Calcul numérique de solutions de l'équation de Schrödinger non linéaire faiblement amortie avec défaut

Laurent Di Menza [a] — Olivier Goubet [b], — Emna Hamraoui [b,c,*], — Ezzeddine Zahrouni [c,d]

[a] Laboratoire de Mathématiques de Reims (LMR) - EA 4535, U.F.R. Sciences Exactes et Naturelles, 51687 REIMS cedex 2, France
laurent.di-menza@univ-reims.fr

[b] Laboratoire Amiénois de Mathématique Fondamentale et Appliquée, CNRS UMR 7352, Faculté des Sciences, Université de Picardie Jules Verne, 80039 Amiens CEDEX 1, France
Olivier.Goubet@u-picardie.fr

[c] Unité de Recherche : Multifractals et Ondelettes, Faculté des Sciences de Monastir, Université de Monastir, 5019 Monastir,Tunisie
emna.hamraoui@gmail.com

[d] Faculté des Sciences Économiques et de Gestion de Nabeul, Université de Carthage, 8000 Nabeul, Tunisie
zahrouniez@gmail.com
[*] Corresponding author

RÉSUMÉ. Dans ce travail, on étudie numériquement l'influence d'un défaut ponctuel sur le comportement des solutions de l'équation de Schrödinger non linéaire faiblement amortie. Notre méthode numérique repose sur l'utilisation des couches PML (a Perfectly Matched Layer) pour les conditions aux limites, d'un schéma Cranck-Nicolson en temps et la méthode des différences finies en espace. On observe tout d'abord que le défaut décompose l'onde incidente en deux parties, une réfléchie et une transmise, dont les normes L^2 sont des fonctions décroissantes du temps. D'autre part, on trouve que le défaut peut jouer le rôle d'une barrière.

ABSTRACT. In this work, we study numerically how a single defect influences the behaviour of solutions of the weakly damped non linear Schrödinger equation. Our numerical method is based on a Crank-Nicolson scheme in the time, finite difference method in space including a Perfectly Matched Layer (PML) treatment for the boundary conditions. First, we observe that the defect splits the incident wave in two parts, one reflected and one transmitted. For each, the L^2-norm are decreasing functions with respect to time. More over, we find that the defect can be considered as a barrier.

MOTS-CLÉS : NLS faiblement amortie, masse de Dirac, couche parfaitement absorbante.

KEYWORDS : weakly damped NLS equation, Dirac potential, perfectly matched layer.

1 Introduction

Les équations de Schrödinger non linéaires (NLS) ont toujours fait l'objet d'études intensives dans la littérature sur des thèmes variés tels que l'explosion en temps fini ou la propagation d'états stationnaires. En optique non linéaire, elles sont utilisées pour décrire la propagation d'un faisceau lumineux intense (laser) dans une fibre optique [12]. Ici, plusieurs phénomènes peuvent participer à l'atténuation de la lumière dans la fibre et à la perte de l'énergie lumineuse [1, 11].

Ce travail porte sur deux causes de perte d'énergie. La première est la dispersion du signal. Dans ce cas, le phénomène est modélisé par l'équation NLS faiblement amortie

$$i\frac{\partial u}{\partial t} + i\gamma u + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + |u|^2 u = 0, \tag{1}$$

où l'inconnue $u = u(t,x)$ est définie sur $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$ à valeurs dans $\mathbb{C}$, avec γ une constante positive qui représente le paramètre d'amortissement. Le problème de Cauchy associé à (1) a été étudié par plusieurs auteurs dont J. Ginibre [6], T. Cazenave [2] et T. Kato [9].

La deuxième cause de perte d'énergie résulte de l'existence d'impuretés dans le milieu d'étude et qui sont la conséquence du mode de fabrication. Ici, notre problème est modélisé par l'équation NLS avec défaut ponctuel à l'origine

$$i\frac{\partial u}{\partial t} + Zu\delta_0 + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + |u|^2 u = 0, \tag{2}$$

où Z est l'amplitude de défaut et δ_0 est la masse Dirac en zéro. L'existence et l'unicité de la solution du problème (2) à été étudiée par R. H Goodmana et all [7], ils ont prouvé que le problème est bien posé en $H^1(\mathbb{R})$.

Dans ce travail, on étudie numériquement l'influence du défaut sur le comportement des solutions de l'équation de NLS faiblement amortie. Notre problème est donné par l'équation de Schrödinger suivante

$$i\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + i\gamma u + Zu\delta_0 + |u|^2 u = 0. \tag{3}$$

L'objectif de notre étude est l'analyse de l'influence du défaut sur le comportement des solutions de l'équation NLS faiblement amortie (pour γ fixé), et en particulier sur la décroissance en temps de la norme L^2 des solutions numériques calculées.

2 Formulation forte du problème modèle

2.0.0.1 Mise en place des PML

Soit Ω le domaine de calcul, $\Omega =]x_g, x_d[\subset \mathbb{R}$ tel que $0 \in]x_g, x_d[$. Notre problème s'écrit

$$\begin{cases} i\dfrac{\partial u}{\partial t} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + i\gamma u + Zu\delta_0 + |u|^2 u = 0, & x \in \Omega, t > 0, \\ u(0,x) = u_0(x), & x \in \Omega, \\ u(t,x_d) = u(t,x_g) = 0, & t > 0. \end{cases} \tag{4}$$

L'utilisation d'une condition aux limites classique aux points x_d et x_g (par exemple la condition de type Dirichlet homogène) provoque la réflexion de la solution à l'intérieur

du domaine du calcul, et perturbe ainsi la solution numérique recherchée. D'où l'utilisation des couches PML (a Perfectly Matched Layer), qui sont des bandes ajoutées autour du domaine du calcul et destinées à absorber les ondes proches du bord sans les réfléchir [13].
Soit L la largeur de la bande PML. Le nouveau domaine de calcul est défini par $]x_g - L, x_d + L[$, que l'on note aussi $]xg_{pml}, xd_{pml}[$.

Figure 1 – Domaine et PML considérés en 1D.

La nouvelle formulation PML est basée sur la transformation suivante de x en coordonnées complexes (on se restreint au cas $+x$)

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

où $R \in \mathbb{C}$ et σ est une fonction positive, continue et nulle à l'extérieur de $[x_r + \infty)$ appelée coefficient d'absorption. Soit $v = u(t, x')$ une solution du problème (4), v vérifie l'équation

$$i\frac{\partial v}{\partial t} + \frac{\partial^2 v}{\partial x'^2} + i\gamma v + Zv\delta_0 + |v|^2 v = 0, \tag{5}$$

l'équation (5) se réécrit en fonction de la dérivée spatiale en x

$$i\frac{\partial v}{\partial t} - \frac{1}{1+R\sigma}\frac{\partial}{\partial x}(\frac{1}{1+R\sigma}\frac{\partial v}{\partial x}) + i\gamma v + Zv\delta_0 + |v|^2 v = 0,\ x \in]xg_{pml}, xd_{pml}[, \tag{6}$$

avec des conditions de types Dirichlet homogène sur les deux points limites $\{xg_{pml}, xd_{pml}\}$.
Pour l'expression de σ, différents choix existent dans la littérature, dans notre étude on prend le choix des fonctions quadratiques [13]

$$\sigma = \begin{cases} \sigma_0(x - x_g)^2, & xg_{pml} < x < x_g \\ 0, & x_g < x < x_d \\ \sigma_0(x - x_d)^2, & x_d < x < xd_{pml} \end{cases} \tag{7}$$

où σ_0 est une constante positive.

2.0.0.2 Modélisation de la masse de Dirac

Pour la modélisation de la masse de Dirac, on utilise l'approche donnée dans les travaux de Le Coz et al. [10], J. Holmer et C. Liu [8] et aussi dans [5]. Elle traduit la présence du défaut par une condition de transmission en zéro

$$\begin{aligned} &i\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{(1+R\sigma)^2}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{R\sigma'}{(1+R\sigma)^3}\frac{\partial u}{\partial x} + i\gamma u + |u|^2 u = 0, \quad x \in]xg_{pml}, xd_{pml}[,\ x \neq 0,\ t > 0, \\ &\frac{\partial u}{\partial x}(t, 0^+) - \frac{\partial u}{\partial x}(t, 0^-) = -Zu(t, 0), \qquad t > 0. \end{aligned} \tag{8}$$

3 Discrétisation du problème

Dans cette section, on utilise la méthode des différences finies pour l'approximation en espace et le schéma de Crank-Nicolson pour la discrétisation en temps. L'approximation numérique du terme défaut est donnée dans [10].

3.1 Semi-discrétisation en espace

Pour l'approximation en espace on utilise la méthode des différences finies. Soit Δx le pas de discrétisation, $\forall x_j \in]xg_{pml}, xd_{p_ml}[$, $x_j = xg_{pml} + j\ \Delta x$, $j = 1 : N$.

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, 0^+) = \frac{4u(t, \Delta x) - u(t, 2\Delta x) - 3u(t, 0)}{2\Delta x}. \tag{9}$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, 0^-) = \frac{u(t, -2\Delta x) - 4u(t, 0 - \Delta x) + 3u(t, 0)}{2\Delta x}. \tag{10}$$

Par conséquent, on résout en 0 un schéma d'ordre deux

$$4u(t, \Delta x) - u(t, 2\Delta x) + (2\ Z\ \Delta x - 6)u(t, 0) - u(t, 0 - 2\Delta x) + 4u(t, -\Delta x) = 0.$$

Pour $x_j \neq 0$, on utilise un schéma centré pour la approximation de la dérivé première

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, x_j) \approx \frac{u(t, x_{j+1}) - u(t, x_{j-1})}{2\Delta x},$$

et un schéma d'ordre deux pour l'approximation de la dérivée seconde

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x_j) \approx \frac{u(t, x_{j+1}) - 2u(t, x_j) + u(t, x_{j-1})}{(\Delta x)^2}.$$

3.2 Semi-discrétisation en temps

Pour l'approximation en temps on utilise un schéma de Crank-Nicolson. Soit Δt le pas discrétisation en temps, $t^n = n\ \Delta t$. On note $u_j^n \approx u(t^n, x_j)$. Pour tout $j \neq j_\delta$ où $x_{j_\delta} = 0$, on résout un système non linéaire

$$\begin{aligned}
&i\ \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \frac{1}{2}\frac{1}{(1 + R\sigma_j)^2}\frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} - \frac{1}{2}\ \frac{R\sigma_j'}{(1 + R\sigma_j)^3}\frac{u_{j+1}^{n+1} - u_{j-1}^{n+1}}{2\Delta x} \\
&+i\frac{\gamma}{2}u_j^{n+1} = -\frac{1}{2}\frac{1}{(1 + R\sigma_j)^2}\frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}\ \frac{R\sigma_j'}{(1 + R\sigma_j)^3}\frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} \\
&-i\frac{\gamma}{2}u_j^n - \frac{1}{2}(|u_j^{n+1}|^2 u_j^{n+1} + |u_j^n|^2 u_j^n).
\end{aligned}$$

En revanche, en $j = j_\delta$ (au point défaut) on résout l'équation linéaire suivante

$$\begin{aligned}
&\frac{\Delta t}{2}\ (4u_{j_\delta+1}^{n+1} - u_{j_\delta+2}^{n+1} + (2\ Z\ \Delta x - 6)\ u_{j_\delta}^{n+1} - u_{j_\delta-2}^{n+1} + 4u_{j_\delta-1}^{n+1}) \\
&\qquad = -\frac{\Delta t}{2}\ (4u_{j_\delta+1}^n - u_{j_\delta+2}^n + (2\ Z\ \Delta x - 6)\ u_{j_\delta}^n - u_{j_\delta-2}^n + 4u_{j_\delta-1}^n).
\end{aligned}$$

Comme le schéma contient des termes non linéaires, l'implémentation nécessite la résolution d'un problème de point fixe à chaque pas du temps.

4 Résultats numériques

Dans notre étude, on s'intéresse aux solutions issues d'une donnée initiale voyageuse de type gaussienne

$$u_0 = q\exp(ikx)\exp(-(x-x_0)^2).$$

Pour les simulations numériques on pose que $t \in [0,T]$, avec $T = 1$. On prend $x_g = -25$, $x_d = 25$, $L = 2$, $\Delta x = 10^{-2}$, $\Delta t = 10^{-4}$, $R = exp(\frac{i\pi}{4})$, et $\sigma_0 = 1$. Dans tous les cas test, on prend la même donnée initiale

$$u_0 = \exp(i10x)\exp(-(x-x_0)^2),$$

avec $x_0 = -5$.

4.1 Cas test 1 : sans défaut $(Z = 0)$

On rappelle que l'équation (1) vérifie l'estimations à priori suivante, établi par la masse

$$\frac{\partial}{\partial t}\|u\|^2_{L^2} = -2\gamma\|u\|^2_{L^2}, \tag{11}$$

L'égalité (11) montre que la norme L^2 de la solution de l'équation NLS faiblement amortie est une fonction décroissante du temps. Dans la figure 2, on visualise pour différentes valeurs d'amortissement la variation de la masse au cours du temps.

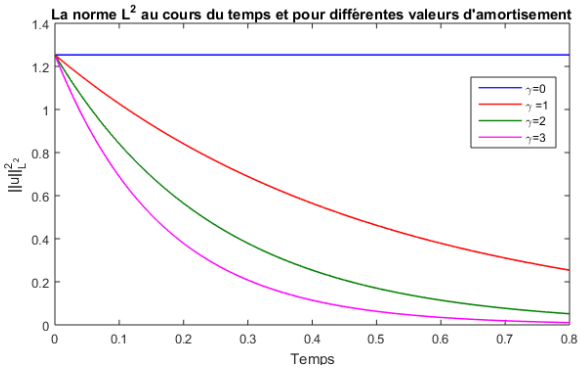

Figure 2 – La norme L^2 au cours du temps pour différentes valeurs d'amortissement.

En absence de dissipation ($\gamma = 0$), on observe bien la conservation de la masse qui est un invariant pour l'équation NLS. Pour $\gamma > 0$, on remarque que plus la valeur de l'amortissement est grande, plus la décroissance de la masse est rapide. Maintenant, afin de mieux comprendre l'influence du défaut, on visualise le comportement de la solution de l'équation NLS faiblement amortie pour $\gamma = 1$.

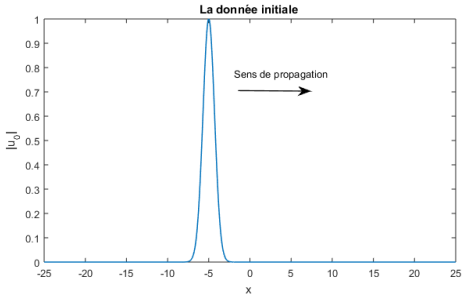

Figure 3 – La donnée initiale.

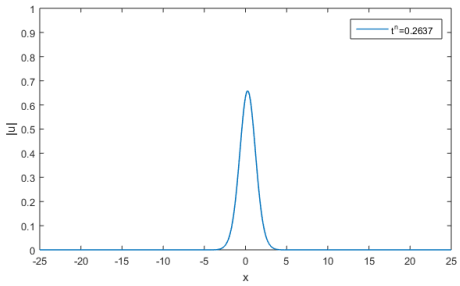

Figure 4 – La solution numérique calculée pour $\gamma = 1$ à l'instant $t^n = 0.2637$.

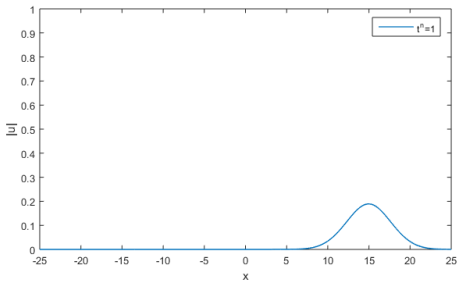

Figure 5 – La solution solution numérique calculée pour $\gamma = 1$ à l'instant final.

On observe que la solution numérique calculée se déplace vers les x positifs, ce qui est en bonne concordance avec le choix de k strictement positif (paramètre de la donnée initiale, $k = 10$). On remarque aussi l'influence du paramètre d'amortissement sur la décroissance de la norme L^2 : Soient $M_i = ||u_0||^2_{L^2}$ la masse de la donnée initiale, $M_n = ||u^n||^2_{L^2}$ la masse de la solution à l'instant n, on a

$$M_i = 1.2533,\ M_T = 0.1696, \text{ et } M_T << M_i.$$

4.2 Cas test 2 : avec défaut ($Z = 10$)

Dans ce cas test, on analyse l'influence de la présence du défaut sur le comportement dynamique de la solution. On prend un défaut localisé à l'origine, d'amplitude $Z = 10$.

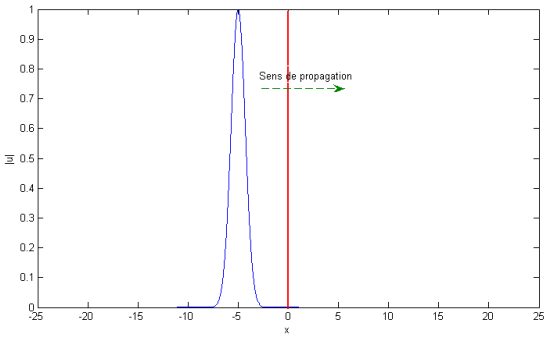

Figure 6 – La donnée initiale.

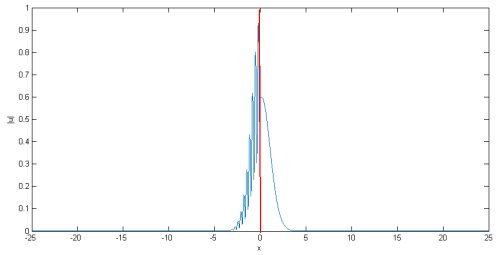

Figure 7 – La solution numérique calculée pour $\gamma = 1$, $Z = 10$ à l'instant $t^n = 0.2553$.

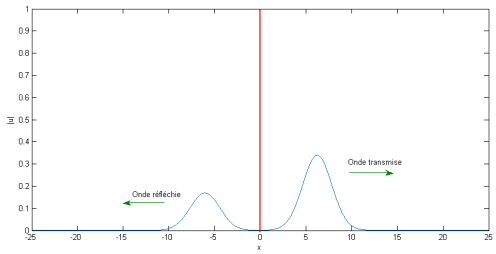

Figure 8 – La solution numérique calculée pour $\gamma = 1$, $Z = 10$ à l'instant $t^n = 0.5592$.

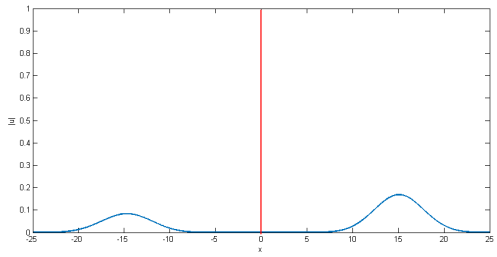

Figure 9 – La solution numérique calculée pour $\gamma = 1$, $Z = 10$ à l'instant final.

On observe que la solution se décompose en deux parties, une onde transmise et une onde réfléchie à la suite du passage par le défaut. On note t_δ le temps lors de l'interaction avec le défaut, $\forall t > T_\delta$, on a $u = u_{\mathbf{t}} + u_{\mathbf{r}}$, où $u^{\mathbf{t}}$ est l'onde transmise qui représente dans notre cas test la restriction de u sur $]0, x_d]$, pendant que $u^{\mathbf{r}}$ est l'onde réfléchie qui s'accorde avec la restriction de u sur $[x_g, 0[$.
Soient $M_{\mathbf{r}}$ la masse associée à l'onde réfléchie et $M_{\mathbf{t}}$ la masse associée à l'onde transmise. A l'instant final, on a

$$M_{\mathbf{t}} = 0.1354,\ M_{\mathbf{r}} = 0.0342, \text{ ainsi } M_{\mathbf{r}} < M_{\mathbf{t}} < M_i.$$

où M_i est la masse de la donnée initiale.
Les deux figures suivantes représentent la variation de la masse de l'onde réfléchie et l'onde transmise au cours du temps.

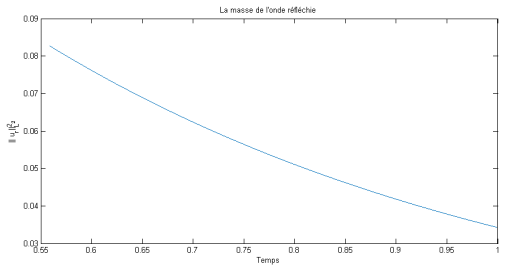

Figure 10 – La masse de l'onde réfléchie en fonction du temps pour $\gamma = 1$, et $Z = 10$.

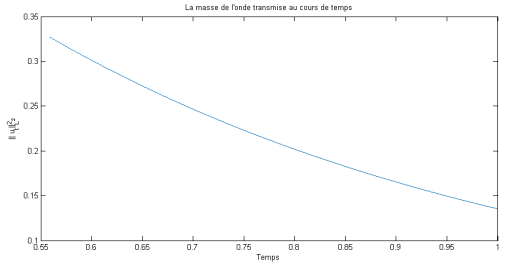

Figure 11 – La masse de l'onde transmise en fonction du temps pour $\gamma = 1$, et $Z = 10$.

On remarque que le défaut décompose l'onde incidente en deux parties (onde transmise et onde réfléchie), dont la norme L^2 de chacune décroit en fonction du temps.

4.3 Cas test 3 : influence du défaut sur la norme L^2

Dans un premier temps, on visualise la variation de la masse de la solution globale (sur tout le domaine de calcul) pour deux différentes amplitudes du défaut, $Z = 0$ et $Z = 10$, avec $\gamma = 1$.

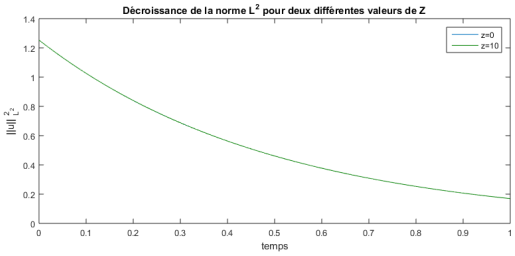

Figure 12 – La masse en fonction du temps pour $\gamma = 1$, $Z = 0$ et $Z = 10$.

On observe que les valeurs de la norme L^2 des solutions calculées se superposent au cours du temps. Ainsi, le présence de défaut n'influe pas sur la manière de la décroissance de la norme L^2. Dans la figure suivante, on visualise la norme L^2 de l'onde transmise en fonctions du temps et pour différentes valeurs de Z.

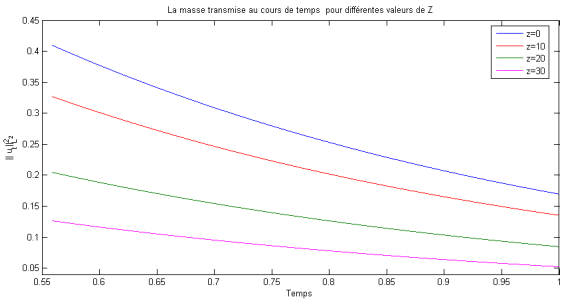

Figure 13 – La masse de l'onde transmise en fonction du temps pour $\gamma = 1$, et différentes valeurs de Z.

On remarque que plus l'amplitude du défaut est importante, plus la masse de la partie transmise est faible.

4.4 Cas test 4 : Z assez grand

Ici, on étudie le comportement de la solution suite au passage par un défaut d'amplitude assez grande, $Z = 10000$ avec $\gamma = 1$.

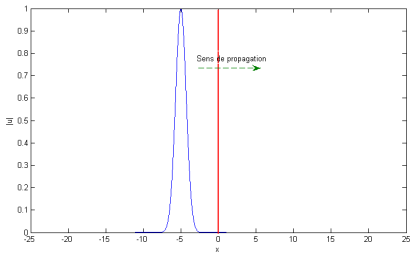

Figure 14 – La donnée initiale.

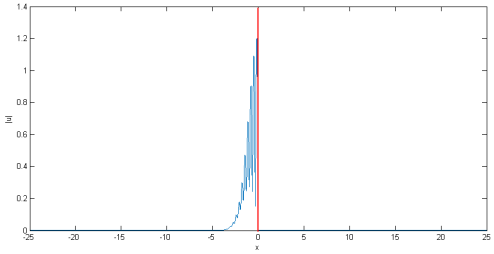

Figure 15 – La solution numérique calculée pour $\gamma = 1$, $Z = 10000$ à l'instant $t^n = 0.2683$.

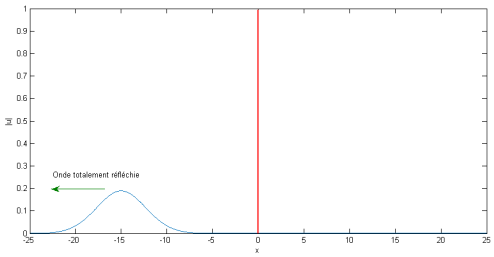

Figure 16 – La solution numérique calculée pour $\gamma = 1$, $Z = 10000$ à l'instant final.

On observe que le défaut a joué le rôle d'une barrière : la solution est totalement réfléchie et la partie transmise est nulle. On remarque aussi que la masse de la solution réfléchie à l'instant final est égale à la masse de la solution de l'équation NLS faiblement amortie sans défaut, $M_{\mathbf{r}} = M_T = 0.1696$.

Références

[1] B. BALLAND, « Optique géométrique - imagerie et instruments ». *Presses polytec*, 2007.

[2] T. CAZENAVE « Semilinear Schrodinger Equations ». Courant Lecture Notes in Mathematics, vol. 10, New York University Courant Institute of Mathematical Sciences, New York, 2003.

[3] M. DELFOUR, M. FORTIN, G. PAYRE. « Finite-difference solutions of a nonlinear Schrödinger equation ». *J. Comput. Phys*, vol. 44(2) (1981), 277-288

[4] E. EZZOUG, O. GOUBET, E. ZAHROUNI « Semi-discrete weakly damped nonlinear 2-D Schrödinger equation ». *Differential and Integral Equations*, vol. 23, (2010), 237-252.

[5] F. GENOUD, B. A. MALOMED, R. M. WEISHÄUPL. « Stable NLS Solitons in a cubic-quintic medium with a delta-function potential ». *Nonlinear Analysis : Theory, Methods & Applications*, vol. 133, (2016), 28-50

[6] J. GINIBRE « Introduction aux équations de Schrödinger non linéaires ». Cours de DEA 1994-1995, Orsay, Paris 11 éditions.

[7] R. H GOODMAN, P. J HOLMES, M. I WEINSTEIN « Strong NLS soliton defect interactions ». *Physica D : Nonlinear Phenomena*, 2004.

[8] J. HOLMER, C. LIU. « Blow-up for the $1D$ nonlinear Schrödinger equation with point nonlinearty I : Basic theory ». arXiv :1510.03491, october 2015.

[9] T.KATO « On nonlinear Schrödinger equation ». *Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor.*, vol. 46(1987), 113-129.

[10] S. LE COZ, R. FUKUIZUMI, G. FIBICH, B. KSHERIM, Y. SIVAN. « Instability of bound states of a nonlinear Schrödinger equation with a Dirac potential », Physica D, vol. 237 (2008) 1103-1128.

[11] H. C. NGUYEN, B. T. KUHLMEY, E. C. MÄGI , M. J. STEEL, P. DOMACHUK, C. L. SMITH, B. J. EGGLETON, « Tapered photonic crystal fibres : properties, characterisation and applications ». *Applied Physics B*, vol. 81, Issue 2-3, 2005.

[12] C. SULEM, P. L SULEM, « The Nonlinear Schrödinger Equation. Self-Focusing and Wave Collapse ». *Applied Mathematical Sciences*, vol. 139, 1999.

[13] C. ZHENG. « A perfectly matched layer approach to the nonlinear Schrödinger equations ». *Journal of Computational Physics*, 2007.