Perspectives

Le thème fédérateur de mes travaux de recherche est donc l'étude des excitations non linéaires localisées (existence, stabilité, interactions,...), et de leur rôle sur les propriétés du système physique étudié (diffusion d'atomes sur des surfaces, instabilités en hydrodynamique pour des expériences de laboratoire ou dans l'océan,...). Les méthodes utilisées alternent entre formalisme mathématique exact et simulations numériques poussées. C'est par l'utilisation la plus judicieuse possible de ces deux outils que nous avons pu progresser dans la compréhension des différents problèmes abordés. Dans l'avenir, j'envisage de poursuivre cette double approche et j'ai actuellement les projets suivants.

Dans l'esprit du thème A, avec Peter Holdworth et Stefano Ruffo, nous avons commencé depuis quelques mois une activité sur la dynamique non linéaire et la mécanique statistique d'un réseau unidimensionnel, mais avec des interactions à longue portée [1]. Nous étudions plus particulièrement la dynamique du modèle XY antiferromagnétique infiniment connecté (modèle de champ moyen de taille finie). Nous avons remarqué une différence frappante entre les résultats obtenus par les méthodes déterministes (dynamique moléculaire) et les méthodes stochastiques (Monte Carlo). A basse énergie, nous observons dans le premier cas la formation de deux excitations localisées alors que la méthode de Monte Carlo produit une distribution homogène d'orientation de spin. Nous voulons établir l'origine de cette instabilité et la caractériser. Nous souhaitons également comprendre la brisure du principe d'ergodicité à l'origine des différences observées dans les ensembles canonique et microcanonique. En effet, même si l'on sait que ce sont les interactions à longue portée qui en sont à l'origine, l'étude préliminaire des différents états fondamentaux ne nous a permis d'élucider que partiellement la structure de l'espace des phases.

Dans la continuité de mes activités antérieures, relatives au thème D, j'envisage de travailler également sur plusieurs prolongations naturelles. La première est de mettre en œuvre une expérience simple de réflexion des ondes internes, de manière à utiliser de façon judicieuse une géométrie axisymétrique. Cette expérience est actuellement en voie d'élaboration. La seconde voie de recherche, analytique, consiste à traiter de manière plus propre et plus précise les effets visqueux, lors de la réflexion de l'onde interne. Dans l'étude préliminaire que nous avons menée jusqu'ici, nous avons considéré que la viscosité était faible mais il est clair qu'un traitement plus explicite des effets visqueux est à mettre en œuvre. A plus longue échéance, je souhaiterais considérer la réflexion d'ondes internes en tenant compte des effets de rotation. Des expériences [2] et travaux théoriques [3] récents ont en effet mis en évidence leurs effets importants sur la création d'un fort courant longitudinal ; celui-ci a de fortes répercussions sur les phénomènes de mélange à l'origine de notre étude. Cela implique un passage à une description qui tient compte des effets tridimensionnels.

J'ai par ailleurs découvert récemment les travaux de Michel Rieutord sur les modes d'oscillation des fluides en rotation. Lorsque le fluide est enfermé dans un récipient de dimensions finies, les solutions de ce problème sont singulières et, par exemple, le champ de vitesse diverge le long des cycles limites dessinés par les lignes caractéristiques de l'équation. Grâce à une analyse numérique, Rieutord a montré [4] que la viscosité permet de régulariser ces singularités et de les cacher au sein de couches de cisaillement imbriquées. Une analyse rapide semble indiquer que le type d'approche que nous avons développée, pour la réflexion des ondes internes (partie D), devrait pouvoir s'adapter ; outre son caractère analytique, elle aurait le grand avantage de pouvoir inclure les effets non linéaires ainsi que les effets transitoires, totalement négligés jusqu'à présent. Ce problème est initié par l'étude géophysique de la dynamique du cœur liquide de la terre ou de l'atmosphère profonde de Jupiter mais est également très proche de l'expérience menée au laboratoire par Joël Sommeria et al [5]. Ce travail serait donc aussi relié au problème d'origine de la partie C, puisque dans l'expérience de mise en évidence d'un attracteur d'ondes internes, les solutions sont infiniment dégénérées en l'absence de viscosité et c'est cette dernière qui sélectionne la bonne solution.

Références

[1] M. Antoni & S. Ruffo, Clustering and relaxation in Hamiltonian long-range dynamics, *Physical Review E* **52**, 2361-2374 (1995).

[2] C. C. Eriksen, Internal wave reflection and mixing at Fieberling Guyot, *Journal of Geophysical Research* **103**, 2977-2994 (1998).

[3] S. A. Thorpe, The effects of rotation on the non linear reflection of internal waves from a slope, soumis au *Journal of Physical Oceanography* (1999).

[4] M. Rieutord & L. Valdettaro, Inertial waves in a rotating spherical shell, *Journal of Fluid Mechanics* **341**, 77-99(1997).

[5] L. R. M. Maas, D. Benielli, J. Sommeria & F.-P. A. Lam, Observation of an internal wave attractor in a confined stably stratified fluid, *Nature* **388**, 557-561 (1997).

Liste des Publications

[31] T. Dauxois, E. E. Mac Phee & W. R. Young, Near critical reflection of internal waves in a stably stratified fluid, soumis (Février 1999).

[30] C. Laroche, T. Dauxois & M. Peyrard, Experimental study of the soliton depinning hierarchy, soumis (Octobre 1998).

[29] T. Dauxois & W. R. Young, Near critical reflection of internal waves, *Journal of Fluid Mechanics* **390**, 271-295 (1999).

[28] T. Dauxois, S. Ruffo & A. Torcini, Analytical estimation of the maximal Lyapunov exponent in oscillator chains, *Journal de Physique IV* **8**, Pr 6, 147-156 (1998).

[27] T. Cretegny, T. Dauxois, S. Ruffo & A. Torcini, Localization and equipartition of energy in the β-FPU chain : chaotic breathers, *Physica D* **121**, 109-126 (1998).

[26] O. M. Braun, T. Dauxois, M. V. Paliy, M. Peyrard & B. Hu, Kinks motion and underdamped dc-driven dynamics of atomic monolayers, *Physica D* **123**, 357-367 (1998).

[25] T. Dauxois, S. Ruffo & A. Torcini, Modulational estimate for the maximal Lyapunov exponent in Fermi-Pasta-Ulam chain, *Physical Review E* **56**, R6229-R6232 (1997).

[24] M. Paliy, O. M. Braun, T. Dauxois & B. Hu, Dynamical phase diagram of the dc-driven underdamped Frenkel-Kontorova chain, *Physical Review E* **56**, 4025-4030 (1997).

[23] O. M. Braun, T. Dauxois & M. Peyrard, Friction in a thin commensurate contact, *Physical Review B* **56**, 4987-4995 (1997).

[22] I. Daumont, T. Dauxois & M. Peyrard, Modulational instability : first step toward energy localization in nonlinear lattices, *Nonlinearity*, **10**, 617-630 (1997).

[21] O. M. Braun, T. Dauxois, M. V. Paliy & M. Peyrard, Nonlinear mobility of the generalized Frenkel-Kontorova model, *Physical Review E* **55**, 3598-3612 (1997).

[20] F. Russell, Y. Zolotaryuk, J. Eilbeck & T. Dauxois, Moving breathers in a chain of magnetic pendulums, *Physical Review B* **55**, 6304-6308 (1997).

[19] O. M. Braun, T. Dauxois, M.V. Paliy & M. Peyrard, Dynamical transitions in correlated driven diffusion in a periodic potential, *Physical Review Letters* **78**, 1295-1298 (1997).

[18] O. M. Braun, T. Dauxois & M. Peyrard, Solitonic-exchange mechanism of surface diffusion, *Physical Review B* **54**, 313-320 (1996).

[17] O. M. Braun, T. Dauxois, M. V. Paliy & M. Peyrard, Mobility and diffusivity in a generalized Frenkel-Kontorova model, *Physical Review B* **54**, 321-332 (1996).

[16] M. Peyrard & T. Dauxois, DNA melting : a phase transition in one dimension, *Mathe-*

matics and Computer in Simulations **40**, 305-318 (1996).

[15] T. Dauxois, S. Fauve & L. Tuckerman, Stability of periodic arrays of vortices, *Physics of Fluids*, **8**, 487-495 (1996).

[14] S. Ciliberto, T. Dauxois & M. Droz, *Physics of Complexity*, Editions Frontières (1995).

[13] T. Dauxois & M. Peyrard, Entropy driven transition in a one dimensional system, *Physical Review E* **51**, 4027-4040 (1995).

[12] G. Gaeta, C. Reiss, M. Peyrard & T. Dauxois, Simple models of nonlinear DNA dynamics, *Rivista del Nuovo Cimento* **17**, 1-48 (1994).

[11] T. Dauxois, Nonlinear stability of counter-rotating vortices, *Physics of Fluids* **6**, 1625-1627 (1994).

[10] T. Dauxois, M. Peyrard & C. R. Willis, Discreteness effects on the formation and propagation of breathers in nonlinear Klein-Gordon equations, *Physical Review E* **48**, 4768-4778 (1993).

[9] M. Peyrard, T. Dauxois, H. Hoyet & C. R. Willis, Biomolecular dynamics of DNA : statistical mechanics and dynamical model, *Physica D* **68**, 104-115 (1993).

[8] T. Dauxois, M. Peyrard & A. R. Bishop, Thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation, *Physica D* **66**, 35-42 (1993).

[7] T. Dauxois & M. Peyrard, Energy localization in a nonlinear lattices, *Physical Review Letters* **70**, 3935-3938 (1993).

[6] T. Dauxois, *Dynamique Non Linéaire et Mécanique Statistique d'un Modèle d'ADN*, Thèse de doctorat, Université de Bourgogne (1993).

[5] T. Dauxois, M. Peyrard & A. R. Bishop, Entropy driven DNA denaturation, *Physical Review E* **47**, R44-R47 (1993).

[4] T. Dauxois, M. Peyrard & A. R. Bishop, Dynamics and thermodynamics of a nonlinear model for DNA denaturation, *Physical Review E* **47**, 684-695 (1993).

[3] M. Peyrard, T.Dauxois & H.Hoyet, Dynamics of DNA melting, *Nanobiology* **1**, 313-324 (1992).

[2] T. Dauxois, M. Peyrard & C. R. Willis, Localized breather-like solution in a discrete Klein-Gordon model and application to DNA, *Physica D* **57**, 267-282 (1992).

[1] T. Dauxois, Dynamics of breather modes in a nonlinear "helicoidal" model of DNA, *Physics Letters A* **159**, 390-395 (1991).

Résumé

Conjuguant formalisme mathématique exact et simulations numériques, le thème fédérateur de mes principaux travaux de recherche est l'étude des excitations non linéaires localisées (existence et stabilité) et de leur rôle sur les propriétés du système physique étudié (diffusion d'atomes sur des surfaces, instabilités en hydrodynamique pour des expériences de laboratoire ou dans l'océan,...).

Nous avons tout d'abord étudié le mécanisme d'instabilité modulationnelle dans les réseaux, dans le cadre du modèle de Fermi-Pasta-Ulam (FPU), et nous avons montré que la discrétisation modifie de manière importante les conditions de stabilité. Nous nous sommes intéressés plus particulièrement à la transition vers l'équipartition de l'énergie lorsque l'on part du mode de plus petite longueur d'onde. Au-dessus d'un seuil énergétique, que nous avons calculé analytiquement, ce mode est détruit par instabilité modulationnelle et nous avons mis en évidence la création d'excitations localisées de type breathers, mais chaotiques ; ceux-ci sont capables de collecter de manière très efficace l'énergie dans le réseau. Nous avons expliqué ces caractéristiques en analysant la dynamique de breathers exacts perturbés dans la chaîne FPU. En particulier, nous avons montré une relation étroite entre le spectre de Lyapunov des breathers chaotiques et le spectre de Floquet des breathers exacts. Nous avons expliqué l'émergence de breathers chaotiques par l'absorption des phonons de haute fréquence. Par ailleurs, nous avons mis en évidence pour la première fois leur caractère métastable ; leur durée de vie est très étroitement liée au temps nécessaire pour rejoindre l'équipartition de l'énergie, question fondamentale à l'origine de l'étude de cette équation modèle. Nous avons également dégagé une méthode simple pour obtenir une très bonne estimation *analytique* de l'exposant de Lyapunov maximal. La méthode est fondée sur le calcul de la valeur moyenne des taux de croissance des modes instables par instabilité modulationnelle.

Par ailleurs, nous nous sommes intéressés à différents processus de diffusion de particules couplées sur une surface. Des simulations numériques récentes de dynamique moléculaire, où des atomes isolés sont superposés à une monocouche, ont mis en évidence un phénomène de diffusion anormale. Dans un premier temps, nous avons modélisé cet effet en montrant que sous l'effet d'une activation thermique des atomes peuvent passer dans la première couche pour y former un "défaut étendu" très mobile, d'où une diffusion anormale. Notre modèle permet de rendre compte de la structure et de l'énergie de formation de ce défaut et d'étudier le mécanisme de sa mobilité. Par la suite, nous nous sommes intéressés aux variations de la mobilité et de la diffusivité en fonction du taux de couverture de la surface. Ces études mettent en évidence le rôle important joué par les valeurs commensurables simples du taux de couverture. Enfin, nous avons étudié la mobilité d'une chaîne de particules couplées. D'une part, au lieu d'une unique transition comme dans le cas de la diffusion d'une seule particule, on observe une série de transitions dynamiques hors d'équilibre, et l'hystérésis persiste jusqu'à des températures élevées. D'autre part, la diffusion fait apparaître des phénomènes qui ressemblent à un embouteillage à l'échelle atomique. Nous avons analysé cet effet en termes

de modes non linéaires collectifs du type kinks ou superkinks, i.e. en termes de solitons dans un réseau de quasi-solitons. Ce traitement donne une bonne description quantitative du phénomène observé. Des études préliminaires d'application de ces concepts aux problèmes de friction ont également donné des résultats qualitatifs encourageants.

Nous avons en outre étudié la stabilité de certaines solutions localisées de l'équation d'Euler (famille de Mallier-Maslowe) ; en utilisant la méthode de stabilité non linéaire des Casimirs, nous avons pu déduire les conditions explicites de stabilité des allées de vortex contra-rotatifs. Nous avons poursuivi ce travail en étudiant la stabilité de solutions stationnaires de l'équation de Navier-Stokes dont la topologie des lignes de courant est proche de celles de l'équation d'Euler bidimensionnelle (famille de Liouville ou famille de Stuart). Ensuite, en utilisant un code numérique, nous avons déterminé l'effet de la viscosité et d'un forçage extérieur. Les résultats ont été alors comparés à une expérience où des vortex contra-rotatifs engendrés électromagnétiquement sont instables au dessus d'un courant électrique critique et conduisent à l'apparition de vortex corotatifs : nous avons montré le rôle essentiel de la friction au fond de la boîte, modélisée dans Navier-Stokes par un terme phénoménologique de friction linéaire. Ce terme est désormais pris en compte dans l'interprétation des expériences.

Enfin, nous nous sommes intéressés à certaines expériences récentes qui ont suggéré que les ondes internes de l'océan pouvaient fournir une source d'énergie suffisante pour créer un fort mélange près des fonds marins pentus, et ainsi participer de manière importante au mélange vertical. Lorsqu'une onde interne se réfléchit, son angle de propagation par rapport à l'horizontale est conservé, ce qui conduit à une augmentation de la densité d'énergie de l'onde réfléchie. La situation la plus propice pour le mélange correspond au cas où l'angle de propagation de l'onde incidente est approximativement égal à l'angle de la pente. Pour cet angle critique, la théorie linéaire prévoit une amplitude infinie pour l'onde réfléchie qui reste localisée près du bord. Il est donc essentiel d'avoir recours à des théories non linéaires. Nous avons donc choisi des méthodes analytiques (échelles multiples et raccordements asymptotiques) pour résoudre ce problème. Cette approche se révèle tout à fait appropriée et nous a permis de lever cette singularité. Nous avons pu, pour la première fois, comprendre les effets de la non linéarité, de la viscosité ainsi que les effets transitoires près de la paroi.