

# Projet de recherche

Ce projet de recherche s'articule autour de deux thèmes différents: d'une part le phénomène des roll-waves en hydraulique, d'autre part la localisation d'énergie dans des systèmes discrets (breathers). Les principales techniques utilisées sont issues de la théorie des systèmes hyperboliques (notions de chocs visqueux, entropiques,...) et de la théorie des systèmes dynamiques (réduction à une variété invariante, théorèmes de bifurcation locale,...).

## 1 Roll-waves pour les équations de Saint Venant

On rappelle que les roll-waves sont des instabilités hydrodynamiques très connues apparaissant dans des rivières (naturelles ou artificielles) de faible pente en présence d'une certaine rugosité due aux bords et au fond. Les applications sont nombreuses: compréhension des crues dans des écoulements fluviaux, conception de constructions artificielles comme les barrages. On utilise pour décrire ces écoulements **le modèle de Saint Venant** auquel on rajoute un terme de friction

$$\begin{aligned} h_t + (hu)_x &= 0, \\ (hu)_t + (g \cos(\theta) \frac{h^2}{2} + hu^2)_x &= gh \sin(\theta) - c_f u^2, \end{aligned} \quad (1)$$

pour un canal incliné à fond plat:  $\theta$  désigne l'inclinaison et  $c_f$  représente un coefficient de frottement dû aux fond. Le système obtenu est hyperbolique avec un terme source. Si la théorie des systèmes hyperboliques est très développée, il y a en revanche peu d'études sur ces systèmes avec terme source hormis dans le cas scalaire où on a des propriétés du type Poincaré Bendixson. L'équipe HYDRE de l'IMFT (O. Thual, D. Dartus,...) a mené plusieurs études expérimentales et numériques sur ce sujet (écoulements à fond périodique, écoulements 2D) et le but est d'interagir avec ce groupe pour aborder ces problèmes d'un point de vue mathématique. Un premier contact avec O. Thual a déjà eu lieu pour étudier l'existence de roll-waves pour les écoulements à fond périodique. Un certain nombre de progrès a été accompli dans l'étude de ce système: analyse pour des petites perturbations visqueuses du modèle, stabilité linéaire d'une certaine classe de roll-waves, existence de roll-waves pour des fond non plats. La suite de l'étude se scinde en deux parties.

### 1.1 Modèle de Saint Venant non visqueux

Un résultat classique (R. Dressler, *Mathematical solution of the problem of Roll-Waves in Inclined Open Channels*, CPAM (1949), p. 149-190) établit l'existence de roll-waves discontinues solutions des équations de Saint Venant 1D. Dans la thèse, on a montré la stabilité linéaire de ces solutions: la prochaine étape est donc l'étude de la stabilité non linéaire. Dans les chapitres 2 et 3 de la thèse, on a mis en place un formalisme permettant de traiter les perturbations de roll-waves en les supposant régulières par morceaux avec des discontinuités proches de celles de la roll-wave de base. On a établi la stabilité linéaire des roll-waves et le chapitre 3 fournit des outils permettant de traiter des non linéarités de petites amplitudes: en utilisant ces techniques, on étudiera la stabilité non linéaire des roll-waves de Dressler.

La deuxième piste retenue est celle de la généralisation de ces roll-waves pour des écoulements 2D (voir la thèse de J.P.Vila pour un modèle standard de Saint Venant 2D). On abordera ce problème de deux points de vue: d'abord en étudiant des roll-waves avec des discontinuités situées sur des plans puis pour des zones de discontinuités courbes. Pour les discontinuités "planes", l'idée principale est de mettre en évidence un phénomène de rupture de dimension. C'est un phénomène bien connu pour les équations KdV/ KP: en effet l'équation KdV possède un soliton qui, translaté dans la direction transverse à la direction de propagation fournit une solution de base de KP. On peut montrer que KP possède des solutions modulées périodiquement dans la direction transverse. M. Groves et M. Haragus ont démontré par des théorèmes de bifurcation ce résultat pour les ondes type gravité/capillarité ( M.D.Groves, M. Haragus et S.M.Sun, *A dimension-breaking phenomenon in the theory of steady gravity-capillary water waves. Recent developments in the mathematical theory of water waves (Oberwolfach, 2001)*, R. Soc. Lond. Philos. Trans. Ser. A Math. Phys. Eng. Sci. 360 (2002), no. 1799, p. 2189-2243.). Nous chercherons à savoir si ces techniques s'appliquent à notre contexte en utilisant les roll-waves de Dressler comme solution de base. Une difficulté supplémentaire sera de gérer les conditions de saut. Pour des fronts de discontinuités non plans, on s'inspirera des méthodes utilisées pour étudier l'existence et la stabilité multidimensionnels de chocs plans (cf Zumbrun, Métivier,..) dans le but de montrer l'existence de roll-waves avec des fronts presque plans.

J'ai actuellement des contacts avec O. Thual pour mener en parallèle une étude mathématique et une étude numérique voire expérimentale des roll-waves dans des écoulements 2D. En effet l'IMFT possède des codes de calculs très précis pour les écoulements 2D et on peut envisager à plus long terme des études numériques de stabilité des solutions obtenues.

## 1.2 Modèle de Saint Venant avec petite viscosité

On a déjà démontré l'existence de roll-waves continues proches des roll-waves de Dressler. Une question naturelle est celle de leur stabilité linéaire et non linéaire. Il existe un formalisme permettant d'étudier des travelling waves périodiques et de donner quelques informations sur le spectre (J.Alexander, R.Gardner et C.Jones, *A topological invariant arising in the stability analysis of travelling waves.*, J. Reine Angew. Math. 410 (1990), p. 167-212). Dans notre cas, on possède grâce aux théorèmes de Fenichel des informations très précises sur le profil des roll-waves continues. Le but est de faire le lien entre la stabilité des roll-waves visqueuses et la stabilité des roll-waves de Dressler (étudiée au chapitre 2). Ce type d'étude a déjà été réalisée pour étudier la stabilité de chocs visqueux (K. Zumbrun et D. Serre, *Viscous and inviscid stability of multidimensional planar shock fronts.*, Indiana Univ. Math. J. 48 (1999), no. 3, p. 937-992). En réalisant une analyse de type Fenichel, on fera le lien entre le cas visqueux et le cas non visqueux pour étudier la stabilité linéaire des roll-waves visqueuses: on exhibera une dynamique lente correspondant à la linéarisation des équations de Saint Venant au voisinage de la roll-wave de Dressler et une dynamique rapide décrite essentiellement par les conditions de Rankine-Hugoniot linéarisées au voisinage des roll-waves de Dressler. On abordera également le problème de la stabilité non linéaire des roll-waves continues.

Enfin, à partir des solutions de type roll-waves non visqueuses obtenues dans le cas 2D et avec une analyse de type Fenichel, on étudiera la généralisation des roll-waves continues au cas 2D.

## 2 Breathers dans des systèmes hamiltoniens discrets

Les breathers sont des oscillations périodiques localisées spatialement apparaissant dans des réseaux non linéaires discrets. Ce phénomène de localisation est important en tant que mécanisme possible de stockage et de transport d'énergie dans des chaînes homogènes. Il a donc de nombreuses applications en physique: pour étudier des oscillations localisées dans des cristaux ioniques, des systèmes avec liaisons hydrogène comme la glace ou encore, pour expliquer certains échanges d'énergie dans les chaînes d'ADN (dans les phases de dénaturation et de réplication) ou dans les protéines.

### 2.1 Nouvelles bifurcations et analyse de stabilité

Dans la thèse, on a montré essentiellement l'existence de breathers discrets de petite amplitude dans des systèmes FPU diatomiques pour des rapports de masses arbitraires et exhibé leur géométrie. On a utilisé une technique de réduction à une variété centrale (ici de dimension 2) pour des mappings en dimension infinie. On s'est restreint à des solutions paires et il serait intéressant d'étudier quelles nouvelles bifurcations on obtient en considérant aussi des fonctions impaires. Une autre étude, beaucoup plus difficile (et donc qui sera abordée plus tard), serait d'analyser le système lorsque le linéarisé possède une paire de valeurs propres conjuguées sur le cercle unité et une paire de valeurs propres collisionnant en 1 ou  $-1$ . Eric Lombardi a étudié ce type de bifurcation pour des champs de vecteurs en utilisant des intégrales oscillantes (E. Lombardi, *Oscillatory integrals and phenomena beyond all algebraic orders with applications to homoclinic orbits in reversible systems.*, Lecture notes in mathematics, (2000)): il faut ici reprendre l'étude en utilisant cette fois des séries oscillantes.

Une autre piste intéressante concerne l'étude de la stabilité linéaire et non linéaire des solutions breathers obtenues. Aubry a montré des propriétés très précises sur le spectre du linéarisé (au voisinage d'un breather) et montré la stabilité de breathers obtenus dans la limite anticontinue (Ref: S. Aubry, *Breathers in nonlinear lattices: existence, stability and quantization*, Physica D 103, (1997), p. 201-250). Ce résultat de stabilité ne s'applique pas pour les breathers obtenus par réduction à une variété centrale. Cependant, il existe des études numériques sur la stabilité linéaire de ce type de breathers aussi bien dans le cas monoatomique (A.J. Sievers and J.B. Page, *Unusual Anharmonic Local Mode Systems*, Dynamical Properties of Solids 7, Ch. 3,(1995), p. 137-255.) que dans le cas diatomique (S.A. Kiselev, S.R. Bickham and A.J. Sievers, *Anharmonic gap mode in a one-dimensional diatomic lattice with nearest-neighbor Born-Mayer-Coulomb potentials and its interaction with a mass-defect impurity*, Phys Rev B 50 (1994), number 13, p. 9135). Ces études montrent un lien étroit entre la géométrie du breather et sa stabilité. On commencera l'étude par l'analyse de stabilité linéaire des breathers de petite amplitude obtenus par G. James dans le cas monoatomique avant de traiter le cas diatomique. On s'inspirera pour cette étude des méthodes mises en place par Friesecke et Pego pour étudier la stabilité des ondes progressives (de petite amplitude) dans les réseaux FPU (G. Friesecke et R.L. Pego, *Solitary waves on FPU lattices. II. Linear implies nonlinear stability.*, Nonlinearity 15 (2002)).

### 2.2 Breathers dans des molécules simples

La localisation d'énergie vibrationnelle dans des molécules simples est un phénomène qui est observé expérimentalement mais mal compris (M. Halonen, L. Halonen, H. Burger, W. Jerzembeck, *Vibrational energy localization in*

the stretching vibrational  $(1000A_1/F_2)/(2000A_1/F_2)$  and  $(3000A_1/F_2)$  band systems in  $SnD_4$ , J. Chem. Phys. 108, (1998), p. 9285-9290). Deux questions se posent: quelles sont les conditions d'existence des modes localisés (vibrations localisées au voisinage d'une liaison) et comment peut on les exciter?

Dans des molécules tétraédriques qui sont étudiées en spectroscopie infra rouge, l'existence des modes localisés est liée au rapport de masse entre l'atome central et les atomes externes qui lui sont liés. En effet, un atome lourd étant pratiquement immobile, il transmettra peu aux autres liaisons l'énergie vibrationnelle d'une liaison excitée. Cette observation est en accord avec les théorèmes d'existence obtenus par Aubry et MacKay (*Proof of existence of breathers for time-reversible or Hamiltonian networks of weakly coupled oscillators*, Nonlinearity 7 (1994), p. 1623-1643). La compréhension quantitative du seuil de stabilité est la première question qu'on étudiera. La molécule étant relativement simple, on doit pouvoir trouver des bornes d'existence.

La question de l'excitation des modes localisés se pose car la longueur d'onde des infra rouges est bien plus grande que la dimension des molécules et on pourrait s'attendre à une excitation homogène de toutes les liaisons. Même en cas de localisation, on ne saurait la détecter du fait du manque de résolution spatiale. La compréhension de la détection a été faite et repose sur l'idée de rupture de dimension. Si une liaison est plus excitée que les autres, sa longueur moyenne est différente et la molécule perd sa symétrie: des modes restés inactifs dans les infra rouges (à cause de la symétrie) deviennent actifs. La question de leur création reste cependant posée.

On commencera l'étude par le cas d'une molécule linéaire  $A - B - A$  constituée de deux atomes légers (de masse 1) et un atome lourd de masse  $M > 1$ . L'Hamiltonien pour une molécule triatomique linéaire s'écrit

$$H = \frac{\dot{q}_1^2}{2} + M \frac{\dot{Q}^2}{2} + \frac{\dot{q}_2^2}{2} + V(Q - q_1) + V(q_2 - Q),$$

où  $q_1, Q, q_2$  décrivent les déplacements des atomes et  $V$  est un potentiel d'interaction. L'existence d'un mode localisé peut être obtenu via le théorème des fonctions implicites dans la limite  $M \rightarrow \infty$ . On déterminera dans un premier temps une borne d'existence pour ces solutions localisées puis on étudiera leur stabilité lorsque  $M$  décroît: des modes au départ stables deviennent instables lorsque  $M$  dépasse un certain seuil. On analysera ce phénomène numériquement et analytiquement au voisinage de certaines fréquences critiques (dans le cas de résonance paramétrique ou non linéaire d'ordre 3).

On abordera alors le cas d'une molécule tétraédrique (4 atomes légers de masse 1 et un atome central de masse  $M > 1$ ). Un modèle est donné par l'Hamiltonien

$$H = M \frac{\dot{X}^2}{2} + \sum_{i=1..4} \frac{\dot{x}_i^2}{2} + \sum_{i=1..4} V(\|X - x_i\|) + \gamma \sum_k W(\theta_k)$$

où  $x_i, X$  désigne le déplacement des atomes, les  $\theta_k$  correspondent aux angles entre les liaisons et  $V, W$  sont des potentiels d'interaction. On étudiera d'abord l'existence de modes localisés. Pour cela, on utilisera un théorème des fonctions implicites. Il faut tenir compte de la dégénérescence due à l'invariance par rotation mais cela se traite au moyen d'une méthode standard de Lyapounov Schmidt. On étudiera alors l'instabilité de la solution localisée lorsque  $M$  diminue en calculant numériquement son spectre de Floquet.

Pour se rapprocher des vibrations observées par spectroscopie, on considèrera des solutions dont le moment angulaire  $J = MX \wedge \dot{X} + \sum_i x_i \wedge \dot{x}_i$  est non nul. Plus précisément, on essaie de voir si il existe des solutions qui apparaissent localisées lorsqu'on se place dans un repère tournant (autour d'un certain axe de symétrie). Ce problème a été résolu dans le cas plus simple des équilibre relatifs (une molécule tourne à vitesse constante sans déformation) pour  $J$  petit (J.A.Montaldi et R.M.Roberts, *Relative equilibria of molecules*, J. Nonlinear Sci. 9 (1999), p. 53-88). Nous étudierons si les méthodes de bifurcations locales utilisées s'appliquent à notre contexte.

Je suis en contact avec Guillaume James (INSA Toulouse) pour cette partie de l'étude qui fait partie intégrante d'un projet d'ACI (nouvelles interfaces des mathématiques).