L'équation de Schrödinger

Aspects mathématiques et numériques

Cours de Master 2
Claudia NEGULESCU

- Introduction/ Motivation
- Rappels d'analyse fonctionnelle
- L'équation de Schrödinger linéaire (existence, unicité d'une solution, propriétés)

$$iu_t + \Delta u + f = 0\,.$$

- Equation de Schrödinger non-linéaire (existence locale, existence globale)

$$iu_t + \Delta u + g(u) = 0\,.$$

- Aspects numériques : résolution approchée de l'équation de Schrödinger stationnaire sur un domaine borné

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + qV(x)\varphi(x) = E\varphi(x)\,.$$

1 Introduction

L'équation de Schrödinger est l'équation fondamentale de la physique quantique, comme l'est la loi de Newton en physique classique. On la retrouve pour décrire des phénomènes assez variés que ce soit dans l'optique quantique (propagation d'un faisceau de laser), la physique atomique (supraconductivité, condensation de Bose-Einstein), la technologie électronique (semiconducteurs, transistors, mémoires), la physique des plasmas, l'astrophysique, la microscopie électronique, la neutronique, la chimie ou encore la biologie, ...

Comme exemple, on va regarder la description du transport électronique dans des dispositifs semiconducteurs de taille nanométrique (MOSFET, RTD, guides d'onde,...). Ces dispositifs sont les composants essentiels de l'industrie électronique d'aujourd'hui. En raison de leur petite taille, atteignant des échelles nanométriques, des effets quantiques commencent à jouer un rôle important, comme l'effet tunnel, les interférences, la quantification, etc. Les modèles classiques (équation de Newton entre autres) ne sont plus valables et l'approche quantique (équation de Schrödinger) devient nécessaire.

Dans cette approche l'évolution des particules (électrons ou protons) dans un champ électrique se laisse décrire à l'aide de l'équation de Schrödinger

$$\mathbf{i}\hbar\partial_t\psi_E(t,x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x\psi_E(t,x) + qV(t,x)\psi_E(t,x)\,,$$

où $\psi_E(t,x)$ est la fonction d'onde correspondante à la particule d'énergie E, q la charge élémentaire, $\hbar$ la constante de Planck réduite, m la masse de l'électron (ou proton), V le potentiel électrique, qui s'écrit sous la forme $V = V_e + V_s$, somme d'un potentiel extérieur donné V_e et d'un potentiel "auto-consistant" V_s, solution de l'équation de Poisson

$$-\Delta_x V(t,x) = qn(t,x) = \int f(E)|\psi_E(t,x)|^2 dE\,,$$

où f est une statistique de distribution des particules d'énergie E et n leur densité. La signification physique de la fonction d'onde repose sur le fait suivant : la probabilité de trouver un électron d'énergie E à l'instant t dans le volume dx autour de la position x est donnée par $|\psi_E(t,x)|^2$.

D'un point de vue mathématique, l'équation de Schrödinger apparaît comme un problème à part, assez délicat, puisqu'elle possède à la fois des aspects paraboliques et hyperboliques. En effet, on verra plus tard que l'équation de Schrödinger a une vitesse de propagation infinie (Lemme 3.20), qui est une propriété parabolique. Par contre, l'équation de Schrödinger régularise seulement très peu (Lemme 3.22 et Théorème 3.25) et est réversible en temps, ces deux propriétés étant des propriétés hyperboliques.

L'objectif de ce cours est de donner quelques résultats mathématiques de base concernant l'équation de Schrödinger (linéaire comme non-linéaire) ainsi que de présenter quelques applications et aspects numériques.

2 Notions de l'analyse fonctionnelle

3 L'équation de Schrödinger linéaire

De nombreuses équations aux dérivées partielles, qui permettent de modéliser l'évolution d'un système au cours du temps, peuvent être reformulées sous la forme d'un problème de Cauchy abstrait. L'étude du problème de Cauchy associé à un opérateur A est intimement liée à l'existence d'un semi-groupe engendré par $-A$. Le point de départ de notre étude est donc le semi-groupe.

3.1 Semi-groupes

Soit X un espace de Banach (réel ou complexe) de norme $||\cdot||_X$.

Definition 1 *Une famille* $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\geq 0}$ *d'éléments* $\mathcal{T}(t) \in \mathcal{L}(X)$ *forme un semi-groupe de classe* C^0 *dans* X *ssi*

$$\begin{aligned}&(i)\;\; \mathcal{T}(s+t) = \mathcal{T}(s)\mathcal{T}(t)\,, \quad \forall s,t \geq 0\\ &(ii)\;\; \mathcal{T}(0) = I \quad (\textit{identité dans } \mathcal{L}(X))\\ &(iii)\;\; lim_{t\to 0^+}||\mathcal{T}(t)x - x||_X = 0 \quad \forall x \in X\,.\end{aligned}$$

La famille $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ *forme un groupe de classe* C^0 *ssi (i)-(iii) ont lieu pour* $s,t \in \mathbb{R}$.

Proposition 3.1 *Soit* $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\geq 0}$ *un semi-groupe de classe* C^0. *Alors*
(i) $\forall x \in X$ *la fonction* $t \longmapsto \mathcal{T}(t)x$ *est continue de* $[0,\infty)$ *dans* X.
(ii) $\exists \omega \in \mathbb{R}$ *et* $M \in \mathbb{R}$ *tels que*

$$||\mathcal{T}(t)||_{\mathcal{L}(X)} \leq Me^{\omega t}\,, \quad \forall t \in \mathbb{R}^+\,.$$

Definition 3.2 *Le semi-groupe* $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\geq 0}$ *est dit semi-groupe de contraction de classe* C^0 *ssi* $||\mathcal{T}(t)||_{\mathcal{L}(X)} \leq 1$, $\forall t \geq 0$.

Proposition 3.3 *Soit* $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\geq 0}$ *un semi-groupe de classe* C^0. *On désigne par* $D(A)$ *l'ensemble*

$$D(A) := \left\{ x \in X \;/\; \lim_{t\to 0^+} \frac{\mathcal{T}(t)x - x}{t} \;\; \textit{existe dans } X \right\}\,.$$

Alors $D(A)$ *est un sous-espace dense de* X *et pour tout* $x \in D(A)$, *l'élément* $\mathcal{T}(t)x$ *appartient aussi à* $D(A)$ *pour tout* $t \geq 0$.

Definition 3.4 *Soit* $A_h \in \mathcal{L}(X)$ *l'opérateur défini par*

$$A_h(x) := \frac{\mathcal{T}(h)x - x}{h}\,, \quad h > 0\,.$$

On pose $Ax := \lim_{h\to 0^+} A_h(x)$ *pour* $x \in D(A)$. *Alors, l'opérateur non-borné* $A : D(A) \subset X \to X$ *s'appelle le générateur infinitésimal du semi-groupe* $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\geq 0}$.

Proposition 3.5 *Soient* $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\geq 0}$ *un semi-groupe de classe* C^0 *et* A *son générateur infinitésimal. On a les propriétés suivantes*
(i) Soit $x \in D(A)$. *Alors l'application* $t \longmapsto \mathcal{T}(t)x$ *appartient à* $C^1([0,\infty), X)$ *et on a*

$$\frac{d}{dt}\mathcal{T}(t)x = A\mathcal{T}(t)x = \mathcal{T}(t)Ax\,, \quad \forall x \in D(A)\,,\; \forall t \geq 0\,.$$

(ii) A *est un opérateur non-borné, fermé.*

Proposition 3.6 (Problème de Cauchy homogène)
Soit $A : D(A) \subset X \to X$ *l'opérateur infinitésimal d'un semi-groupe* $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\geq 0}$ *de classe* C^0. *Le problème de Cauchy suivant*

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = Au\,, \quad t \geq 0 \\ u(0) = \varphi \end{cases} \tag{3.1}$$

admet pour $\varphi \in D(A)$ *comme unique solution* $u(t) = \mathcal{T}(t)\varphi$. *Cette solution satisfait* $u \in C^1([0,\infty); X)$ *et* $u(t) \in D(A)$, $\forall t \geq 0$.
Si de plus $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\geq 0}$ *est un semi-groupe d'isométries de classe* C^0, *alors on a la conservation de la "charge" ou de la "masse"* $||u(t)||_X = ||\varphi||_X$, *pour tout* $t \geq 0$.

Proof: EXO. ∎

Remark 3.7 On peut munir $D(A)$ de la norme du graphe $||x||^2_{D(A)} := ||x||^2_X + ||Ax||^2_X$, l'espace $(D(A), ||\cdot||_{D(A)})$ étant alors un espace de Banach. L'opérateur A peut être vu alors comme un élément de $\mathcal{L}(D(A); X)$. Par ailleurs, l'unique solution de (3.1) satisfait dans ce cas $u \in C([0,\infty); D(A)) \cap C^1([0,\infty); X)$. ∎

Soit maintenant X un espace de Hilbert complexe.

Lemma 3.8 (Le semi-groupe adjoint)
Soit $A : D(A) \subset X \to X$ le générateur infinitésimal d'un semi-groupe $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\geq 0}$ de classe C^0 et soit A^* l'adjoint de A. A^* est fermé de domaine $D(A^*)$ dense dans X. De plus, A^* est le générateur infinitésimal d'un semi-groupe $\{\mathcal{T}^*(t)\}_{t\geq 0}$ de classe C^0 où $\mathcal{T}^*(t)$ est l'adjoint de $\mathcal{T}(t)$ pour tout $t \geq 0$.

Definition 3.9 *Un semi-groupe est dit dissipatif (resp. accrétif, conservatif) si son générateur infinitésimal l'est. C.à.d.*
(i) A est dissipatif ssi $\mathcal{R}e(Ax, x)_X \leq 0\,, \quad \forall x \in D(A)$,
(ii) A est conservatif ssi $\mathcal{R}e(Ax, x)_X = 0\,, \quad \forall x \in D(A)$,
(iii) A est accrétif ssi $\mathcal{R}e(Ax, x)_X \geq 0\,, \quad \forall x \in D(A)$ (On dit aussi "monotone" dans le cas réel).

Quand est-ce qu'un opérateur fermé, non-borné A, de domaine $D(A)$ dense dans X est le générateur infinitésimal d'un semi-groupe de classe C^0 ? (Voir condition nécessaire et suffisante dans le thm. de Hille-Yosida).

Theorem 3.10 *Soit A un opérateur non-borné de domaine $D(A)$ dense dans X. Si*
(i) A est fermé et dissipatif (ou $-A$ est accrétif),
(ii) A^* est dissipatif,
alors A est générateur infinitésimal d'un semi-groupe $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\geq 0}$ de contraction de classe C^0.

Theorem 3.11 (Théorème de Stone)
Soient $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ un groupe d'opérateurs unitaires, de classe C^0 dans X et A son générateur infinitésimal. Alors il existe un opérateur H auto-adjoint tel que

$$A = iH\,.$$

La réciproque de ce théorème est

Theorem 3.12 *Soit A un opérateur fermé, non-borné de domaine $D(A)$ dense dans X, tel que $A = iH$ avec H un opérateur auto-adjoint. Alors A est le générateur infinitésimal d'un groupe $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ d'opérateurs unitaires, de classe C^0.*

Problème de Cauchy inhomogène
Soit X un espace de Banach et $-A$ le générateur infinitésimal d'un semi-groupe $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\geq 0}$ de classe C^0. On cherche une solution u du problème de Cauchy suivant

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} + Au = f\,, \quad t \geq 0 \\ u(0) = \varphi \end{cases} \tag{3.2}$$

où φ et f sont les données du problème.
Dans la suite, on notera par $T > 0$ un temps final arbitraire.

Definition 3.13 *On appelle solution* **classique** *de (3.2) une fonction* $u \in C^1([0,T];X)$*, telle que* $u(t) \in D(A)$ $\forall t \geq 0$ *et telle qu'elle vérifie (3.2) pour tout* $t \geq 0$.
On appelle solution **forte** *de (3.2) une fonction* $u \in W^{1,1}(0,T;X)$*, telle que* $u(t) \in D(A)$ *p.p.t.* $t \geq 0$ *et telle qu'elle vérifie (3.2) pour presque tout* $t \geq 0$.

Remark 3.14 Si u est solution classique (resp. forte) de (3.2) et si $f \in C([0,T];X)$ (resp. $f \in L^1(0,T;X)$), alors par l'équation $Au \in C([0,T];X)$ (resp. $Au \in L^1(0,T;X)$). Cela signifie que $u \in C([0,T];D(A))$ (resp. $u \in L^1(0,T;D(A))$), avec $D(A)$ muni de la norme du graphe $||x||^2_{D(A)} := ||x||^2_X + ||Ax||^2_X$. ∎

Definition 3.15 *Pour* $f \in L^1(0,T;X)$ *et* $\varphi \in X$ *on appelle solution* **"mild"** *("douce") de (3.2) la fonction* $u \in C([0,T];X))$ *donnée par la formule de Duhamel*

$$u(t) := \mathcal{T}(t)\varphi + \int_0^t \mathcal{T}(t-s)f(s)ds\,, \quad \forall t \geq 0\,. \tag{3.3}$$

La fonction u donnée par (3.3) s'appelle solution "mild" de (3.2) même si elle ne doit pas satisfaire le problème de Cauchy. Pour qu'elle satisfasse le problème de Cauchy (3.2) il faut des conditions supplémentaires sur f, φ et u même.

Proposition 3.16 *Soient* $\varphi \in D(A)$ *et* $f \in L^1(0,T;X)$ *donnés ainsi que* u *une solution classique (resp. forte) du problème de Cauchy. Alors* u *satisfait la formule de Duhamel pour tout* $t \geq 0$ *(resp. pour presque tout* $t \geq 0$*).*
Si de plus $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\geq 0}$ *est un semi-groupe d'isométries de classe* C^0*, alors on a*

$$||u||_{C([0,T];X)} \leq ||\varphi||_X + ||f||_{L^1(0,T;X)}\,.$$

Proof: EXO. ∎

Essayons de voir maintenant quelles conditions doivent satisfaire les données pour que la fonction u définie par la formule de Duhamel soit une solution classique (ou forte) du problème de Cauchy.

Proposition 3.17 *Soient* $\varphi \in D(A)$ *et* $f \in W^{1,1}(0,T;X)$*. Alors la fonction* $u \in C([0,T];X)$ *donnée par la formule de Duhamel (3.3) est l'unique solution classique du problème de Cauchy (3.2).*

La condition $f \in C([0,T];X)$ ne suffit pas pour avoir une solution classique ou forte, même si $\varphi \in D(A)$. Par contre

Proposition 3.18 *Soient* $\varphi \in D(A)$ *et* $f \in C([0,T];D(A))$ *(resp.* $f \in L^1(0,T;D(A))$*). Alors la fonction* $u \in C([0,T];X)$ *donnée par la formule de Duhamel (3.3) est l'unique solution classique (resp. l'unique solution forte) du problème de Cauchy (3.2).*

Si l'on a que $f \in C([0,T];X)$ on peut se débrouiller de la manière suivante

Proposition 3.19 *Soient $\varphi \in D(A)$ et $f \in C([0,T];X)$ (resp. $f \in L^1(0,T;X)$). Alors la fonction u donnée par la formule de Duhamel (3.3) est l'unique solution classique (resp. l'unique solution forte) du problème de Cauchy (3.2) ssi $u \in C^1([0,T];X)$ ou $u \in C([0,T];D(A))$ (resp. $u \in W^{1,1}(0,T;X)$ ou $u \in L^1(0,T;D(A))$) .*
Si $\varphi \in D(A)$ et $f \in L^\infty(0,T;X)$, alors la fonction u donnée par la formule de Duhamel (3.3) est l'unique solution forte du problème de Cauchy (3.2) ssi $u \in W^{1,\infty}(0,T;X)$ ou $u \in L^\infty(0,T;D(A))$.

3.2 Application à l'équation de Schrödinger linéaire

On va appliquer les résultats de la section précédente pour démontrer l'existence et l'unicité d'une solution de l'équation de Schrödinger linéaire

$$\begin{cases} iu_t + \Delta u + f = 0\,, \quad t \geq 0\,, \quad \text{sur } \Omega \\ u_{|\partial\Omega} = 0\,, \\ u(0) = \varphi\,, \end{cases} \tag{3.4}$$

où $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ est un ouvert quelconque. Pour commencer, on va d'abord introduire le bon cadre mathématique. Soit l'espace $X := L^2(\Omega;\mathbb{C})$ considéré comme un espace de Hilbert réel, c.à.d. $(\cdot,\cdot)_X := \mathcal{R}e(\cdot,\cdot)_{L^2(\Omega;\mathbb{C})}$. On définit l'opérateur A comme

$$A : D(A) \subset X \to X\,, \quad Au := \Delta u\,,$$

de domaine $D(A)$ dense dans X

$$D(A) := \{u \in H_0^1(\Omega) \;/\; \Delta u \in L^2(\Omega)\}\,.$$

Dans le cas où Ω est assez régulier (de classe C^2), alors $D(A) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$. L'opérateur A ainsi défini est un opérateur auto-adjoint et dissipatif. De plus, l'opérateur iA est anti-adjoint et engendre (réciproque du théorème de Stone) un groupe unitaire, donc d'isométries $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$.

On peut munir $D(A)$ de la norme du graphe $||x||^2_{D(A)} := ||x||^2_X + ||Ax||^2_X$ pour construire un espace de Hilbert. Dans ce cas on a le triplet d'évolution $D(A) \hookrightarrow X \hookrightarrow (D(A))^*$ avec des inclusions denses. En désignant par X_A la complétude de $D(A)$ pour la norme $||x||^2_{X_A} := ||x||^2_X - (Ax,x)_X$ on a un nouvel espace de Hilbert X_A et les inclusions denses suivantes

$$D(A) \hookrightarrow X_A \hookrightarrow X \hookrightarrow X_A^* \hookrightarrow (D(A))^*\,.$$

Dans le cadre fonctionnel de cette section on a $X_A = H_0^1(\Omega)$ et $X_A^* = H^{-1}(\Omega)$. L'opérateur A peut être étendu à un opérateur autoadjoint

$$\bar{A} : X \subset (D(A))^* \longmapsto (D(A))^*\,,$$

de telle manière que $\bar{A}_{|D(A)} = A \in \mathcal{L}(D(A);X)$, $\bar{A}_{|X_A} \in \mathcal{L}(X_A;X_A^*)$, $\bar{A}_{|X} \in \mathcal{L}(X;(D(A))^*)$. D'après la réciproque du théorème de Stone, l'opérateur $i\overline{A}$ engendre un groupe d'isométries $\{\overline{\mathcal{T}}(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ qui coincide avec $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ sur X et qui, restreint à un des espaces $D(A)$,

X_A, X, X_A^*, $(D(A))^*$, est encore un groupe d'isométries.

En bref, l'opérateur $Au := \Delta u$ peut être vu comme suit

$$A : D(A) \subset X \to X\,, \quad A : X_A \subset X_A^* \to X_A^*\,, \quad A : X \subset (D(A))^* \to (D(A))^*\,,$$

et iA engendre un groupe d'isométries $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\in\mathbb{R}} \in \mathcal{L}(X)$ (resp. $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\in\mathbb{R}} \in \mathcal{L}(X_A^*)$ ou $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\in\mathbb{R}} \in \mathcal{L}((D(A))^*)$). Dans ce contexte, l'existence et l'unicité d'une solution de l'équation de Schrödinger linéaire (3.4) est une conséquence immédiate de la section précédente (EXO). La formule de Duhamel prend la forme suivante dans ce cas

$$u(t) := \mathcal{T}(t)\varphi + i\int_0^t \mathcal{T}(t-s)f(s)ds\,, \quad \forall t \geq 0\,.$$

La donnée initiale $\varphi \in D(A)$ (resp. $\varphi \in X_A$ ou $\varphi \in X$) ainsi que f vont nous permettre de choisir le bon cadre mathématique.
Il est important d'observer que si $f = 0$ et $\varphi \in L^2(\Omega)$, on a la conservation de la charge $||u(t)||_{L^2} = ||\varphi||_{L^2}$, pour tout $t \geq 0$. Si $f = 0$ et $\varphi \in H_0^1(\Omega)$, alors on a en plus la conservation de l'énergie $||\nabla u(t)||_{L^2} = ||\nabla\varphi||_{L^2}$, pour tout $t \geq 0$.

3.3 L'équation de Schrödinger dans $\mathbb{R}^N$ / Estimations de Strichartz

Soit $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ le groupe d'isométries généré par l'opérateur iA, comme dans la section 3.2. Dans le cas $\Omega = \mathbb{R}^N$ on peut explicitement exprimer $\mathcal{T}(t)$ à l'aide de l'analyse de Fourier et démontrer certaines de ses propriétés.

Lemma 3.20 *Pour chaque $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^N)$ et $t \neq 0$ on a $\mathcal{T}(t)\varphi = K_t * \varphi$, où la fonction K_t est définie pour $t \neq 0$ par*

$$K_t(x) := (4\pi i t)^{-N/2} e^{\frac{i|x|^2}{4t}}\,, \quad \forall x \in \mathbb{R}^N\,.$$

En bref, on a

$$\mathcal{T}(t)\varphi(x) = (4\pi i t)^{-N/2} \int_{\mathbb{R}^N} e^{\frac{i|x-y|^2}{4t}} \varphi(y)dy\,. \tag{3.5}$$

Proof: Soit $\varphi \in S(\mathbb{R}^N)$ et soit $u \in C(\mathbb{R}; S(\mathbb{R}^N))$ la fonction dont la transformée de Fourier (par rapport à la variable d'espace) est définie par

$$\widehat{u(t)}(\xi) := e^{-4i\pi^2|\xi|^2 t}\widehat{\varphi}(\xi)\,. \tag{3.6}$$

En différentiant cette fonction on a

$$i\widehat{u}_t - 4\pi^2|\xi|^2\widehat{u} = 0\,, \quad (t,x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N\,,$$

et donc

$$iu_t + \Delta u = 0\,, \quad (t,x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N\,.$$

Comme en plus $u(0) = \varphi$ on trouve que $u(t) = \mathcal{T}(t)\varphi$. D'autre part $\widehat{K_t} = e^{-4i\pi^2|\xi|^2 t}$, ce qui implique $\widehat{u(t)} = \widehat{K_t}\widehat{\varphi}$ et le résultat est prouvé. ∎

Remark 3.21 On peut voir avec (3.6) que $\mathcal{T}(t) \in \mathcal{L}(\mathcal{S}(\mathbb{R}^N))$, $\forall t \geq 0$ et que $\mathcal{T}(\cdot)\varphi \in C(\mathbb{R}, \mathcal{S}(\mathbb{R}^N))$ pour $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^N)$. Des arguments de densité permettent alors d'étendre ce résultat à

$$\mathcal{T}(t) \in \mathcal{L}(H^s(\mathbb{R}^N))\,, \quad ||\mathcal{T}(t)\varphi||_{H^s(\mathbb{R}^N)} = ||\varphi||_{H^s(\mathbb{R}^N)}\,, \quad \forall s \in \mathbb{R}\,, \forall t \geq 0\,,$$

et pour chaque $\varphi \in H^s(\mathbb{R}^N)$ la fonction $u(t) := \mathcal{T}(t)\varphi$ satisfait

$$u \in \cap_{0 \leq j < \infty} C^j(\mathbb{R}, H^{s-2j}(\mathbb{R}^N))\,.$$

Le générateur infinitésimal de ce groupe d'isométries est iA_s, avec

$$A_s : D(A_s) \subset H^s(\mathbb{R}^N) \longmapsto H^s(\mathbb{R}^N)\,, \quad A_s u := \Delta u \quad \text{pour } u \in D(A_s)\,,$$

de domaine $D(A_s) = H^{s+2}(\mathbb{R}^N)$. ∎

Le résultat suivant est une propriété de décroissance en temps.

Lemma 3.22 *Soit $t \neq 0$ et $p \in [2, \infty]$. Alors $\mathcal{T}(t) \in \mathcal{L}(L^{p'}(\mathbb{R}^N), L^p(\mathbb{R}^N))$, où p' est le conjugué de p, c.à.d. $1/p + 1/p' = 1$, et on a*

$$||\mathcal{T}(t)\varphi||_{L^p(\mathbb{R}^N)} \leq (4\pi|t|)^{-N(1/2-1/p)} ||\varphi||_{L^{p'}(\mathbb{R}^N)}\,, \quad \forall \varphi \in L^{p'}(\mathbb{R}^N)\,.$$

Proof: La preuve est une simple application du théorème d'interpolation de Riesz-Thorin. En effet, soit $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^N)$. Le lemme précédent nous donne

$$||\mathcal{T}(t)\varphi||_{L^\infty(\mathbb{R}^N)} \leq (4\pi|t|)^{-N/2} ||\varphi||_{L^1(\mathbb{R}^N)}$$

ce qui implique que $\mathcal{T}(t) \in \mathcal{L}(L^1(\mathbb{R}^N), L^\infty(\mathbb{R}^N))$ avec $||\mathcal{T}(t)||_{\mathcal{L}(L^1, L^\infty)} \leq (4\pi|t|)^{-N/2}$. D'un autre côté, la remarque 3.21 implique $\mathcal{T}(t) \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^N), L^2(\mathbb{R}^N))$ avec $||\mathcal{T}(t)||_{\mathcal{L}(L^2, L^2)} = 1$. On applique alors le théorème d'interpolation à $\mathcal{T}(t)$ pour démontrer le résultat. ∎

Ce résultat peut être amelioré de la manière suivante

Lemma 3.23 *Soient $t \neq 0$, $s \in \mathbb{R}$ et $p \in [2, \infty]$. Alors $\mathcal{T}(t) \in \mathcal{L}(H^{s,p'}(\mathbb{R}^N), H^{s,p}(\mathbb{R}^N))$ et on a*

$$||\mathcal{T}(t)\varphi||_{H^{s,p}(\mathbb{R}^N)} \leq (4\pi|t|)^{-N(1/2-1/p)} ||\varphi||_{H^{s,p'}(\mathbb{R}^N)}\,, \quad \forall \varphi \in H^{s,p'}(\mathbb{R}^N)\,.$$

Les estimations de Strichartz qu'on va présenter dans la suite impliquent aussi la variable temps et seront très importantes lors de l'étude de l'unicité d'une solution de l'équation de Schrödinger non linéaire dans $\mathbb{R}^N$.

Definition 3.24 *On dit que (q, r) est une paire admissible ssi*

$$\frac{2}{q} = N\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{r}\right)\,,$$

et

$$2 \leq r \leq \frac{2N}{N-2} \text{ si } N \geq 3\,; \quad 2 \leq r < \infty \text{ si } N = 2\,; \text{ et } 2 \leq r \leq \infty \text{ si } N = 1\,.$$

Theorem 3.25 (Estimations de Strichartz)
(i) Soit $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^N)$. Alors la fonction $t \longmapsto \mathcal{T}(t)\varphi$ appartient à

$$L^q(\mathbb{R}, L^r(\mathbb{R}^N)) \cap C(\mathbb{R}, L^2(\mathbb{R}^N))\,,$$

pour chaque paire admissible (q,r). De plus il existe une constante C telle que

$$||\mathcal{T}(\cdot)\varphi||_{L^q(\mathbb{R},L^r(\mathbb{R}^N))} \leq C||\varphi||_{L^2(\mathbb{R}^N)}\,, \quad \forall \varphi \in L^2(\mathbb{R}^N)\,.$$

(ii) Soit $I \subset \mathbb{R}$ (borné ou pas), $J = \bar{I}$ et $t_0 \in J$. Soit (γ,ρ) une paire admissible et $f \in L^{\gamma'}(I, L^{\rho'}(\mathbb{R}^N))$. Alors pour chaque paire admissible (q,r) la fonction

$$t \longmapsto \Phi_f(t) := \int_{t_0}^{t} \mathcal{T}(t-s)f(s)ds\,, \quad t \in I\,,$$

appartient à $L^q(I, L^r(\mathbb{R}^N)) \cap C(J, L^2(\mathbb{R}^N))$. De plus il existe une constante C indépendante de I, telle que

$$||\Phi_f||_{L^q(I,L^r(\mathbb{R}^N))} \leq C||f||_{L^{\gamma'}(I,L^{\rho'}(\mathbb{R}^N))}\,, \quad \forall f \in L^{\gamma'}(I, L^{\rho'}(\mathbb{R}^N))\,.$$

Proof: Voir [2]. ∎

Remark 3.26 La propriété (i) est un résultat de régularité. En effet, pour $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^N)$, $\mathcal{T}(t)\varphi \in L^r(\mathbb{R}^N)$, pour $r \in [2, \frac{2N}{N-2}]$ dans le cas $N \geq 3$.
Les propriétés (i) et (ii) donnent des estimations de la solution u de l'équation de Schrödinger non homogène

$$\begin{cases} iu_t + \Delta u + f = 0\,, & t \geq 0 \\ u(0) = \varphi \end{cases}$$

en terme de φ et f. ∎

Remark 3.27 Les estimations du théorème 3.25 peuvent être étendues à d'autres espaces, comme

$$||\mathcal{T}(\cdot)\varphi||_{L^q(\mathbb{R},H^{s,r}(\mathbb{R}^N))} \leq C||\varphi||_{H^s(\mathbb{R}^N)}\,, \quad \forall \varphi \in H^s(\mathbb{R}^N)\,.$$

et

$$||\Phi_f||_{L^q(I,H^{s,r}(\mathbb{R}^N))} \leq C||f||_{L^{\gamma'}(I,H^{s,\rho'}(\mathbb{R}^N))}\,, \quad \forall f \in L^{\gamma'}(I, H^{s,\rho'}(\mathbb{R}^N))\,.$$

∎

Les deux lemmes suivants (voir [2] pour les preuves) montrent l'effet de "smoothing" ainsi que de la décroissance en temps de l'opérateur $\mathcal{T}(t)$.

Lemma 3.28 *Soit $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^N)$ et supposons que $(1+|x|^m)\varphi \in L^2(\mathbb{R}^N)$, $m \in \mathbb{N}\backslash\{0\}$. Alors la fonction $u(t) := \mathcal{T}(t)\varphi$ satisfait $e^{-i\frac{|x|^2}{4t}}u(t) \in C(\mathbb{R}\backslash\{0\}, H^m(\mathbb{R}^N))$ et avec $k = [m/2]$*

$$u \in \cap_{0\leq j\leq k} C^j(\mathbb{R}\backslash\{0\}, H^{m-2j}_{loc}(\mathbb{R}^N)).$$

Si $(1+|x|^m)\varphi \in L^2(\mathbb{R}^N)$ pour tout $m \in \mathbb{N}$, alors $u \in C^\infty(\mathbb{R}\backslash\{0\} \times \mathbb{R}^N)$.

Lemma 3.29 *Soit $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^N)$ et supposons que $|\cdot|\varphi(\cdot) \in L^2(\mathbb{R}^N)$. Alors,*
(i) la fonction $t \longmapsto (x + 2it\nabla)u(t,x)$ appartient à $L^q(\mathbb{R}, L^r(\mathbb{R}^N))$ pour chaque paire admissible (q,r).
(ii) $u \in C(\mathbb{R}\backslash\{0\}, L^r(\mathbb{R}^N))$ pour $r \in [2, \frac{2N}{N-2}]$ ($r \in [2,\infty]$ si $N = 1$, et $r \in [2,\infty)$ si $N = 2$) et il existe une consante C, indépendante de r et N, telle que

$$||u(t)||_{L^r(\mathbb{R}^N)} \leq C(||\varphi||_{L^2(\mathbb{R}^N)} + ||x\varphi||_{L^2(\mathbb{R}^N)})|t|^{-N(1/2-1/r)}, \quad \forall t \neq 0\,.$$

4 L'équation de Schrödinger nonlinéaire dans un domaine arbitraire $\Omega \subset \mathbb{R}^N$

4.1 Introduction

Cette section sera consacrée à l'étude de l'équation de Schrödinger nonlinéaire dans un domaine général $\Omega \subset \mathbb{R}^N$. On se placera dans des espaces d'énergie appropriés pour démontrer un résultat d'existence locale. Des estimations d'énergie permetteront par la suite de démontrer le résultat d'existence globale.

L'équation considérée dans cette section sera la suivante

$$\begin{cases} iu_t + \Delta u + g(u) = 0\,, \text{ sur } \Omega\,,\; t \geq 0\,, \\ u_{|\partial\Omega} = 0\,, \\ u(0) = \varphi\,, \end{cases} \tag{4.1}$$

où g est une nonlinéarité donnée.
La nonlinéarité la plus courante est la nonlinéarité de type puissance, $g(u) := \lambda|u|^\alpha u$, avec $\lambda \in \mathbb{R}$ et $\alpha \geq 0$. Dans ce cas on peut formellement voir que la solution du système (4.1) satisfait deux lois de conservation, à savoir la conservation de la charge et la conservation de l'énergie. En effet, en multipliant l'équation (4.1) par $\overline{u}$, en intégrant sur Ω et prenant la partie imaginaire, on obtient

$$\frac{d}{dt}\int_\Omega |u(t,x)|^2 dx = 0\,,$$

qui signifie que la norme L^2 de u (la charge) reste constante le long du temps. De même multipliant l'équation (4.1) par $\overline{u_t}$, intégrant sur Ω et prenant la partie réelle donne lieu à

$$\frac{d}{dt}E(u(t)) = 0\,,$$

où E est l'énergie totale du système définie par

$$E(w) := \int_\Omega \left[\frac{1}{2}|\nabla w(x)|^2 - \frac{\lambda}{\alpha+2}|w(x)|^{\alpha+2}\right] dx\,.$$

Cela suggère qu'on pourra se placer dans deux espaces d'énergie, à savoir l'espace $L^2(\Omega)$ ou l'espace $H_0^1(\Omega)$. Le choix de l'espace est très important pour l'obtention des estimations *a priori* qui se déduisent des lois de conservation et qui sont nécessaires pour la preuve de l'existence globale d'une solution. Dans la suite on utilisera l'espace d'énergie (plus usuel) $H_0^1(\Omega)$ et on définit maintenant ce que l'on entend par une solution de l'équation (4.1).

Definition 4.1 *Soit $g \in C(H_0^1(\Omega), H^{-1}(\Omega))$, $\varphi \in H_0^1(\Omega)$ et I un intervalle avec $0 \in I$.*
(i) On appelle u H_0^1-solution **classique** *de (4.1) sur I ssi*

$$u \in C(I; H_0^1(\Omega)) \cap C^1(I; H^{-1}(\Omega)),$$

et si u vérifie (4.1) pour tout $t \in I$ (au sens $H^{-1}(\Omega)$).
(ii) On appelle u H_0^1-solution **forte** *de (4.1) sur I ssi*

$$u \in L^\infty(I; H_0^1(\Omega)) \cap W^{1,\infty}(I; H^{-1}(\Omega)),$$

et si u vérifie (4.1) presque partout sur I (au sens $H^{-1}(\Omega)$).

On a la propriété suivante

Proposition 4.2 (Formule de Duhamel)
Soit $g \in C(H_0^1(\Omega), H^{-1}(\Omega))$, $\varphi \in H_0^1(\Omega)$ et I un intervalle avec $0 \in I$. Si g est bornée sur des ensembles bornés et si $u \in L^\infty(I; H_0^1(\Omega))$, alors u est solution forte de (4.1) ssi

$$u(t) = \mathcal{T}(t)\varphi + i\int_0^t \mathcal{T}(t-s)g(u(s))ds\,, \quad p.p.t.\ t \geq 0\,. \tag{4.2}$$

La fonction $u \in C(I; H_0^1(\Omega))$ est solution classique de (4.1) ssi elle satisfait (4.2) pour tout $t \in I$.

Proof: Soit $g \in C(H_0^1(\Omega), H^{-1}(\Omega))$ et $u \in L^\infty(I; H_0^1(\Omega))$ (resp. $u \in C(I; H_0^1(\Omega))$), alors on a avec la définition $f(s) := g(u(s))$

$$f \in L^\infty(I; H^{-1}(\Omega))\,, \quad (\text{resp. } f \in C(I; H^{-1}(\Omega))).$$

La suite de la proposition est alors une simple conséquence de la proposition 3.19. ∎

On introduit maintenant la notion de "problème bien posé".

Definition 4.3 *Soit $g \in C(H_0^1(\Omega), H^{-1}(\Omega))$. On dit que le problème (4.1) est localement bien posé ssi les propriétés suivantes sont satisfaites:*
(i) Pour chaque $\varphi \in H_0^1(\Omega)$ on a **unicité** *de la solution de (4.1) sur tout intervalle I avec $0 \in I$, sur lequel une solution existe.*
(ii) Pour chaque $\varphi \in H_0^1(\Omega)$ il existe une H_0^1-solution classique de (4.1), définie sur un **intervalle maximal** *$(-T_{min}, T_{max})$, avec $T_{max} = T_{max}(\varphi) \in (0, \infty]$ et $T_{min} = T_{min}(\varphi) \in (0, \infty]$.*
(iii) On a **l'alternative d'explosion** *: si $T_{max} < \infty$, alors $\lim_{t \to T_{max}} ||u(t)||_{H^1} = \infty$. Pareil, si $T_{min} < \infty$, alors $\lim_{t \to -T_{min}} ||u(t)||_{H^1} = \infty$.*
(iv) **La solution dépend continuement de la donnée initiale** *φ : soit $\varphi_n \to_{n\to\infty} \varphi$ dans $H_0^1(\Omega)$, une suite de données initiales. Si $I \subset (-T_{min}(\varphi), T_{max}(\varphi))$ est un intervalle fermé, alors les H_0^1-solutions classiques et maximales u_n, correspondant aux conditions initiales φ_n, sont définies sur I pour n assez grand et on a $u_n \to_{n\to\infty} u$ dans $C(I, H_0^1(\Omega))$.*

Remark 4.4 La propriété (iii) signifie que soit u est une solution globale (définie sur tout $\mathbb{R}$) soit u explose en temps fini. ∎

Plusieurs types de non linéarités peuvent être étudiés dans le cadre fonctionnel de ce chapitre. On va présenter ici trois types.

Potentiel extérieur
Soit $V \in L^p(\Omega)$ avec $p \geq 1$, $p > N/2$ et soit la "nonlinéarité" g définie par

$$g(u) := Vu\,,$$

ainsi qu'une sorte de primitive

$$G(u) := \frac{1}{2}\int_\Omega V(x)|u(x)|^2 dx\,,$$

où $u : \Omega \to \mathbb{C}$ est une fonction mesurable telle que $V|u|^2 \in L^1(\Omega)$. On définit dans ce cas

$$r := \frac{2p}{p-1}\,,$$

tel que $r \in [2, \frac{2N}{N-2})$, ($r \in [2, \infty]$ si $N = 1$). Ainsi on a les injections continues et denses $H_0^1(\Omega) \hookrightarrow L^r(\Omega)$ et donc $L^{r'}(\Omega) \hookrightarrow H^{-1}(\Omega)$ qui signifie que $G(u)$ est bien définie pour $u \in H_0^1(\Omega)$.

Ce type de "nonlinéarité" apparaît dans le cas de l'équation de Schrödinger linéaire avec un potentiel extérieur donné, c.à.d.

$$iu_t + \Delta u + Vu = 0\,.$$

La nonlinéarité de type puissance
Soit le paramètre α donné par

$$\begin{cases} 0 \leq \alpha < \dfrac{4}{N-2} & \text{si } N \geq 2\,, \\ 0 \leq \alpha < \infty & \text{si } N = 1\,, \end{cases}$$

alors on définit la nonlinéarité g par

$$g(u) := \lambda |u|^\alpha u\,, \quad \lambda \in \mathbb{R}\,,$$

et une primitive G par

$$G(u) := \frac{\lambda}{\alpha+2}\int_\Omega |u(x)|^{\alpha+2} dx\,,$$

pour $u \in L^{\alpha+2}(\Omega)$. On définit dans ce cas

$$r := \begin{cases} \alpha + 2 & \text{si } N \geq 2\,, \\ 2 & \text{si } N = 1\,, \end{cases}$$

tel que $r \in [2, \frac{2N}{N-2})$. Cela implique de nouveau que $H_0^1(\Omega) \hookrightarrow L^r(\Omega)$ et donc $L^{r'}(\Omega) \hookrightarrow H^{-1}(\Omega)$ qui signifie que $G(u)$ est bien définie pour $u \in H_0^1(\Omega)$.

Pour $\alpha = 2$ il s'agit de l'équation de Gross-Pitaevskii décrivant l'évolution d'un condensat de Bose-Einstein

$$iu_t + \Delta u + |u|^2 u = 0\,.$$

La nonlinéarité de Hartree dans $\mathbb{R}^N$
Soit $W \in L^p(\mathbb{R}^N)$ un potentiel impair, $p \geq 1$, $p > N/4$. On définit la nonlinéarité g et G par

$$g(u) := (W * |u|^2)u\,, \quad G(u) := \frac{1}{4}\int_{\mathbb{R}^N} (W * |u|^2)(x)|u(x)|^2 dx\,,$$

pour une fonction mesurable $u : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ telle que $(W * |u|^2)(x)|u(x)|^2 \in L^1(\mathbb{R}^N)$. On définit dans ce cas

$$r := \frac{4p}{2p-1}\,,$$

tel que $r \in [2, \frac{2N}{N-2})$, ($r \in [2, \infty)$ si $N = 1$). Ainsi $G(u)$ est bien définie pour $u \in H_0^1(\Omega)$.

Cette nonlinéarité décrit par exemple l'équation de Schrödinger couplée (de manière nonlinéaire) avec l'équation de Poisson

$$\begin{cases} iu_t + \Delta u = Vu\,, \\ -\Delta V = |u|^2\,, \end{cases}$$

ou de manière équivalente (en $\mathbb{R}^3$)

$$iu_t + \Delta u = (\frac{1}{4\pi|x|} * |u|^2)u\,.$$

On peut vérifier que toutes ces nonlinéarités satisfont les propriétés suivantes (avec $\Omega = \mathbb{R}^N$ pour la nonlinéarité de Hartree), avec r comme défini pour chaque non linéarité :

(i) $g = G'$ avec $g \in C(H_0^1(\Omega), H^{-1}(\Omega))$, $G \in C^1(H_0^1(\Omega), \mathbb{R})$.
(ii) $g \in C(L^r(\Omega), L^{r'}(\Omega))$.
(iii) Pour chaque $M > 0$ il existe $C(M) < \infty$ telle que pour tout $u, v \in H_0^1(\Omega)$ avec $||u||_{H^1} + ||v||_{H^1} \leq M$ on a

$$||g(u) - g(v)||_{L^{r'}(\Omega)} \leq C(M)||u - v||_{L^r(\Omega)}\,.$$

(iv) $\mathcal{I}m(g(u)\overline{u}) = 0$ presque partout sur Ω et pour tout $u \in H_0^1(\Omega)$.

4.2 Existence / Unicité pour un cas régulier

Dans cette section on démontrera un résultat d'existence globale et d'unicité pour une équation non linéaire abstraite, avec une non linéarité assez régulière.

On se place dans le cadre fonctionnel de la section 3.2. Soit X un espace de Hilbert complexe muni du produit scalaire réel $(\cdot,\cdot)_X$. Soit $A : D(A) \subset X \to X$ un opérateur autoadjoint, dissipatif et de domaine $D(A)$ dense dans X et $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$ le groupe d'isométries généré par iA. Les espaces de Hilbert $D(A)$ et X_A sont définis comme dans la section 3.2. On a les inclusions denses

$$D(A) \hookrightarrow X_A \hookrightarrow X \hookrightarrow X_A^* \hookrightarrow (D(A))^* .$$

Dans la suite on notera les opérateurs prolongés sur un de ces espaces, à savoir $\overline{A}$ et $\{\overline{\mathcal{T}}(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$, de nouveau par A resp. $\{\mathcal{T}(t)\}_{t\in\mathbb{R}}$.

Theorem 4.5 *Soit $g : X \to X$ une fonction lipschitzienne sur les ensembles bornés de X et soit $G \in C^1(X_A,\mathbb{R})$ une fonction telle que $G'(x) = g(x)$ pour $x \in X$. Supposons que*

$$(g(x), ix)_X = 0\,, \quad \forall x \in X\,. \tag{4.3}$$

En notant

$$E(x) = \frac{1}{2}(||x||^2_{X_A} - ||x||^2_X) - G(x) = -\frac{1}{2}(Ax,x)_X - G(x)\,,$$

on a $E \in C^1(X_A;\mathbb{R})$ et $E'(x) = -Ax - g(x) \in X_A^*$ pour tout $x \in X_A$.
Alors, pour chaque $\varphi \in X$ il existe une solution unique $u \in C(\mathbb{R};X) \cap C^1(\mathbb{R},(D(A))^*)$ du problème

$$\begin{cases} iu_t + Au + g(u) = 0\,, & t \in \mathbb{R} \\ u(0) = \varphi\,. \end{cases} \tag{4.4}$$

De plus on a les propriétés suivantes :
(i) $||u(t)||_X = ||\varphi||_X$, $\forall t \in \mathbb{R}$ (conservation de la charge).
(ii) Si $\varphi \in X_A$, alors $u \in C(\mathbb{R};X_A) \cap C^1(\mathbb{R},X_A^*)$ et $E(u(t)) = E(\varphi)$ pour tout $t \in \mathbb{R}$ (régularité et conservation de l'énergie).
(iii) Si $\varphi \in D(A)$, alors $u \in C(\mathbb{R};D(A)) \cap C^1(\mathbb{R},X)$ (régularité).

La preuve de ce théorème se fera en plusieurs étapes. La première est un résultat d'existence / unicité locale en temps.

Lemma 4.6 *Soit $g : X \to X$ une fonction lipschitzienne sur les ensembles bornés de X. Alors pour chaque $\varphi \in X$ il existe une unique solution maximale $u \in C((T_1,T_2);X) \cap C^1((T_1,T_2);(D(A))^*)$ de (4.4) avec $T_1 < 0 < T_2$. La solution est maximale dans le sens où si $|T_i| < \infty$, alors $||u(t)||_X \to_{t\to T_i} \infty$. En plus, cette solution dépend continuement de la donnée initiale, c.à.d. pour $\varphi_n \to_{n\to\infty} \varphi$ dans X et pour tout intervalle fermé $I \subset (T_1,T_2)$ on a $u_n \to_{n\to\infty} u$ dans $C(I,X)$ pour n assez grand. On a noté ici u_n la solution maximale correspondant à la donnée initiale φ_n.*
On a aussi la propriété de régularité suivante : si $\varphi \in D(A)$, alors la solution u satisfait $u \in C((T_1,T_2);D(A)) \cap C^1((T_1,T_2);X)$.

Proof: 1. Etape : Existence / Unicité
Cette partie sera basée sur un argument de point fixe. Soit $\varphi \in X$ avec $||\varphi||_X \le M$. Notons $K(R) > 0$ la constante de Lipschitz de g sur la boule B_R de rayon R et définissons

$$L := 2M + ||g(0)||_X\,, \quad T_M := \frac{1}{2K(L)+2}\,.$$

On introduit de plus l'espace métrique complet

$$E := \{u \in C([0,T_M];X) \ / \ ||u(t)||_X \leq L\,,\ \forall t \in [0,T_M]\}\,,$$

muni de la distance $d(u,v) := \max_{t\in[0,T_M]} ||u(t)-v(t)||_X$ pour $u,v \in E$. On définit maintenant l'application

$$\Phi_u(t) := \mathcal{T}(t)\varphi + i\int_0^t \mathcal{T}(t-s)g(u(s))\,ds\,, \quad \forall t \in [0,T_M]\,.$$

On a pour $u \in E$

$$||g(u(s))||_X = ||g(0)||_X + ||g(u(s)) - g(0)||_X \leq ||g(0)||_X + K(L)L$$

Il en résulte que

$$||\Phi_u(t)||_X \leq ||\varphi||_X + \int_0^t ||g(u(s))||_X\,ds \leq M + t(||g(0)||_X + K(L)L) \leq L\,,$$

ce qui signifie que $\Phi_u : E \to E$. Cette application est même une contraction. En effet,

$$||\Phi_u(t) - \Phi_v(t)||_X \leq K(L)\int_0^t ||u(s)-v(s)||_X \leq K(L)T_M d(u,v) \leq \frac{1}{2}d(u,v)\,.$$

D'après le théorème du point fixe de Banach l'application Φ_u admet un unique point fixe $u \in E$.
Pour chaque $\varphi \in X$ avec $||\varphi||_X \leq M$ il existe donc un $T_M > 0$ et une unique solution $u \in C([0,T_M];X)$ du problème

$$u(t) = \mathcal{T}(t)\varphi + i\int_0^t \mathcal{T}(t-s)g(u(s))\,ds\,, \quad \forall t \in [0,T_M]\,. \tag{4.5}$$

Par conséquent (Proposition 3.18) cette solution est l'unique solution $u \in C([0,T_M];X) \cap C^1([0,T_M];(D(A))^*)$ du problème nonlinéaire (4.4).
2. Etape : Alternative d'explosion
Notons

$$T(\varphi) := \sup\{T > 0 \ / \ \exists u \in C([0,T];X) \text{ solution de (4.5)}\}$$

et supposons que $T(\varphi) < \infty$. On veut montrer que dans ce cas $||u(t)||_X \to_{t\to T(\varphi)} \infty$. On va le montrer par l'absurde. Supposons donc qu'il existe un $0 < M < \infty$ et une suite $t_j \to T(\varphi)$ telle que $||u(t_j)||_X \leq M$. Soit T_M le temps défini dans la première étape et soit $k \in \mathbb{N}$ tel que $t_k + T_M > T(\varphi)$. D'après la première étape, il existe une solution unique v du problème (4.4) avec condition initiale $v(0) = u(t_k)$ et cette solution sera définie sur $[t_k, t_k + T_M]$. L'unicité d'une solution de (4.4) implique que cette solution v sera identique sur $[t_k, T(\varphi))$ à u, ce qui signifie que la solution u pourra être prolongée sur un intervalle plus grand que $[0, T(\varphi))$, ce qui est en contradiction avec la définition de $T(\varphi)$. Avec ça on a démontré qu'on doit avoir $||u(t)||_X \to_{t\to T(\varphi)} \infty$ dans le cas où $T(\varphi) < \infty$.
3. Etape : Régularité
Soient $\varphi \in D(A)$ avec $||\varphi||_X \leq M$ et $u \in C([0,T];X)$ une solution de (4.5). On a

$||u(t)||_X \leq C_M$ pour chaque $t \in [0,T]$ et avec une constante $C_M \geq M$. Alors $g(u) \in C([0,T];X)$. De plus on va montrer que u est une fonction lipschitzienne. En effet

$$
\begin{aligned}
u(t+h) - u(t) &= \mathcal{T}(t)(\mathcal{T}(h)\varphi - \varphi) + i\int_0^t \mathcal{T}(s)\left[g(u(t+h-s)) - g(u(t-s))\right] ds \\
&\quad + i\int_0^h \mathcal{T}(t+s) g(u(h-s)) ds \,.
\end{aligned}
$$

Par conséquent on a

$$
||u(t+h)-u(t)||_X \leq ||\mathcal{T}(h)\varphi-\varphi||_X + K(C_M)\int_0^t ||u(\tau+h)-u(\tau)||_X d\tau + h\sup_{s\in[0,T]} ||g(u(s))||_X
$$

Comme

$$
\mathcal{T}(h)\varphi - \varphi = i\int_0^h \mathcal{T}(s)A\varphi ds \,,
$$

et en utilisant le lemme de Gronwall on trouve

$$
||u(t+h) - u(t)||_X \leq Ch \,, \quad \text{pour } 0 \leq t < t+h \leq T \,,
$$

ce qui implique que u est une fonction lipschitzienne, ainsi $u \in W^{1,\infty}(0,T;X)$ et par définition de g on a $g(u) \in W^{1,\infty}(0,T;X)$. La proposition 3.17 conduit alors à $u \in C([0,T];D(A)) \cap C^1([0,T],X)$.
On a considéré dans cette preuve que des intervalles $[0,T]$ avec $T > 0$. Pour finir il suffit de reprendre tous les arguments sur $[-T,0]$ avec $T > 0$. ■

Proof: Preuve du théorème 4.5 :
D'après le lemme 4.6 pour chaque $\varphi \in X$ il existe une unique solution maximale $u \in C((T_1,T_2);X) \cap C^1((T_1,T_2);(D(A))^*)$ de (4.4) avec $T_1 < 0 < T_2$. En plus, cette solution dépend continuement de la donnée initiale et pour $\varphi \in D(A)$ elle satisfait $u \in C((T_1,T_2);D(A)) \cap C^1((T_1,T_2),X)$. On va poursuivre maintenant en plusieurs étapes.
1. Etape : Soit $\varphi \in D(A)$. En prenant le produit scalaire (dans X) de l'équation (4.4) avec iu, on a

$$
(u_t,u)_X = (iu_t,iu)_X = -(Au,iu)_X - (g(u),iu)_X = 0 \,.
$$

Le terme de droite s'annule du fait que A est autoadjoint et que g satisfait (4.3). Alors

$$
\frac{d}{dt}||u(t)||_X^2 = 2(u_t,u)_X = 0 \,,
$$

ce qui n'est rien d'autre que la conservation de la charge. En prenant maintenant le produit scalaire de l'équation (4.4) avec u_t, on obtient

$$
0 = (iu_t,u_t)_X = -(Au,u_t)_X - (g(u),u_t)_X \,,
$$

ce qui signifie que l'énergie est conservée

$$
\frac{d}{dt}E(u(t)) = 0 \,.
$$

2. Etape : Soit $\varphi \in X$. La dépendance continue de la solution u par rapport à la donnée initiale permet d'obtenir la conservation de la charge pour tout $\varphi \in X$. Par conséquent et en utilisant l'alternative d'explosion du lemme précédent la solution est définie sur tout $\mathbb{R}$ et on a ainsi montré (i) et (iii) du théorème. Il reste à montrer (ii).
3. Etape : Soit $\varphi \in X_A$ et $\{\varphi_n\}_{n\in\mathbb{N}} \subset D(A)$ une suite convergeant dans X_A vers φ. On note u_n les solutions de (4.4) correspondant aux données initiales φ_n. D'après (i) les u_n sont bornées uniformément dans $L^\infty(\mathbb{R}; X)$ et ainsi $G(u_n)$ est borné uniformément. En effet, cela se voit comme suit

$$\begin{aligned} |G(u_n)| &\leq |G(u_n) - G(0)| + |G(0)| \leq \left| \int_0^1 \frac{d}{ds} G(su_n) ds \right| + |G(0)| \\ &\leq \left| \int_0^1 (g(su_n), u_n)_X \, ds \right| + |G(0)| \leq \int_0^1 ||g(su_n)||_X ds \, ||u_n||_X + |G(0)| \leq C \,. \end{aligned}$$

A partir de la conservation de l'énergie on peut maintenant affirmer que les u_n sont bornés uniformément dans $L^\infty(\mathbb{R}; X_A)$, ce qui mène à l'aide de l'équation au fait que $\partial_t u_n$ est borné dans $L^\infty(\mathbb{R}; X_A^*)$. Comme $u_n(t) \to_{n\to\infty} u(t)$ dans X pour chaque $t \in \mathbb{R}$, alors $u_n(t) \to_{n\to\infty} u(t)$ faiblement dans X_A et on a $u \in L^\infty(\mathbb{R}; X_A) \cap W^{1,\infty}(\mathbb{R}; X_A^*)$ ainsi que $E(u(t)) \leq E(\varphi)$ pour chaque $t \in \mathbb{R}$.
4. Etape : Soit $\varphi \in X_A$ et $u \in L^\infty(\mathbb{R}; X_A) \cap W^{1,\infty}(\mathbb{R}; X_A^*)$ l'unique solution du problème (4.4) avec condition initiale φ. Soit $t \in \mathbb{R}$ fixé. On définit une nouvelle fonction $v(s) := u(s+t) \in L^\infty(\mathbb{R}; X_A) \cap W^{1,\infty}(\mathbb{R}; X_A^*)$. Cette fonction v est l'unique solution du problème (4.4) avec condition initiale $u(t) \in X_A$. D'après l'étape 4 on a $E(v(s)) \leq E(u(t))$ pour chaque $s \in \mathbb{R}$. Donc pour $s := -t$ on retrouve $E(\varphi) = E(u(0)) \leq E(u(t))$. Avec l'estimation de l'étape précédente on a la conservation de l'énergie. Cela implique aussi que $||u(t)||_{X_A}^2$ est une fonction continue et donc, avec la continuité faible de $t \in \mathbb{R} \longmapsto u(t) \in X_A$ on a $u \in C(\mathbb{R}; X_A)$. A partir de l'équation (4.4) on trouve alors $u \in C^1(\mathbb{R}; X_A^*)$ et (iii) est démontré. ∎

4.3 Existence locale / Well-posedness

Le résultat de la section précédente est très beau, mais il est seulement utilisable pour des nonlinéarités assez régulières. Les trois nonlinéarités introduites dans la section 4.1 ne sont pas suffisamment régulières pour pouvoir utiliser le théorème 4.5. Plaçons nous donc dans cette section dans le contexte de l'équation de Schrödinger, c.à.d. $X = L^2(\Omega)$, $X_A = H_0^1(\Omega)$ etc. (voir section 3.2) et dans un cadre plus réaliste, c.à.d. supposons que la nonlinéarité g satisfasse les propriétés suivantes

$$g = G' \quad \text{avec } g \in C(H_0^1(\Omega), H^{-1}(\Omega)) \text{ et } G \in C^1(H_0^1(\Omega), \mathbb{R}) \,. \tag{4.6}$$

Supposons qu'il existe $r, \rho \in [2, \frac{2N}{N-2})$ si $N \geq 2$ (ou $r, \rho \in [2, \infty]$ si $N = 1$), tels que

$$g \in C(H_0^1(\Omega), L^{\rho'}(\Omega)) \,, \tag{4.7}$$

ainsi que pour chaque $M > 0$ il existe $C(M) < \infty$ tel que tout $u, v \in H_0^1(\Omega)$ avec $||u||_{H^1} + ||v||_{H^1} \leq M$ on a

$$||g(u) - g(v)||_{L^{\rho'}(\Omega)} \leq C(M) ||u - v||_{L^r(\Omega)} \,. \tag{4.8}$$

Finalement supposons que pour tout $u \in H_0^1(\Omega)$

$$\mathcal{I}m\,(< g(u), \overline{u} >_{H^{-1},H^1}) = 0\,. \tag{4.9}$$

Définisons maintenant

$$E(u) = \frac{1}{2}\int_\Omega |\nabla u|^2 dx - G(u)\,, \quad \forall u \in H_0^1(\Omega)\,, \tag{4.10}$$

On a $E \in C^1(H_0^1(\Omega);\mathbb{R})$ et $E'(u) = -\Delta u - g(u)$ pour tout $u \in H_0^1(\Omega)$.
Avant de passer au théorème d'existence on va démontrer un lemme nécéssaire pour la suite.

Lemma 4.7 *Soient $I \subset \mathbb{R}$ et $u \in L^\infty(I, H_0^1(\Omega)) \cap W^{1,\infty}(I, H^{-1}(\Omega))$. Alors on a*

$$||u(t) - u(s)||_{L^2(\Omega)} \leq \sqrt{2}C|t-s|^{1/2}\,, \quad \forall s, t \in I\,, \tag{4.11}$$

qui signifie entre autres que $u \in C(\overline{I}, L^2(\Omega))$. Ici $C := \max\{||u||_{L^\infty(I,H^1)}; ||u'||_{L^\infty(I,H^{-1})}\}$. Soit maintenant g une fonction satisfaisant (4.6)-(4.10). Alors on a

$$||g(u)-g(v)||_{L^{\rho'}(\Omega)} \leq C(M)||u-v||^a_{L^2(\Omega)}\,, \quad |G(u)-G(v)| \leq C(M)||u-v||^b_{L^2(\Omega)}\,, \tag{4.12}$$

pour tout $u, v \in H_0^1(\Omega)$ satisfaisant $||u||_{H^1} + ||v||_{H^1} \leq M$. Ici on a noté $a := 1-N(1/2-1/r)$, $b := 1-N(1/2-1/\rho)$ et $C(M) > 0$ une constante ne dépendant que de M.

Proof:

$$\begin{aligned} ||u(t)-u(s)||^2_{L^2(\Omega)} &= \; < u(t)-u(s), u(t)-u(s) >_{H^{-1},H_0^1} \leq 2C||u(t)-u(s)||_{H^{-1}(\Omega)} \\ &\leq \; 2C||\int_s^t u'(\tau)d\tau||_{H^{-1}(\Omega)} \leq 2C\int_s^t ||u'(\tau)||_{H^{-1}(\Omega)}d\tau \leq 2C^2|t-s|\,. \end{aligned}$$

La propriété (4.8) ainsi que l'inégalité de Gagliardo-Nirenberg mènent à

$$||g(u)-g(v)||_{L^{\rho'}(\Omega)} \leq C(M)||u-v||_{L^r(\Omega)} \leq C(M)||u-v||^{1-a}_{H^1(\Omega)}||u-v||^a_{L^2(\Omega)}\,,$$

avec $0 < a \leq 1$ donné dans l'énoncé. Concernant l'inégalité sur G, on a

$$G(u)-G(v) = \int_0^1 \frac{d}{ds}G(su+(1-s)v)ds = \int_0^1 < g(su+(1-s)v), u-v >_{L^{\rho'},L^\rho} ds\,,$$

impliquant avec l'inégalité de Gagliardo-Nirenberg ainsi qu'avec le fait que $g \in C(H_0^1(\Omega), L^{\rho'}(\Omega))$

$$\begin{aligned} |G(u)-G(v)| &\leq \int_0^1 ||g(su+(1-s)v)||_{L^{\rho'}}ds\,||u-v||_{L^\rho} \leq C(M)||u-v||_{L^\rho} \\ &\leq C(M)||u-v||^{1-b}_{H^1(\Omega)}||u-v||^b_{L^2(\Omega)}\,, \end{aligned}$$

avec $0 < b \leq 1$ donné dans l'énoncé. ∎

Le théorème d'existence locale s'écrit maintenant

Theorem 4.8 *Supposons que g, G, et E satisfont les hypothèses (4.6)-(4.10). Alors pour chaque $M > 0$ il existe $T_M > 0$ tel que : pour chaque $\varphi \in H_0^1(\Omega)$ avec $||\varphi||_{H^1} \leq M$, il existe une H_0^1-solution forte sur $I = (-T_M, T_M)$ du système*

$$\begin{cases} iu_t + \Delta u + g(u) = 0\,, \quad sur\,\Omega\,,\ t \geq 0\,, \\ u_{|\partial\Omega} = 0\,, \\ u(0) = \varphi\,, \end{cases} \tag{4.13}$$

avec $u \in L^\infty(I, H_0^1(\Omega)) \cap W^{1,\infty}(I, H^{-1}(\Omega))$ et satisfaisant

$$||u||_{L^\infty(I,H_0^1(\Omega))} \leq 2M\,.$$

De plus on a la conservation de la charge et l'inégalité de l'énergie

$$||u(t)||_{L^2(\Omega)} = ||\varphi||_{L^2(\Omega)}\,, \quad E(u(t)) \leq E(\varphi)\,, \quad \forall t \in I\,. \tag{4.14}$$

Proof: L'idée de la preuve est la suivante: On va tout d'abord régulariser la nonlinéarité g pour pouvoir utiliser le théorème 4.5 dans le but de construire une suite de solutions approchées u_m. La deuxième étape sera d'utiliser les lois de conservations pour avoir des estimations de u_m uniformes en m. Et finalement on va passer à la limite $m \to \infty$ dans les équations approchées pour trouver une solution u de l'équation initiale (4.13).

1. Etape : Construction des solutions approchées u_m
On va régulariser la nonlinéarité g en utilisant l'opérateur autoadjoint J_m, $m \in \mathbb{N}$

$$J_m := \left(I - \frac{1}{m}\Delta\right)^{-1}\,,$$

qui associe à $f \in H^{-1}(\Omega)$ la fonction $J_m f \in H_0^1(\Omega)$ solution unique dans $H_0^1(\Omega)$ du problème

$$u - \frac{1}{m}\Delta u = f\,; \quad u_{|\partial\Omega} = 0\,.$$

Cet opérateur a les propriétés suivantes

$$J_m \in \mathcal{L}(H^{-1}(\Omega); H_0^1(\Omega))\,; \quad ||J_m||_{\mathcal{L}(H^{-1}(\Omega);H_0^1(\Omega))} \leq 1\,,$$

et pour un des espaces $Y = H_0^1(\Omega)$, $Y = L^p(\Omega)$, $1 < p < \infty$ ou $Y = H^{-1}(\Omega)$ on a

$$J_m \in \mathcal{L}(Y)\,; \quad ||J_m||_{\mathcal{L}(Y)} \leq 1\,; \quad J_m u \to_{m\to\infty} u \quad \text{dans } Y\,,\ \forall u \in Y\,.$$

Définissons maintenant les applications $g_m : L^2(\Omega) \to L^2(\Omega)$ et $G_m : H_0^1(\Omega) \to \mathbb{R}$ par

$$g_m(u) := J_m(g(J_m(u)))\,; \quad G_m(u) := G(J_m(u))\,.$$

Ces deux fonctions satisfont les hypothèses du théorème 4.5 avec $X = L^2(\Omega)$. En effet, dû au fait que J_m est auto-adjoint, on a pour $u \in X$

$$(g_m(u), iu)_X =< g(J_m u), iJ_m(u) >_{H^{-1},H^1} = 0\,.$$

Le théorème 4.5 peut donc être utilisé et on a l'existence d'une suite de fonctions $u_m \in C(\mathbb{R}; H_0^1(\Omega)) \cap C^1(\mathbb{R}; H^{-1}(\Omega))$ solutions du problème régularisé

$$\begin{cases} i\partial_t u_m + \Delta u_m + g_m(u_m) = 0\,, \quad t \in \mathbb{R} \\ u_m(0) = \varphi \in H_0^1(\Omega)\,; \quad u_{m|\partial\Omega} = 0\,. \end{cases} \tag{4.15}$$

De plus on a la conservation de la charge et de l'énergie

$$||u_m(t)||_{L^2(\Omega)} = ||\varphi||_{L^2(\Omega)}\,, \quad E_m(u_m(t)) = E_m(\varphi)\,, \quad \forall t \in \mathbb{R}\,, \forall m \in \mathbb{N}\,, \tag{4.16}$$

où $E_m(u) := \frac{1}{2}\int_\Omega |\nabla u|^2 dx - G_m(u)$.

2. Etape : Estimations uniformes en m

Soit $\varphi \in H_0^1(\Omega)$ avec $||\varphi||_{H^1} \leq M$. Notons

$$\theta_m := sup\{\tau > 0 \ / \ ||u_m(t)||_{H^1} \leq 2M \text{ sur } [-\tau, \tau]\}\,.$$

On a donc

$$||u_m||_{L^\infty(-\theta_m, \theta_m; H_0^1(\Omega))} \leq 2M\,, \quad \forall m \in \mathbb{N}\,.$$

En utilisant les propriétés de l'opérateur J_m on peut démontrer que g_m satisfait (4.7) et (4.8) uniformément en m de telle manière qu'on peut montrer (à l'aide de l'équation (4.15)) qu'on a avec une constante $C(M) > 0$ (dépendante que de M) l'estimation

$$||\partial_t u_m||_{L^\infty(-\theta_m, \theta_m; H^{-1}(\mathbb{R}^N))} \leq C(M)\,, \quad \forall m \in \mathbb{N}\,.$$

L'intervalle de définition de ces estimations dépend malheureusement de m. Mais en utilisant l'égalité d'énergie et le lemme 4.7 on a pour chaque $t \in (-\theta_m, \theta_m)$

$$||u_m(t)||_{H^1}^2 \leq ||\varphi||_{L^2}^2 + ||\nabla\varphi||_{L^2}^2 + 2|G_m(u_m(t)) - G_m(\varphi)| \leq ||\varphi||_{H^1}^2 + C(M)|t|^{\frac{b}{2}}\,.$$

Cela implique que si on choisit à ce moment T_M tel que $C(M)T_M^{\frac{b}{2}} = 2M^2$ on a pour $T := \min(T_M, \theta_m)$

$$||u_m||_{L^\infty((-T,T); H_0^1(\Omega))} \leq \sqrt{3}M < 2M\,.$$

Cela signifie avec la définition de θ_m que $T_M \leq \theta_m$ pour chaque $m \in \mathbb{N}$ ce qui implique qu'on a les estimations suivantes indépendantes de m

$$||u_m||_{L^\infty((-T_M,T_M); H_0^1(\Omega))} \leq 2M\,, \quad ||\partial_t u_m||_{L^\infty((-T_M,T_M); H^{-1}(\Omega))} \leq C(M)\,.$$

3. Etape : Passage à la limite $m \to \infty$

Cette partie est assez technique. On ne donnera que le fil conducteur. L'idée est de passer à la limite $m \to \infty$ dans la formulation faible de l'équation (4.15), donnée par

$$\int_{-T_M}^{T_M} \Big[- < iu_m, w >_{H^{-1}, H_0^1} \phi'(t) + < \Delta u_m + g_m(u_m), w >_{H^{-1}, H_0^1} \phi(t) \Big] dt = 0\,,$$

où $w \in H_0^1(\Omega)$ et $\phi \in C_0^\infty(-T_M, T_M)$ sont des fonctions test.

Tout d'abord les estimations uniformes de l'étape précédente entraîne l'existence d'une fonction

$$u \in L^\infty((-T_M, T_M), H_0^1(\Omega)) \cap W^{1,\infty}((-T_M, T_M), H^{-1}(\Omega))\,,$$

et pour chaque $t \in [-T_M, T_M]$ on a, à une sous-suite près, $u_m(t) \to u(t)$ faiblement dans $H_0^1(\Omega)$. On peut aussi montrer que

$$g_m(u_m(t)) \to f(t) \quad \text{faiblement dans } L^{\rho'}(\Omega)\,.$$

Cela permet de passer à la limite dans la formulation faible et d'obtenir

$$\int_{-T_M}^{T_M} \Big[- < iu, w >_{H^{-1},H_0^1} \phi'(t) + < \Delta u + f, w >_{H^{-1},H_0^1} \phi(t) \Big]\, dt = 0\,.$$

Il suffit maintenant d'identifier f avec $g(u)$ pour démontrer l'existence d'une solution locale $u \in L^\infty(I, H_0^1(\Omega)) \cap W^{1,\infty}(I, H^{-1}(\Omega))$ de l'équation de Schrödinger non linéaire (4.13).

4. Etape : Conservation de la charge et inégalité d'énergie

... ∎

En supposant que la solution du problème (4.13) est unique on pourra montrer que ce problème est aussi bien posé. Les techniques pour démontrer l'unicité d'une solution de (4.13) dépendent du problème même (des espaces, de la nonlinéarité etc). Dans le cas $\Omega = \mathbb{R}^N$ on pourra donner une preuve générale grâce aux estimations de Strichartz.

Theorem 4.9 *Supposons que g, G, et E satisfont les hypothèses (4.6)-(4.10) et supposons de plus que le problème (4.13) admet une solution unique. Alors le système (4.13) est bien posé et on a la conservation de la charge et de l'énergie*

$$||u(t)||_{L^2(\Omega)} = ||\varphi||_{L^2(\Omega)}\,, \quad E(u(t)) = E(\varphi)\,, \quad \forall t \in (-T_{min}, T_{max})\,. \tag{4.17}$$

Proof: 1. Etape : Régularité

Soit I un intervalle quelconque et $u \in L^\infty(I; H_0^1(\Omega)) \cap W^{1,\infty}(I; H^{-1}(\Omega))$ l'unique solution forte de (4.13) sur I. On va d'abord montrer que $u \in C(\overline{I}; H_0^1(\Omega)) \cap C^1(\overline{I}; H^{-1}(\Omega))$ et qu'elle satisfait la conservation de la charge et de l'énergie (4.17).

Soient $M := \sup\{||u(t)||_{H^1}\,,\ t \in I\}$ et $J \subset I$ un intervalle tel que $|J| \le T_M$, où T_M a été défini dans le théorème 4.8. Soient de plus $\sigma, \tau \in J$ arbitraires, mais fixés. On définit la fonction $v(s) := u(\sigma + s)$ pour tout $s \in \mathbb{R}$ tel que $\sigma + s \in I$. Alors v est l'unique solution de (4.13) avec condition initiale $u(\sigma)$. De plus, d'après le théorème 4.8, v est défini sur $(-T_M, T_M)$ et satisfait la conservation de la charge ainsi que l'inégalité d'énergie. Donc

$$||u(\sigma + s)||_{L^2} = ||v(s)||_{L^2} = ||u(\sigma)||_{L^2}\,, \quad E(u(\sigma + s)) = E(v(s)) \le E(u(\sigma))\,.$$

En prenant $s \in (-T_M, T_M)$ tel que $\tau = \sigma + s$ on a $||u(\tau)||_{L^2} = ||u(\sigma)||_{L^2}$ et $E(u(\tau)) \le E(u(\sigma))$. En faisant de même avec la fonction $w(s) := u(\tau + s)$ on démontre que $||u(\sigma)||_{L^2} = ||u(\tau)||_{L^2}$ et $E(u(\sigma)) \le E(u(\tau))$. Et comme σ, τ sont choisis de manière arbitraire on a montré les deux lois de conservation sur tout J et ainsi sur I. Maintenant on sait que $u \in C(\overline{I}, L^2(\Omega))$ et ainsi $G \in C(\overline{I}, \mathbb{R})$ (Lemma 4.7). L'égalité de l'énergie implique donc que $u \in C(\overline{I}, H_0^1(\Omega))$. Et finalement par l'équation on a aussi $u \in C^1(\overline{I}, H^{-1}(\Omega))$.

2. Etape : Maximalité

Soit $I = (-T_{min}, T_{max})$ l'intervalle maximal pour lequel il existe une solution de (4.13) avec condition initiale $\varphi \in H_0^1(\Omega)$. D'après l'étape 1 on a $u \in C(\overline{I}; H_0^1(\Omega)) \cap C^1(\overline{I}; H^{-1}(\Omega))$. L'alternative d'explosion se démontre maintenant exactement comme dans la preuve du théorème 4.5.

3. Etape : Dépendance continue par rapport à la donnée initiale

Soit $\varphi_n \to_{n\to\infty} \varphi$ dans $H_0^1(\Omega)$ une suite de données initiales et u_n (resp. u) les solutions classiques maximales correspondant aux conditions initiales φ_n (resp. φ). Soit de plus $M := 2\sup\{||u(t)||_{H^1}\,;\ t \in (-T_{min}(\varphi), T_{max}(\varphi))\}$. Alors pour n assez grand on a $||\varphi_n||_{H^1} \le M$ et donc $[-T_M, T_M] \subset (-T_{min}(\varphi), T_{max}(\varphi))$. De plus la suite u_n est bornée dans $L^\infty((-T_M, T_M); H_0^1(\Omega)) \cap W^{1,\infty}((-T_M, T_M); H^{-1}(\Omega))$ (thm. 4.8). On peut ainsi montrer que

$$u_n \to_{n\to\infty} u \quad \text{dans} \quad C([-T_M, T_M]; L^2(\Omega))\,,$$

(assez technique, comme dans l'étape 3 de la preuve du théorème 4.8). Le lemme 4.7 ainsi que la conservation de l'énergie impliquent alors $||u_n(t)||_{H^1} \to_{n\to\infty} ||u(t)||_{H^1}$ uniformément sur $[-T_M, T_M]$, ce qui signifie que

$$u_n \to_{n\to\infty} u \quad \text{dans} \quad C([-T_M, T_M]; H_0^1(\Omega))\,.$$

En répétant cet argument on peut couvrir tout intervalle $I \subset (-T_{min}(\varphi), T_{max}(\varphi))$. ∎

4.4 Existence globale

Nous allons établir maintenant un résultat d'existence globale pour certaines conditions initiales $\varphi \in H_0^1(\Omega)$ et lorsque G satisfait une condition supplémentaire. La preuve est basée sur la conservation de la charge et l'inégalité d'énergie.

Theorem 4.10 *Soient g, G et E comme dans le théorème 4.8. Supposons qu'il existe un $A > 0$, $C(A) > 0$ et $\varepsilon \in (0,1)$ tels que*

$$G(u) \le \frac{1-\varepsilon}{2}||u||^2_{H^1(\Omega)} + C(A)\,, \quad \forall u \in H_0^1(\Omega) \quad \textit{avec } ||u||_{L^2(\Omega)} \le A\,.$$

Si $\varphi \in H_0^1(\Omega)$ satisfait $||\varphi||_{L^2(\Omega)} \le A$, alors le problème (4.13) admet une H_0^1-solution forte, globale sur $\mathbb{R}$, c.à.d. $u \in L^\infty(\mathbb{R}, H_0^1(\Omega)) \cap W^{1,\infty}(\mathbb{R}, H^{-1}(\Omega))$. Cette solution satisfait la conservation de la charge et l'inégalité de l'énergie (4.14) pour tout $t \in \mathbb{R}$.

Proof: Soit $\varphi \in H_0^1(\Omega)$ et $u \in L^\infty(I; H_0^1(\Omega)) \cap W^{1,\infty}(I, H^{-1}(\Omega))$ une solution forte de (4.13) sur I, où $0 \in I$ (théorème 4.8). Comme

$$||u(t)||^2_{H^1} = 2E(u(t)) + 2G(u(t)) + ||u(t)||^2_{L^2}\,,$$

la conservation de la charge et l'inégalité de l'énergie (4.14) implique

$$||u(t)||^2_{H^1} \le ||\varphi||^2_{H^1} - 2G(\varphi) + 2G(u(t))\,, \quad \forall t \in I\,.$$

En supposant que $||\varphi||_{L^2(\Omega)} \le A$, la propriété de G nous permet d'estimer

$$||u(t)||^2_{H^1} \le ||\varphi||^2_{H^1} - 2G(\varphi) + (1-\varepsilon)||u(t)||^2_{H^1} + 2C(A)\,, \quad \forall t \in I\,,$$

et on déduit l'estimation de u dans la norme H^1, estimation qui dépend que de la donnée initiale

$$||u(t)||_{H^1}^2 \leq \frac{1}{\varepsilon}\left(||\varphi||_{H^1}^2 - 2G(\varphi) + 2C(A)\right), \quad \forall t \in I\,. \tag{4.18}$$

Notons maintenant

$$M := \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}\sqrt{||\varphi||_{H^1}^2 - 2G(\varphi) + 2C(A)}\,.$$

Tout d'abord on a $||\varphi||_{H^1} \leq M$. Le théorème locale implique alors l'existence d'un T_M et d'une solution forte $u \in L^\infty((-T_M, T_M); H_0^1(\Omega)) \cap W^{1,\infty}((-T_M, T_M), H^{-1}(\Omega))$, qui satisfait (4.14). L'idée c'est de prolonger cette solution sur tout $\mathbb{R}$. L'estimation (4.18) implique d'abord que $||u(T_M)||_{H^1} \leq M$. En appliquant de nouveau le théorème 4.8, on peut démontrer qu'il existe une solution forte $v \in L^\infty((-T_M, T_M); H_0^1(\Omega)) \cap W^{1,\infty}((-T_M, T_M), H^{-1}(\Omega))$ avec $v(0) = u(T_M)$ et satisfaisant (4.14). En définissant maintenant

$$u(t) := \begin{cases} u(t) & \text{pour } t \in [-T_M, T_M] \\ v(t - T_M) & \text{pour } t \in [T_M, 2T_M]\,, \end{cases}$$

alors cette nouvelle fonction est définie sur $[-T_M, 2T_M]$, elle satisfait l'équation (4.13) et la conservation de charge ainsi que l'inégalité d'énergie. En effet pour $T_M \leq t \leq 2T_M$ on a

$$||u(t)||_{L^2} = ||v(t - T_M)||_{L^2} = ||u(T_M)||_{L^2} = ||\varphi||_{L^2}\,,$$
$$E(u(t)) = E(v(t - T_M)) \leq E(u(T_M)) \leq E(\varphi)\,.$$

En continuant de cette manière on peut prolonger u sur tout $\mathbb{R}$. ∎

Parmi les problèmes les plus importants liés aux équations d'évolution nonlinéaires figure l'étude du comportement à l'infini des solutions globales. C'est ce qu'on appelle le comportement asymptotique des solutions (scattering theory), c.à.d. comment se comporte $u(t)$ lorsque $t \to \pm\infty$. On n'aura pas le temps d'aborder ce vaste sujet dans le cadre de ce cours.

5 L'équation de Schrödinger nonlinéaire dans $\mathbb{R}^N$

On va étudier dans cette section le cas $\Omega = \mathbb{R}^N$ pour le problème

$$\begin{cases} iu_t + \Delta u + g(u) = 0\,, \text{ sur } \mathbb{R}^N\,,\ t \geq 0\,, \\ u(0) = \varphi\,. \end{cases} \tag{5.1}$$

Les résultats obtenus dans la section précédente sont valables aussi pour ce cas. La caractéristique principale du cas $\Omega = \mathbb{R}^N$ est que les estimations de Strichartz peuvent être utilisées pour démontrer un résultat d'unicité. On se rappelle que dans la section 4.3 (théorème 4.9) on supposait avoir de l'unicité pour pouvoir démontrer que le problème est bien posé. Dans le cas $\Omega = \mathbb{R}^N$, c'est justement les estimations de Strichartz qui vont nous permettre d'enlever cette hypothèse.
De plus, les estimations de Strichartz sont un outil puissant, qui permettent entre autres de prouver des résultats d'existence dans différents espaces à l'aide des arguments de

point fixe (méthode de Kato).
Montrons donc comment ces estimations nous donnent la propriété clé de l'unicité.

Theorem 5.1 *Soit $g \in C(H^1(\mathbb{R}^N), H^{-1}(\mathbb{R}^N))$ une fonction satisfaisant (4.8), c.à.d. on suppose qu'il existe $r, \rho \in [2, \frac{2N}{N-2})$ si $N \geq 2$ (ou $r, \rho \in [2, \infty]$ si $N = 1$) tel que $g \in C(H^1(\mathbb{R}^N), L^{\rho'}(\mathbb{R}^N))$ et tel que pour tout $u, v \in H^1(\mathbb{R}^N)$ avec $||u||_{H^1} + ||v||_{H^1} \leq M$ on a*

$$||g(u) - g(v)||_{L^{\rho'}(\mathbb{R}^N)} \leq C(M)||u - v||_{L^r(\mathbb{R}^N)} . \tag{5.2}$$

Si $\varphi \in H^1(\mathbb{R}^N)$ et u_1, u_2 sont deux $H^1(\mathbb{R}^N)$-solutions fortes de (5.1) de condition initiale φ et définies sur un intervalle I avec $0 \in I$, alors $u_1 = u_2$.

Proof: Soient $u_1, u_2 \in L^\infty(I, H^1(\mathbb{R}^N)) \cap W^{1,\infty}(I, H^{-1}(\mathbb{R}^N))$ deux solutions de (5.1) avec condition initiale $\varphi \in H^1(\mathbb{R}^N)$. Alors la formule de Duhamel nous donne

$$u_1(t) - u_2(t) = i \int_0^t \mathcal{T}(t - s) \, [g(u_1(s)) - g(u_2(s))] \, ds .$$

Les estimations de Strichartz impliquent pour deux paires admissibles (q, r) et (γ, ρ) ainsi que pour chaque intervalle borné J avec $0 \in J \subset I$

$$||u_1 - u_2||_{L^q(J, L^r(\mathbb{R}^N))} \leq K||g(u_1) - g(u_2)||_{L^{\gamma'}(J, L^{\rho'}(\mathbb{R}^N))} .$$

Mais avec l'hypothèse (5.2) on a

$$||g(u_1) - g(u_2)||_{L^{\gamma'}(J, L^{\rho'}(\mathbb{R}^N))} \leq C(M)||u_1 - u_2||_{L^{\gamma'}(J, L^r(\mathbb{R}^N))} ,$$

et donc

$$||u_1 - u_2||_{L^q(J, L^r(\mathbb{R}^N))} \leq C||u_1 - u_2||_{L^{\gamma'}(J, L^r(\mathbb{R}^N))} ,$$

où $1 \leq \gamma' < 2 < q$. Cela implique immédiatement avec le lemme suivant, que $u_1 \equiv u_2$ sur I. ∎

Lemma 5.2 *Soit I un intervalle avec $0 \in I$ et soit $w \in L^b(I) \cap L^a(I)$ pour $1 \leq a < b \leq \infty$ et satisfaisant $w(0) = 0$. S'il existe une constante $C > 0$ telle qu'on a pour tout intervalle borné $J \subset I$ avec $0 \in J$*

$$||w||_{L^b(J)} \leq C||w||_{L^a(J)} ,$$

alors on a $w \equiv 0$ presque partout sur I.

Proof: Soit $J := [0, T] \subset I$ arbitraire et soit $\theta := \sup\{t \in [0, T] \ / \ w \equiv 0 \text{ sur } [0, t]\}$. On va montrer que $\theta = T$ par contradiction. Et comme l'intervalle J est arbitraire, cela prouve le résultat. Supposons donc que $\theta < T$. Alors on a avec l'inégalité de Hölder et pour $\theta < t < T$

$$||w||_{L^b(\theta,t)} \leq C||w||_{L^a(\theta,t)} \leq C(t - \theta)^{1/a - 1/b}||w||_{L^b(\theta,t)} .$$

On peut maintenant choisir $t - \theta > 0$ tellement petit pour que $C(t - \theta)^{1/a-1/b} < 1$ et donc on aura

$$||w||_{L^b(\theta,t)} < ||w||_{L^b(\theta,t)} ,$$

qui est une contradiction. L'hypothèse $\theta < T$ est donc fausse et on a $\theta = T$. ∎

Le théorème 5.1 qu'on vient de prouver ainsi que le théorème 4.9 entraînent finalement le résultat suivant

Theorem 5.3 *Supposons que g, G, et E satisfont les hypothèses (4.6)-(4.10) avec $\Omega = \mathbb{R}^N$ et soit $\varphi \in H^1(\mathbb{R}^N)$. Dans ce cas le problème (5.1) est localement bien posé et on a la conservation de la charge et de l'énergie*

$$||u(t)||_{L^2(\mathbb{R}^N)} = ||\varphi||_{L^2(\mathbb{R}^N)} , \quad E(u(t)) = E(\varphi) , \quad \forall t \in (-T_{min}, T_{max}) . \tag{5.3}$$

L'existence (locale ou globale) d'une solution étant établie, les propriétés comme la régularité et le "smooting effect" pourront maintenant être analysés. On n'aura pas le temps d'étudier ces problèmes dans ce cours.

6 Résolution numérique de l'équation de Schrödinger stationnaire

On a vu dans les sections précédentes que l'équation de Schrödinger

$$\mathbf{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(t,x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x \psi(t,x) + qV(t,x)\psi(t,x) , \quad \text{dans } \mathbb{R} \times (a,b) . \tag{6.1}$$

a une solution explicite pour $V \equiv 0$ (voir sections 3.2, 3.3). Par contre, dès que $V \neq 0$, l'équation de Schrödinger n'a plus (dans la plupart des cas) de solution analytique et on doit se tourner vers la résolution numérique. Dans cette section on va étudier le cas simple d'un potentiel ne dépendant que de l'espace et essayer de résoudre numériquement l'équation de Schrödinger correspondante. On se placera dans $\mathbb{R}$. Dans ce cas précis, il est possible de séparer dans l'équation les variables d'espace et de temps, ce qui conduit à rechercher une solution sous la forme

$$\psi(t,x) = \chi(t)\varphi(x) . \tag{6.2}$$

En insérant cet Ansatz dans l'équation de Schrödinger, on trouve que

$$\chi(t) = Ae^{-\mathbf{i}\frac{E}{\hbar}t} , \quad A \in \mathbb{R} , \tag{6.3}$$

et φ est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi''(x) + qV(x)\varphi(x) = E\varphi(x) . \tag{6.4}$$

On a noté par E l'énergie totale de l'électron. Une fonction d'onde de la forme

$$\psi(t,x) = e^{-\mathbf{i}\frac{E}{\hbar}t}\varphi(x) , \tag{6.5}$$

est appelée solution stationnaire de l'équation de Schrödinger, car elle donne lieu à une densité de probabilité $|\psi(t,x)|^2 = |\varphi(x)|^2$ indépendante du temps. Comme l'équation de Schrödinger (6.1) est linéaire, les solutions ("admissibles") de cette équation se laissent écrire comme une combinaison linéaire des solutions stationnaires de la forme (6.5).
Par conséquent, pour retrouver les solutions de (6.1), il ne nous reste maintenant qu'à résoudre numériquement l'équation stationnaire (6.4) pour retrouver les solutions φ. Par contre, pour la résolution numérique il faut se ramener à un domaine de calcul borné et

donc il faudra imposer des conditions aux bords. L'obtention des conditions aux bords adequates pour l'équation de Schrödinger est une étape très importante et pas du tout évidente. L'idéal serait de choisir ces conditions de telle manière que la solution calculée sur le domaine borné Ω, avec des conditions aux bords, est la restriction sur Ω de la solution sur tout $\mathbb{R}$. Ce sont les conditions aux limites exactes ou transparentes.

L'objectif de cette section est d'étudier d'un point de vue numérique l'équation de Schrödinger stationnaire, uni-dimensionnelle, munie de conditions aux bords ouvertes (transparentes)

$$\begin{cases} -\varepsilon^2 \psi_E''(x) + V(x)\psi_E(x) = E\psi_E(x) \quad \text{dans } (a,b) \\ \psi_E'(a) + \mathbf{i}k_a\psi_E(a) = 2\mathbf{i}k_a \\ \psi_E'(b) - \mathbf{i}k_b\psi_E(b) = 0\,. \end{cases} \tag{6.6}$$

Cette équation décrit l'évolution d'un électron injécté dans le dispositif (a,b) en $x=a$ avec l'énergie E et qui sera réfléchi ou transmis à travers le dispositif par le potentiel électrostatique V. On supposera tout le long de cette section que $E - V(x) \geq \tau > 0$ et $0 < \varepsilon < 1$. Le vecteur d'onde $k(x)$ et la longueur d'onde $\lambda(x)$ sont donnés par

$$k(x) := \frac{\sqrt{E - V(x)}}{\varepsilon} \quad ; \quad \lambda(x) := \frac{1}{k(x)} = \frac{\varepsilon}{\sqrt{E - V(x)}}\,.$$

Pour déduire dans notre cas l'expression des conditions aux bords, on a supposé le potentiel constant en dehors du dispositif (c'est la méthode QTBM: Quantum Transport Boundary Conditions). Cela nous permet de résoudre explicitement l'équation de Schrödinger sur $(-\infty, a)$ et (b, ∞). En effet pour $x \leq a$ on trouve

$$\psi_E(x) = a_E e^{\mathbf{i}k_a(x-a)} + r_E e^{-\mathbf{i}k_a(x-a)}\,, \quad x \leq a\,, \tag{6.7}$$

où a_E est l'amplitude de l'onde entrante, qu'on met égale à 1, et r_E est l'amplitude de l'onde réflechie. Le coefficient r_E est une inconnue qui sera éliminé pour déduire la condition en $x = a$. Cela se fait en dérivant l'expression (6.7)

$$\psi_E'(x) = \mathbf{i}k_a[a_E e^{\mathbf{i}k_a(x-a)} - r_E e^{-\mathbf{i}k_a(x-a)}]\,, \quad x \leq a\,,$$

et en utilisant le fait que ψ_E ainsi que ψ_E' sont des fonctions continues en $x = a$. Pareil pour $x \geq b$ on trouve

$$\psi_E(x) = d_E e^{-\mathbf{i}k_b(x-b)} + t_E e^{\mathbf{i}k_b(x-b)}\,, \tag{6.8}$$

où l'amplitude d_E est l'amplitude d'une onde entrante du côté droit et donc est mise égale à 0, car on est dans le cas où on veut décrire un électron injécté du côté gauche. Par contre t_E est l'amplitude de l'onde transmise de gauche à droite à travers le dispositif, et reste une inconnue, à éliminer comme dans le cas précédent pour donner lieu à la condition en $x = b$.
Le potentiel électrostatique V est composé d'un potentiel extérieur donné V_e et d'un potentiel autoconsistant V_s, solution de l'équation de Poisson

$$\begin{cases} -V_s''(x) = n(x) \qquad \text{dans } (a,b) \\ V_s'(a) = V_s'(b) = 0\,. \end{cases} \tag{6.9}$$

Les quantités macroscopiques telles que la densité en électrons n et la densité de courant j sont données par les formules

$$n(x) = \int_0^\infty f_{FD}(E)|\psi_E(x)|^2 dE \quad ; \quad j(x) = \int_0^\infty f_{FD}(E)\mathcal{I}m[\overline{\psi_E(x)}\psi'_E(x)]dE\,, \qquad (6.10)$$

où f_{FD} est la distribution de Fermi-Dirac (connue), représentant la statistique d'injection des électrons dans le dispositif.

En résumé la densité électronique n et le potentiel électrostatique V sont obtenus par la résolution du système couplé de Schrödinger/Poisson (6.6), (6.9), (6.10). Ce système non-linéaire se résoudra de manière intérative par une procédure de Gummel (ou Newton), comme le montre l'organigramme **??**. Il est très important de remarquer qu'il est nécéssaire (pour un V donné) de résoudre un grand nombre de fois l'équation de Schrödinger (6.6) (suivant la valeur de l'énergie d'injection E) afin de déterminer l'ensemble des fonctions d'ondes ψ_E, pour pouvoir calculer la densité électronique n (6.10) et ensuite calculer V (6.9). Et cela se fait au cours de chaque itération Schrödinger/Poisson! Le temps de calcul de la procédure de résolution de l'équation de Schrödinger (6.6) est donc très très important, un temps trop long mènera à une méthode extrêment coûteuse.

Dans cette partie on regardera plus en détail la résolution de l'équation de Schrödinger (6.6) pour un potentiel V et une énergie E donnés. Pour simplifier on choisira $V \equiv cst$ tel que $E - V > 0$ et on note $k = \frac{\sqrt{E-V}}{\varepsilon} \equiv cst$. Le système à étudier prend donc la forme

$$\begin{cases} \psi''(x) + k^2\psi(x) = 0\,, \quad \text{dans } \ (a,b) \\ \psi'(a) + \mathbf{i}k\psi(a) = 2\mathbf{i}k \\ \psi'(b) - \mathbf{i}k\psi(b) = 0\,. \end{cases} \qquad (6.11)$$

On a le théorème suivant d'existence et d'unicité pour le problème continu (6.6), et en particulier de (6.11)

Theorem 6.1 *Soient* $0 < \varepsilon < 1$, $V \in L^\infty(a,b)$ *et* $E - V \geq \tau > 0$. *Alors le système (6.6) admet une unique solution* $\psi \in W^{2,\infty}(a,b)$. *Si* $V \in W^{1,\infty}(a,b)$,*alors cette unique solution satisfait*

$$||\psi||_{L^\infty(a,b)} \leq C \quad ; \quad ||\frac{\varepsilon}{\sqrt{E-V}}\psi'||_{L^\infty(a,b)} \leq C \quad ; \quad ||\frac{\varepsilon^2}{E-V}\psi''||_{L^\infty(a,b)} \leq C\,, \qquad (6.12)$$

avec $C > 0$ *une constante indépendante de* ε, E *et* k.

Proof: ... ∎

Passons maintenant à la résolution numérique de (6.11), qu'on fera à l'aide de la méthode d'éléments finis. Pour cela on va tout d'abord établir la formulation variationnelle de (6.11). Soit $\mathcal{V} := H^1(a,b)$ muni de la norme (avec poids)

$$||\theta||^2_{\mathcal{V}} := ||\theta||^2_{L^2} + \frac{1}{k^2}||\theta'||^2_{L^2}\,, \quad \text{pour } \ \theta \in \mathcal{V}\,.$$

La formulation variationnelle de (6.11) s'écrit alors

$$b(\psi,\theta) = L(\theta)\,, \quad \forall \theta \in \mathcal{V}\,, \tag{6.13}$$

avec la forme sesquilinéaire, continue $b : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \to \mathbb{C}$ donnée par

$$b(\psi,\theta) = \frac{1}{k^2}\int_a^b \psi'(x)\overline{\theta}'(x)dx - \int_a^b \psi(x)\overline{\theta}(x)dx - \frac{\mathbf{i}}{k}\psi_a\overline{\theta}_a - \frac{\mathbf{i}}{k}\psi_b\overline{\theta}_b\,, \tag{6.14}$$

et la forme anti-linéaire, continue $L : \mathcal{V} \to \mathbb{C}$ définie par

$$L(\theta) = -\frac{2\mathbf{i}}{k}\overline{\theta}_a\,. \tag{6.15}$$

Il est important de remarquer que b n'est pas une forme coercive! Les deux formulations, la formulation forte (6.11) ainsi que la formulation faible (6.13) sont équivalentes, ce qui signifie que (6.13) admet une unique solution $\psi \in H^1(a,b)$ qui satisfait

$$||\psi||_{\mathcal{V}} \le C\,,$$

indépendamment de ε, E et k.

On va passer maintenant à la discrétisation du problème continue (6.13), en approchant l'espace de dimension infinie $\mathcal{V}$ par un espace de dimension finie $\mathcal{V}_h \subset \mathcal{V}$. Pour cela, soit $a = x_1 < \cdots < x_N = b$ une discrétisation du domaine $[a,b]$. On choisit comme $\mathcal{V}_h$ l'espace des fonctions continues et linéaires sur chaque maille $I_n := (x_n, x_{n+1})$

$$\mathcal{V}_h := \left\{ \theta_h \in \mathcal{V} \ / \ \theta_h(x) = \sum_{n=1}^{N} z_n\zeta_n(x)\,,\ z_n \in \mathbb{C} \right\}\,,$$

où ζ_n sont les fonctions chapeaux représentées sur la figure **??** et données par

$$\zeta_n(x) := \begin{cases} \dfrac{x - x_{n-1}}{x_n - x_{n-1}} & \text{sur } [x_{n-1}, x_n]\,, \\ \dfrac{x_{n+1} - x}{x_{n+1} - x_n} & \text{sur } [x_n, x_{n+1}]\,. \end{cases} \tag{6.16}$$

Le problème discret se formule alors : On cherche une fonction $\psi_h \in \mathcal{V}_h$ telle que

$$b(\psi_h, \theta_h) = L(\theta_h)\,, \quad \forall \theta_h \in \mathcal{V}_h\,. \tag{6.17}$$

En écrivant

$$\psi_h(x) = \sum_{n=1}^{N} \psi_n\zeta_n(x)\,, \tag{6.18}$$

où ψ_n pour $n = 1, \cdots, N$, sont les inconnues (les approximations de $\psi(x_n)$) et en choisissant comme fonctions test $\theta_h := \zeta_n$, le problème discret est équivalent au système linéaire

$$\begin{pmatrix} b(\zeta_1,\zeta_1) & b(\zeta_2,\zeta_1) & \cdots & b(\zeta_N,\zeta_1) \\ b(\zeta_1,\zeta_2) & b(\zeta_2,\zeta_2) & \cdots & b(\zeta_N,\zeta_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ b(\zeta_1,\zeta_N) & b(\zeta_2,\zeta_N) & \cdots & b(\zeta_N,\zeta_N) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L(\zeta_1) \\ L(\zeta_2) \\ \vdots \\ L(\zeta_N) \end{pmatrix}. \tag{6.19}$$

La matrice de ce système (qu'on notera M) est une matrice complexe, tridiagonale, qu'on peut calculer à la main dans notre cas simple

$$M = \begin{pmatrix} \frac{1}{kh} - \frac{kh}{3} - \mathbf{i} & -\frac{1}{kh} - \frac{kh}{6} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -\frac{1}{kh} - \frac{kh}{6} & \frac{2}{kh} - \frac{2kh}{3} & -\frac{1}{kh} - \frac{kh}{6} & \cdots & 0 & 0 \\ & & \cdots & & & \\ & & \cdots & & & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\frac{1}{kh} - \frac{kh}{6} & \frac{1}{kh} - \frac{kh}{3} - \mathbf{i} \end{pmatrix}. \tag{6.20}$$

Deux questions se posent maintenant. Le problème discret (6.17) (resp. le système linéaire (6.19)) a-t-il une solution unique $\psi_h \in \mathcal{V}_h$? Et quelle sera l'erreur en résolvant le problème discret (6.17) au lieu du problème continu (6.13), c.à.d. il faut essayer d'estimer l'erreur $||\psi - \psi_h||_{\mathcal{V}}$ en fonction de h (et probablement de k).

Theorem 6.2 *Le problème discret (6.17) admet une unique solution $\psi_h \in \mathcal{V}_h$ pour tout $h > 0$.*

Proof: Pour démontrer ce théorème il suffit de montrer que le système homogène $Mz = 0$ admet une unique solution $z \equiv 0$, où $z \in \mathbb{C}^N$ et M est définie par (6.20). Notons $u_h \in \mathcal{V}_h$ la fonction définie par

$$u_h(x) := \sum_{n=1}^{N} z_n \zeta_n(x)\,.$$

Alors le système $Mz = 0$ est équivalent à $b(u_h, \theta_h) = 0$ pour tout $\theta_h \in \mathcal{V}_h$, ce qui implique $b(u_h, u_h) = 0$. Prenant la partie imaginaire de cette dernière équation, mène à $u_h(a) = u_h(b) = 0$, c.à.d. $z_1 = z_N = 0$. Comme la matrice M est tridiagonale, cela implique immédiatement que $z_i = 0$ pour tout $i = 1, \cdots, N$. ∎

On va passer maintenant à l'estimation de l'erreur $||\psi - \psi_h||_{\mathcal{V}}$. Dans la suite on notera par ψ la solution du probème continu (6.13), ψ_h la solution du problème discret (6.17) et par ψ_I l'interpolée de ψ dans l'espace $\mathcal{V}_h$, c.à.d.

$$\psi_I(x) := \sum_{n=1}^{N} \psi(x_n)\zeta_n(x)\,.$$

De même $\psi_n = \psi_h(x_n)$ sera l'approximation de $\psi(x_n)$, c.à.d. $(\psi_n)_{n=1}^N$ est la solution du système linéaire (6.19).
Le premier théorème nous donne l'erreur d'interpolation

Theorem 6.3 *Soit une fonction $u \in H^2(a, b)$ et $u_h \in \mathcal{V}_h$ son interpolée. Alors il existe une constante $c > 0$, telle que pour tout $h > 0$ on a*

$$||u - u_h||_{L^2(a,b)} \le ch||u' - u_h'||_{L^2(a,b)}\,, \quad ||u' - u_h'||_{L^2(a,b)} \le ch||u''||_{L^2(a,b)}\,.$$

Theorem 6.4 *Soient $\psi \in \mathcal{V}$ la solution unique du problème continu (6.13) et $\psi_h \in \mathcal{V}_h$ la solution unique du problème discret (6.17). Alors on a l'estimation d'erreur*

$$||\psi - \psi_h||_{\mathcal{V}} \leq chk(1 + hk)\,.$$

Proof: A partir des formulations variationnelles

$$b(\psi, \theta) = L(\theta)\,, \quad \forall \theta \in \mathcal{V} \quad \text{et} \quad b(\psi_h, \theta_h) = L(\theta_h)\,, \quad \forall \theta_h \in \mathcal{V}_h\,,$$

on a $b(\psi - \psi_h, \theta_h) = 0$ pour tout $\theta_h \in \mathcal{V}_h$, qui mène à $b(\psi - \psi_h, \psi_I - \psi_h) = 0$, vu que $\psi_I - \psi_h \in \mathcal{V}_h$. Cela signifie

$$b(\psi - \psi_h, \psi - \psi_h) = b(\psi - \psi_h, \psi - \psi_I)\,.$$

En notant $e := \psi - \psi_h$, cette équation s'écrit $b(e, e) = b(e, \psi - \psi_I)$, ou

$$\frac{1}{k^2}||e'||^2_{L^2} - ||e||^2_{L^2} - \frac{\mathbf{i}}{k}|e_a|^2 - \frac{\mathbf{i}}{k}|e_b|^2 = \frac{1}{k^2}\int_a^b e'(\overline{\psi} - \overline{\psi}_I)'dx - \int_a^b e(\overline{\psi} - \overline{\psi}_I)dx\,.$$

En prenant la partie réelle de cette équation on déduit

$$\frac{1}{k^2}||e'||^2_{L^2} = ||e||^2_{L^2} + \frac{1}{k^2}\mathcal{R}e\left(\int_a^b e'(\overline{\psi} - \overline{\psi}_I)'dx\right) - \mathcal{R}e\left(\int_a^b e(\overline{\psi} - \overline{\psi}_I)dx\right)\,,$$

ce qui implique

$$\frac{1}{k^2}||e'||^2_{L^2} \leq ||e||^2_{L^2} + \frac{1}{k^2}||e'||_{L^2}||(\psi - \psi_I)'||_{L^2} + ||e||_{L^2}||\psi - \psi_I||_{L^2}\,.$$

Avec le théorème d'interpolation et le théorème 6.1 on a donc l'estimation

$$\begin{aligned} \tfrac{1}{k^2}||e'||^2_{L^2} &\leq ||e||^2_{L^2} + ch\tfrac{1}{k^2}||e'||_{L^2}||\psi''||_{L^2} + ch^2||e||_{L^2}||\psi''||_{L^2} \\ &\leq ||e||^2_{L^2} + ch||e'||_{L^2} + ch^2k^2||e||_{L^2}\,. \end{aligned} \tag{6.21}$$

On va essayer maintenant d'avoir une estimation de $||e||_{L^2}$. Pour cela on se rend compte facilement (pareil comme pour l'existence et l'unicité du problème (6.13)) que le problème

$$b(v, z) = (v, e)\,, \quad \forall v \in \mathcal{V}\,,$$

a une unique solution $z \in W^{2,\infty}(a, b)$, satisfaisant les mêmes estimations que (6.12). Comme $e \in \mathcal{V}$, on a $b(e, z) = (e, e)$. Mais en même temps on a aussi $b(e, \theta_h) = 0$ pour tout $\theta_h \in \mathcal{V}_h$, ce qui implique $b(e, z_I) = 0$, où z_I est l'interpolée de z dans $\mathcal{V}_h$. En tout on a

$$(e, e) = b(e, z - z_I)\,,$$

d'où on déduit

$$||e||^2_{L^2} \leq \frac{1}{k^2}||e'||_{L^2}||(z - z_I)'||_{L^2} + ||e||_{L^2}||z - z_I||_{L^2}\,.$$

Avec le théorème d'interpolation on trouve l'estimation

$$||e||^2_{L^2} \leq ch||e'||_{L^2} + ch^2k^2||e||_{L^2}\,. \tag{6.22}$$

En insérant cette estimation dans (6.21), on trouve

$$\frac{1}{k^2}||e'||_{L^2}^2 \leq ch||e'||_{L^2} + ch^2k^2||e||_{L^2} \,. \tag{6.23}$$

L'addition de ces deux estimations mène à

$$\begin{aligned} ||e||_{L^2}^2 + \tfrac{1}{k^2}||e'||_{L^2}^2 &\leq ch||e'||_{L^2} + ch^2k^2||e||_{L^2} \\ &\leq ch^2k^2 + \tfrac{1}{2k^2}||e'||_{L^2}^2 + ch^4k^4 + \tfrac{1}{2}||e||_{L^2}^2 \,, \end{aligned}$$

où on a utilisé l'inégalité de Young. Donc finalement on retrouve

$$||e||_{L^2}^2 + \frac{1}{k^2}||e'||_{L^2}^2 \leq ch^2k^2 + ch^4k^4 \,.$$

$\blacksquare$

Comme le montre le théorème 6.4 le choix du pas de discrétisation est fortement lié à la valeur du vecteur d'onde k. Pour des ondes fortement oscillantes ($k >> 1$), on est obligé de choisir un pas $h > 0$ très petit, tel que $hk(1+hk) \leq \epsilon$, où $\epsilon > 0$ est la tolérence désirée. Cela implique l'utilisation d'un maillage très fin, qui est synonyme à de grands espaces mémoires et de grands temps de calculs. Le choix des éléments finis $\mathcal{P}_1$ pour la résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire n'est donc pas astucieux.
A l'heure actuelle, des travaux de recherche se concentrent sur le développement des méthodes numériques efficaces et rapides pour la résolution de l'équation de Schrödinger stationnaire, en utilisant aussi des éléments finis, par contre....

References

[1] H. Brezis, *Analyse fonctionnelle*

[2] T. Cazenave, *Semilinear Schrödinger equations*

[3] T. Cazenave, A. Haraux *Introduction aux problèmes d'évolution semi-linéaires*

[4] R. Dautray, J.-L. Lions, *Analyse mathématique et calcul scientifique*

[5] A. Pazy, *Semigroups of linear operators and applications to partial differential equations*