Conditions aux limites artificielles pour l'équation de Schrödinger

Pauline KLEIN, Université de Franche-Comté

Xavier ANTOINE, Université de Lorraine

Christophe BESSE, Université Toulouse 3

On considère la résolution numérique d'équations de Schrödinger de la forme :

$$\begin{cases} i\partial_t u + \Delta u + V\,u = 0, & \text{dans } \mathbb{R}^d \times (0,T), \\ u(\mathbf{x},0) = u_0(\mathbf{x}), & \text{dans } \mathbb{R}^d, \end{cases} \tag{1}$$

où V est un terme de potentiel, pouvant être non linéaire, la dimension spatiale d est égale à un ou deux, et la donnée initiale u_0 est supposée à support compact.
Pour résoudre ce problème posé en domaine non borné, on choisit de recourir à la méthode des conditions aux limites artificielles. Pour cela, on se donne un domaine de calcul Ω borné, incluant le support de la donnée initiale u_0 ; la frontière $\partial\Omega$ de ce domaine de calcul est fictive par rapport au problème physique. L'objectif est de déterminer la condition aux limite transparente sur $\partial\Omega$, de telle sorte que la solution du problème sur le domaine tronqué Ω coïncide avec la restriction à Ω de la solution de (1).
À potentiel nul, ou pour certains potentiels particuliers, il est possible d'expliciter cette condition aux limites transparente, par exemple via l'opérateur Dirichlet-to-Neumann sur $\partial\Omega$:

$$\partial_{\mathbf{n}} u|_{\partial\Omega} = \Lambda^+ u|_{\partial\Omega} \quad \text{sur } \partial\Omega. \tag{2}$$

Pour des potentiels plus généraux ou non linéaires, il n'est plus possible d'expliciter une condition transparente, et on approche l'opérateur Dirichlet-to-Neumann afin de construire des conditions aux limites artificielles approchées de différents ordres, se prêtant à une implémantation numérique efficace.
L'utilisation du calcul pseudodifférentiel et du calcul symbolique permet de déterminer l'asymptotique de l'opérateur Dirichlet-to-Neumann. On discrétise ensuite le système obtenu par un schéma de Crank-Nicolson.

Références

[1] X. Antoine, C. Besse, S. Descombes, *Artificial boundary conditions for one-dimensional cubic nonlinear Schrödinger equations*, SIAM J. Numer. Anal., 43(6) : 2272–2293, 2006.

[2] X. Antoine, C. Besse, P. Klein, *Absorbing boundary conditions for the one-dimensional Schrödinger equation with an exterior repulsive potential*, J. of Computational Physics, 228(2) : 312–335, 2009.

[3] X. Antoine, C. Besse, P. Klein, *Absorbing boundary conditions for Schrödinger equations with general potentials and nonlinearities*, SIAM J. Scientific Computing, 33(2) : 1008–1033, 2011.

[4] X. Antoine, C. Besse, P. Klein, *Absorbing boundary conditions for the two-dimensional Schrödinger equation with an exterior potential. Part I: construction and a priori estimates*, M3AS, 10(22), 2012.

Pauline KLEIN, Laboratoire de Mathématiques de Besançon, CNRS UMR 6623, Université de Franche-Comté, 16 route de Gray, 25030 Besançon CEDEX, France
`pauline.klein@univ-fcomte.fr`
Xavier ANTOINE, Institut Elie Cartan de Lorraine, UMR 7502, Inria Nancy-Grand Est, Université de Lorraine, BP 239, F-54506 Vandœuvre-lès-Nancy Cedex
`xavier.antoine@univ-lorraine.fr`
Christophe BESSE, Institut de Mathématiques de Toulouse, UMR CNRS 5219, Université Paul Sabatier Toulouse 3, 118 Route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex 9
`christophe.besse@math.univ-toulouse.fr`