac{\rho u^2}{2} + \frac{3}{2} \rho \theta \right) u \right) = 0. \quad (4.3c)$$

La question était donc : comment définir les conditions aux limites pour ρ, u et θ afin de mimer la condition aux limites cinétique (qu'il s'agisse d'un terme source ou d'un opérateur de réflexion ou les deux) ? La méthode que nous avons utilisée est inspirée des travaux sur la décomposition de domaine de F. Coron, F. Golse et C. Sulem dans [61] et C. Bardos, F. Golse et Y. Sone dans [15] et permet d'obtenir des conditions de type Maxwell pour les quantités fluides. Je vais commencer par faire quelques rappels sur la théorie bien établie qui existe dans le cas linéaire, puis, je montrerai comment nous nous en sommes servis pour construire les conditions aux limites dont nous avons besoin.

Linéarisation des équations et analyse de couche limite

Considérons un état donné $\rho_\star > 0$, $u_\star \in \mathbb{R}$ et θ_\star respectivement des densité, vitesse et température. Notons M_{U_\star} la Maxwellienne associée donnée par :

$$M_{U_\star}(v) = \frac{\rho_\star}{\sqrt{2\pi\theta_\star}} \exp\left(-\frac{|v - u_\star|^2}{2\theta_\star}\right),$$

et posons, en supposant que les fluctuations restent petites,

$$F = M_{U_\star}(v)(1 + \delta f(t, x, v)).$$

La fluctuation f satisfait alors :

$$\partial_t f + v \partial_x f = \frac{1}{\tau} L_{U_\star} f, \quad (4.4)$$

$$f|_{t=0} = f^{Init}, \quad (4.5)$$

et les conditions aux limites :

$$\gamma^{inc} f(t, -\omega, v) = \Psi^G(t, v) \text{ pour } v > 0, \quad \gamma^{inc} f(t, \omega, v) = \Psi^D(t, v) \text{ pour } v < 0, \quad (4.6)$$

avec $\Psi^j = \Phi^j / M_{U_\star} - 1$ pour $j = G$ ou $j = D$, et L_{U_\star} l'opérateur de BGK linéarisé.

Lorsque τ tend vers 0, $L_{U_\star}(f)$ tend vers 0 et donc f tend vers la Maxwellienne infinitésimale :

$$m_{(\tilde{\rho}, \tilde{u}, \tilde{\theta})}(t, x) = \frac{\tilde{\rho}}{\rho_\star} + \frac{v - u_\star}{\theta_\star} \tilde{u} + \frac{\tilde{\theta}}{2\theta_\star} \left(\frac{(v - u_\star)^2}{\theta_\star} - 1 \right),$$

où $\tilde{\rho}$, \tilde{u} , $\tilde{\theta}$ satisfont les équations d'Euler linéarisées :

$$\partial_t \tilde{\rho} + \rho_\star \nabla_x \cdot \tilde{u} + u_\star \cdot \nabla_x \tilde{\rho} = 0, \quad (4.7a)$$

$$\partial_t \tilde{u} + (U_\star \cdot \nabla_x) \tilde{u} + \nabla_x \tilde{\theta} + \frac{\theta_\star}{\rho_\star} \nabla_x \tilde{\rho} = 0, \quad (4.7b)$$

$$\partial_t \tilde{\theta} + u_\star \cdot \nabla_x \tilde{\theta} + 2\theta_\star \nabla_x \cdot \tilde{u} = 0. \quad (4.7c)$$

Classiquement, sont associés à (4.4)-(4.6), une entropie linéarisée :

$$f \longmapsto \int_{\mathbb{R}} |f|^2 M_{U_\star} dv,$$

et son flux d'entropie correspondant :

$$P : U \longmapsto \int_{\mathbb{R}} v |g|^2 M_{U_\star} dv|_{g=m_U}.$$

Notons que le noyau de l'opérateur L_{U_\star} (correspondant à l'ensemble des Maxwelliennes infinitésimales) peut être décomposé de la façon suivante :

$$\text{Ker}(L_{U_\star}) = \Lambda^+ \oplus \Lambda^- \oplus \Lambda^0,$$

avec :

$$\Lambda^+ = \text{Vect}\{\chi_k / P(\chi_k) > 0\}, \quad \Lambda^- = \text{Vect}\{\chi_k / P(\chi_k) < 0\}, \quad \Lambda^0 = \text{Vect}\{\chi_k / P(\chi_k) = 0\},$$

où les vecteurs χ_k sont donnés par :

$$\begin{aligned} \chi_0(v) &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\frac{(v - u_\star)^2}{\theta_\star} - 3 \right), \\ \chi_1(v) &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\sqrt{3} \frac{v - u_\star}{\sqrt{\theta_\star}} + \frac{(v - u_\star)^2}{\theta_\star} \right), \\ \chi_2(v) &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\sqrt{3} \frac{v - u_\star}{\sqrt{\theta_\star}} - \frac{(v - u_\star)^2}{\theta_\star} \right). \end{aligned}$$

On a de plus :

$$P(\chi_1) = \rho_\star(u_\star + c_\star), \quad P(\chi_0) = \rho_\star u_\star, \quad P(\chi_2) = \rho_\star(u_\star - c_\star),$$

où c_\star est la vitesse du son ($c_\star = \sqrt{3\theta_\star}$ en 1-d). La signature de P permet donc d'obtenir le nombre de valeurs propres positives, négatives ou nulles de la matrice associée à (4.7) (celles-ci étant en effet données par : $u_\star - c_\star$, u_\star et $u_\star + c_\star$), et donc, d'obtenir ainsi le nombre de conditions aux limites à imposer.

En procédant à une analyse de couche limite du problème linéaire, on obtient que f peut s'écrire sous la forme :

$$f(t, x, v) = m_{(\bar{\rho}, \bar{u}, \bar{\theta})}(t, x)(v) + G^G(t, (x + \omega)/\tau, v) + G^D(t, (\omega - x)/\tau, v) + r(t, x, v),$$

où r est un reste supposé petit lorsque τ tend vers 0, et où G^G , G^D sont les correcteurs de couche limite définis à partir du problème de demi-espace suivant :

$$\begin{cases} v \partial_z G = L_{U_\star} G, & \text{pour } z > 0, \quad v \in \mathbb{R}, \\ G(0, v) = S_G & \text{pour } v > 0. \end{cases} \quad (4.8)$$

Comme loin du bord, les correcteurs ne doivent pas avoir d'influence (puisqu'on est alors en dehors de la couche limite), la solution du problème (4.8) doit vérifier : $G(\infty, v) = 0$. Par le théorème 1.7.1 de [61], il existe une application linéaire telle qu'à toute donnée entrante S_G elle fasse correspondre $m_\infty \in \text{Ker}(L_{U_\star})$, la limite lorsque z tend vers l'infini de l'unique solution G du problème de demi-espace (4.8). Notons que comme $m_\infty \in \text{Ker}(L_{U_\star})$, elle peut être décomposée selon $\Lambda^+ \oplus \Lambda^- \oplus \Lambda^0$. Ceci permet de définir les conditions aux limites pour les fluctuations macroscopiques.

Dans notre cas, nous avons un bord gauche et un bord droit pour lesquels les conditions aux limites ne sont pas les mêmes. A gauche, $G^G(t, z, v)$ est la solution $G(t, z, v)$ de (4.8) avec :

$$S_G(t, v) = \Psi^G(t, v) - m_{(\tilde{\rho}, \tilde{u}, \tilde{\theta})(t, -\omega)}(v).$$

A droite, $G^D(t, z, v)$ est la solution $G(t, z, v)$ du même problème avec cette fois :

$$S_G(t, v) = \Psi^D(t, -v) - m_{(\tilde{\rho}, \tilde{u}, \tilde{\theta})(t, \omega)}(-v).$$

Dans les deux cas, les conditions aux limites nécessaires sont données par la détermination de l'état asymptotique m_∞ associé à la donnée entrante S_G . Il est cependant plus intuitif de décomposer $m_{\tilde{G}}$ en une partie entrante et une partie sortante. La première est directement prescrite par le fluide et la seconde doit être imposée comme une condition aux limites pour compléter le système d'Euler. A gauche (resp. à droite), la partie sortante est donnée par m_- (resp. m_+), et la partie entrante par m_+ (resp. m_-). En définissant \tilde{G} comme la solution du problème de demi-espace dont la donnée entrante est $\Psi^G - m_-$ (resp. $\Psi^D - m_+$), m_+ (resp. m_-) est alors obtenue par $\tilde{G}(z, \infty) = m_+$ (resp. $\tilde{G}(z, \infty) = m_-$).

Schéma volume fini et traitement des conditions aux limites

Le but ici est de définir les conditions aux limites adaptées pour la simulation numérique du système d'Euler (4.3). Pour valider notre procédure de construction, nous avons comparé les résultats obtenus pour le modèle d'Euler avec ceux obtenus par la simulation numérique du problème (4.1)-(4.2) complétée d'une condition initiale. Pour ce dernier le schéma utilisé est un schéma de splitting de Strang. Il est à noter que pour capturer les effets microscopiques nous devons respecter la contrainte $\Delta t, \Delta x \ll \tau$, ce qui est bien sûr très coûteux dans la limite τ tend vers 0. Voyons maintenant le schéma numérique choisi pour le modèle d'Euler et la construction des conditions aux limites associées.

Dans toute la suite nous notons $\mathcal{U} = (\rho, \rho u, \rho u^2/2 + \rho \theta/2)$ le vecteur des quantités conservées. Pour tout $i \in \{1, \dots, I\}$, nous définissons $C_i = (-\omega + (i - 1/2)\Delta x, -\omega + (i + 1/2)\Delta x)$ la cellule centrée en x_i . De même, les cellules du bord sont définies par $C_0 = (-\omega, -\omega + \Delta x/2)$ et $C_{I+1} = (\omega - \Delta x/2, \omega)$. On note \mathcal{U}_i^n l'approximation de $\frac{1}{\Delta x} \int_{C_i} \mathcal{U}(n\Delta t, x) dx$ la valeur moyenne de $\mathcal{U}(n\Delta t, x)$ sur la cellule C_i . En intégrant les équations (4.3a)-(4.3c) sur une cellule $(n\Delta t, (n+1)\Delta t) \times C_i$ on obtient le schéma numérique suivant :

$$\mathcal{U}_i^{n+1} - \mathcal{U}_i^n = -\frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathcal{F}_{i+1/2}^n - \mathcal{F}_{i-1/2}^n \right),$$

où $\mathcal{F}_{i+1/2}^n$ est une approximation du flux à l'interface $x = -\omega + (i + 1/2)\Delta x$ à l'étape n . Dans le cas le plus simple, cette approximation est obtenue par les inconnues des deux

cellules voisines (voir [88, 107])

$$\mathcal{F}_{i+1/2}^n = \mathbf{F}(\mathcal{U}_i^n, \mathcal{U}_{i+1}^n).$$

Nous avons choisi de travailler avec des flux de Godunov (voir par exemple [107, Chapitre 15]) pour les cellules intérieures (correspondant à $i \in \{1, \dots, I\}$) puisque le schéma est un schéma à trois points seulement. Bien sûr des schémas plus sophistiqués peuvent également être utilisés. La question est maintenant de définir les flux aux bords (c'est-à-dire pour $i = 0$ et $i = I + 1$).

En fait cette question contient deux difficultés. La première consiste à effectuer l'analyse de couche limite dans le cas non linéaire et à obtenir ainsi les conditions nécessaires dans le régime fluide à partir de (4.2). La seconde difficulté tient au fait que le problème de demi-espace sous-jacent est en général numériquement non abordable puisque sa résolution est aussi coûteuse que celle du problème cinétique. Nous avons donc besoin d'une procédure d'approximation supplémentaire. L'approche que nous avons proposée est basée sur la théorie linéarisée précédente. Cela présente l'avantage d'offrir un cadre de travail "propre" et une façon naturelle de déterminer le nombre et la nature des conditions aux limites nécessaires pour (4.3).

Je ne donne ici la procédure utilisée que pour le bord gauche, celle pour le bord droit étant la même (en changeant le signe de la variable de vitesse et en adaptant la définition des caractéristiques entrantes et sortantes). On commence par linéariser autour d'un état d'équilibre global U_\star . Le nombre de conditions aux limites nécessaires est alors entièrement déterminé par cet état référence. Si $u_\star - c_\star > 0$, il y a 3 caractéristiques entrantes et nous avons donc besoin de 3 conditions aux limites. Si $u_\star > 0 > u_\star - c_\star$, il y a 2 caractéristiques entrantes et une sortante, nous avons alors besoin de 2 conditions. Si $u_\star + c_\star > 0 > u_\star$, il y a 1 caractéristique entrante et 2 sortantes, nous avons alors besoin d'une seule condition. Enfin si $u_\star + c_\star < 0$, il n'y a aucune caractéristique entrante et nous n'avons donc pas besoin de condition aux limites.

En utilisant l'analyse de couche limite présentée précédemment et la condition de Maxwell [113]

$$\gamma^{out} G(0, v) = G(\infty, v) = 0,$$

où γ^{out} est l'opérateur de trace sortante, on obtient la procédure suivante. Le flux au bord est donné par :

$$\mathcal{F}_{bd} = \int_{v>0} v \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ v^2/2 \end{pmatrix} \Phi^G(v) dv + \int_{v<0} v \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ v^2/2 \end{pmatrix} (1 + m_{bd}) M_{U_\star} dv,$$

avec $m_{bd} = m_+ + m_-$ où la Maxwellienne infinitésimale m_- est la projection sur Λ^- de la fluctuation par rapport à l'état référence ; et où m_+ est définie ainsi :

- dans les cas non dégénérés, m_+ est la solution du problème de minimisation sous contrainte :

$$\inf_{m_+ \in \Lambda^+} \left| \int_{v>0} v \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ v^2 \end{pmatrix} (\Psi^G - m_-)(v) M_{U_\star}(v) dv - \int_{v>0} v \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ v^2 \end{pmatrix} m_+(v) M_{U_\star}(v) dv \right|^2$$

- dans le cas dégénéré $u_\star = 0$, nous appliquons la procédure en trois étapes suivantes :
 - Etape 1 : Résolution de :

$$\int_{v>0} v \left(\frac{1}{v^2} \right) (\Psi^G - m_-)(v) M_{U_\star}(v) dv = \int_{v>0} v \left(\frac{1}{v^2} \right) \tilde{m}_+(v) M_{U_\star}(v) dv.$$
 - Etape 2 : Calcul de \tilde{K} et \tilde{K}' données par :

$$\int_{v>0} v \left(\frac{\lambda(v)}{v} \right) (\Psi^G - m_-)(v) M_{U_\star}(v) dv + \int_{v<0} v \left(\frac{\lambda(v)}{v} \right) \tilde{m}_+(v) M_{U_\star}(v) dv = \begin{pmatrix} \tilde{K} \\ \tilde{K}' \end{pmatrix}.$$
 - Etape 3 : Résolution de :

$$\int_{\mathbb{R}} v \left(\frac{\lambda(v)}{v} \right) m_+(v) M_{U_\star}(v) dv = \begin{pmatrix} \tilde{K} \\ \tilde{K}' \end{pmatrix}.$$

Cette approche fournit des résultats satisfaisants mais son applicabilité reste très limitée. En effet, à cause des données entrantes, la solution de l'équation cinétique peut-être déviée loin de l'état référence. En particulier, il peut arriver que proche de la frontière, le flot change de type c'est-à-dire que le nombre de caractéristiques entrantes et sortantes change. L'approche totalement linéarisée, que nous avons appelée la linéarisation globale, ne peut pas capturer de tels phénomènes et produit donc des résultats faux en temps long (voir les figures 4.1 et 4.2).

Nous avons donc adapté les idées ci-dessus en raisonnant localement. Connaissant l'approximation numérique $U^\ell = (\rho^\ell, u^\ell, \theta^\ell)$, la première étape consiste à définir un état de référence adéquat. Pour $0 \leq \nu < 1$, nous approchons $\frac{2}{\Delta x} \int_{C_0} U((n + \nu)\Delta t, y) dy$ par une interpolation linéaire et nous posons $U_\star = U^n + \nu(U^n - U^{n-1})$. Nous considérons alors l'inconnue dans la cellule de bord comme une perturbation de l'état référence (c'est-à-dire $U_0^n = U_\star + U_{fluc}$), et, nous construisons les flux aux bords comme précédemment. Nous avons appelé cette approche la linéarisation locale.

La figure 4.1 présente les résultats obtenus via les simulations cinétique et hydrodynamique pour les deux types d'approche (linéarisation globale et locale). Dans les simulations, nous avons choisi $(\rho^{Init}, u^{Init}, \theta^{Init}) = (\rho_\star, u_\star, \theta_\star) = (1, 0.1, 1)$, $T = 0.1$ comme temps final, $\tau = 10^{-3}$ et $\Phi^G = \Phi^D = 0$ à la frontière. On voit clairement sur la figure que la linéarisation locale donne de meilleurs résultats que la linéarisation globale. Ceci est normal, puisque, comme illustré dans la figure 4.2, la signature change très vite à droite comme à gauche ; et la linéarisation globale ne peut pas s'adapter à de tels changements.

Résultats numériques

Un cas test intéressant que nous avons regardé est celui de la simulation du phénomène d'évaporation/ condensation. Ce problème est présenté en détail dans [125, 126, 7]. Les données entrantes sont deux Maxwelliennes avec des quantités macroscopiques différentes :

$$\Phi^G = \frac{\rho_w^G}{\sqrt{2\pi\theta_w^G}} \exp\left(-\frac{|v|^2}{2\theta_w^G}\right), \quad \Phi^D = \frac{\rho_w^D}{\sqrt{2\pi\theta_w^D}} \exp\left(-\frac{|v|^2}{2\theta_w^D}\right). \quad (4.9)$$

où ρ_w^G, θ_w^G peuvent être différents de ρ_w^D, θ_w^D . Nous avons pris comme donnée initiale soit un état constant $(\rho^{Init}, u^{Init}, \theta^{Init})$ qui peut ne pas être à l'équilibre avec la donnée entrante, soit un profil discontinu. Pour l'équation cinétique la donnée initiale est la Maxwellienne

obtenue à partir des données initiales fluides. Bien sûr, le code doit préserver les équilibres : pour $(\rho^{\text{Init}}, u^{\text{Init}}, \theta^{\text{Init}}) = (\rho_w^G, 0, \theta_w^G) = (\rho_w^D, 0, \theta_w^D)$, la solution doit rester constante. Bien que je ne présente pas de figures, nous avons bien sûr vérifié que c'est bien le cas, l'erreur étant donnée par celle commise lors du calcul des intégrales. Nous avons également obtenu les mêmes résultats si la vitesse de référence n'est pas nulle.

Dans les figures 4.3, 4.4 et 4.5, nous avons comparé les résultats de la simulation cinétique avec ceux de la simulation hydrodynamique pour $(\rho_w^D, u_w^D, \theta_w^D) = (\rho^{\text{Init}}, u^{\text{Init}}, \theta^{\text{Init}}) = (1, 0, 0.5)$, et différentes valeurs de $(\rho_w^G, \theta_w^G) \neq (\rho^{\text{Init}}, \theta^{\text{Init}})$. Notons que pour les simulations cinétiques nous avons pris $\tau = 10^{-3}$. On peut voir sur ces figures, une bonne correspondance entre les simulations cinétique et hydrodynamique. La définition des flux numériques est capable de capturer ce qui se passe à la frontière. Notons que le modèle cinétique produit des termes de diffusion, typiquement de la taille $\mathcal{O}(\tau)$: en temps long cet effet devient sensible. Cependant utiliser des valeurs de τ plus petites nécessitent un effort numérique bien plus important, la taille des maillages en temps et en espace devant être petite comparativement à τ .

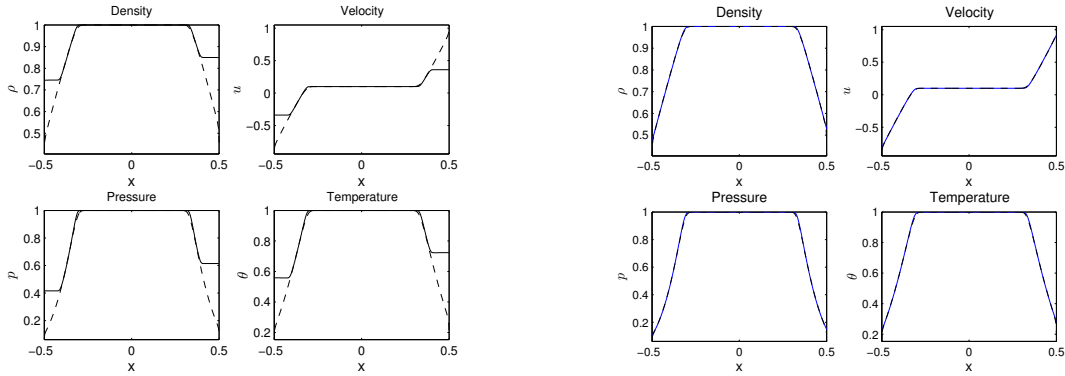


FIGURE 4.1 – Linéarisation globale (figures de gauche) et linéarisation locale (figures de droite) dans le cas $(\rho_\star, u_\star, \theta_\star) = (1, 0.1, 1)$, temps final $T = 0.1$ et $\Phi^G = \Phi^D = 0$ (la ligne pointillée représente la simulation cinétique et la ligne continue la simulation hydrodynamique).

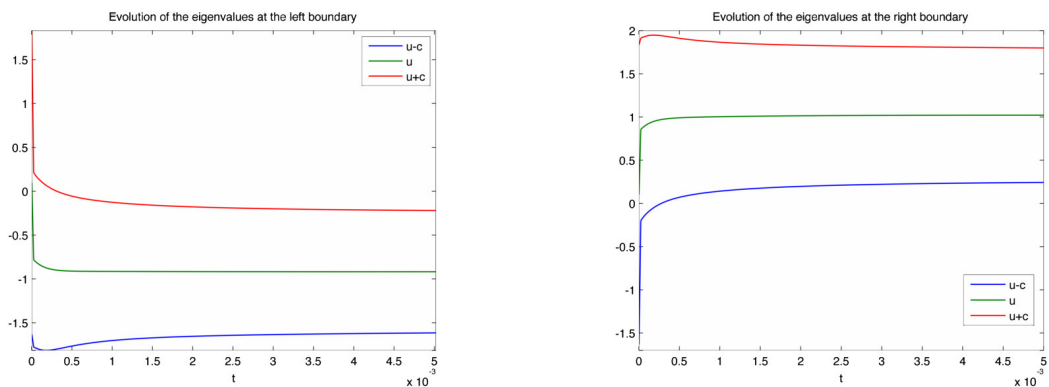


FIGURE 4.2 – Evolution des valeurs propres à gauche et à droite pour la même simulation que celle de la figure 4.1

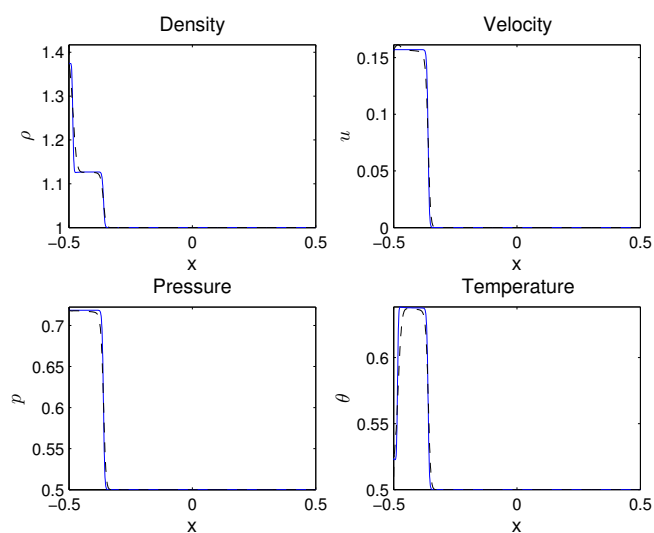


FIGURE 4.3 – Problème d'évaporation/condensation : simulation cinétique (ligne pointillée) et simulation hydrodynamique (ligne solide) pour $\rho_w^G = 2/1.2$, $\theta_w^G = 1.2/2$, et un temps final $T = 0.1$.

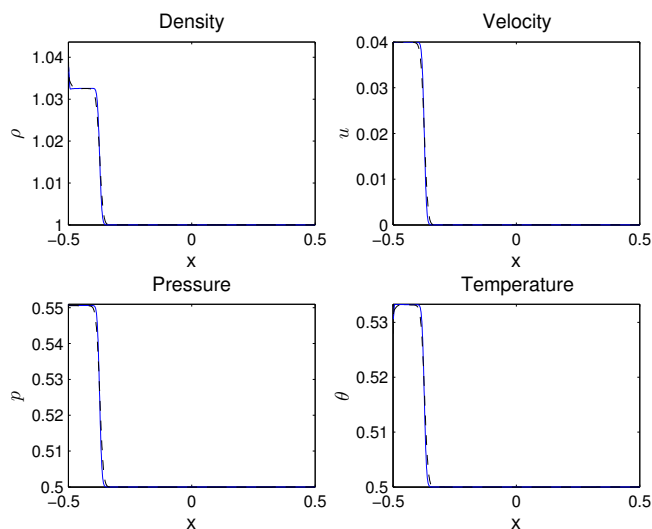


FIGURE 4.4 – Problème d’évaporation/condensation : simulation cinétique (ligne pointillée) et simulation hydrodynamique (ligne solide) pour $\rho_w^G = 1.2/1.1$, $\theta_w^G = 1.1/2$ et un temps final $T = 0.1$.

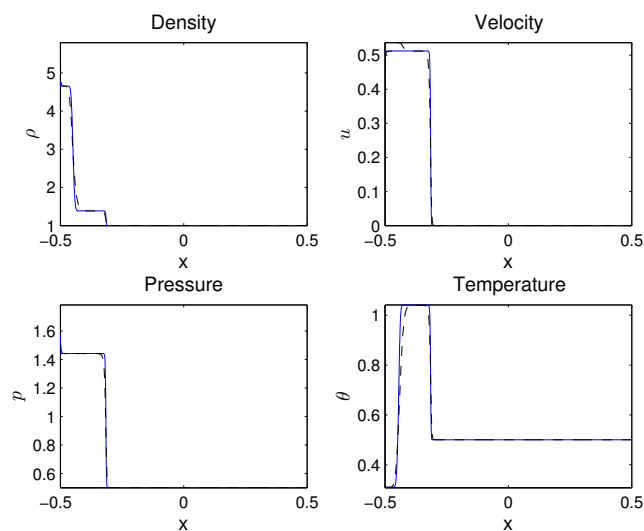


FIGURE 4.5 – Problème d’évaporation/condensation : simulation cinétique (ligne pointillée) et simulation hydrodynamique (ligne solide) pour $\rho_w^G = 10/1.1$, $\theta_w^G = 1.1/2$ et un temps final $T = 0.1$.

4.2 Réduction de modèles initialement posés en domaines non bornés

Lorsqu'un problème physique est défini sur un domaine non borné, nous devons réduire celui-ci à un domaine borné muni de conditions aux limites adaptées pour sa simulation numérique. Une méthode usuelle est l'introduction de conditions aux limites artificielles permettant de conserver les caractéristiques du problème. De telles conditions sont construites de façon à approcher au mieux la solution exacte restreinte au domaine de calcul. Elles sont dites absorbantes si elles conduisent à un problème avec valeurs initiales bien posé pour lequel une énergie est absorbée à la frontière. Si la solution approchée coïncide sur le domaine de calcul avec la solution exacte sur le domaine tout entier, elles sont dites transparentes.

4.2.1 Conditions aux limites transparentes pour des milieux périodiques hexagonaux localement perturbés

Les milieux périodiques (cristaux) apparaissent dans beaucoup d'applications physiques. Bien qu'ils concernent des matériaux impliquant différentes échelles et différents types d'ondes, ils partagent des caractéristiques communes. La plus importante, inhérente à la structure périodique, est l'apparition de bandes interdites *i.e.*, la forte atténuation de certaines gammes de fréquences (au moins dans une direction). Beaucoup d'applications faisant intervenir des structures périodiques utilisent ces bandes interdites pour contrôler la propagation des ondes dans le matériau.

En collaboration avec C. Besse, J. Coatleven, S. Fliss et K. Ramdani, nous nous sommes intéressés au cas de milieux périodiques hexagonaux contenant un défaut local (voir figure 4.6). Notre approche est adaptée de celle utilisée dans [82] dans le cas de réseaux carrés pour lesquels deux des principales hypothèses concernaient les directions de périodicité (orthogonales) et les périodes correspondantes (commensurables). Pour les réseaux hexagonaux, bien que les directions de périodicité soient orthogonales, les périodes correspondantes n'étaient plus commensurables.

Dans toute la suite, j'appellerai réseau hexagonal un domaine bi-dimensionnel où :

- l'angle entre les directions de périodicité est $\pi/3$,
- les cellules de périodicité ont une symétrie hexagonale.

De tels réseaux apparaissent en mécanique quantique [74, 102, 120], phononique [106, 119, 127] et photonique [69, 75, 86]. A nouveau, bien qu'ils concernent des applications différentes et mettent en jeu différents types d'ondes, les problèmes sont similaires d'un point de vue mathématique. En effet, si on veut faire des simulations numériques, la principale question est la détermination de conditions aux limites transparentes permettant de réduire le problème, initialement posé en domaine infini, à un problème posé sur un domaine borné contenant le défaut. Les opérateurs différentiels mis en jeu sont ceux permettant de décrire la physique du problème considéré. En mécanique quantique, par exemple, dans un cristal (classique), la formulation mathématique du problème conduit à l'opérateur de

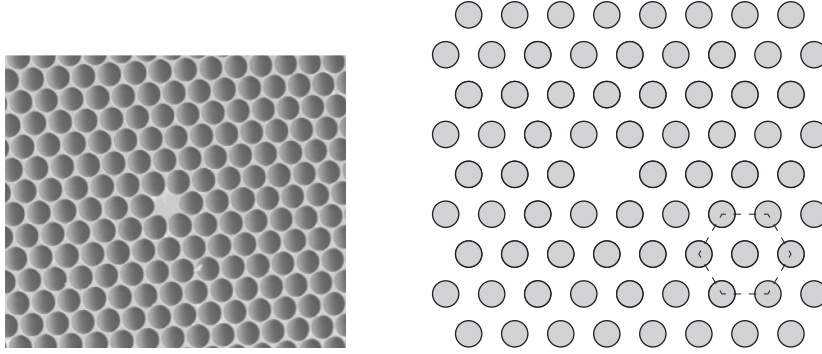


FIGURE 4.6 – Un cristal photonique localement perturbé : coupe d’un cristal photonique de fibre optique (figure de gauche) et représentation de la périodicité hexagonale (figure de droite)

Schrödinger :

$$Au := -\Delta u + (V + ip)u, \quad (4.10)$$

où $V(x)$ est un potentiel et où p est la variable de la transformée de Laplace. Les milieux périodiques parfaits sont décrits par l’opérateur adapté au problème avec des coefficients périodiques (comme par exemple le potentiel dans le cas d’un cristal classique).

L’introduction d’un défaut est alors prise en compte en ajoutant un obstacle ou en perturbant localement les coefficients. Dans le cas de l’exemple du cristal classique, lorsque le réseau contient un atome différent en un point, nous avons :

$$V = V_{per} + V_0,$$

où V_{per} est périodique et où V_0 est un potentiel de faible portée décrivant la perturbation locale (voir [120, p. 312]).

Dans [27], nous avons restreint notre étude au cas d’un cristal photonique infini $\Omega = \mathbb{R}^2$ contenant un défaut localisé dans une cellule hexagonale Ω^i (dont la longueur des côtés est notée d). On note $\Sigma^i = \partial\Omega^i$ la frontière de cette cellule et on note $\Omega^e = \Omega \setminus \overline{\Omega^i}$ l’extérieur de la cellule. D’un point de vue mathématique, nous avons considéré l’équation dissipative d’Helmholtz :

$$\Delta u + \rho u = f, \quad \text{dans } \Omega. \quad (4.11)$$

Nous avons supposé vérifiées les hypothèses suivantes :

- **(A1)** ρ est une perturbation locale d’une fonction périodique ρ_{per} . Plus précisément,

$$\rho = \rho_{per} + \rho_0,$$

avec

- pour tout $\mathbf{x} = (x, y) \in \Omega$ et tout $(p, q) \in \mathbb{Z}^2$, $\rho_{per}(\mathbf{x} + p\mathbf{e}_1 + q\mathbf{e}_2) = \rho_{per}(\mathbf{x})$ où $\mathbf{e}_1 = (3d/2, \sqrt{3}d/2)$ et $\mathbf{e}_2 = (0, \sqrt{3}d)$ sont les deux directions de périodicité (voir la figure 4.7) ;

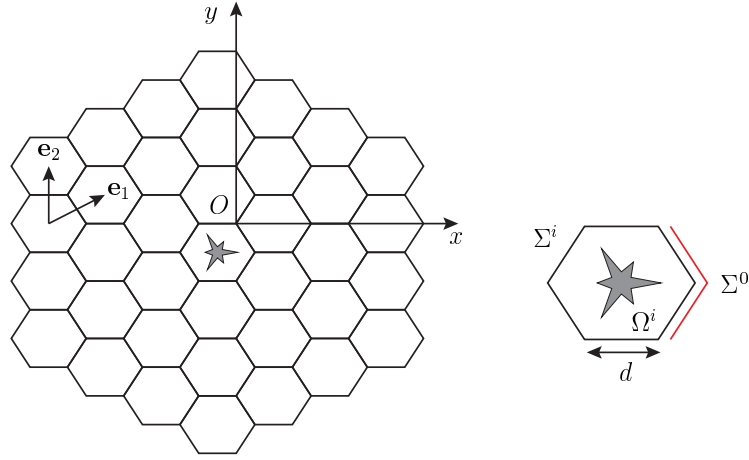


FIGURE 4.7 – Le milieu périodique hexagonal avec défaut

- ρ_{per} et ρ_0 ont une symétrie hexagonale ;
- $\text{Supp}(\rho_0) \subset \Omega^i$.
- **(A2)** ρ vérifie la propriété de dissipation :

$$|\text{Im } \rho(\mathbf{x})| \geq \rho_b > 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega. \quad (4.12)$$

- **(A3)** Le terme source f est à support compact dans Ω^i et a une symétrie hexagonale.

Remarque 4.1. Dans l'hypothèse **(A2)**, la condition (4.12) garantit l'existence et l'unicité de solutions d'énergie finie pour le problème (4.11) (i.e. une solution dans $H^1(\Omega)$) dans le domaine infini Ω . Lorsqu'aucune dissipation n'est supposée (i.e. quand ρ est à valeurs réelles), l'existence et l'unicité de solutions ou encore l'obtention d'un principe d'absorption limite n'étaient pas l'objet de notre étude et sont encore des questions ouvertes, à notre connaissance (voir [83, Remarque 2] et [94]).

Notre étude avait pour but de proposer une méthode de résolution de (4.11) dans le domaine infini Ω sous les hypothèses **(A1)**-**(A2)**-**(A3)**. J'ai fait le choix de ne donner qu'une vue d'ensemble de la méthode en ne décrivant que les principales étapes et en omettant tous les détails techniques liés au cadre fonctionnel.

Comme dans [82] l'idée était de réduire le problème (4.11) posé sur le domaine infini Ω , à un problème de valeurs aux limites posé sur la cellule contenant le défaut Ω^i . Pour cela nous avons besoin de définir des conditions aux limites transparentes sur Σ^i associées à un opérateur Dirichlet-to-Neuman (DtN) Λ .

Plus précisément, la restriction $u^i := u|_{\Omega^i} \in H^1(\Omega^i)$ est solution du problème intérieur suivant :

$$\begin{cases} \Delta u^i + \rho u^i = f, & \text{dans } \Omega^i, \\ \frac{\partial u^i}{\partial \nu^i} + \Lambda u^i = 0, & \text{sur } \Sigma^i, \end{cases}$$

où ν^i est la normale unité extérieure à Ω^i et Λ est l'opérateur DtN défini par :

$$\Lambda\phi = - \left. \frac{\partial u^e(\phi)}{\partial \nu^i} \right|_{\Sigma^i}, \quad (4.13)$$

pour lequel $u^e(\phi) \in H^1(\Omega^e)$ est l'unique solution du problème extérieur :

$$\begin{cases} \Delta u^e(\phi) + \rho u^e(\phi) = 0, & \text{dans } \Omega^e, \\ u^e(\phi) = \phi, & \text{sur } \Sigma^i. \end{cases} \quad (4.14)$$

Le but était donc de calculer cet opérateur DtN Λ . Remarquons que, puisque le problème original possède des propriétés de symétrie hexagonale (voir les hypothèses **(A1)** et **(A3)**), il suffisait de calculer cet opérateur Λ pour des données de Dirichlet ϕ sur Σ^i ayant des propriétés de symétrie hexagonale. Nous avons donc restreint notre analyse à de telles données.

Afin de présenter les différentes étapes de la méthodes, je commence par introduire quelques notations.

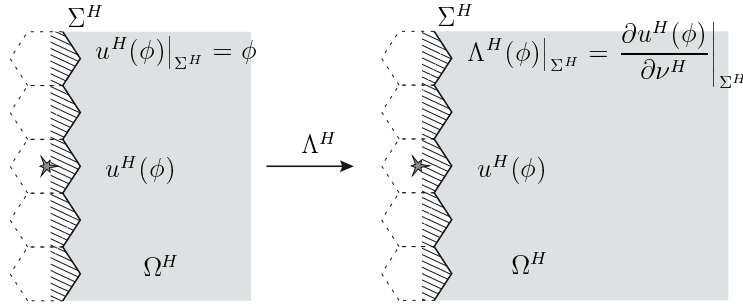


FIGURE 4.8 – L'opérateur DtN de demi-espace Λ^H

Nous notons Σ^H la frontière décrite dans la figure 4.8 et Ω^H le demi-espace à droite de Σ^H . Pour une donnée de Dirichlet ϕ sur Σ^H , nous définissons l'opérateur DtN de demi-espace Λ^H par (voir la figure 4.8)

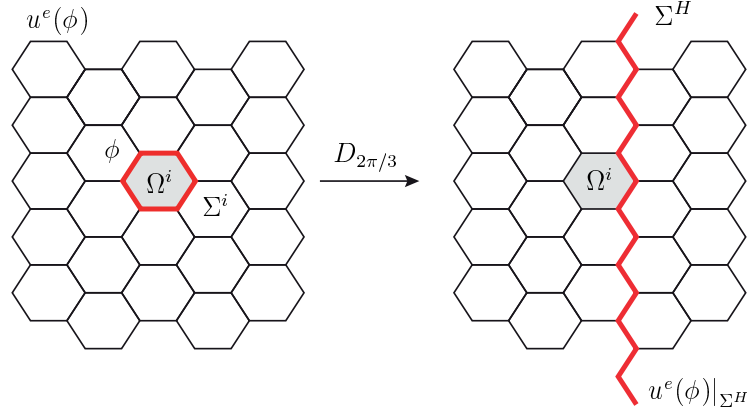
$$\Lambda^H\phi = \left. \frac{\partial u^H(\phi)}{\partial \nu^H} \right|_{\Sigma^H}, \quad (4.15)$$

où ν^H est la normale unité extérieure à Ω^H et $u^H(\phi)$ l'unique solution, dans $H^1(\Delta, \Omega^H)$, du problème de demi-espace :

$$(\mathcal{P}^H) \quad \begin{cases} \Delta u^H(\phi) + \rho u^H(\phi) = 0, & \text{dans } \Omega^H, \\ u^H(\phi) = \phi, & \text{sur } \Sigma^H. \end{cases} \quad (4.16)$$

Le deuxième élément important de notre méthode est l'opérateur Dirichlet-to-Dirichlet (DtD) $D_{2\pi/3}$ défini de Σ^i à Σ^H (voir la figure 4.9) par la formule :

$$D_{2\pi/3}\phi = u^e(\phi)|_{\Sigma^H}, \quad (4.17)$$

FIGURE 4.9 – L'opérateur DtD $D_{2\pi/3}$

où $u^e(\phi)$ est l'unique solution du problème extérieure (4.14).

Étape 1 : Factorisation de l'opérateur DtN Λ

Avec les notations ci-dessus, il est clair que pour une fonction ϕ donnée sur Σ^i , les fonctions $u^e(\phi)$ et $u^H(D_{2\pi/3}\phi)$ sont toutes les deux solutions du problème de demi-espace :

$$\Delta U + \rho U = 0,$$

avec les mêmes conditions de Dirichlet $D_{2\pi/3}\phi$ sur Σ^H . L'unicité de solution conduit alors à :

$$u^e(\phi)|_{\Omega^H} = u^H(D_{2\pi/3}\phi),$$

et en particulier, les dérivées normales coïncident sur $\Sigma^i \cap \Sigma^H$ où elles sont toutes les deux définies. Ceci donne donc :

$$\Lambda\phi|_{\Sigma^i \cap \Sigma^H} = \Lambda^H(D_{2\pi/3}\phi)|_{\Sigma^i \cap \Sigma^H}. \quad (4.18)$$

La partie manquante de $\Lambda\phi$ sur Σ^i est obtenue en utilisant la symétrie hexagonale. La formule de factorisation (4.18) est le point de départ de notre stratégie pour calculer l'opérateur Λ (voir le théorème 4.1 dans [27] pour un énoncé plus précis de ce résultat de factorisation avec notamment un cadre fonctionnel bien défini). Le problème est donc maintenant ramené au calcul de l'opérateur DtN Λ^H et de l'opérateur DtD $D_{2\pi/3}$ pour des données bien préparées (*i.e.* étant invariantes par rotation d'angle $2\pi/3$).

Étape 2 : Caractérisation de l'opérateur DtN Λ^H

L'application d'une transformation (partielle) de Floquet-Bloch, dans la direction verticale, au problème de demi-espace (4.16) montre qu'il suffit de considérer le cas d'une donnée ϕ sur Σ^H k -quasi-périodique, c'est-à-dire telle que :

$$\phi(y + qL) = \phi(y)e^{iqkL}, \quad \forall y \in \mathbb{R}, \quad \forall q \in \mathbb{Z},$$

où $L = \sqrt{3}d$ représente la période dans la direction verticale et où $k \in (-\pi/L, \pi/L)$. A partir de maintenant nous ne considérons donc que des données de Dirichlet k -quasi-périodiques.

Nous définissons ensuite un opérateur de propagation \mathcal{P}_k de sorte que pour toute donnée ϕ sur Σ^H k -quasi-périodique, $\mathcal{P}_k \phi$ ne soit rien d'autre que la trace de la solution $u^H(\phi)$ de (4.16) sur $\tilde{\Sigma}^H = \Sigma^H + \mathbf{e}_1$. L'avantage d'un tel opérateur est qu'il nous permet de déterminer la solution $u^H(\phi)$ du problème de demi-espace dans n'importe quelle cellule à partir de la connaissance de $u^H(\phi)$ dans une cellule de référence.

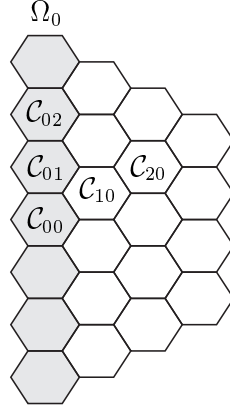


FIGURE 4.10 – Description du demi-espace Ω^H et de ses cellules de périodicité

Plus précisément, en utilisant les notations de la figure 4.10, nous pouvons montrer, grâce à des arguments d'unicité, que :

$$u^H(\phi)|_{\mathcal{C}_{pq}} = e^{iqkL} u^H((\mathcal{P}_k)^p \phi)|_{\mathcal{C}_{00}}.$$

Cette relation permet de ramener la résolution du problème de demi-espace à la détermination de l'opérateur \mathcal{P}_k et de $u^H(\phi)$ sur la cellule de référence \mathcal{C}_{00} . Par linéarité, la solution $u^H(\phi)$ sur \mathcal{C}_{00} est obtenue en résolvant deux problèmes de cellule élémentaires. Enfin, en faisant correspondre les dérivées normales de $u^H(\phi)$ à travers une partie de l'interface $\tilde{\Sigma}^H$, nous montrons que l'opérateur \mathcal{P}_k peut, quant à lui, être obtenu par la résolution d'une équation de Riccati.

Etape 3 : Caractérisation de l'opérateur DtD $D_{2\pi/3}$

Alors que, comme on l'a vu à l'étape 2, la détermination de Λ^H utilise essentiellement les propriétés de périodicité du milieu, celle de l'opérateur DtD $D_{2\pi/3}$ utilise principalement la symétrie hexagonale. Plus précisément, nous pouvons montrer que $D_{2\pi/3}$ est la solution d'une équation affine d'opérateurs bien posée (voir le théorème 6.1 de [27]). Afin de traiter une telle équation d'un point de vue pratique, nous utilisons à nouveau les variables de Floquet-Bloch plutôt que les variables physiques. Nous réduisons ainsi l'équation affine à un ensemble d'équations intégrales contraintes non standard.

4.2.2 Conditions aux limites artificielles discrètes pour l'équation de Korteweg-de-Vries linéarisée

L'équation de Korteweg-de-Vries (KdV) est utilisée pour modéliser les ondes de surface en eau peu profonde. Il s'agit d'une équation non linéaire dispersive qui fût d'abord introduite par Boussinesq en 1877 puis redécouverte en 1895 par Korteweg et de Vries [103]. Elle s'écrit :

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0, \quad t \in \mathbb{R}^+, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (4.19)$$

Les solutions de cette équation comprennent les solitons donnés par :

$$u(x, t) = \gamma \operatorname{sech}^2(\beta(x - ct)), \quad t \in \mathbb{R}^+, \quad x \in \mathbb{R}. \quad (4.20)$$

En collaboration avec C. Besse et M. Ehrhardt [31], nous nous sommes intéressés à l'équation de KdV linéarisée (aussi connue sous le nom d'équation d'Airy) en 1-d :

$$u_t + U_1 u_x + U_2 u_{xxx} = h(t, x), \quad t \in \mathbb{R}^+, \quad x \in \mathbb{R}, \quad (4.21)$$

où h est un terme source et U_1, U_2 sont deux constantes telles que $U_1 \in \mathbb{R}$ et $U_2 > 0$. Bien que très simple, cette équation a un large champ d'applications (comme par exemple la modélisation de la propagation d'ondes longues dans les équations shallow water). Nous avons complété l'équation par une donnée initiale à support compact :

$$u(0, x) = u_0(x), \quad x \in \mathbb{R}, \quad (4.22)$$

et supposé :

$$u \rightarrow 0, \quad x \rightarrow \pm\infty. \quad (4.23)$$

Il est d'usage de simplifier la simulation de telles équations en supposant le domaine périodique. Il est cependant connu que la dynamique sur le tore des solutions de (4.19) ou (4.21) est complètement différente de celle sur \mathbb{R} . L'introduction de frontières fictives pour ramener le calcul numérique à un domaine borné nécessite donc la construction de conditions aux limites adaptées. Elles sont dites absorbantes si elles conduisent à un problème bien posé pour lequel une énergie est absorbée à la frontière. Elles sont dites transparentes si la solution approchée coïncide sur le domaine de calcul avec la solution exacte du problème posé sur le domaine entier. Dans [2], les auteurs présentent une revue des techniques utilisées pour construire de telles conditions dans le cas de l'équation de Schrödinger.

Il existe deux méthodes :

- soit on les construit au niveau continu puis, seulement ensuite, on discrétise le problème aux limites obtenu ;
- soit on commence par discrétiser complètement l'équation, puis seulement ensuite, on construit les conditions aux limites artificielles (dans ce cas les conditions obtenues sont adaptées au schéma numérique choisi).

Dans [137], les auteurs ont utilisé la première méthode dans le cas $U_1 = 0$ et $U_2 = 1$. Avec C. Besse et M. Ehrhardt, nous avons fait le choix d'utiliser la seconde pour deux schémas numériques différents. Nous avons, pour cela, d'abord étendu la construction des

conditions aux limites faite au niveau continu dans [137] au cas $U_1 \in \mathbb{R}$ et $U_2 > 0$, cette construction servant de guide pour le cas totalement discret.

Conditions aux limites pour le cas continu

Pour construire les conditions aux limites du cas continu, nous avons suivi la procédure générale présentée dans [2].

Pour simplifier supposons que u_0 et h soient des fonctions à support compact dans un intervalle $[a, b]$. Elles sont donc nulles dans le complémentaire de $[a, b]$ sur lequel le problème s'écrit alors :

$$u_t + U_1 u_x + U_2 u_{xxx} = 0, \quad t \in \mathbb{R}^+, \quad x < a \quad \text{ou} \quad x > b, \quad (4.24a)$$

$$u(0, x) = 0, \quad x < a \quad \text{ou} \quad x > b, \quad (4.24b)$$

$$u \rightarrow 0, \quad x \rightarrow \pm\infty. \quad (4.24c)$$

En notant $\hat{u} = \hat{u}(s, x)$, la transformée de Laplace en temps de la fonction $u = u(t, x)$, on obtient par (4.24a) le problème extérieur transformé suivant :

$$s\hat{u} + U_1 \hat{u}_x + U_2 \hat{u}_{xxx} = 0, \quad x < a \quad \text{ou} \quad x > b, \quad (4.25a)$$

$$\hat{u} \rightarrow 0, \quad x \rightarrow \pm\infty, \quad (4.25b)$$

où $s \in \mathbb{C}$ avec $\text{Re}(s) > 0$ est la variable de transformation. Les solutions de l'équation différentielle ordinaire (4.25a) sont explicitement données par :

$$\hat{u}(s, x) = c_1(s) e^{\lambda_1(s)x} + c_2(s) e^{\lambda_2(s)x} + c_3(s) e^{\lambda_3(s)x}, \quad x < a \quad \text{ou} \quad x > b, \quad (4.26)$$

où $\lambda_1(s)$, $\lambda_2(s)$ et $\lambda_3(s)$ sont les racines de l'équation :

$$s + U_1 \lambda + U_2 \lambda^3 = 0. \quad (4.27)$$

Elles sont données par :

$$\lambda_k(s) = \omega^{k-1} \zeta(s) - \frac{1}{3} \frac{U_1}{U_2} \frac{1}{\omega^{k-1} \zeta(s)}, \quad k = 1, 2, 3, \quad (4.28)$$

où $\omega = \exp(2i\pi/3)$ et

$$\zeta(s) = -\frac{1}{2^{1/3}} \left(\frac{s}{U_2} + \sqrt{\left(\frac{s}{U_2}\right)^2 + \frac{4}{27} \left(\frac{U_1}{U_2}\right)^3} \right)^{1/3}.$$

Théorème 4.1. *Les racines de l'équation cubique (4.27) possède la propriété de séparation suivante :*

$$\text{Re}(\lambda_1(s)) < 0, \quad \text{Re}(\lambda_2(s)) > 0, \quad \text{Re}(\lambda_3(s)) > 0. \quad (4.29)$$

Cette propriété de séparation des racines est cruciale puisqu'elle permet ensuite de décomposer les solutions fondamentales en ondes entrantes et sortantes. Grâce à elle, à

(4.25b) et (4.26), et puisque les solutions de (4.25a) doivent appartenir à $L^2(]-\infty, a[)$ ou $L^2(]b, +\infty[)$, on obtient :

$$c_1(s) = 0 \quad \text{pour } x \leq a, \quad c_2(s) = c_3(s) = 0 \quad \text{pour } x \geq b, \quad (4.30)$$

qui conduit aux conditions aux limites transparentes :

$$\widehat{u}_{xx}(s, a) - (\lambda_2(s) + \lambda_3(s)) \widehat{u}_x(s, a) + \lambda_2(s)\lambda_3(s) \widehat{u}(s, a) = 0, \quad (4.31)$$

$$\widehat{u}(s, b) - \frac{1}{\lambda_1^2(s)} \widehat{u}_{xx}(s, b) = 0, \quad \widehat{u}_x(s, b) - \frac{1}{\lambda_1(s)} \widehat{u}_{xx}(s, b) = 0. \quad (4.32)$$

Comme les λ_i sont les racines d'une équation cubique, on peut ré-écrire (4.31) en terme de $\lambda_1(s)$ uniquement :

$$\widehat{u}(s, a) - \frac{U_2 \lambda_1(s)^2}{s} \widehat{u}_x(s, a) - \frac{U_2 \lambda_1(s)}{s} \widehat{u}(s, a) = 0. \quad (4.33)$$

En utilisant la transformée de Laplace inverse nous obtenons alors :

$$u(t, a) - U_2 \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{\lambda_1(s)^2}{s} \right) * u_x(t, a) - U_2 \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{\lambda_1(s)}{s} \right) * u_{xx}(t, a) = 0, \quad (4.34)$$

$$u(t, b) - \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{1}{\lambda_1(s)^2} \right) * u_{xx}(t, b) = 0, \quad u_x(t, b) - \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{1}{\lambda_1(s)} \right) * u_{xx}(t, b) = 0, \quad (4.35)$$

où $\mathcal{L}^{-1}(f(s))$ représente la transformée de Laplace inverse de f et $*$ le produit de convolution. Nous obtenons donc finalement le problème aux limites suivant :

$$u_t + U_1 u_x + U_2 u_{xxx} = 0, \quad t \in \mathbb{R}^+, \quad x \in [a, b], \quad (4.36a)$$

$$u(0, x) = u_0(x), \quad x \in [a, b], \quad (4.36b)$$

$$u(t, a) - U_2 \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{\lambda_1(s)^2}{s} \right) * u_x(t, a) - U_2 \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{\lambda_1(s)}{s} \right) * u_{xx}(t, a) = 0, \quad (4.36c)$$

$$u(t, b) - \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{1}{\lambda_1(s)^2} \right) * u_{xx}(t, b) = 0, \quad (4.36d)$$

$$u_x(t, b) - \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{1}{\lambda_1(s)} \right) * u_{xx}(t, b) = 0, \quad (4.36e)$$

qui peut être vu comme la restriction sur $[a, b]$ du problème (4.19)-(4.23).

Conditions aux limites pour le cas totalement discret

Nous avons, pour les obtenir, suivi une procédure analogue à celle décrite ci-dessus. Dans [31], nous avons construit des conditions aux limites adaptées à deux schémas numériques différents proposés dans [114] :

- le schéma Crank-Nicolson à droite (R-CN) dans le cas $U_1 = 0$ et $U_2 > 0$,
- le schéma Crank-Nicolson centré (C-CN) dans le cas $U_1 \in \mathbb{R}$ et $U_2 \geq 0$.

Je ne présente ici que le second schéma puisque c'est celui qui permet de traiter le cas le plus général.

On note $(t_n)_{0 \leq n \leq N}$ une subdivision uniforme de l'intervalle de temps $[0, T]$ donnée par $t_n = n\Delta t$ avec $\Delta t = T/N$ le pas de temps :

$$0 = t_0 < t_1 < \dots < t_{N-1} < t_N = T.$$

On définit également $(x_j)_{0 \leq j \leq J}$ une subdivision uniforme de l'intervalle $[a, b]$ donnée par $x_j = a + j\Delta x$ avec $\Delta x = (b - a)/J$ le pas d'espace :

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_{J-1} < x_J = b.$$

Notons que le pas de la discrétisation temporelle doit rester constant du fait de l'utilisation, pour obtenir les conditions aux limites transparentes discrètes, de la transformée en \mathcal{Z} (voir l'annexe de [2] pour la définition et les propriétés de cette transformation). La discrétisation en espace pourrait, elle, être non uniforme. Dans la suite nous notons $u_j^{(n)}$ l'approximation constante par maille de la solution $u(t_n, x_j)$. Le schéma (C-CN) est alors donné par :

$$\frac{u_j^{(n+1)} - u_j^{(n)}}{\Delta t} + \frac{U_1}{2\Delta x} D_0^1 \left(\frac{u^{(n+1)} + u^{(n)}}{2} \right)_j + \frac{U_2}{2(\Delta x)^3} D_0^3 \left(\frac{u^{(n+1)} + u^{(n)}}{2} \right)_j = 0 \quad (4.37)$$

où D_0^1 et D_0^3 correspondent aux opérateurs $D_0^1(u)_j = u_{j+1} - u_{j-1}$ et $D_0^3(u)_j = u_{j+2} - 2u_{j+1} + 2u_{j-1} - u_{j-2}$. Ce schéma est absolument stable et d'ordre 2 en temps et en espace.

Remarque 4.2. *Le schéma (C-CN) étant un schéma à 5 noeuds, nous aurons à résoudre une équation quartique et non cubique. Ceci conduit alors à 4 conditions aux limites au lieu de 3 comme dans le cas continu. Notons que le schéma (R-CN), non présenté ici, est lui un schéma à 4 noeuds conduisant à une équation cubique et donc à 3 conditions aux limites. Il est donc en cela le schéma pour lequel la construction des conditions aux limites est la plus proche de celle du cas continu.*

En appliquant la transformée en \mathcal{Z} en temps et en notant \hat{u}_j la transformée en \mathcal{Z} de la suite $(u_j^{(n)})_{n \in \mathbb{N}_0}$ nous obtenons à partir de (4.37) l'équation d'ordre 4 homogène :

$$\hat{u}_{j+2} - \left(2 - \frac{U_1(\Delta x)^2}{U_2} \right) \hat{u}_{j+1} + \frac{4(\Delta x)^3}{U_2 \Delta t} \frac{z-1}{z+1} \hat{u}_j + \left(2 - \frac{U_1(\Delta x)^2}{U_2} \right) \hat{u}_{j-1} - \hat{u}_{j-2} = 0, \quad (4.38)$$

pour $2 \leq j \leq J-2$. Les solutions de cette équation sont données par $\hat{u}_j(z) = \sum_k c_k(z) \ell_k^j(z)$, où $\ell = \ell(z)$ est solution de l'équation :

$$\ell^4 - (2-a)\ell^3 + 2p\ell^2 + (2-a)\ell - 1 = 0, \quad (4.39)$$

avec $a = U_1(\Delta x)^2/U_2$ et $p = 2\lambda(z-1)/(z+1)$, $\lambda = (\Delta x)^3/(U_2 \Delta t)$. L'équation (4.39) admet quatre solutions qui peuvent être calculées numériquement ou analytiquement par la méthode de Ferrari. Nous identifions ces solutions et nous les notons ℓ_k pour $k = 1, 2, 3, 4$. La solution générale de (4.38) est alors de la forme :

$$\hat{u}_j(z) = c_1(z) \ell_1^j(z) + c_2(z) \ell_2^j(z) + c_3(z) \ell_3^j(z) + c_4(z) \ell_4^j(z).$$

Comme dans le cas continu nous pouvons démontrer la propriété de séparation suivante :

Théorème 4.2. *Pour $U_1 \in \mathbb{R}$, $U_2 > 0$, $\Delta x > 0$, $\Delta t > 0$ et $|z| > 1$, les solutions de l'équation d'ordre 4 (4.39) vérifient :*

$$|\ell_1(z)| < 1, \quad |\ell_2(z)| < 1, \quad |\ell_3(z)| > 1, \quad |\ell_4(z)| > 1, \quad \text{pour tout } z. \quad (4.40)$$

Grâce à ce théorème et à la propriété de décroissance des solutions nous obtenons :

- pour le domaine extérieur gauche $c_1(z) = c_2(z) = 0$, $j \leq 2$ et donc :
 $\hat{u}_j(z) = c_3(z) \ell_3^j(z) + c_4(z) \ell_4^j(z)$, $j \leq 2$
- pour le domaine extérieur droit $c_3(z) = c_4(z) = 0$, $j \geq J - 2$ et donc :
 $\hat{u}_j(z) = c_1(z) \ell_1^j(z) + c_2(z) \ell_2^j(z)$, $j \geq J - 2$

Nous avons donc besoin de deux conditions côté droit comme côté gauche.

Concernant le côté droit, il est facile de voir que :

$$\hat{u}_{j+2}(z) - (\ell_1(z) + \ell_2(z))\hat{u}_{j+1}(z) + \ell_1(z)\ell_2(z)\hat{u}_j(z) = 0, \quad (4.41)$$

$$\hat{u}_{j+2}(z) - 2(\ell_1(z) + \ell_2(z))\hat{u}_{j+1}(z) + (\ell_1(z) + \ell_2(z))^2\hat{u}_j(z) - (\ell_1(z)\ell_2(z))^2\hat{u}_{j-2}(z) = 0, \quad (4.42)$$

qui donnent un lien entre $u_J^{(n)}$, $u_{J-1}^{(n)}$, $u_{J-2}^{(n)}$ et $u_{J-4}^{(n)}$ avec $j = J - 2$. Nous introduisons les notations $Y_{i,C} = \mathcal{Z}^{-1}\{k_{i,C}(z)\}$, $i = 1, 2, 3, 4$ avec :

$$\begin{aligned} k_{1,C}(z) &= \ell_1(z) + \ell_2(z), & k_{2,C}(z) &= (\ell_1(z) + \ell_2(z))^2, \\ k_{3,C}(z) &= \ell_1(z)\ell_2(z), & k_{4,C}(z) &= (\ell_1(z)\ell_2(z))^2, \end{aligned}$$

et nous obtenons par (4.41)-(4.42), les conditions aux limites à droite :

$$\begin{aligned} u_J^{(n)} - Y_{1,C} * u_{J-1}^{(n)} + Y_{3,C} * u_{J-2}^{(n)} &= 0, \\ u_J^{(n)} - 2Y_{1,C} * u_{J-1}^{(n)} + Y_{2,C} * u_{J-2}^{(n)} - Y_{4,C} * u_{J-4}^{(n)} &= 0. \end{aligned} \quad (4.43)$$

Concernant le côté gauche, on peut facilement vérifier que :

$$\hat{u}_j(z) - (\ell_3(z) + \ell_4(z))\hat{u}_{j-1}(z) + \ell_3(z)\ell_4(z)\hat{u}_{j-2}(z) = 0, \quad (4.44)$$

$$\hat{u}_{j+2}(z) - 2(\ell_3(z) + \ell_4(z))\hat{u}_{j+1}(z) + (\ell_3(z) + \ell_4(z))^2\hat{u}_j(z) - (\ell_3(z)\ell_4(z))^2\hat{u}_{j-2}(z) = 0, \quad (4.45)$$

qui donnent un lien entre $u_0^{(n)}$, $u_1^{(n)}$, $u_2^{(n)}$, $u_3^{(n)}$ et $u_4^{(n)}$ pour $j = 2$. En effet, en notant $Y_{i,C} = \mathcal{Z}^{-1}\{k_{i,C}(z)\}$, $i = 5, 6, 7, 8$ avec

$$\begin{aligned} k_{5,C}(z) &= \ell_3(z) + \ell_4(z), & k_{6,C}(z) &= (\ell_3(z) + \ell_4(z))^2, \\ k_{7,C}(z) &= \ell_3(z)\ell_4(z), & k_{8,C}(z) &= (\ell_3(z)\ell_4(z))^2, \end{aligned}$$

nous obtenons par (4.44)-(4.45) :

$$\begin{aligned} Y_{7,C} * u_0^{(n)} - Y_{5,C} * u_1^{(n)} + u_2^{(n)} &= 0, \\ -Y_{8,C} * u_0^{(n)} + Y_{6,C} * u_2^{(n)} - 2Y_{5,C} * u_3^{(n)} + u_4^{(n)} &= 0. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Remarque 4.3. On peut voir numériquement (voir figure 2 dans [31]), que les coefficients dans la transformée en \mathcal{Z} inverse des noyaux $k_{i,C}(z)$ changent de signe. Ceci peut créer des erreurs d'annulation quand nous les utilisons pour calculer les produits de convolution aux bords. En suivant les idées de [9, 8], nous avons donc modifié les noyaux de convolution. Il s'agit de multiplier le noyau de convolution $k_{i,C}(z)$ par $\xi(z) = 1 + z^{-1}$, ce qui correspond à sommer deux valeurs voisines dans la série $\mathcal{Z}^{-1}\{k_{i,C}(z)\}$. Les coefficients ne changent alors plus de signe. Nous avons donc introduit les notations $Y_{i,C}^\xi = \mathcal{Z}^{-1}\{\xi(z)k_{i,C}(z)\}$. Je décris plus loin comment sont calculées numériquement ces transformées en \mathcal{Z} inverse.

Nous obtenons donc finalement l'algorithme de résolution suivant : en supposant $(u_j^{(n)})_{0 \leq j \leq J}$ connue, $(u_j^{(n+1)})_{0 \leq j \leq J}$ est donnée pour $n \geq 0$ par :

$$\begin{cases} Y_{7,C}^\xi * u_0^{(n)} - Y_{5,C}^\xi * u_1^{(n)} + u_2^{(n)} = -u_2^{(n-1)}, \\ -Y_{8,C} * u_0^{(n)} + Y_{6,C} * u_2^{(n)} - 2Y_{5,C} * u_3^{(n)} + u_4^{(n)} = -u_4^{(n-1)}, \\ u_j^{(n+1)} + \beta D_0^1(u^{(n+1)})_j + \frac{\alpha}{2} D_0^3(u^{(n+1)})_j = u_j^{(n)} - \beta D_0^1(u^{(n)})_j - \frac{\alpha}{2} D_0^3(u^{(n)})_j, \quad 2 \leq j \leq J-2, \\ u_J^{(n)} - Y_{1,C}^\xi * u_{J-1}^{(n)} + Y_{3,C}^\xi * u_{J-2}^{(n)} = -u_J^{(n-1)}, \\ u_J^{(n)} - 2Y_{1,C}^\xi * u_{J-1}^{(n)} + Y_{2,C}^\xi * u_{J-2}^{(n)} - Y_{4,C}^\xi * u_{J-4}^{(n)} = -u_J^{(n-1)}. \end{cases} \quad (4.47)$$

avec $\alpha = U_2 \Delta t / (2(\Delta x)^3)$ et $\beta = U_1 \Delta t / (4\Delta x)$.

Remarque 4.4. Une implémentation ad-hoc des convolutions discrètes de la forme

$$\sum_{k=1}^n X_m^{(k)} u_j^{(n-k)},$$

avec comme coefficients de convolution $X_m^{(n)}$ présente un désavantage. Les conditions aux limites sont non locales en temps (et en espace pour des dimensions supérieures) et par conséquent c'est numériquement très coûteux. Pour remédier à ce problème, il est possible d'utiliser comme dans [9] un développement en somme d'exponentielles. Plus précisément, il s'agit d'approcher les coefficients $X_m^{(n)}$ par une somme finie (disons avec L_m termes) d'exponentielles qui sont décroissantes en temps. Cette approche permet une évaluation rapide des convolutions discrètes puisque celles-ci peuvent alors être évaluées par une simple récurrence pour L_m termes auxiliaires. L'effort numérique reste ainsi constant à chaque pas de temps (voir [31] et [9] pour plus de détails).

Procédure numérique de calcul de la transformée en \mathcal{Z} inverse

Je vais maintenant brièvement décrire la procédure présentée dans [138] pour calculer la transformée en \mathcal{Z} inverse discrète. Rappelons que pour une suite $(u_n)_{n \in \mathbb{N}}$, sa transformée en \mathcal{Z} s'écrit :

$$U(z) = \sum_{k=0}^{\infty} u_k z^{-k}, \quad |z| > R.$$

Supposons que $U(z)$ soit connu, il est possible de reconstruire la suite u_n grâce à la relation

$$u_n = \frac{1}{2i\pi} \oint_{S_r} U(z) z^{n-1} dz, \quad r > R,$$

où S_r est un cercle de rayon $r > R$. Par le changement de variable $z = re^{i\varphi}$, on obtient

$$u_n = \frac{r^n}{2\pi} \int_0^{2\pi} U(re^{i\varphi}) e^{in\varphi} d\varphi.$$

En discrétisant la variable φ avec N noeuds, on obtient l'approximation

$$u_n \approx \frac{r^n}{N} \sum_{k=0}^{N-1} U\left(re^{i\frac{2\pi}{N}k}\right) e^{i\frac{2\pi}{N}kn}.$$

Considérons maintenant la suite finie $(f_n)_{n=0}^{N-1}$. Sa transformée en \mathcal{Z} discrète est donnée par :

$$F_k = \mathcal{F}\{f_n\}(k) = \sum_{n=0}^{N-1} f_n \omega_N^{-nk},$$

et il est possible de reconstruire les valeurs f_n via

$$f_n = \mathcal{F}^{-1}\{F_k\}(n) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} F_k \omega_N^{nk},$$

où $\omega_N = e^{i\frac{2\pi}{N}}$. Par conséquent, si l'on définit $U_k = U(r\omega_N^k)$, on a :

$$u_n \approx \frac{r^n}{N} \sum_{k=0}^{N-1} U_k \omega_N^k = r^n \mathcal{F}^{-1}\{U_k\}(n), \quad 0 \leq n < N.$$

Pour obtenir l'approximation de u_n , nous multiplions donc la transformée inverse discrète de Fourier de $U(z)$ évaluée aux noeuds $z_k = re^{2i\pi k/N}$ par r^k . La Transformée de Fourier inverse est facilement calculée via la transformée de Fourier inverse rapide. Notons que le choix de r est important pour garantir une bonne approximation de la transformée en \mathcal{Z} inverse discrète et donc la convergence du schéma numérique.

Nous renvoyons à [138] pour une discussion concernant le choix de r . Dans [138] le choix optimal semble être 1.02 lorsque les sommes sont implémentées en double précision. Nous avons regardé ce qu'on obtenait en quadruple précision. Les résultats sont présentés dans la figure 4.14. On ne voit plus les instabilités détaillées dans [138]. Nous avons par conséquent choisi la valeur $r = 1.001$ pour les simulations. Celles-ci sont toutes faites en utilisant la quadruple précision. Tous les codes sont écrits en Fortran 2008 (ISO/IEC 1539-1 :2010).

Résultats numériques

Je ne présente ici qu'un seul des deux exemples présentés dans [31]. Celui-ci peut également être traité avec le schéma (R-CN) et les résultats alors obtenus sont similaires.

Il s'agit de l'exemple traité dans [137] pour le cas $U_1 = 0$ et $U_2 = 1$. On considère donc le problème :

$$u_t + u_{xxx} = 0, \quad x \in \mathbb{R}, \quad (4.48)$$

$$u(0, x) = e^{-x^2}, \quad x \in \mathbb{R}, \quad (4.49)$$

$$u \rightarrow 0, \quad |x| \rightarrow \infty. \quad (4.50)$$

La solution fondamentale de (4.48) est ([137]) :

$$E(t, x) = \frac{1}{\sqrt[3]{3t}} \text{Ai} \left(\frac{x}{\sqrt[3]{3t}} \right),$$

où $\text{Ai}(\cdot)$ est la fonction d'Airy. La solution exacte du problème (4.48)-(4.50) est donnée en fonction de $E(t, x)$ par

$$u_{\text{exact}}(t, x) = E(t, x) * e^{-x^2},$$

où $*$ est le produit de convolution sur \mathbb{R} .

Nous définissons $e^{(n)}$ l'erreur relative ℓ^2 au temps $t = n\Delta t$ par :

$$e^{(n)} = \left\| u_{\text{exact}}^{(n)} - u_{\text{num}}^{(n)} \right\|_2 / \left\| u_{\text{exact}}^{(n)} \right\|_2,$$

où la formule des trapèzes est utilisée pour le calcul de la norme ℓ^2 . Notons qu'ici u_{num} correspond à la solution approchée calculée avec le schéma (C-CN). A partir de $e^{(n)}$ nous avons décidé de calculer deux fonctions d'erreur : le maximum ou la norme ℓ^2 en temps :

$$\text{rel.ErrTm} = \max_{0 < n < N} \left(e^{(n)} \right), \quad \text{rel.ErrL2} = \left(\Delta t \sum_{n=1}^N (e^{(n)})^2 \right)^{1/2}.$$

Le comportement de ces deux erreurs par rapport à Δx est présenté dans la figure 4.11. L'ordre obtenu correspond à l'ordre théorique attendu (ordre 2). Pour chaque valeur de N on observe un phénomène de saturation qui est relié à la constante d'erreur en Δt . En effet, l'erreur est bornée par $C_x \Delta x^2 + C_t \Delta t^2$, et donc pour Δx assez petit, l'erreur prédominante est donnée par $C_t \Delta t^2$.

Je présente dans la figure 4.12 les erreurs rel.ErrTm et rel.ErrL2 par rapport à Δt pour $J = 60000$ et $r = 1.001$. Encore une fois, nous avons obtenu l'ordre théorique attendu (ordre 2).

La figure 4.13 montre l'évolution en temps de l'erreur ℓ^2 pour différentes valeurs de N avec $J = 60000$ et $r = 1.001$. Comme attendu, l'erreur décroît lorsque N croît. Dans tous les cas l'erreur reste relativement bornée tout au long de la simulation ce qui montre l'utilité de la méthode proposée.

Enfin la figure 4.14 présente l'erreur rel.ErrL2 en fonction de r avec soit $N = 2560$ et différentes valeurs de J , soit $J = 5000$ et différentes valeurs de N . Le choix du rayon d'inversion r n'influence pas l'erreur pour des valeurs fixées de N et J . Notons que cette figure a été obtenue avec un code Fortran quadruple précision (GFortran) qui permet de supprimer tous les effets arithmétiques de virgule flottante. En effet, le choix du rayon

d'inversion r influence les erreurs en double précision et dépend des valeurs de N et J (voir [138]). Notons également que lorsqu'on utilise le compilateur Intel Fortran la double précision est suffisante et conduit à la même figure (à l'exception de deux points pour $N=2048$, voir Figure 4.15 pour une comparaison entre les résultats obtenus en double précision pour les compilateurs GFortran et Intel Fortran).

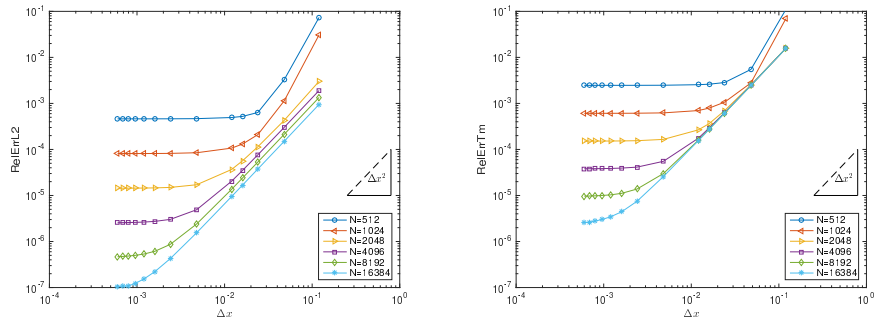


FIGURE 4.11 – Erreurs relatives en fonction de Δx au temps $T = 4.096$ pour le schéma (C-CN) et différentes valeurs de N .

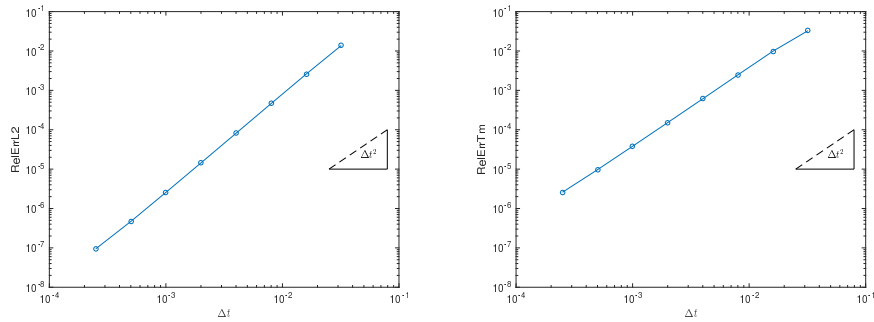


FIGURE 4.12 – Erreurs relatives en fonction de Δt au temps $T = 4.096$ pour le schéma (C-CN) et pour $J = 60000$.

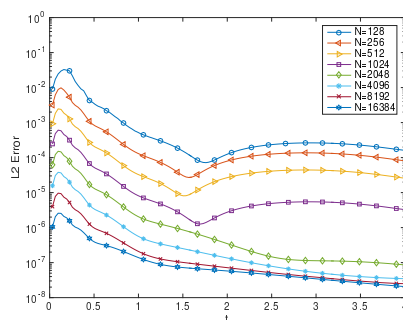


FIGURE 4.13 – Evolution de la norme ℓ^2 entre $T = 0$ et $T = 4.096$ pour le schéma (C-CN) et pour $J = 60000$ et différentes valeurs de N .

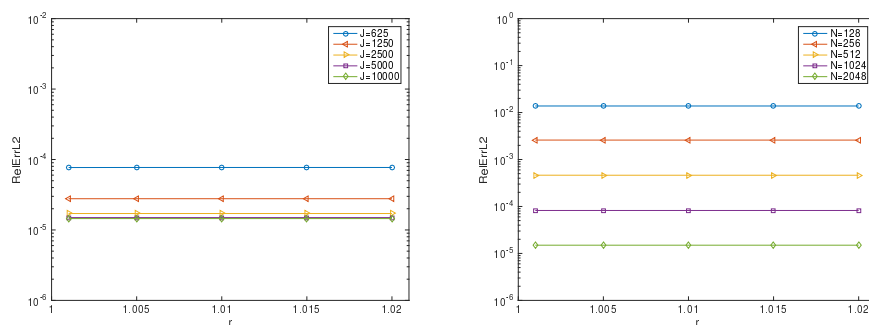


FIGURE 4.14 – Erreur en fonction de r au temps $T = 4.096$ pour le schéma (C-CN) avec soit $N = 2048$ et différentes valeurs de J (figure de gauche) soit $J = 5000$ et différentes valeurs de N (figure de droite).

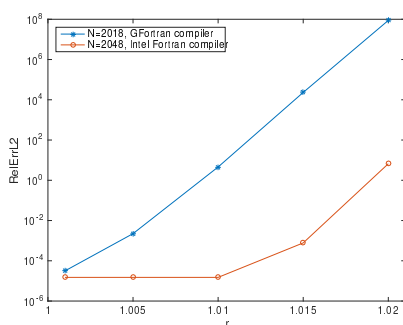


FIGURE 4.15 – Comparaison de l'erreur $rel.ErrL2$ en fonction r en double précision pour les compilateurs GFortran et Intel Fortran.

Chapitre 5

Simulation numérique des condensats de Bose-Einstein

Un condensat de Bose-Einstein (BEC) est un état de la matière atteint par un gaz de bosons dilué à des températures très basses. Une grande partie des bosons occupe l'état quantique le plus bas de sorte qu'un phénomène quantique macroscopique devient visible. Ce phénomène a été théoriquement prédit par Bose en 1924 pour les photons [33] et a été généralisé aux atomes par Einstein en 1925 [76]. La première expérience mettant en évidence les BEC a été réalisée en 1995 [1, 63].

5.1 Présentation du problème

A basse température, un BEC plan en rotation peut être décrit par une fonction d'onde à valeurs complexes $\varphi = \varphi(t, \mathbf{x})$ dont l'évolution est donnée par l'équation de Gross-Pitaevskii (GPE) avec un terme de rotation du moment angulaire. Suite au changement de variables décrit dans [13], l'équation GPE en dimension $d = 2$ satisfaite par φ peut être écrite pour $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$:

$$i\partial_t\varphi = -\frac{1}{2}\Delta\varphi + V_c(\mathbf{x})\varphi + \beta|\varphi|^{2\kappa}\varphi - \Omega R\varphi. \quad (5.1)$$

La fonction à valeurs réelles $V_c = V_c(\mathbf{x})$ correspond à un potentiel régulier qui dépend uniquement des variables d'espace notées $\mathbf{x} = (x, y)^t$. Dans le contexte considéré ici, le potentiel est confinant, c'est-à-dire que $V_c(\mathbf{x})$ tend vers $+\infty$ quand $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{x^2 + y^2}$ tend vers $+\infty$. Par exemple, dans notre cas, nous avons considéré des potentiels de la forme :

$$V_c(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} (\gamma_x^2 x^2 + \gamma_y^2 y^2), \quad (5.2)$$

où $\gamma_x, \gamma_y > 0$. Ce potentiel confinant entre en compétition avec l'opérateur de rotation $-\Omega R = i\Omega(x\partial_y - y\partial_x)$ à la vitesse angulaire $\Omega \in \mathbb{R}$. En effet, le premier tend à faire rester les bosons ensemble à l'origine du plan, alors que le second tend à les propager à l'extérieur.

Le coefficient réel β représente la force de la non linéarité et vient de l'effet moyenné des bosons. L'équation (5.1) est complétée par la condition initiale :

$$\varphi(0, \mathbf{x}) = \varphi_0(\mathbf{x}), \quad \text{pour tout } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2. \quad (5.3)$$

En introduisant la fonctionnelle d'énergie :

$$E(\varphi) = \int_{\mathbb{R}^2} \left[\frac{1}{4} |\nabla \varphi|^2 + \frac{1}{2} V_c |\varphi|^2 + \frac{\beta}{2(\kappa+1)} |\varphi|^{2\kappa+2} - \frac{\Omega}{2} \text{Re}(\varphi^* R \varphi) \right] d\mathbf{x}, \quad (5.4)$$

l'équation (5.1) s'écrit :

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

Celle-ci est une équation Hamiltonienne et l'énergie est donc préservée par la dynamique : pour une solution $t \mapsto \varphi(t, \cdot)$ de (5.1)-(5.3), $E(\varphi(t, \cdot)) = E(\varphi_0)$. En plus de préserver l'énergie, elle préserve également la masse de la fonction d'onde : pour une solution $t \mapsto \varphi(t, \cdot)$ de (5.1)-(5.3), $\int_{\mathbb{R}^2} |\varphi(t, \mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^2} |\varphi_0(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}$. Une autre caractéristique de cette équation concerne le moment angulaire. La fonction à valeurs réelles donnée par :

$$\langle R \rangle (t) = \int_{\mathbb{R}^2} \varphi^*(t, \mathbf{x}) R \varphi(t, \mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (5.5)$$

est constante dans le cas particulier d'un potentiel radial harmonique ($\gamma_x = \gamma_y$ dans (5.2)) et a une dynamique plus complexe dans des cas plus généraux (voir le Lemme 6.2.1 dans [130]).

Dans les dernières décennies, ce modèle a été beaucoup étudié [14, 11, 4, 3, 130]. Une question importante concerne la simulation numérique des équations (5.1)-(5.3) et la prise en compte du terme de rotation R . Comme dans [13], nous avons introduit de nouvelles coordonnées qui permettent d'écrire l'équation (5.1) sous la forme plus classique de l'équation de Schrödinger non linéaire. En effet, en posant pour $t \in \mathbb{R}$,

$$A(t) = \begin{pmatrix} \cos(\Omega t) & -\sin(\Omega t) \\ \sin(\Omega t) & \cos(\Omega t) \end{pmatrix}, \quad (5.6)$$

et en utilisant le changement de variables $\varphi \leftrightarrow \psi$ donné par :

$$\varphi(t, \mathbf{x}) = \psi(t, A(t)\mathbf{x}). \quad (5.7)$$

on obtient que ψ est solution de

$$\partial_t \psi = \frac{i}{2} \Delta \psi - iV(t, \tilde{\mathbf{x}}) \psi - i\beta |\psi|^{2\kappa} \psi, \quad (5.8)$$

où V est un potentiel dépendant du temps donné par :

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

et où la donnée initiale est :

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

Notons que $A(t)$ est orthogonale et vérifie donc $A(t)^{-1} = A(t)^t$.

L'équation (5.8) vérifiée par ψ est une équation de Schrödinger non linéaire (NLS) avec un potentiel dépendant à la fois du temps et de l'espace. Nous nous sommes donc intéressés à des méthodes numériques pour la simulation de :

$$i\partial_t\psi = -\frac{1}{2}\Delta\psi + V(t, \mathbf{x})\psi + \beta|\psi|^{2\kappa}\psi, (t, \mathbf{x}) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^d, \quad (5.9a)$$

$$\psi(0, \mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}), x \in \mathbb{R}^d, \quad (5.9b)$$

où le potentiel V est régulier et $\kappa \in \mathbb{N}$. La littérature concernant la construction et l'analyse de méthodes numériques semi-discrètes efficaces pour ce type d'équation est très étendue. Certains auteurs ont étudié la précision des schémas en temps fini [73, 65, 22, 110]. Avec des hypothèses supplémentaires, correspondant à des cas physiquement intéressants, l'équation (5.9) peut avoir, en plus de la conservation de la masse, plusieurs autres invariants. Il y a donc un intérêt à ce que les schémas numériques les préservent [65, 21, 134, 77, 122]. Au-delà de l'intégration en temps de l'équation (5.9), des régimes asymptotiques ont également été étudiés, comme par exemple la préservation des invariants en temps long [59, 85, 72] et les régimes semi-classiques [12, 45, 25, 46, 55].

5.2 Méthodes numériques d'ordre élevé

Dans un premier temps, avec C. Besse et G. Dujardin, nous nous sommes intéressés aux méthodes de Runge-Kutta exponentielles (RKE) et de Lawson [30]. Nous les avons comparées aux méthodes de splitting utilisées dans [13]. Pour les simulations numériques, nous avons complété les algorithmes en temps par des méthodes de transformée de Fourier rapide (FFT) en espace.

Notons que le caractère non borné du potentiel V rend difficile l'analyse de ces méthodes. Cependant, pour les équations de Schrödinger avec potentiel confinant, on sait que si initialement la masse est essentiellement concentrée dans un domaine borné autour de l'origine, cette propriété sera conservée (au moins pour des temps assez raisonnables). Nous avons donc décidé de tronquer le potentiel V en dehors d'un ensemble borné assez grand. Plus précisément, soit $\chi : \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ la fonction régulière donnée par :

$$\forall x \in [1 - \delta/2, \delta/2 - 1], \quad \chi(x) = 1 \quad \text{et} \quad \forall x \in (-\infty, -\delta/2) \cup (\delta/2, +\infty), \quad \chi(x) = 0,$$

où $\delta \gg 2$ est un réel choisi en fonction de la donnée initiale, des paramètres physiques et du temps final $T > 0$. Le nouveau potentiel est alors défini par :

$$W(t, \mathbf{x}) = V(t, \mathbf{x}) \prod_{j=1}^d \chi(x_j). \quad (5.10)$$

On introduit $\mathbb{T}_\delta = \mathbb{R}/(\delta\mathbb{Z})$ et w une fonction δ -périodique dans toutes les directions telle que pour tout $t > 0$ et tout $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ vérifiant : $|x_j| \leq \delta/2$, $1 \leq j \leq d$, $w(t, \mathbf{x}) = W(t, \mathbf{x})$. L'application $t \mapsto w(t, \cdot)$ est régulière de $[0, T]$ dans $H^\sigma(\mathbb{T}_\delta^d)$ dès que $\sigma \geq 0$.

Le problème (5.9) est donc ici remplacé par le problème bien posé dans $H^\sigma(\mathbb{T}_\delta^d)$:

$$\begin{aligned} \partial_t \psi(t, \mathbf{x}) - L\psi(t, \mathbf{x}) &= N_w(t, \psi)(\mathbf{x}), \quad (t, \mathbf{x}) \in [0, T] \times \mathbb{T}_\delta^d, \\ \psi(0, \mathbf{x}) &= \psi_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{T}_\delta^d, \end{aligned} \quad (5.11)$$

où $T > 0$, $L = \frac{i\Delta}{2}$ et $N_w(t, \psi)(\mathbf{x}) = -iw(t, \mathbf{x})\psi(t, \mathbf{x}) - i\beta|\psi|^{2\kappa}\psi(t, \mathbf{x})$.

Les méthodes Runge-Kutta exponentielles (RKE)

Soit $(t_n)_{0 \leq n \leq M}$ une subdivision régulière de $[0, T]$ à $M + 1$ points dont le pas est noté h . Soit $s \in \mathbb{N}^*$ et $c_1, \dots, c_s \in [0, 1]$ donnés tels que pour tout $(i, j) \in \{1, \dots, s\}^2$, $c_i \neq c_j$ si $i \neq j$. Pour $n \in \{0, \dots, M - 1\}$ fixé, on suppose qu'on connaît une approximation ψ_n de la solution exacte $\psi(t_n)$ du problème (5.11) au temps t_n . Utiliser une méthode RKE consiste à calculer une approximation ψ_{n+1} à partir de ψ_n de la façon suivante. On commence par résoudre le système non-linéaire à s équations :

$$\psi_{n,k} = e^{c_k h L} \psi_n + h \sum_{\ell=1}^s a_{k,\ell}(hL) N_w(t_n + c_\ell h, \psi_{n,\ell}), \quad 1 \leq k \leq s, \quad (5.12)$$

où les inconnues sont $\psi_{n,1}, \dots, \psi_{n,s}$ et où les s^2 coefficients $(a_{k,\ell}(hL))_{(k,\ell) \in \{1, \dots, s\}^2}$ sont des opérateurs linéaires continus sur $H^\sigma(\mathbb{T}_\delta^d)$ définis par :

$$a_{k,\ell}(hL) = \frac{1}{h} \int_0^{c_k h} e^{(c_k h - \xi)L} \mathcal{L}_\ell(\xi) d\xi, \quad (5.13)$$

avec $(\mathcal{L}_\ell)_{1 \leq \ell \leq s}$ les polynômes de Lagrange donnés par :

$$\mathcal{L}_\ell(\tau) = \prod_{j=1, j \neq \ell}^s \frac{\tau/h - c_j}{c_\ell - c_j}, \quad 1 \leq \ell \leq s. \quad (5.14)$$

Ensuite ψ_{n+1} est calculée via la formule :

$$\psi_{n+1} = e^{hL} \psi_n + h \sum_{k=1}^s b_k(hL) N_w(t_n + c_k h, \psi_{n,k}), \quad (5.15)$$

où

$$\forall k \in \{1, \dots, s\}, \quad b_k(hL) = \frac{1}{h} \int_0^h e^{(h-\xi)L} \mathcal{L}_k(\xi) d\xi. \quad (5.16)$$

Remarque 5.1. *Nous avons utilisé pour le calcul des coefficients une procédure permettant d'éviter les instabilités numériques qu'une approche directe peut générer (voir [30] pour plus de détails). Notons que nous pouvons calculer tous les coefficients indépendamment les uns des autres et utiliser du calcul parallèle pour le faire. De plus une fois qu'ils ont été calculés, nous n'avons plus besoin de le refaire tant que les paramètres de discrétisation en temps et en espace restent inchangés.*

Pour cette méthode, nous pouvons montrer en utilisant le Théorème 3.6 de [71], le résultat suivant :

Théorème 5.1. *Pour tout $\psi_0 \in H^\sigma(\mathbb{T}_\delta^d)$ et tout $T > 0$ tels que la solution exacte de (5.11) soit régulière sur $[0, T]$, il existe $C, h_0 > 0$ tels que pour tout $h \in (0, h_0)$, la méthode RKE (5.12)-(5.15) avec donnée initiale ψ_0 soit bien définie. De plus, pour tout $h \in (0, h_0)$ et $n \in \mathbb{N}$ tels que $nh \leq T$, on a :*

$$\|\psi(t_n) - \psi_n\|_{H^\sigma(\mathbb{T}_\delta^d)} \leq Ch^s.$$

Bien que nous ne soyons pas capable de le montrer, nous avons observé numériquement que si les s points de collocation sont les points de Gauss, la méthode RKE est en fait d'ordre $2s$ (voir la figure 5.2). Dans la suite j'appellerai Gauss-RKE la méthode RKE utilisant les points de collocation de Gauss.

Les méthodes de Lawson

Le principe de ces méthodes est le suivant. On effectue, dans (5.11), le changement de variable suivant (appelé transformation de Lawson) :

$$u(t, \mathbf{x}) = e^{-Lt}\psi(t, \mathbf{x}). \quad (5.17)$$

Alors ψ est solution de (5.11) si et seulement si u est solution de :

$$\begin{aligned} \partial_t u(t, \mathbf{x}) &= e^{-Lt} N_w(t, e^{Lt} u(t, \mathbf{x})), \quad (t, \mathbf{x}) \in [0, T] \times \mathbb{T}_\delta^d, \\ u(0, \mathbf{x}) &= \psi(0, \mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{T}_\delta^d. \end{aligned} \quad (5.18)$$

Enfin, on applique maintenant une méthode de Runge-Kutta classique à (5.18) vue comme une EDO en temps. Plus précisément, soit la méthode de Runge-Kutta à s étages suivante :

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

telle que :

$$\forall k \in \{1, \dots, s\}, \quad c_k := \sum_{\ell=1}^s a_{k,\ell}, \quad (5.19)$$

et

$$\sum_{k=1}^s b_k = 1. \quad (5.20)$$

Alors la méthode de Lawson consiste à commencer par résoudre le système non linéaire à s équations :

$$\psi_{n,k} = e^{c_k h L} \psi_n + h \sum_{\ell=1}^s a_{k,\ell} e^{(c_k - c_\ell) h L} N_w(t_n + c_\ell h, \psi_{n,\ell}), \quad (5.21)$$

puis à calculer ψ_{n+1} via la formule :

$$\psi_{n+1} = e^{hL}\psi_n + h \sum_{k=1}^s b_k e^{(1-c_k)hL} N_w(t_n + c_k h, \psi_{n,k}). \quad (5.22)$$

Dès que h est assez petit, la méthode de Lawson (5.21)-(5.22) est bien définie dans $H^\sigma(\mathbb{T}_\delta^d)$. L'équation (5.11) étant réversible en temps, on peut donner une condition suffisante pour que la méthode de Lawson soit symétrique. Pour cela, il suffit de suivre les idées développées dans [47].

Théorème 5.2. *Supposons que la méthode de Runge-Kutta à s étages définie par $(a_{k,\ell})_{1 \leq k, \ell \leq s}$ et $(b_k)_{1 \leq k \leq s}$ vérifie (5.20) de sorte qu'elle soit au moins d'ordre 1. Supposons que cette méthode vérifie également :*

$$\forall (k, \ell) \in \{1, \dots, s\}^2, \quad a_{s+1-k, s+1-\ell} + a_{k,\ell} = b_\ell, \quad (5.23)$$

de sorte qu'elle soit symétrique (voir le Théorème 2.3 dans [90]). Alors la méthode de Lawson définie par (5.21)-(5.22) est aussi symétrique.

Il est facile de montrer également que si la méthode de Runge-Kutta sous-jacente préserve les invariants quadratiques (au sens où elle vérifie la condition de Cooper), alors la méthode de Lawson préserve elle aussi les invariants quadratiques.

Théorème 5.3. *Supposons que la méthode sous-jacente de Runge-Kutta vérifie (5.20) de sorte qu'elle soit au moins d'ordre 1. Supposons qu'elle vérifie également la condition de Cooper :*

$$b_k a_{k,\ell} + b_\ell a_{\ell,k} = b_k b_\ell, \quad \forall 1 \leq k, \ell \leq s, \quad (5.24)$$

de sorte qu'elle préserve les invariants quadratiques. Alors la méthode de Lawson (5.21)-(5.22) préserve la norme L^2 :

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

J'appellerai dans la suite méthode de Gauss-Lawson une méthode de Lawson dont la méthode de Runge-Kutta sous-jacente est une méthode de collocation de Gauss. Nous avons montré qu'une telle méthode à s étages est d'ordre $2s$.

Théorème 5.4. *Supposons $\psi_0 \in H^\sigma(\mathbb{T}_\delta^d)$ donnée et $T > 0$ choisis tels que la solution exacte $t \mapsto \psi(t)$ du problème de Cauchy (5.11) soit définie sur $[0, T]$. Il existe des constantes $C > 0$ et $h_0 > 0$ telles que :*

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

où ψ_n est l'approximation numérique de ψ fournie par la méthode de Gauss-Lawson (5.21)-(5.22).

Pour démontrer ce résultat, nous commençons par considérer une forme équivalente à (5.11) qui soit autonome. Nous montrons ensuite qu'appliquer une méthode de Lawson à cette formulation autonome revient essentiellement à l'appliquer directement à (5.11). Enfin, nous utilisons le lemme d'Alekseev-Gröbner pour les systèmes autonomes (Théorème 2 de [66]). Ce résultat nous fournit une représentation de l'erreur de consistance permettant de conclure que celle-ci est d'ordre h^{2s+1} dans $H^\sigma(\mathbb{T}_\delta^d)$ (les méthodes de Gauss-Lawson étant des méthodes de collocation), et donc, que l'erreur globale est d'ordre h^{2s} (via un lemme de Gronwall discret).

Remarque 5.2. *Notons que la constante C du théorème 5.4, n'est pas uniforme par rapport au paramètre de troncature δ .*

Résultats numériques

Pour les expériences numériques, nous avons comparé les résultats obtenus avec les deux méthodes présentées ci-dessus et ceux obtenus avec les méthodes de splitting d'ordre 1, 2, 4 et 6. Je ne présente ici qu'une partie d'entre elles.

Un exemple 1-d avec $\kappa = 1$

Dans un premier exemple, nous avons considéré l'équation cubique de Schrödinger non linéaire 1-d :

$$\partial_t \psi = i \partial_x^2 \psi + iq |\psi|^2 \psi, \quad (t, x) \in [0, T] \times \mathbb{R}, \quad (5.25)$$

pour laquelle une solution exacte est donnée par la formule du soliton :

$$\psi_{ex}(t, x) = \sqrt{\frac{2a}{q}} \operatorname{sech}(\sqrt{a}(x - ct)) \exp\left(ic \frac{x - ct}{2}\right) \exp\left(i\left(a + \frac{c^2}{4}\right)t\right). \quad (5.26)$$

Nous nous sommes intéressés aux erreurs de phase, masse et énergie données par :

$$\mathcal{E}_{P,h} = \sup_{n \in \{0, \dots, N\}} \|\Pi_k(\psi_{ex}(t_n, \cdot)) - (\psi_j^n)_j\|_{\ell^2}, \quad (5.27)$$

$$\mathcal{E}_{M,h} = \sup_{n \in \{0, \dots, N\}} \left| \|\Pi_k(\psi_{ex}(t_n, \cdot))\|_{\ell^2} - \|(\psi_j^n)_j\|_{\ell^2} \right| / \|\Pi_k(\psi_{ex}(0, \cdot))\|_{\ell^2}, \quad (5.28)$$

$$\mathcal{E}_{E,h} = \sup_{n \in \{0, \dots, N\}} |E_k(\Pi_k(\psi_{ex}(t_n, \cdot))) - E_k((\psi_j^n)_j)| / E_k(\Pi_k(\psi_{ex}(0, \cdot))), \quad (5.29)$$

où Π_k est l'opérateur de projection :

$$\begin{aligned} \Pi_k : \mathcal{C}^0([x_\ell, x_r], \mathbb{C}) &\rightarrow \mathbb{C}^M \\ \varphi &\mapsto (\varphi(x_j))_{0 \leq j \leq M-1} \end{aligned}$$

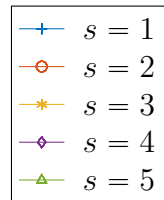
et E_k l'énergie discrète :

$$E_k(v) = \frac{1}{2} \|\nabla_k v\|_{\ell^2}^2 - \frac{q}{4} \|v\|_{\ell^4}^4.$$

Pour toutes les simulations, le domaine de calcul est $(-15, 15)$, le temps final $T = 5$ et nous avons pris 2^{10} points en espace. Les paramètres physiques choisis sont $q = 8$, $a = q^2/16$ et $c = 0.5$. Les légendes des figures sont données dans la figure 5.1.

Je présente dans la figure 5.2 l'évolution de $\mathcal{E}_{P,h}$ en fonction de h pour les différents schémas. Comme nous avons utilisé pour les simulations les points de collocation de Gauss, l'ordre numérique obtenu pour les méthodes de Gauss-Lawson est bien $2s$. Il est à noter que c'est numériquement également le cas pour les méthodes Gauss-RKE. Pour s grand, il y a un phénomène de saturation : l'erreur de phase $\mathcal{E}_{P,h}$ arrête de décroître avec h . Ceci est dû au fait que la solution exacte ψ_{ex} définie par (5.26) ne satisfait pas exactement les conditions aux limites (voir la transformation du problème de \mathbb{R}^d à \mathbb{T}_δ^d). Ce phénomène peut être réduit soit en augmentant δ soit en transformant les conditions aux limites périodiques en, par exemple, des conditions de Dirichlet homogènes pour lesquelles on remplacera alors la procédure FFT par une transformation en sinus discrète. En comparant les figures 5.2 pour RKE et pour Lawson, on peut remarquer que les constantes d'erreur sont meilleures pour RKE que pour Lawson.

(a) Méthodes
RKE et Lawson



(b) Schémas de splitting



FIGURE 5.1 – Légendes

Les préservations de la masse et de l'énergie sont fondamentales quand il s'agit d'équations dispersives. Comme il est connu que les méthodes de Gauss-Lawson et du splitting préservent la masse, je ne présente l'évolution de l'erreur de masse $\mathcal{E}_{M,h}$ en fonction de h que pour les méthodes Gauss-RKE (voir la figure 5.3). On voit clairement que, bien que ces méthodes ne préservent pas la masse, on atteint la précision numérique pour un pas de temps inférieur à 10^{-2} et pour toute méthode à au moins deux étages. Concernant l'énergie, les méthodes considérées ne la préservent pas. Je présente donc dans la figure 5.4 l'évolution de l'erreur $\mathcal{E}_{E,h}$ en fonction de h pour tous les schémas. Il est clair que les méthodes Gauss-RKE sont de ce point de vue de meilleure qualité que les méthodes de Gauss-Lawson qui sont elles-mêmes meilleures que les méthodes de splitting.

Enfin je présente dans la figure 5.5 l'évolution du temps CPU en fonction de l'erreur de phase $\mathcal{E}_{P,h}$. Ces figures sont très intéressantes. En effet, les schémas Gauss-RKE et Gauss-Lawson étant des schémas implicites on pourrait croire qu'ils sont bien plus coûteux que les schémas de splitting. On voit cependant sur la figure que pour une erreur $\mathcal{E}_{P,h}$ donnée, le temps CPU est clairement plus faible pour les schémas Gauss-RKE. De plus, on remarque que pour une erreur "grande" ($\mathcal{E}_{P,h} \geq 10^{-2}$), les schémas de splitting sont moins coûteux que ceux de Gauss-Lawson mais la situation s'inverse ensuite. Notons que pour les schémas de Gauss-RKE et Gauss-Lawson, il n'est pas vraiment intéressant d'utiliser beaucoup de

points de collocation.

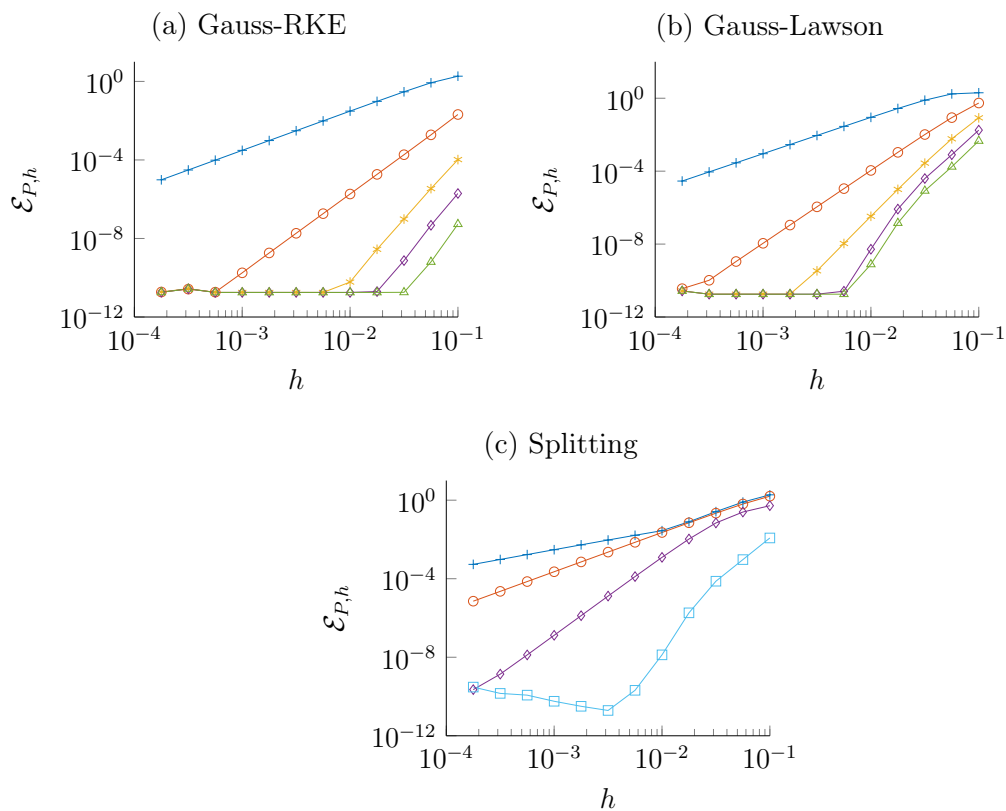


FIGURE 5.2 – Evolution de $\mathcal{E}_{P,h}$ en fonction du pas de temps pour le problème (5.25) (voir Fig. 5.1 pour les légendes)

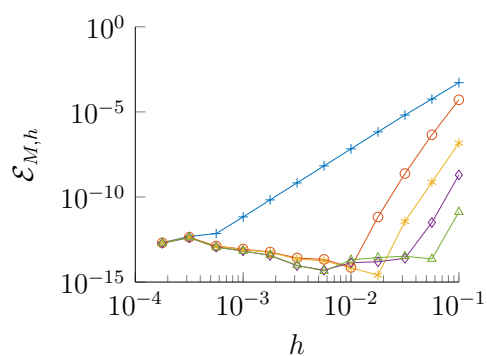


FIGURE 5.3 – Evolution de $\mathcal{E}_{M,h}$ en fonction du pas de temps pour le problème (5.25) et la méthode Gauss-RKE (voir Fig. 5.1 pour les légendes)

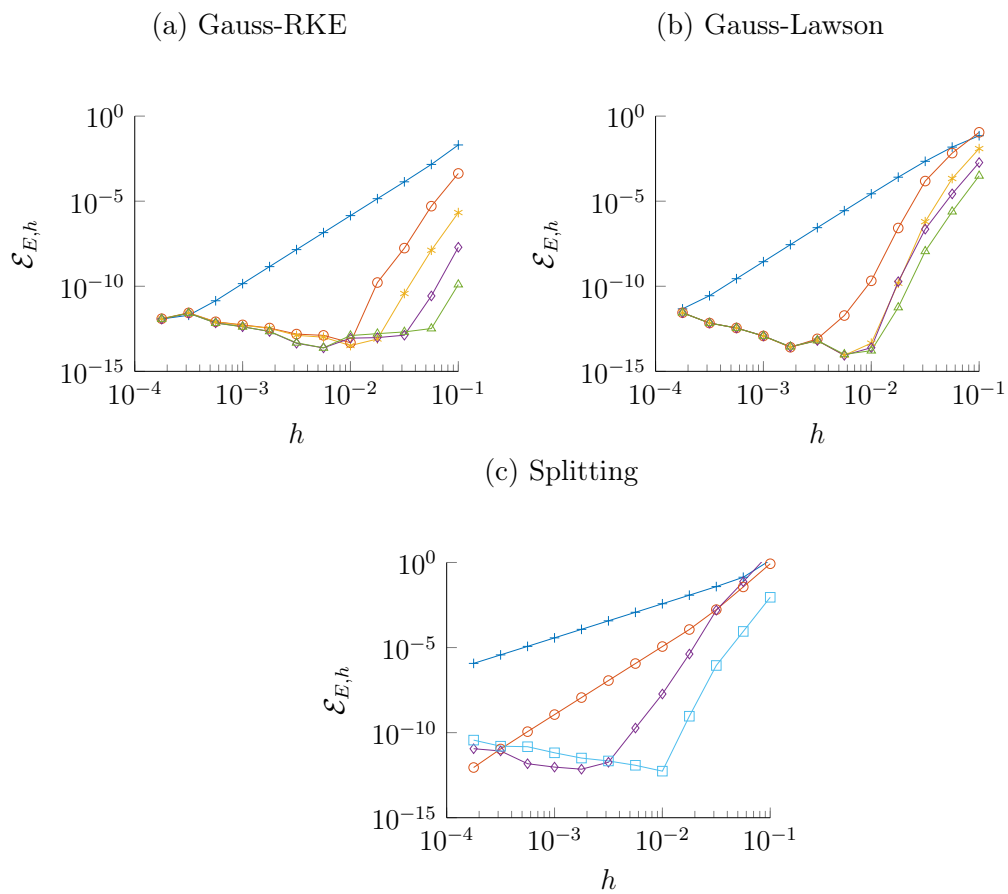


FIGURE 5.4 – Evolution de $\mathcal{E}_{E,h}$ en fonction du pas de temps pour le problème (5.25) (voir Fig. 5.1 pour les légendes)

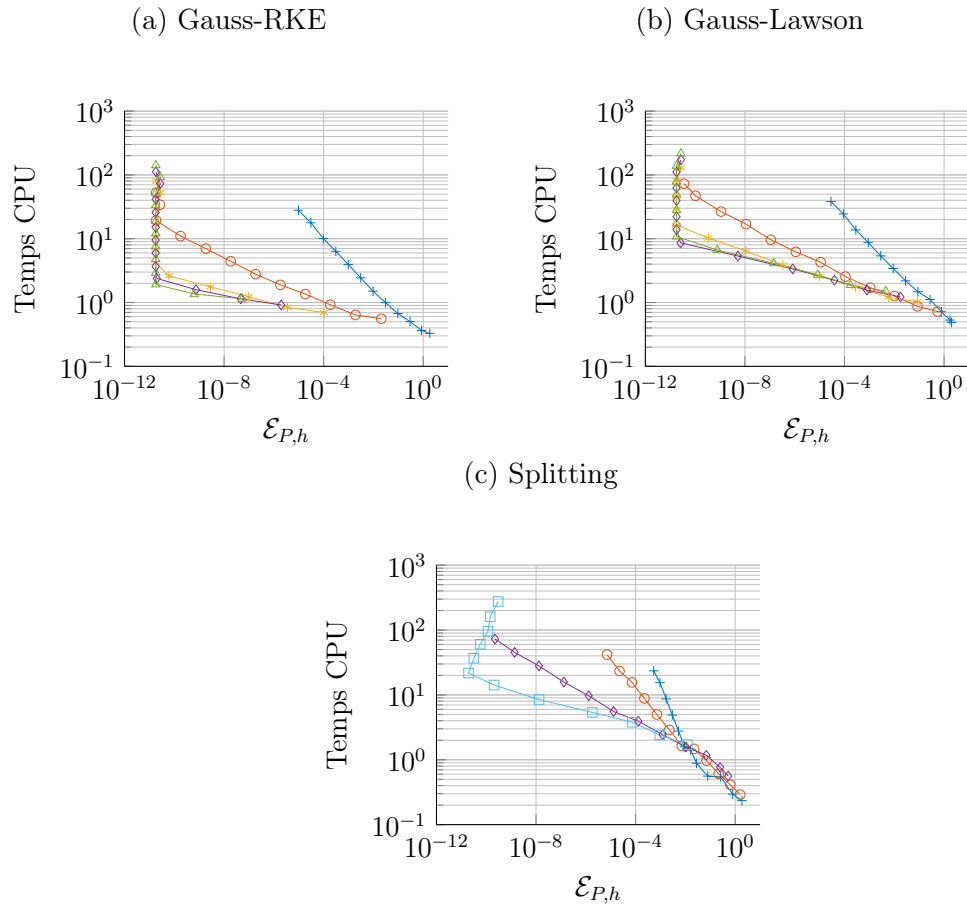


FIGURE 5.5 – Evolution du temps CPU en fonction de l'erreur $\mathcal{E}_{P,h}$ pour le problème (5.25) (voir Fig. 5.1 pour les légendes)

Un exemple 2-d avec $\kappa = 1$

Un autre exemple que nous avons considéré est celui d'un BEC en rotation 2-d modélisé par l'équation (5.1). Nous avons utilisé la méthode de Gauss-RKE d'ordre 6 pour reproduire les simulations réalisées dans [13]. Les paramètres sont $\beta = 1000$, $\Omega = 0.9$, $\gamma_x = 1.05$ et $\gamma_y = 0.95$. Le domaine de calcul est $(-16, 16)$ avec 2^9 modes de Fourier dans chaque direction. Le pas de temps est $h = 10^{-3}$ et le temps final $T = 7$. La donnée initiale est l'état fondamental de l'équation stationnaire généré par la toolbox Matlab GPelab¹. On retrouve le même comportement et les mêmes propriétés de conservation.

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

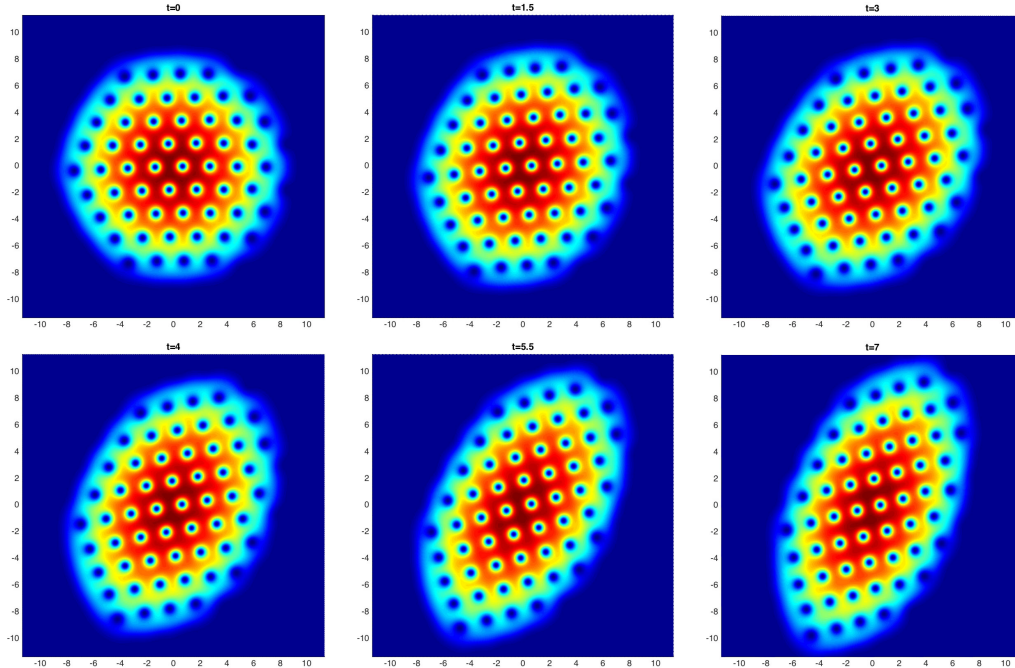


FIGURE 5.6 – Tracés de contours de la fonction de densité $|\varphi(t, \mathbf{x})|^2$ dans un BEC en rotation.

5.3 Méthodes numériques préservant l'énergie

Le travail présenté ici est un travail encore en cours. Comme nous l'avons vu dans la présentation du modèle, l'équation (5.1) préserve l'énergie (5.4) et cette propriété n'est pas vérifiée par les schémas numériques de la section précédente. Avec C. Besse, S. Descombes et G. Dujardin, nous nous intéressons donc à des schémas numériques préservant l'énergie et d'ordre élevé si possible. En particulier, nous nous intéressons à deux schémas numériques préservant l'énergie : le schéma de Crank-Nicolson présenté dans [62] et celui de relaxation présenté, pour des non linéarités cubiques ($\kappa = 1$) dans [32]. Il est bien connu (au moins numériquement) que chacun d'entre eux est d'ordre 2.

Pour ces schémas nous nous sommes posé plusieurs questions :

- est-il possible de généraliser le schéma de relaxation à des non linéarités quelconques tout en conservant la propriété de préservation de l'énergie et l'ordre du schéma ?
- est-il possible de démontrer, au moins dans le cas NLS cubique (*i.e.* $V \equiv 0, \beta = 1, \kappa = 1, \Omega = 0$), que le schéma de relaxation est bien d'ordre 2 ?
- est-il possible, par une procédure de composition, d'obtenir des méthodes numériques d'ordre élevé et préservant l'énergie ?

Le schéma de relaxation généralisé à des non linéarités quelconques

Nous proposons la généralisation suivante de la méthode de relaxation introduite, pour $\kappa = 1$, dans [32]. Soit φ_0 et $\gamma_{-1/2}$ données, pour $n \in \mathbb{N}$, $(\varphi_{n+1}, \gamma_{n+1/2})$ est calculé à partir de $(\varphi_n, \gamma_{n-1/2})$ par :

$$\begin{cases} \gamma_{n+1/2}^\kappa = \left(\frac{\kappa+1}{\kappa} |\varphi_n|^2 - \gamma_{n-1/2} \right) \left(\sum_{k=0}^{\kappa-1} \gamma_{n+1/2}^k \gamma_{n-1/2}^{\kappa-1-k} \right), \\ i \frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{\delta t} = \left(-\frac{1}{2} \Delta + V + \beta \gamma_{n+1/2}^\kappa - \Omega R \right) \frac{\varphi_{n+1} + \varphi_n}{2}. \end{cases} \quad (5.30)$$

Notons que la première équation dans (5.30) peut aussi s'écrire :

$$\frac{\gamma_{n+1/2}^{\kappa+1} - \gamma_{n-1/2}^{\kappa+1}}{\gamma_{n+1/2}^\kappa - \gamma_{n-1/2}^\kappa} = \frac{\kappa+1}{\kappa} |\varphi_n|^2,$$

et donc lorsque $\kappa = 1$, (5.30) conduit à :

$$\begin{cases} \frac{\gamma_{n+1/2} + \gamma_{n-1/2}}{2} = |\varphi_n|^2, \\ i \frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{\delta t} = \left(-\frac{1}{2} \Delta + V + \beta \gamma_{n+1/2} - \Omega R \right) \frac{\varphi_{n+1} + \varphi_n}{2}, \end{cases} \quad (5.31)$$

qui correspond exactement au schéma proposé dans [32].

En multipliant la dernière équation de (5.30) par $\overline{\varphi_{n+1} - \varphi_n}$, en intégrant en espace et en en prenant la partie réelle, on obtient facilement que cette méthode de relaxation généralisée préserve l'énergie discrète suivante :

$$E_{rlx}(\varphi, \gamma) = \int \left(\frac{1}{4} \|\nabla \varphi\|^2 + \frac{1}{2} V |\varphi|^2 + \frac{\beta}{2} \gamma^\kappa |\varphi|^2 - \beta \frac{\kappa}{2(\kappa+1)} \gamma^{\kappa+1} - \frac{\Omega}{2} \overline{\varphi} R \varphi \right) dx. \quad (5.32)$$

Théorème 5.5. *La méthode de relaxation généralisée (5.30) appliquée à l'équation (5.1) avec donnée initiale φ_0 et $\gamma_{-1/2}$ préserve exactement la norme L^2 et l'énergie E_{rlx} définie dans (5.32) au sens où pour tout $n \in \mathbb{N}$ tel qu'une solution de (5.30) soit définie, on a :*

$$\|\varphi_{n+1}\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 = \|\varphi_0\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 \quad \text{et} \quad E_{rlx}(\varphi_{n+1}, \gamma_{n+1/2}) = E_{rlx}(\varphi_0, \gamma_{-1/2}). \quad (5.33)$$

Remarque 5.3. *Bien que je ne présente ici que le cas $K = 1$, la méthode de relaxation généralisée s'applique également à l'équation :*

$$i \partial_t \varphi(t, x) = \left(-\frac{1}{2} \Delta + V(x) + \sum_{k=1}^K \beta_k |\varphi|^{2\sigma_k}(t, x) + \lambda (U * |\varphi(t, \cdot)|^2)(x) - \Omega L \right) \varphi(t, x).$$

Il faudra dans ce cas créer une inconnue par non linéarité considérée et ajouter dans l'énergie autant de termes liés aux non linéarités que nécessaires.

Analyse de consistance pour la méthode de relaxation

Ici nous considérons le cas $V = 0, \beta = 1, \kappa = 1$ et $\Omega = 0$ dans (5.1). Nous pouvons montrer qu'alors le schéma de relaxation est un schéma consistant d'ordre 2. Pour cela nous suivons les idées introduites dans [32]. En particulier, nous commençons par ré-écrire l'équation sous la forme d'un système :

$$i\partial_t\varphi = \mathcal{L}\varphi + \beta\Upsilon\varphi, \quad (5.34a)$$

$$\partial_t\Upsilon = 2\text{Re}(\bar{v}\varphi), \quad (5.34b)$$

$$i\partial_tv = \mathcal{L}v + \beta(\partial_t\Upsilon\varphi + \Upsilon\partial_t\varphi). \quad (5.34c)$$

De plus, nous considérons l'équivalent augmenté de (5.30) :

$$\frac{\Upsilon_{n+\frac{3}{2}} - \Upsilon_{n-\frac{1}{2}}}{2\delta t} = \Xi_{n+\frac{1}{2}}, \quad (5.35a)$$

$$i\frac{\varphi_{n+2} - \varphi_{n+1}}{\delta t} - \mathcal{L}\left(\frac{\varphi_{n+2} + \varphi_{n+1}}{2}\right) = \beta\Phi_{n+\frac{3}{2}}, \quad (5.35b)$$

$$i\frac{v_{n+\frac{3}{2}} - v_{n-\frac{1}{2}}}{2\delta t} - \mathcal{L}\left(\frac{v_{n+\frac{3}{2}} + 2v_{n+\frac{1}{2}} + v_{n-\frac{1}{2}}}{4}\right) = \beta V_{n+\frac{1}{2}}, \quad (5.35c)$$

où $v_{n+\frac{1}{2}} = \frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{\delta t}$ et :

$$\Phi_{n+\frac{1}{2}} = \Upsilon_{n+\frac{1}{2}} \left(\frac{\varphi_{n+1} + \varphi_n}{2} \right), \quad (5.36a)$$

$$\Xi_{n+\frac{1}{2}} = 2\text{Re}(v_{n+\frac{1}{2}} \left(\frac{\varphi_{n+1} + \varphi_n}{2} \right)), \quad (5.36b)$$

$$V_{n+\frac{1}{2}} = \left(\frac{\Upsilon_{n+\frac{3}{2}} + \Upsilon_{n-\frac{1}{2}}}{2} \right) \left(\frac{v_{n+\frac{3}{2}} + 2v_{n+\frac{1}{2}} + v_{n-\frac{1}{2}}}{4} \right) \quad (5.36c)$$

$$+ 2\text{Re} \left(v_{n+\frac{1}{2}} \left(\frac{\varphi_{n+1} + \varphi_n}{2} \right) \right) \left(\frac{\varphi_{n+2} + \varphi_{n+1} + \varphi_n + \varphi_{n-1}}{4} \right). \quad (5.36d)$$

Le système (5.35) permet de calculer $(\varphi_{n+2}, \Upsilon_{n+\frac{3}{2}}, v_{n+\frac{3}{2}})$ à partir de :

$$X_n := (\varphi_{n+1}, \varphi_n, \varphi_{n-1}, \Upsilon_{n+\frac{1}{2}}, \Upsilon_{n-\frac{1}{2}}, v_{n+\frac{1}{2}}, v_{n-\frac{1}{2}}).$$

Notons que les sept variables de X_n ne sont pas indépendantes, elles vérifient :

$$\begin{cases} v_{n-\frac{1}{2}} = \frac{\varphi_n - \varphi_{n-1}}{\delta t}, \\ v_{n+\frac{1}{2}} = \frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{\delta t}, \\ \Upsilon_{n+\frac{1}{2}} + \Upsilon_{n-\frac{1}{2}} = 2|\varphi_n|^2, \\ i\frac{\varphi_n - \varphi_{n-1}}{\delta t} = (\mathcal{L} + \beta\Upsilon_{n-1/2}) \frac{\varphi_n + \varphi_{n-1}}{2}, \\ i\frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{\delta t} = (\mathcal{L} + \beta\Upsilon_{n+1/2}) \frac{\varphi_{n+1} + \varphi_n}{2}. \end{cases}$$

L'application $X_n \mapsto X_{n+1}$ s'écrit alors sous la forme :

$$X_{n+1} = \mathcal{B}X_n + \delta t \mathcal{C}\mathcal{M}(X_n, X_{n+1}). \quad (5.37)$$

Sous les bonnes hypothèses sur les données initiales, on peut montrer que :

$$\begin{aligned} \|\mathcal{M}(X_n, X_{n+1}) - \mathcal{M}(X(t_n), X(t_{n+1}))\|_{(H^s(\mathbb{R}^d))^7} &\leq \\ C \left(\|X_n - X(t_n)\|_{(H^s(\mathbb{R}^d))^7} + \|X_{n+1} - X(t_{n+1})\|_{(H^s(\mathbb{R}^d))^7} \right). \end{aligned}$$

et

$$\|\mathcal{B}^n \mathcal{C}\| \leq b,$$

où $\|\cdot\|$ est la norme des opérateurs linéaires continus de $(H^s(\mathbb{R}^d))^7$ dans lui-même.

On obtient alors le résultat suivant :

Théorème 5.6. *Sous les bonnes hypothèses sur les données initiales $\varphi_0, \Upsilon_{-1/2} \in H^{s+6}(\mathbb{R}^d)$ et pour $\delta t_0 > 0$ et $T < T^*$ vérifiant nos hypothèses, il existe une constante $\mathcal{C} > 0$ et un temps $t_1 \in (0, T)$ tels que pour tout $n \in \mathbb{N}$ et tout $\delta t \in (0, \delta t_0)$ avec $n\delta t \leq t_1$,*

$$\|X_n - X(t_n)\|_{(H^s(\mathbb{R}^d))^7} \leq \mathcal{C} \left(\|\Upsilon_{-1/2} - |\varphi(-\delta t/2)|^2\|_{H^{s+6}(\mathbb{R}^d)} + \delta t^2 \right). \quad (5.38)$$

Le théorème 5.6 est uniquement vrai pour un temps t_1 assez petit et ne peut pas être itéré, essentiellement parce que le spectre non borné du Laplacien empêche de borner indépendamment de n les puissances de \mathcal{B} . Cependant, si l'opérateur Laplacien est remplacé par une version bornée (comme c'est le cas dès qu'il est discrétisé), alors les puissances de \mathcal{B} sont bornées et on peut itérer les estimations d'erreur de façon à obtenir le résultat suivant :

Théorème 5.7. *Supposons que l'opérateur \mathcal{L} soit une version tronquée de l'opérateur Laplacien de symbole $\xi \mapsto -\|\xi\|^2 \chi_r(\xi)$ où χ_r est une fonction régulière à support dans une boule de rayon r et égale à 1 dans une boule de rayon $r - 1$. Sous les bonnes hypothèses sur les données initiales $\varphi_0, \Upsilon_{-1/2} \in H^{s+4}(\mathbb{R}^d)$ et pour $\delta t_0 > 0$ and $T < T^*$ vérifiant nos hypothèses, il existe une constante $\mathcal{C} > 0$ telle que pour tout $n \in \mathbb{N}$ et tout $\delta t \in (0, \delta t_0)$ tels que $n\delta t \leq T$,*

$$\|X_n - X(t_n)\|_{(H^s(\mathbb{R}^d))^7} \leq \mathcal{C} \left(\|\Upsilon_{-1/2} - |\varphi(-\delta t/2)|^2\|_{H^{s+4}(\mathbb{R}^d)} + \delta t^2 \right). \quad (5.39)$$

Composition de la méthode de Crank-Nicolson

L'idée ici est d'utiliser la composition d'une méthode préservant l'énergie pour construire une méthode d'ordre élevé préservant elle aussi l'énergie. La brique de base que nous avons utilisé est la méthode de Crank-Nicolson.

Pour l'équation (5.1) cette dernière s'écrit :

$$i \frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{\delta t} = \left(-\frac{1}{2} \Delta + V + \frac{\beta}{\kappa + 1} \frac{|\varphi_{n+1}|^{2\kappa+2} - |\varphi_n|^{2\kappa+2}}{|\varphi_{n+1}|^2 - |\varphi_n|^2} - \Omega \cdot R \right) \frac{\varphi_{n+1} + \varphi_n}{2}, \quad (5.40)$$

que nous notons ensuite :

$$\varphi_{n+1} = \Phi_{\delta t}^{CN}(\varphi_n).$$

Cette méthode permet de préserver l'énergie $E(\varphi)$ donnée par (5.4). En la composant :

- soit par la formule de Creutz et Gocksh ([90] page 44) :

$$\varphi_{n+1} = \Phi_{\gamma_3 \delta t}^{CN} \circ \Phi_{\gamma_2 \delta t}^{CN} \circ \Phi_{\gamma_1 \delta t}^{CN}(\varphi_n),$$

avec :

$$\gamma_1 = \gamma_3 = \frac{1}{2 - 2^{1/(2+1)}} \quad \text{et} \quad \gamma_2 = -\frac{2^{1/(2+1)}}{2 - 2^{1/(2+1)}};$$

- soit en utilisant les coefficients de Suzuki ([90] page 45) :

$$\varphi_{n+1} = \Phi_{\gamma_5 \delta t}^{CN} \circ \Phi_{\gamma_4 \delta t}^{CN} \circ \Phi_{\gamma_3 \delta t}^{CN} \circ \Phi_{\gamma_2 \delta t}^{CN} \circ \Phi_{\gamma_1 \delta t}^{CN}(\varphi_n), \quad (5.41)$$

avec :

$$\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_4 = \gamma_5 = \frac{1}{4 - 4^{1/(2+1)}} \quad \text{et} \quad \gamma_3 = -\frac{4^{1/(2+1)}}{4 - 4^{1/(2+1)}}, \quad (5.42)$$

on obtient des méthodes d'ordre 4 qui préservent encore la même énergie.

Remarque 5.4. *La méthode de Crank-Nicolson est une méthode totalement implicite qui nécessite donc la résolution d'une équation non linéaire à chaque étape et cela peut-être numériquement coûteux. Nous avons essayé d'accélérer la méthode en utilisant les formules de Peaceman-Rachford [115].*

Quelques simulations numériques

Nous testons actuellement les méthodes de Crank-Nicolson (CN) et de relaxation, l'accélération de la méthode de Crank-Nicolson via les formules de Peaceman-Rachford (CN-PR) et la méthode de composition de Suzuki (5.41)-(5.42) avec comme élément de base la méthode de Crank-Nicolson (CN-Suzuki). Nous comparons ces méthodes à la méthode classique du splitting de Lie. Dans les simulations numériques, nous nous intéressons aux mêmes quantités que dans la partie précédente, à savoir l'erreur de phase $\mathcal{E}_{P,h}$, l'erreur de masse $\mathcal{E}_{M,h}$ et l'erreur d'énergie $\mathcal{E}_{E,h}$ données par (5.27)-(5.29). Je présente ici les premiers résultats obtenus sur deux type de cas test.

Un exemple 1-d avec $\kappa = 1$

Nous considérons, une fois de plus, le cas d'un soliton 1-d *i.e.* le cas d'une solution de l'équation (5.1) (avec $d = 1$, $V \equiv 0$, $\sigma = 1$, $\lambda = \Omega = 0$) de la forme :

$$u(t, x) = \sqrt{\frac{2a}{q}} \operatorname{sech}(\sqrt{2a}(x - ct)) e^{ic(x-ct)} e^{i(a + \frac{c^2}{2})t}. \quad (5.43)$$

Dans les exemples numériques nous prenons : $\beta = -q = -8$, $a = q^2/16 = 4$ et $c = 0$ (il s'agit donc d'un soliton à vitesse nulle).

Sur la figure 5.7, je présente l'erreur de phase en fonction du pas de temps h . On remarque que les ordres des méthodes correspondent aux ordres donnés par la théorie. Sur la figure 5.8, je présente les résultats obtenus pour l'erreur de masse et l'erreur d'énergie en fonction de h . Comme on s'y attend chacune des méthodes préserve la masse. De plus les méthodes CN, CN-PR, CN-Suzuki et relaxation préservent effectivement l'énergie alors

que ce n'est pas le cas de la méthode de splitting. Enfin sur la figure 5.9, je donne le tracé du temps CPU en fonction de l'erreur de phase. On constate que, pour des pas de temps raisonnablement petits et un temps CPU identique, utiliser une méthode de composition d'ordre élevé permet d'obtenir des erreurs de phases plus petites que pour les autres.

Un exemple 1-d avec une non linéarité cubique ($\kappa = 1$) et une non linéarité quintique ($\kappa = 2$)

Dans cet exemple nous considérons l'équation suivante :

$$i\partial_t\varphi = -\frac{1}{2}\partial_x^2\varphi + V(t,x)\varphi + \beta_1|\varphi|^2\varphi + \beta_2|\varphi|^4\varphi, \quad (5.44)$$

avec $\beta_1 < 0$ et $\beta_2 > 0$. Une solution de cette équation (voir [19]) est donnée sous la forme :

$$\varphi(t,x) = e^{i\phi(t,x)}U(\xi(t,x)), \quad (5.45)$$

où ϕ et ξ sont des fonctions qui dépendent du potentiel considéré et où

$$U(X) = \frac{\eta}{\sqrt{\sqrt{1-\zeta} \cosh(2\sqrt{-E}X + 1)}},$$

avec $E < 0$, $\zeta = -16E\beta_2/(3\beta_1^2)$ et $\eta = \sqrt{4E/\beta_1}$.

Pour les simulations numériques, nous considérons deux potentiels différents :

1. Un potentiel indépendant du temps $V(x) = v\sqrt{2}x$, avec v une constante. Pour celui-ci les fonctions ϕ et ξ sont données par :

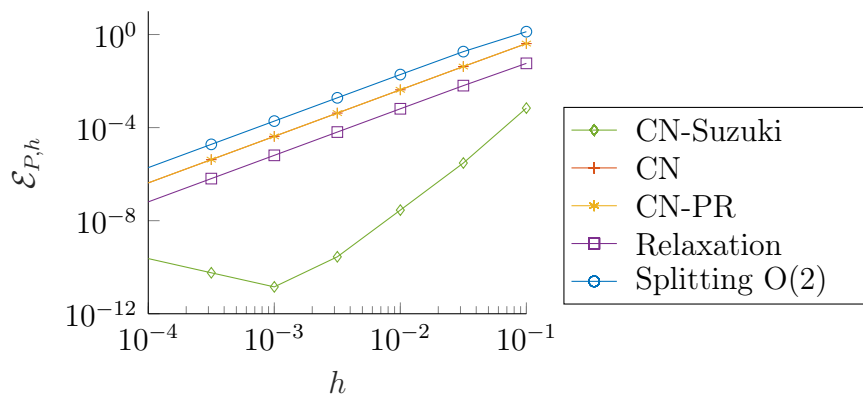
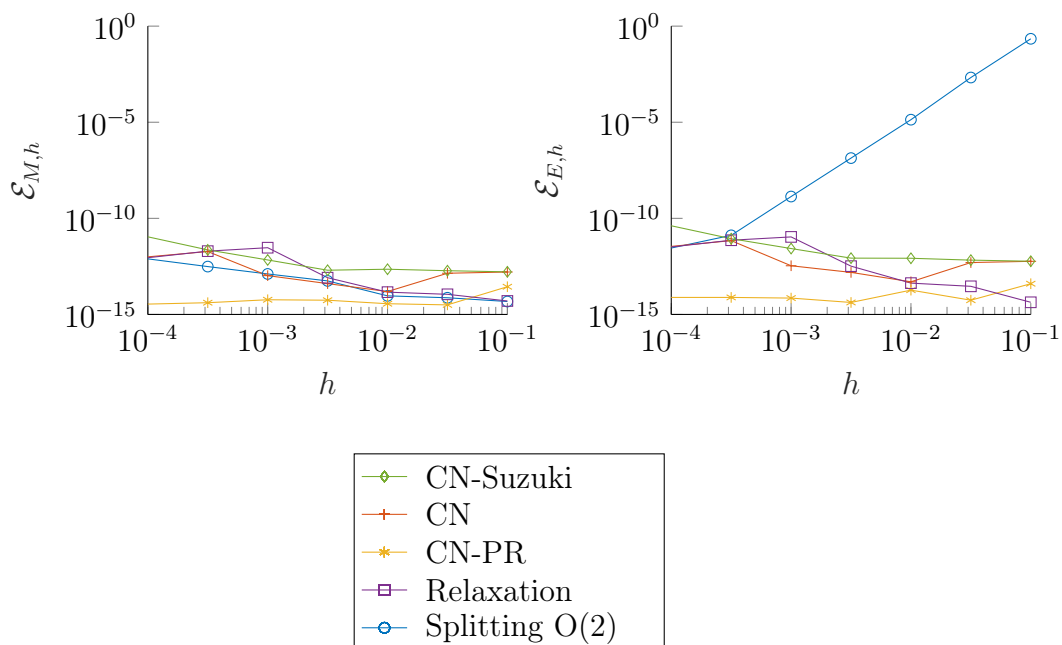
$$\phi(t,x) = -vt\sqrt{2}x - v^2t^3/3 - Et, \quad \xi(t,x) = \sqrt{2}x - vt^2.$$

2. Un potentiel dépendant du temps $V(t,x) = \frac{\tilde{\Omega}^2}{2} \cos(\tilde{\Omega}t + \beta_0)\sqrt{2}x$ pour lequel les fonctions ϕ et ξ sont données par :

$$\phi(t,x) = -\frac{\tilde{\Omega}}{2} \sin(\tilde{\Omega} + \beta_0)\sqrt{2}x - \frac{\tilde{\Omega}^2}{8}t + \frac{\tilde{\Omega}}{16} \sin(2(\tilde{\Omega}t + \beta_0)) - Et,$$

$$\xi(t,x) = \sqrt{2}x - \cos(\tilde{\Omega}t + \beta_0).$$

Pour ces exemples, nous choisissons : $\beta_1 = -2, \beta_2 = 0.5, E = -1, v = 0.1, \tilde{\Omega} = 2, \beta_0 = 0$. Pour le premier cas, je présente dans la figure 5.10 les erreurs de phase et d'énergie en fonction du pas de temps. Les ordres obtenus sont les mêmes que ceux de l'exemple précédent et comme attendu les méthodes de Crank-Nicolson (classique et Suzuki) et de relaxation préservent bien l'énergie. Pour le second cas, je présente dans la figure 5.11 le tracé des erreurs de phase en fonction du pas de temps pour chacune des méthodes. Les ordres obtenus sont toujours les mêmes.

FIGURE 5.7 – $\mathcal{E}_{P,h}$ en fonction de h pour le soliton 1-d.FIGURE 5.8 – $\mathcal{E}_{M,h}$ (à gauche) et $\mathcal{E}_{E,h}$ (à droite) pour le soliton 1-d.

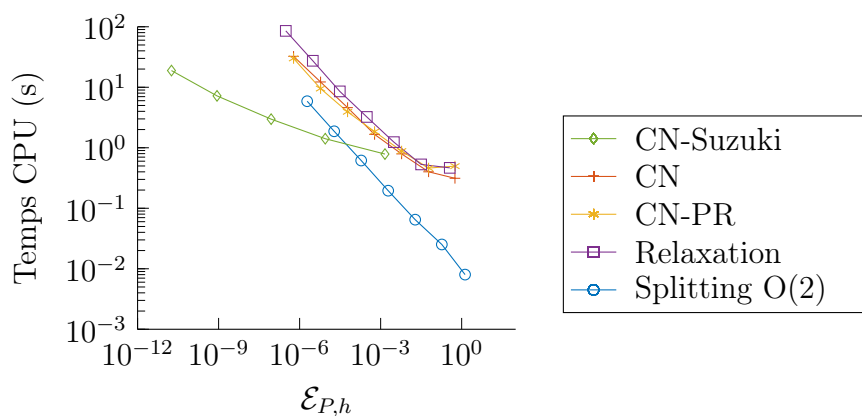


FIGURE 5.9 – Temps CPU en fonction de l’erreur de phase pour le cas du soliton 1-d.

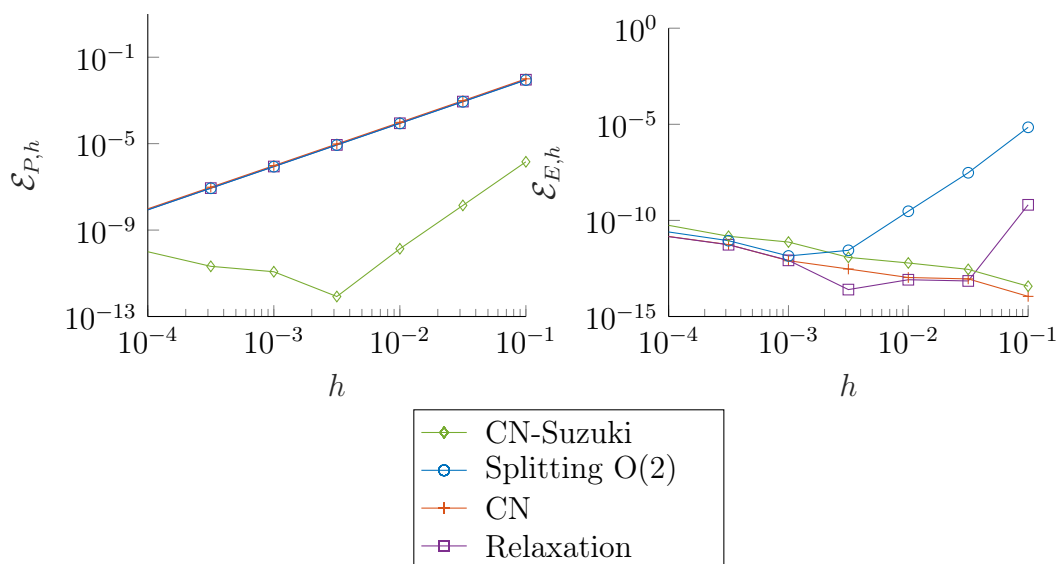
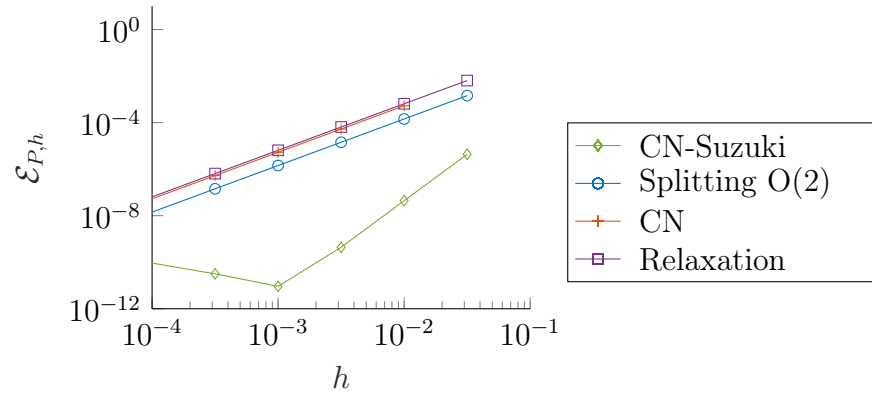


FIGURE 5.10 – $\mathcal{E}_{P,h}$ (à gauche) et $\mathcal{E}_{E,h}$ (à droite) en fonction de h pour le premier cas cubique/quintique.

FIGURE 5.11 – $\mathcal{E}_{P,h}$ en fonction de h pour le second cas cubique/quintique.

Chapitre 6

Conclusion et perspectives

Depuis ma thèse mes travaux de recherche ont donc porté sur des questions aussi bien théoriques (recherche d'inégalités d'entropie, existence de solutions, limites de paramètres) que numériques (construction de conditions aux limites adaptées, dérivation, convergence et comportement asymptotique de schémas numériques). Les travaux plus théoriques concernent l'équation des milieux poreux, le modèle de Navier-Stokes quantique et un modèle de corrosion pour lequel j'ai également fait une étude numérique. D'un point de vue plus numérique, je me suis intéressée à la construction de conditions aux limites pour différents modèles (modèle d'Euler, équation d'Helmholtz et équation d'Airy) ainsi qu'à l'étude de différents schémas numériques pour l'équation de Gross-Pitaevskii.

Dans le chapitre 2, j'ai décrit les résultats obtenus concernant le modèle de Navier-Stokes quantique. En particulier j'ai présenté des résultats d'existence de solutions et de limite semi-classique du modèle utilisant différentes techniques telles que l'ajout d'un terme de pression froide dans les équations ou l'utilisation de solutions faibles re-normalisées en vitesse (suivant en cela respectivement les idées développées dans [38] et [131]). J'ai également expliqué comment, en généralisant aux systèmes de Navier-Stokes-Korteweg et Euler-Korteweg l'entropie relative introduite pour les équations de Navier-Stokes compressibles dans [42], il est possible de démontrer la limite de faible viscosité du modèle.

Dans le chapitre 3, j'ai détaillé une partie de mes travaux concernant le modèle de corrosion simplifié évolutif : un résultat d'existence de solutions ainsi qu'un résultat de convergence pour un schéma numérique Euler implicite en temps et volumes finis en espace. Ici les techniques utilisées sont assez classiques : estimations a priori, résultats de compacité à la Aubin-Simon [124], résultats de convergence des traces suivants les idées développées dans [34].

Le chapitre 4 est dédié à la construction de conditions aux limites. J'y ai détaillé trois résultats en particulier. J'ai expliqué comment construire de telles conditions pour le modèle d'Euler lorsque celui-ci est vu comme la limite hydrodynamique de l'équation BGK pour laquelle les conditions aux limites sont connues. La méthode utilisée est inspirée de travaux sur la décomposition de domaine [15, 61]. Les conditions ainsi obtenues sont de type Maxwell et une approche locale de la linéarisation fournie de meilleurs résultats qu'une approche globale. Nous avons pu constater que les résultats obtenus par la méthode

proposée correspondent à ceux obtenus par la simulation de l'équation BGK. J'ai ensuite présenté comment construire l'opérateur DtN pour un milieu périodique infini à symétrie hexagonale contenant un défaut pour l'équation d'Helmholtz. Comme dans [82], celui-ci est obtenu comme la factorisation de deux opérateurs non locaux, l'un étant un opérateur de type DtN correspondant à un problème de demi-espace et le second un opérateur DtD relié aux propriétés de symétrie du problème. Enfin pour l'équation d'Airy j'ai proposé une construction de conditions limites transparentes, dans le cas complètement discret, adaptées en particulier au schéma de Crank-Nicolson centré. Pour cela nous avons commencé par étendre la construction faite au niveau continu dans [137], celle-ci servant de guide pour le cas totalement discret. Des simulations numériques montrant les résultats ainsi obtenus ont également été présentées. Les ordres de convergence en temps et en espace du schéma ne sont pas perturbés par les conditions aux limites.

Le dernier chapitre est consacré à l'équation de Gross-Pitaevskii utilisée dans la modélisation des condensats de Bose-Einstein. Par un changement de variable le problème est ramené à l'équation de Schrödinger non linéaire avec un potentiel dépendant à la fois du temps et de l'espace. Dans un premier temps, une classe d'intégrateurs exponentiels d'ordre élevé a été développée. Plus précisément je me suis intéressée aux méthodes de Runge-Kutta exponentielles et de Lawson pour lesquelles nous avons respectivement démontré un ordre s et $2s$. Numériquement nous avons observé que les méthodes de Runge-Kutta exponentielles utilisant les points de collocation de Gauss sont en fait d'ordre $2s$ également. Dans les simulations, j'ai comparé ces méthodes aux méthodes de splitting. Tant du point de vue de la précision en temps que du coût de calcul, les méthodes de Runge-Kutta exponentielles utilisant les points de collocation de Gauss sont les plus performantes numériquement bien qu'elles ne préservent pas la masse contrairement aux méthodes de Lawson et de splitting. Toutes ces méthodes ne préservant pas l'énergie, j'ai ensuite présenté des travaux encore en cours sur des schémas numériques permettant de la conserver et d'ordre élevé si possible. J'ai notamment expliqué comment généraliser à des non linéarités quelconques la méthode de relaxation écrite dans [32] pour des non linéarités cubiques ; comment montrer que cette dernière est d'ordre 2 dans le cas cubique à potentiel nul et enfin comment composer par les formules de Suzuki ([90] page 45) la méthode de Crank-Nicolson ([62]) pour en obtenir une méthode d'ordre 4 préservant les invariants de l'équation. Il reste encore pour cette dernière partie des simulations numériques à faire avec en particulier des cas 2-d de condensats de Bose-Einstein.

Dans le futur je souhaite m'intéresser à la hiérarchie de modèles suivante :

— l'équation de Gross-Pitaevskii généralisée donnée par :

$$i\partial_t\psi + \Delta\psi + \psi(W * (1 - |\psi|^2)) = 0, \text{ in } \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}, \quad (6.1)$$

où la fonction d'onde ψ n'est pas nulle à l'infini et où la convolution avec $W \in S'(\mathbb{R}^d)$ prend en compte les interactions non locales. Lorsque W est un Dirac, (6.1) correspond à l'équation de Gross-Pitaevskii classique.

— l'équation de Boltzmann quantique donnée par :

$$\partial_t f + p \cdot \nabla_x f - \nabla_x V \cdot \nabla_p f = \mathcal{Q}(f)/\tau, \quad (6.2)$$

où $f = f(t, x, p)$ représente la distribution des particules dans l'espace des phases, $V =$

$V(x)$ un potentiel confinant, $\mathcal{Q}(f)$ l'opérateur de collision quantique, et τ un paramètre de scaling.

— le modèle de Navier-Stokes quantique présenté dans le chapitre 2.

Ces trois modèles correspondent à trois niveaux différents de description de systèmes quantiques. Ils sont liés de la façon suivante. Si W est un Dirac dans l'équation de Gross-Pitaevskii généralisée, en utilisant une transformation de Madelung on obtient le modèle d'Euler quantique qui, rappelons le, correspond à la limite de faible viscosité du modèle de Navier-Stokes quantique. Ce dernier peut donc être vu comme une correction visqueuse du modèle d'Euler quantique et peut être obtenu, comme mentionné au chapitre 2, à partir de l'équation (6.2) pour un opérateur de collision simplifié [43].

J'aimerais étudier aussi bien théoriquement que numériquement ces trois modèles et leurs liens. L'intérêt d'une telle double étude est que les résultats théoriques peuvent être utilisés pour mettre en place des schémas numériques efficaces et, réciproquement, les expériences numériques peuvent être un point de départ à des conjectures pour des résultats théoriques. Les deux axes que j'aimerais développer sont donc : l'étude des comportements asymptotiques des solutions, en temps grand et en limite de paramètres, et la mise en place de schémas numériques.

Dans la suite des travaux présentés au chapitre 2, je souhaite regarder des développements asymptotiques des solutions en fonction de ε et/ou ν afin d'obtenir des approximations d'ordre plus élevé. J'aimerais également étudier le comportement en temps long des solutions du modèle de Navier-Stokes quantique. Enfin une question intéressante mais difficile est l'étude du lien entre l'équation de Gross-Pitaevskii généralisée et le modèle de Navier-Stokes quantique. Ceci nécessite sans doute de considérer d'abord l'équation de Schrödinger pour N particules et de laisser tendre N vers l'infini afin d'obtenir un modèle macroscopique. L'une des principales difficultés est d'avoir une description des collisions qui permette de retrouver un terme diffusif.

A ma connaissance, la question de la simulation numérique du modèle de Navier-Stokes quantique est toujours une question ouverte. Une possibilité serait d'étendre les idées présentées dans [35] au cas visqueux. Dans ce travail, les auteurs utilisent la formulation augmentée du système d'Euler-Kortewg décrite au chapitre 2 pour construire un schéma numérique stable sous condition CFL. Une autre question intéressante est de voir s'il est possible de développer des schémas hybrides en couplant les niveaux macroscopique (Navier-Stokes quantique) et mésoscopique (équation de Boltzmann quantique) comme ça a récemment été fait dans le cas classique [81], ou encore, de voir si on peut obtenir pour le modèle de Navier-Stokes quantique des conditions aux limites appropriées à partir de celles de l'équation de Boltzmann quantique comme ça a été fait dans le chapitre 4. Une première possibilité serait de considérer le cas simplifié de l'opérateur de BGK quantique.

Références

- [1] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. *Science* 269, 198, 1995.
- [2] X. Antoine, A. Arnold, C. Besse, M. Ehrhardt, and A. Schädle. A review of transparent and artificial boundary conditions techniques for linear and nonlinear Schrödinger equations. *Commun. Comput. Phys.*, 4 :729–796, 2008.
- [3] X. Antoine, W. Bao, and C. Besse. Computational methods for the dynamics of nonlinear Schrödinger/Gross-Pitaevskii equations. *Computer Physics Communications*, 184 :2621–2633, 2013.
- [4] X. Antoine and R. Duboscq. *Modeling and Computation of Bose-Einstein Condensates : Stationary States, Nucleation, Dynamics, Stochasticity*, volume 2146 of *Lecture notes in mathematics*, pages 49–145. Springer, 2015.
- [5] P. Antonelli and P. Marcati. On the finite energy weak solutions to a system in quantum fluid dynamics. *Commun. Math. Phys. l.*, 287 :657–686, 2009.
- [6] P. Antonelli and P. Marcati. The quantum hydrodynamics system in two space dimensions. *Arch. Rational Mech. Anal.*, 203 :499–527, 2012.
- [7] K. Aoki and N. Masukawa. Gas flows caused by evaporation and condensation on two parallel condensed phases and the negative temperature gradient : Numerical analysis by using a nonlinear kinetic equation. *Phys. Fluids*, 6(3) :1379–1395, 1994.
- [8] A. Arnold, M. Ehrhardt, M. Schulte, and I. Sofronov. Discrete transparent boundary conditions for the Schrödinger equation on circular domains. *Commun. Math. Sci.*, 10 :889–916, 2012.
- [9] A. Arnold, M. Ehrhardt, and I. Sofronov. Discrete transparent boundary conditions for the Schrödinger equation : fast calculation, approximation, and stability. *Commun. Math. Sci.*, 1 :501–556, 2003.
- [10] C. Audiard and B. Haspot. Global well-posedness of the Euler-Korteweg system for small irrotational data. *Comm. Math. Phys.*, 315 :201–247, 2017.
- [11] W. Bao, Q. Du, and Y. Zhang. Dynamics of rotating Bose-Einstein condensates and its efficient and accurate numerical computation. *SIAM J. Appl. Math.*, 66 :758–786, 2006.

- [12] W. Bao, S. Jin, and P. A. Markowich. On time-splitting spectral approximations for the Schrödinger equation in the semiclassical regime. *J. Comput. Phys.*, 175 :487–524, 2002.
- [13] W. Bao, D. Marahrens, Q. Tang, and 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 :2671–2695, 2013.
- [14] W. Bao and Y. Zhang. Dynamics of the ground state and central vortex state in Bose-Einstein condensation. *Math. Mod. Meth. Appl. Sci.*, 15 :1863–1896, 2005.
- [15] C. Bardos, F. Golse, and Y. Sone. Half-space problems for the Boltzmann equation : a survey. *Journal of Statistical Physics*, 124 :275–300, 2006.
- [16] C. Bardos and T.-T. Nguyen. Remarks in the inviscid limit for the compressible flows. In *Recent advances in partial differential equations and applications*, volume 666 of *Contemp. Math.*, pages 55–67. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2016.
- [17] C. Bataillon, F. Bouchon, C. Chainais-Hillairet, J. Fuhrmann, E. Hoarau, and R. Touzani. Numerical methods for the simulation of a corrosion model with moving oxide layer. *Journal of Computational Physics*, 231 :6213–6231, 2012.
- [18] C. Bataillon, C. Chainais-Hillairet, C. Desgranges, E. Hoarau, F. Martin, S. Perrin, M. Turpin, and J. Talandier. Corrosion modeling of iron based alloy in nuclear waste repository. *Electrochimica Acta*, 55 :4451–4467, 2010.
- [19] J. Belmonte-Beitia and J. Cuevas. Solitons for the cubic-quintic nonlinear Schrödinger equation with time and space-modulated coefficients. *J. Phys. A : Math. Theor.*, 42, 2009.
- [20] S. Benzoni-Gavage, R. Danchin, and S. Descombes. On the well-posedness for the Euler-Korteweg model in several space dimensions. *Indiana Univ. Math. J.*, 56 :1499–1579, 2007.
- [21] C. Besse. A relaxation scheme for nonlinear Schrödinger equation. *Siam J. Numer. Anal.*, 42 :934–952, 2004.
- [22] C. Besse, B. Bidégaray, and S. Descombes. Order estimates in time of splitting methods for the nonlinear Schrödinger equation. *SIAM J. Numer. Anal.*, 40 :26–40, 2002.
- [23] C. Besse, S. Borghol, J.P. Dudon, T. Goudon, and I. Lacroix-Violet. On hydrodynamic model for LEO spacecraft charging. In *Some Problems on Nonlinear Hyperbolic Equations and Applications, The French-Chinese Summer Institute on Applied Mathematics held at Fudan University, Shanghai, September 1-21, 2008*, volume 15 of *Contemporary Applied Mathematics*. World Scientific, 2010.
- [24] C. Besse, S. Borghol, J.P. Dudon, T. Goudon, and I. Lacroix-Violet. Hydrodynamic regimes, Knudsen layer, Numerical schemes : Definition of boundary fluxes. *Advances in Applied Mathematics and Mechanics*, 3 :519–561, 2011.
- [25] C. Besse, R. Carles, and F. Méhats. An asymptotic preserving scheme based on a new formulation for NLS in the semiclassical limit. *Multiscale Model. Simul.*, 11 :1228–1260, 2013.

- [26] C. Besse, F. Charles, J.P. Dudon, T. Goudon, I. Lacroix-Violet, L. Navoret, and N. Vauchelet. Numerical approximation of Knudsen layer for the Euler-Poisson systems. *ESAIM : Proc. CEMRACS'10 research achievements : Numerical modeling of fusion*, 32 :177–194, 2011.
- [27] C. Besse, J. Coatleven, S. Fliss, I. Lacroix-Violet, and K. Ramdani. Transparent boundary conditions for locally perturbed infinite hexagonal periodic media. *Communications in Math Sciences*, 11 :907–938, 2013.
- [28] C. Besse, S. Descombes, G. Dujardin, and I. Lacroix-Violet. Energy preserving methods for nonlinear Schrödinger equations. *In progress*, 2017.
- [29] C. Besse, J.-P. Dudon, T. Goudon, and N. Vauchelet. Comparison of Vlasov solvers for spacecraft charging simulation. *Preprint INRIA*, 2009.
- [30] C. Besse, G. Dujardin, and I. Lacroix-Violet. High order exponential integrators for nonlinear Schrödinger equations with application to rotating Bose-Einstein condensates. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 55 :1387–1411, 2017.
- [31] C. Besse, M. Ehrhardt, and I. Lacroix-Violet. Discrete artificial boundary conditions for the Korteweg de Vries equation. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 32 :1455–1484, 2016.
- [32] Christophe Besse. A relaxation scheme for the nonlinear Schrödinger equation. *SIAM J. Numer. Anal.*, 42 :934–952, 2004.
- [33] S. N. Bose. Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. *Zeitschrift für Physik*, 26 : 178, 1924.
- [34] K. Brenner, C. Cancès, and D. Hilhorst. Finite volume approximation for an immiscible two-phase flow in porous media with discontinuous capillary pressure. *Comput. Geosci.*, 17 :573–597, 2013.
- [35] D. Bresch, F. Couderc, P. Noble, and J.P. Vila. A generalization of the quantum Bohm identity : Hyperbolic CFL condition for Euler-Korteweg equations. *C. R. math. Acad. Sci. Paris*, 354 :39–43, 2016.
- [36] D. Bresch and B. Desjardins. Existence of global weak solutions for 2D viscous shallow water equations and convergence to the quasi-geostrophic model. *Comm. Math. Phys.*, 238, 2003.
- [37] D. Bresch and B. Desjardins. Quelques modèles diffusifs capillaires de type Korteweg. *Comptes rendus - Mécanique*, 332 :881–886, 2004.
- [38] D. Bresch and B. Desjardins. On the existence of global weak solutions to the Navier-Stokes equations for viscous compressible and heat conducting fluids. *J. Math. Pures Appl.*, 87, 2007.
- [39] D. Bresch, B. Desjardins, and C.K. Lin. On some compressible fluid models : Korteweg, lubrication and shallow water systems. *Commun. Part. Diff. Eqs.*, 28 :1009–1037, 2003.
- [40] D. Bresch, B. Desjardins, and E. Zatorska. Two-velocity hydrodynamics in fluid mechanics Part II : Existence of global κ -entropy solutions to compressible Navier-Stokes systems with degenerate viscosities. *J. Math Pures Appl.*, 104 :801–836, 2015.

- [41] D. Bresch, M. Gisclon, and I. Lacroix-Violet. On Navier-Stokes-Korteweg and Euler-Korteweg systems : application to quantum fluid models. *Submitted for publication*, 2017.
- [42] D. Bresch, P. Noble, and J.P. Vila. Relative entropy for compressible Navier–Stokes equations with density-dependent viscosities and applications. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 1 :45–49, 2016.
- [43] S. Brull and F. Méhats. Derivation of viscous correction terms for the isothermal quantum Euler model. *Comm. Math. Phys.*, 90 :219–230, 2010.
- [44] R. Carles, R. Danchin, and J.-C. Saut. Madelung, Gross-Pitaevskii and Korteweg. *Nonlinearity*, 25 :2843–2873, 2012.
- [45] R. Carles and B. Mohammadi. Numerical aspects of the nonlinear Schrödinger equation in the semiclassical limit in a supercritical regime. *ESAIM Math. Model. Numer. Anal.*, 45 :981–1008, 2011.
- [46] F. Castella, P. Chartier, F. Méhats, and A. Murua. Stroboscopic averaging for the nonlinear Schrödinger equation. *Found. Comput. Math.*, 15 :519–559, 2015.
- [47] E. Celledoni, D. Cohen, and B. Owren. Symmetric exponential integrators with an application to the cubic Schrödinger equation. *Found. Comput. Math.*, 8 :303–317, 2008.
- [48] C. Chainais-Hillairet, P.L. Colin, and I. Lacroix-Violet. Convergence of a finite volume scheme for a corrosion model. *International Journal of Finite Volumes*, 27, 2015.
- [49] C. Chainais-Hillairet and I. Lacroix-Violet. The existence of solutions to a corrosion model. *Applied Mathematical Letters*, 25 :1784–1789, 2012.
- [50] C. Chainais-Hillairet and I. Lacroix-Violet. On the existence of solutions for a drift-diffusion system arising in corrosion modeling. *Discrete and Continuous Dynamical System, Series B*, 20, 2015.
- [51] C. Chainais-Hillairet, Y.J. Peng, and I. Violet. Numerical solution of the Euler-Poisson system for the potential flows. *Applied Numerical Mathematics*, 59 :301–315, 2009.
- [52] M. Chane-Yook. *Etude d’une équation cinétique liée à l’effet Compton ; modélisation et simulation 3D de la charge d’un satellite en environnement plasmique*. PhD thesis, Université de Provence, 2004.
- [53] M. Chane-Yook, S. Clerc, and S. Piperno. Space charge and potential distribution around a spacecraft in an isotropic plasma. *J. Geophys. Res.*, 111, 2006.
- [54] O. Chanrion. *Simulation de l’influence de la propulsion plasmique sur la charge électrostatique d’un satellite en milieu magnétosphérique*. PhD thesis, Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 2001.
- [55] P. Chartier, N. Crouseilles, M. Lemou, and F. Méhats. Uniformly accurate numerical schemes for highly oscillatory Klein-Gordon and nonlinear Schrödinger equations. *Numer. Math.*, 129 :211–250, 2015.

- [56] M. Chatard. Asymptotic behavior of the Scharfetter-Gummel scheme for the drift-diffusion model. In *Finite volumes for complex applications. VI. Problems & perspectives. Volume 1, 2*, volume 4 of *Springer Proc. Math.*, pages 235–243. Springer, Heidelberg, 2011.
- [57] F. Chen. *Introduction to plasma physics and controlled fusion*, volume 1. Plenum Press, New-York, 1984.
- [58] S. Clerc, S. Brosse, and M. Chane-Yook. Sparcs : an advanced software for spacecraft charging analysis. *Proceedings of the 8th Spacecraft Charging Tech. Conf., Huntsville, AL*, October 20-24, 2003.
- [59] D. Cohen and L. Gauckler. One-stage exponential integrators for nonlinear Schrödinger equations over long times. *BIT*, 52 :877–903, 2012.
- [60] P.L. Colin. *Etude théorique et numérique de modèles mathématiques de corrosion*. PhD thesis, Université de Lille 1, 2016.
- [61] F. Coron, F. Golse, and C. Sulem. A classification of well-posed kinetic layer problems. *Comm. on Pure and Appl. Math.*, XLI :409–435, 1988.
- [62] J. Crank and P. Nicolson. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, 43 :50–67, 1947.
- [63] K.B. Davis, M.-O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D.S. Durfee, D.M. Kurn, and W. Ketterle. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Physical Review Letters*, 75 :3969–3973, 1995.
- [64] P. Degond and P.A. Markowich. A steady state potential flow model for semiconductors. *Annali di matematica pura ed applicata*, IV, CLXV :87–98, 1993.
- [65] M. Delfour, M. Fortin, and G. Payre. Finite-difference solutions of a nonlinear Schrödinger equation. *J. Comput. Phys.*, 44 :277–288, 1981.
- [66] S. Descombes and M. Thalhammer. The Lie-Trotter splitting for nonlinear evolutionary problems with critical parameters : a compact local error representation and application to nonlinear Schrödinger equations in the semiclassical regime. *IMA J. Numer. Anal.*, 33 :722–745, 2013.
- [67] D. Donatelli, E. Feireisl, and P. Marcati. Well/ill posedness for the Euler-Korteweg-Poisson system and related problems. *Comm. Partial Differential Equations*, 40 :1314–1335, 2015.
- [68] J. Dong. A note on barotropic compressible quantum Navier-Stokes equations. *Nonlinear Analysis : Real World Applications*, 73 :854–856, 2010.
- [69] K. Dossou, M.-A. Byrne, and L.-C. Botten. Finite element computation of grating scattering matrices and application to photonic crystal band calculations. *J. Comput. Phys.*, 219 :120–143, 2006.
- [70] J. Droniou and R. Eymard. A mixed finite volume scheme for anisotropic diffusion problems on any grid. *Numer. Math.*, 105 :35–71, 2006.
- [71] G. Dujardin. Exponential Runge-Kutta methods for the Schrödinger equation. *Appl. Numer. Math.*, 59 :1839–1857, 2009.

- [72] G. Dujardin and E. Faou. Normal form and long time analysis of splitting schemes for the linear Schrödinger equation with small potential. *Numerische Mathematik*, 106 :223–262, 2007.
- [73] A. Duran and J. M. Sanz-Serna. The numerical integration of relative equilibrium solutions. The nonlinear Schrödinger equation. *IMA. J. Numer. Anal.*, 20 :235–261, 2000.
- [74] W. E and D. Li. On the crystallization of 2D hexagonal lattices. *Comm. Math. Phys.*, 286 :1099–1140, 2009.
- [75] A.-G. Edelman and S.-F. Helfert. Three-dimensional analysis of hexagonal structured photonic crystals using oblique coordinates. *Optical and Quantum Electronics*, 41 :243–254, 2009.
- [76] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen gases. *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften*, 1 :3, 1925.
- [77] Z. Fei, V. Pérez-Garcia, and L. Vázquez. Numerical simulation of nonlinear Schrödinger systems : A new conservative scheme. *Appl. Math. Comput.*, 71 :165–177, 1995.
- [78] E. Feireisl, B.-J. Jin, and A. Novotny. Relative entropies, suitable weak solutions, and weak-strong uniqueness for the compressible Navier-Stokes system. *J. Math. Fluid Mech.*, 14 :717–730, 2012.
- [79] E. Feireisl and A. Novotny. *Singular Limits in Thermodynamics of Viscous Fluids*. Advances in Mathematical Fluid Mechanics. Birkhäuser Basel, 2009.
- [80] D. Ferry and J.-R. Zhou. Form of the quantum potential for use in hydrodynamic equations for semiconductor device modeling. *Phys. Rev. B*, 48 :7944–7950, 1993.
- [81] F. Filbet and T. Rey. A Hierarchy of Hybrid Numerical Method for Multi-Scale Kinetic Equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 37(3) :A1218–A1247, 2015. to appear.
- [82] S. Fliss. *Etude mathématique et numérique de la propagation des ondes dans des milieux périodiques localement perturbés*. PhD thesis, Ecole Polytechnique, 2010.
- [83] S. Fliss and P. Joly. Exact boundary conditions for time-harmonic wave propagation in locally perturbed periodic media. *Appl. Numer. Math.*, 59 :2155–2178, 2009.
- [84] H. Gajewski and K. Gärtner. On the discretization of van Roosbroeck’s equations with magnetic field. *Z. Angew. Math. Mech.*, 76 :247–264, 1996.
- [85] L. Gauckler and C. Lubich. Splitting integrators for nonlinear Schrödinger equations over long times. *Found. Comput. Math.*, 10 :275–302, 2010.
- [86] R.-C. Gauthier, K. Mnaymneh, S. Newman, K.-E. Medri, and C. Raup. Hexagonal array photonic crystal with photonic quasi-crystal defect inclusion. *Optical Materials*, 31 :51–57, 2008.
- [87] M. Gisclon and I. Lacroix-Violet. About the barotropic compressible quantum Navier-Stokes equations. *Nonlinear Analysis Series A : Theory, Methods and Applications*, 128 :106–121, 2015.

- [88] E. Godlewski and P.-A. Raviart. *Numerical approximation of hyperbolic systems of conservation laws*, volume 118 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer, New-York, 1996.
- [89] J. Grant. Pressure and stress tensor expressions in the fluid mechanical formulation of the Bose condensate equations. *J. Phys. A : Math., Nucl. Gen.*, 6 :L151–L153, 1973.
- [90] E. Hairer, G. Wanner, and C. Lubich. *Geometric Numerical Integration : Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*. Springer Series in Computational Mathematics 31. Springer Berlin Heidelberg, 2nd edition, 2006.
- [91] B. Haspot. Weak-strong uniqueness for compressible Navier-Stokes system with degenerate viscosity coefficient and vacuum in one dimension. *Communications in Mathematical Sciences*, 15 :587–591, 2017.
- [92] A. M. Il'in. A difference scheme for a differential equation with a small parameter multiplying the highest derivative. *Mat. Zametki*, 6 :237–248, 1969.
- [93] F. Jiang. A remark on weak solutions to the barotropic compressible quantum Navier-Stokes equations. *Nonlinear Analysis : Real World Applications*, 12 :1733–1735, 2011.
- [94] P. Joly, J.-R. Li, and S. Fliss. Exact boundary conditions for periodic waveguides containing a local perturbation. *Commun. Comput. Phys.*, 1 :945–973, 2006.
- [95] A. Jüngel. Global weak solutions to compressible Navier-Stokes equations for quantum fluids. *SIAM, J. Math. Anal.*, 42 :1025–1045, 2010.
- [96] A. Jüngel and D. Matthes. An algorithmic construction of entropies in higher-order nonlinear PDES. *Nonlinearity*, 19 :633–659, 2006.
- [97] A. Jüngel and R. Pinnau. Global non-negative solutions of a nonlinear fourth-order parabolic equation for quantum systems. *SIAM J. Math. Anal.*, 32 :760–777, 2000.
- [98] A. Jüngel and R. Pinnau. A positivity-preserving numerical scheme for a nonlinear fourth-order parabolic equation. *SIAM J. Num. Anal.*, 39 :385–406, 2001.
- [99] A. Jüngel and I. Violet. First-order entropies for the Derrida-Lebowitz-Speer-Spohn equation. *Discrete and Continuous Dynamical Systems, Series B*, 8 :861–877, 2007.
- [100] A. Jüngel and I. Violet. The quasi-neutral limit in the quantum drift-diffusion equations. *Asymptotic Analysis*, 53 :139–157, 2007.
- [101] A. Jüngel and I. Violet. Mixed entropy estimates for the porous medium equation with convection. *Discrete and Continuous Dynamical Systems, Series B*, 12 :783–796, 2009.
- [102] P. Kerdelhué. Spectre de l'opérateur de Schrödinger magnétique avec symétrie d'ordre six. *Mém. Soc. Math. France (N.S.)*, 51 :139, 1992.
- [103] D.J. Korteweg and G. de Vries. On the change of form of long waves advancing in a rectangular canal, and on a new type of long stationary waves. *Philosophical Magazine*, 39 :422–443, 1895.
- [104] I. Lacroix-Violet and A. Vasseur. Global weak solutions to the compressible quantum Navier-Stokes equation and its semi-classical limit. *Submitted for publication*, 2016.

- [105] R. D. Lazarov, I. D. Mishev, and P. S. Vassilevski. Finite volume methods for convection-diffusion problems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 33 :31–55, 1996.
- [106] H. Le Dret and A. Raoult. Homogenization of hexagonal lattices. *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 349 :111–114, 2011.
- [107] R. J. LeVeque. *Finite volume methods for hyperbolic problems*. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [108] P.-L. Lions. *Mathematical topics in fluid mechanics. Vol 1 incompressible models*. Oxford Science publication, 2006.
- [109] M. Loffredo and L. Morato. On the creation of quantum vortex lines in rotating he II. *Il nouvo cimento*, 108B :205–215, 1993.
- [110] C. Lubich. On splitting methods for Schrödinger-Poisson and cubic nonlinear Schrödinger equations. *Math. Comp.*, 77 :2141–2153, 2008.
- [111] M. J. Mandell, V. A. Davies, and L. G. Mikelides. NASCAP-2K preliminary documentation. *Science Applications International Corp, San Diego, CA, Scientific rept. no. 2, A555024*, 2002.
- [112] P.A. Markowich. *The stationnary semiconductor device equations*. Springer, New-York, 1986.
- [113] J.C. Maxwell. On stresses in rarified gases arising from inequalities of temperature. *Phil. Trans. Royal Soc. London*, 170 :231–256, 1879.
- [114] Q. Mengzhao. Difference schemes for the dispersive equations. *Computing*, 31 :261–267, 1983.
- [115] D. W. Peaceman and H. H. Rachford, Jr. The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations. *J. Soc. Indust. Appl. Math.*, 3 :28–41, 1955.
- [116] Y.J. Peng. Some asymptotic analysis in steady state Euler-Poisson equations for potential flow. *Asymptotic analysis*, 36 :75–92, 2003.
- [117] Y.J. Peng and I. Violet. Asymptotic expansions in a steady state Euler-Poisson system and convergence to incompressible Euler equations. *M3AS*, 15 :717–736, 2005.
- [118] Y.J. Peng and I. Violet. Example of supersonic solutions to a steady state Euler-Poisson system. *Applied Mathematical Letters*, 19 :1335–1340, 2006.
- [119] S. A. Phani, J. Woodhouse, and N.-A. Fleck. Wave propagation in two-dimensional periodic lattices. *J. Acoust. Soc. Am.*, 119 :1995–2005, 2006.
- [120] M. Reed and B. Simon. *Methods of modern mathematical physics. IV. Analysis of operators*. Academic Press [Harcourt Brace Jovanovich Publishers], New York, 1978.
- [121] J. F. Roussel, F. Rogier, M. Lemoine, D. Volpert, G. Rousseau, G. Sookahet, P. Sng, and A. Hilgers. Design of a new modular spacecraft plasma interaction modeling software (SPIS). *Proceedings of the 8th Spacecraft Charging Tech. Conf., Huntsville, AL*, October 20-24, 2003.
- [122] J. M. Sanz-Serna and J. G. Verwer. Conservative and nonconservative schemes for the solution of the nonlinear Schrödinger equation. *IMA J. Numer. Anal.*, 6 :25–42, 1986.

- [123] D. L. Scharfetter and H. K. Gummel. Large signal analysis of a silicon read diode oscillator. *IEEE Trans. Electron Dev.*, 16 :64–77, 1969.
- [124] J. Simon. Compact sets in the space $L^p(0, t; b)$. *Ann. Mat. Pura Appl.*, IV :65–96, 1987.
- [125] Y. Sone. *Kinetic Theory and Fluid Dynamics*. Modeling and simulation in science, engineering and technology. Birkhauser, 2002.
- [126] Y. Sone, T. Ohwada, and K. Aoki. Evaporation and condensation on a plane condensed phase : Numerical analysis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules. *Phys. Fluids*, 1(8) :1398–1405, 1989.
- [127] A. Spadoni, M. Ruzzene, S. Gonella, and F. Scarpa. Phononic properties of hexagonal chiral lattices. *Wave Motion*, 46 :435–450, 2009.
- [128] F. Sueur. On the inviscid limit for the compressible Navier-Stokes system in an impermeable bounded domain. *J. Math. Fluid Mech.*, 16 :163–178, 2014.
- [129] Masuo Suzuki. Fractal decomposition of exponential operators with applications to many-body theories and Monte Carlo simulations. *Phys. Lett. A*, 146 :319–323, 1990.
- [130] Q. Tang. *Numerical Studies on Quantized Vortex Dynamics in Superfluidity and Superconductivity*. PhD thesis, National University of Singapore, 2013.
- [131] A. Vasseur and Ch. Yu. Existence of global weak solutions for 3D degenerate compressible Navier-Stokes equations. *Inventiones Mathematicae*, 206 :935–974, 2016.
- [132] A. Vasseur and Ch. Yu. Global weak solutions to the compressible quantum Navier–Stokes equations with damping. *SIAM J. Math. Anal.*, 48 :1489–1511, 2016.
- [133] I. Violet. High order expansions in quasi-neutral limit of the Euler-Poisson system for a potential flow. *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh*, 137A :1101–1118, 2007.
- [134] J. A. C. Weideman and B. M. Herbst. Split-step methods for the solution of the nonlinear Schrödinger equation. *SIAM J. Numer. Anal.*, 23 :485–507, 1986.
- [135] R. Wyatt. *Quantum Dynamics with Trajectories*. Springer, New York, 2005.
- [136] E. Zatorska. *Fundamental problems to equations of compressible chemically reacting flows*. PhD thesis, University of Warsaw, 2013.
- [137] C. Zheng, X. Wen, and H. Han. Numerical solution to a linearized KdV equation on unbounded domain. *Numer. Meth. Part. Diff. Eqs.*, 24 :383–399, 2008.
- [138] A. Zisowsky. *Discrete transparent boundary conditions for systems of evolution equations*. PhD thesis, Technische Universität Berlin, 2003.