

# CONSTRUCTION ET SIMULATION DE CONDITIONS AUX LIMITES ARTIFICIELLES POUR L'ÉQUATION DE SCHRÖDINGER AVEC POTENTIEL

*Pauline Klein*

*Résumé.* — Dans ce travail effectué en collaboration avec Xavier Antoine (Nancy) et Christophe Besse (Lille), nous présentons différentes familles de conditions aux limites artificielles permettant de résoudre numériquement l'équation de Schrödinger avec potentiel sur un domaine de calcul borné. Ces conditions aux limites sont construites en utilisant le calcul symbolique pour les opérateurs pseudodifférentiels. Des liens entre ces familles de conditions aux limites, ainsi que des résultats de stabilité sont prouvés. Ces conditions sont ensuite discrétisées en temps de manière cohérente avec une formulation variationnelle par éléments finis, et des résultats numériques sont présentés.

## Introduction

Pour des raisons évidentes de simulation par ordinateur, la résolution numérique d'une équation aux dérivées partielles ne peut s'effectuer que sur un domaine borné, même si cette équation est naturellement posée dans un domaine non borné, par exemple lorsque le domaine spatial est  $\mathbb{R}$ . On choisit alors ce domaine de calcul  $\Omega$  borné, sur lequel on résout l'équation en utilisant un maillage contenant un nombre élevé mais fini de points. Mais ce faisant, on a introduit de manière artificielle une frontière, le bord de  $\Omega$ , dans un système qui n'en avait initialement pas. Il est alors nécessaire de préciser la condition aux limites à utiliser sur cette frontière.

La recherche d'une condition aux limites convenable est cruciale dans la résolution numérique de ce genre d'équations. En effet, c'est elle qui permet de simuler le comportement de la solution à l'extérieur du domaine de calcul. Une condition aux limites trop grossière a pour effet de générer une importante réflexion parasite lorsque l'onde atteint le bord du domaine. Une condition aux limites artificielle sera dite exacte, ou *transparente*, si la solution calculée sur  $\Omega$  avec cette condition coïncide avec la restriction à  $\Omega$  de la solution exacte. A défaut, on parlera de condition aux

limites *approchée*. Notre objectif est de construire des conditions aux limites approchées pour l'équation de Schrödinger en dimension une, avec un potentiel variable  $V(x, t)$  ou une non linéarité  $f(u)$ .

### 1. Construction de conditions aux limites artificielles

On s'intéresse à l'équation de Schrödinger en dimension une

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

dont la solution  $u(x, t)$  est à valeurs complexes, et dans laquelle  $V = V(x, t)$  est une fonction régulière appelée *potentiel*. La donnée initiale  $u_0 \in L^2(\mathbb{R})$  est à support compact, supposé dans le domaine de calcul  $\Omega = ]x_\ell; x_r[$ . On note  $\Sigma = \partial\Omega = \{x_\ell, x_r\}$  la frontière artificiellement introduite par la considération du domaine  $\Omega$ .

On cherche à déterminer la condition aux limites sous la forme

$$(1) \quad \partial_n u + i\Lambda^+ u = 0, \quad \text{sur } \Sigma \times [0; T]$$

où  $n$  désigne la normale unitaire sortante au domaine de calcul  $\Omega$ . L'opérateur pseudodifférentiel  $\Lambda^+(x, t, \partial_t)$  est un opérateur de type Dirichlet-Neumann qui peut être déterminé si on connaît son symbole total  $\lambda^+(x, t, \tau)$ , défini par la relation [7]

$$\Lambda^+(x, t, \partial_t)u(x, t) = \mathcal{F}_t^{-1}(\lambda^+(x, t, \tau)\hat{u}(x, \tau)) = \int_{\mathbb{R}} \lambda^+(x, t, \tau)\hat{u}(x, \tau)e^{i\tau t} d\tau$$

où  $\mathcal{F}_t$  désigne la transformée de Fourier en temps,  $\hat{u} = \mathcal{F}_t(u)$  et  $\tau$  est la covariable de  $t$ . Le symbole  $\lambda^+$  admet le développement en symboles homogènes  $\lambda^+ \sim \sum_{j=0}^{+\infty} \lambda_{1/2-j}^+$ . On s'attachera donc à déterminer  $\Lambda^+$  ou une approximation via le calcul des premiers symboles du développement asymptotique de  $\lambda^+$  [5, 6].

Dans le cas bien connu de l'équation sans potentiel ( $V = 0$ ), il est possible d'expliquer la condition aux limites transparente [4]

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

où  $\partial_t^{1/2}$  est l'opérateur de dérivation d'ordre 1/2 défini par

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

Pour un potentiel  $V = V(t)$ , un changement de jauge approprié  $v = e^{-i \int_0^t V(s) ds} u$  permet de se ramener à l'équation sans potentiel [2]. Cette démarche est la base de la première des deux stratégies étudiées ci-après dans le cas général  $V = V(x, t)$ . La deuxième stratégie quant à elle est une méthode directe se basant sur l'équation (S).

Ces deux stratégies conduisent à deux familles de conditions aux limites [3].

**Proposition 1.1.** — Dans le cadre de la première stratégie, appelée changement de jauge, la condition aux limites d'ordre 4 est donnée par

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

où  $\mathcal{V}(x, t) = \int_0^t V(x, s) ds$  et  $I_t$  désigne l'opérateur d'intégration.

Pour la seconde stratégie, dite méthode directe, la condition aux limites d'ordre 4 est

$$(ABC_2^4) \quad \partial_n \mathbf{u} - i \sqrt{i \partial_t + V} \mathbf{u} + \operatorname{sg}(\partial_n \mathcal{V}) \frac{\sqrt{|\partial_n \mathcal{V}|}}{2} (i \partial_t + V)^{-1} \left( \frac{\sqrt{|\partial_n \mathcal{V}|}}{2} \mathbf{u} \right) = 0$$

Dans chacune des deux stratégies, la condition d'ordre 2 se déduit de celle d'ordre 4 en ne conservant que les deux premiers termes.

Pour les conditions aux limites  $ABC_1^M$ , nous avons le résultat de stabilité suivant.

**Théorème 1.2.** — Le système constitué du problème (S) posé sur  $\Omega$ , et de la condition aux limites d'ordre 2  $ABC_1^2$ , est bien posé. En effet, toute solution  $\mathbf{u}$  vérifie l'inégalité d'énergie

$$\forall t > 0, \quad \|\mathbf{u}(t)\|_{L^2(\Omega)} \leq \|\mathbf{u}_0\|_{L^2(\Omega)}$$

ce qui assure l'unicité de cette solution.

Cela reste vrai également pour la condition d'ordre 4  $ABC_1^4$ , sous l'hypothèse supplémentaire que le signe de  $\partial_n \mathcal{V}$  soit constant au cours du temps sur  $\Sigma$ .

**Remarque 1.3.** — Dans le cas d'un potentiel  $V = V(x)$  ne dépendant pas du temps, on montre que les deux familles de conditions aux limites,  $ABC_1^M$  et  $ABC_2^M$ , sont équivalentes.

## 2. Discrétisation et résultats numériques

L'équation intérieure est discrétisée par un schéma de Crank-Nicolson en temps. La discrétisation des conditions aux limites doit préserver la stabilité inconditionnelle de ce schéma. L'évaluation des  $ABC_1^M$  est coûteuse puisqu'elle fait intervenir des opérateurs non locaux en temps : à chaque étape, le calcul de  $\partial_t^{1/2} \mathbf{u}$  sur la frontière nécessite les valeurs de  $\mathbf{u}$  sur le bord à tous les temps précédents. On discrétise ces opérateurs à l'aide de convolutions discrètes [8, 2]

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

avec les coefficients  $\beta_k = 1, -1, \frac{1}{2}, \frac{-1}{2}, \frac{3}{8}, \frac{-3}{8}, \dots$  et  $\gamma_k = 1, 2, 2, 2, \dots$ . On prouve que cette discrétisation mène à un schéma semi-discret inconditionnellement stable [3].

Pour les conditions de la deuxième stratégie, les opérateurs sont approchés formellement par des approximants de Padé d'ordre  $m$

$$(3) \quad \sqrt{i\partial_t + V} \approx R_m(i\partial_t + V) = \sum_{k=0}^m a_k^m - \sum_{k=1}^m a_k^m d_k^m (i\partial_t + V + d_k^m)^{-1}$$

Les conditions  $ABC_{2,m}^M$  ainsi obtenues sont localisées, et faciles à implémenter.

La donnée initiale pour les tests numériques est la gaussienne  $u_0(x) = e^{10ix-x^2}$ . On considère le potentiel  $V(x, t) = 5xt$ . On utilise une formulation variationnelle du problème semi-discrétisé en temps, à laquelle on applique des éléments finis linéaires. Les simulations numériques montrent que les conditions aux limites artificielles que nous avons construites donnent des résultats précis, ce qui est observable au faible niveau de la réflexion parasite observée à la traversée de la frontière droite (figure 1, l'amplitude de l'onde réfléchie est de  $10^{-4}$  et  $10^{-5}$ ). Elles améliorent indéniablement l'usage de la condition transparente du cas sans potentiel TBC (amplitude  $10^{-2}$ ). On remarque aussi que les conditions d'ordre 4 sont plus précises que celles d'ordre 2.

Ces conditions s'adaptent également avec succès à l'équation de Schrödinger non linéaire, dont un exemple repose sur le potentiel cubique  $V = q|u|^2$ .

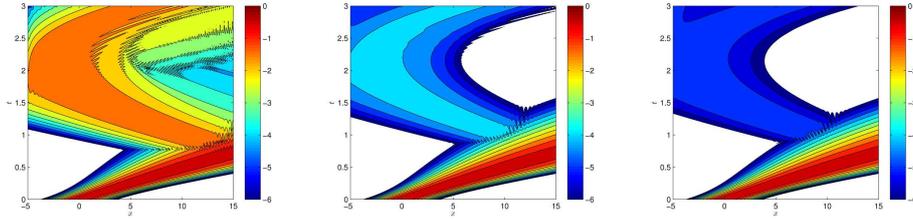


FIGURE 1. Représentation logarithmique dans le plan  $(x, t)$  de l'amplitude  $|u|$  de la solution calculée numériquement avec la condition sans potentiel (TBC, à gauche), la condition d'ordre 2  $ABC_{2,50}^2$  (milieu) et la condition d'ordre 4  $ABC_{2,50}^4$  (à droite), pour le potentiel  $V(x, t) = 5xt$ .

### Références

- [1] X. Antoine, A. Arnold, C. Besse, M. Ehrhardt, et A. Schädle. A review of transparent and artificial boundary conditions techniques for linear and nonlinear Schrödinger equations. *Commun. Comput. Phys.*, 4(4) :729–796, 2008.
- [2] X. Antoine et C. Besse. Unconditionally stable discretization schemes of non-reflecting boundary conditions for the one-dimensional Schrödinger equation. *J. Comput. Phys.*, 188(1) :157–175, 2003.
- [3] X. Antoine, C. Besse, et P. Klein. Absorbing boundary conditions for the one-dimensional Schrödinger equation with an exterior repulsive potential. *J. Comput. Phys.*, 228(2) :312–335, 2009.

- [4] V. A. Baskakov et A. V. Popov. Implementation of transparent boundaries for numerical solution of the Schrödinger equation. *Wave Motion*, 14(2) :123–128, 1991.
- [5] B. Engquist et A. Majda. Absorbing boundary conditions for numerical simulation of waves. *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.*, 74(5) :1765–1766, 1977.
- [6] R. Lascar. Propagation des singularités des solutions d'équations pseudo-différentielles quasi homogènes. *Ann. Inst. Fourier (Grenoble)*, 27(2) :vii–viii, 79–123, 1977.
- [7] M. Taylor. *Pseudodifferential operators*, volume 34 of *Princeton Mathematical Series*. Princeton University Press, Princeton, N.J., 1981.
- [8] D. Yevick, T. Friese, et F. Schmidt. A comparison of transparent boundary conditions for the fresnel equation. *J. Comput. Phys.*, 168(2) :433–444, 2001.

*Pauline Klein*

Institut Elie Cartan de Nancy (IECN), Nancy-Université, CNRS, Equipe INRIA CORIDA,  
Boulevard des Aiguillettes B.P. 239, F-54506 Vandœuvre-lès-Nancy.

*E-mail* : pauline.klein@iecn.u-nancy.fr