Etude qualitative de méthodes de splitting pour l'équation de Schrödinger linéaire en dynamique moléculaire

Guillaume Dujardin et Erwan Faou

INRIA Rennes, Campus de Beaulieu, Rennes, France

L'équation de Schrödinger avec potentiel

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H\psi(x,t), \qquad \psi(x,0) = \psi_0(x).$$

- $H = T + V$
- $T = -\sum_{k=1}^{N} \frac{1}{2m_k}\Delta_{x_k}$ et $V = V(x)$
- $x \in \mathbb{T}^d$ ($d = 1$), $N = 1$ et $m_1 = \frac{1}{2}$.
- V réelle sur $\mathbb{T}$ et analytique. ψ_0 analytique.

Propriétés de conservation : si $H = -\Delta + V$

$$\forall\, s > 0, \quad \langle\psi(t)|H^s|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|H^s|\psi(0)\rangle$$

$s = 2$: énergie. $s = 0$: norme L^2.

Estimations analytiques

- V analytique : $|\widehat{V}_n| \leq M_V e^{-\rho_V |n|}$ ($n \in \mathbb{Z}$).
- Si ψ est une fonction analytique, alors (avec $D = \sqrt{-\Delta}$) pour $\rho \geq 0$,

$$\|\psi\|_\rho := \|e^{\rho D}\psi\|_{L^2} = \|(e^{\rho|n|}\widehat{\psi}_n)_{n\in\mathbb{Z}}\|_{\ell^2}$$

- Pour un opérateur et $\mu \geq 0$, on note

$$\|S\|_\mu = \sup_{n,m} |S_{n,m}| e^{+\mu|n-m|}$$

On a

$$\|S\psi\|_{L^2} \leq C_{\rho,\mu} \|S\|_\mu \|\psi\|_\rho$$

Estimations analytiques pour la solution exacte

Théorème 1 *Si V est suffisamment petit, alors il existe des constantes $c > 0$ et $C > 0$ telles que*

$$\forall\, \psi, \quad c\|\psi\|_{\rho} \leq \|e^{\rho\sqrt{H}}\psi\|_{L^2} \leq C\|\psi\|_{\rho}$$

Corollaire 1 *Si ψ_0 est analytique, alors la solution exacte $\psi(t)$ est analytique uniformément en temps :*

$$\|\psi(t)\|_{\rho} \leq C\|\psi(0)\|_{\rho}$$

A-t-on de telles estimations pour les solutions numériques

après discrétisation en temps ?

Méthodes de splitting

$$L_h = \exp(ih\Delta)\exp(-ihV)$$

Où

$$e^{-ihV}\psi_0 : \begin{cases} i\partial_t \psi(t,x) = V(x)\psi(t,x) & (t,x) \in \mathbb{R}\times\mathbb{T} \\ \psi(0,x) = \psi_0(x) & x \in \mathbb{T} \end{cases}$$

et

$$e^{ih\Delta}\psi_0 : \begin{cases} i\partial_t \psi(t,x) = -\Delta\psi(t,x) & (t,x) \in \mathbb{R}\times\mathbb{T} \\ \psi(0,x) = \psi_0(x) & x \in \mathbb{T} \end{cases}$$

Méthodes de splitting

$$L_h = \exp(ih\Delta)\exp(-ihV)$$

Premières estimations analytiques :

$$\left\|e^{ihV}\psi\right\|_\rho \leq e^{c_V h}\left\|\psi\right\|_\rho \quad \text{et} \quad \left\|e^{ih\Delta}\psi\right\|_\rho = \left\|\psi\right\|_\rho$$

Ainsi,

$$\left\|L_h^n\psi\right\|_\rho \leq e^{nhc_V}\left\|\psi\right\|_\rho$$

- Les expériences numériques montrent des propriétés de conservation bien supérieures.
- Comment les justifier ?

Expérience numérique

$$V(x) = \frac{3}{5 - 4\cos(x)} \quad \text{and} \quad \psi_0(x) = \sin(x)$$

Pas de temps :

non-résonnant : $h = 0.2$

Energie modifiée

La formule de Baker-Campbell-Hausdorff assure que :

$$L_h \simeq \exp(-ih(-\Delta + V - \frac{1}{2}(ih)[-\Delta, V] + \cdots + (ih)^k H_k \cdots))$$

où pour tout k, H_k est un opérateur d'ordre k.

- En dimension finie, ce développement est convergent pour h en $O(\frac{1}{N^2})$.
- Pour pouvoir faire de l'analyse rétrograde, il faut pouvoir contrôler les normes de Sobolev de la solution numérique pour des temps longs.

Mise sous forme normale

- Introduction d'un "petit" paramètre réel λ.

On cherche formellement à construire des opérateurs unitaires

$$Q(\lambda) = \sum_{n\geq 0} \lambda^n Q_n \qquad \text{et} \qquad \Sigma(\lambda) = \sum_{n\geq 0} \lambda^n \Sigma_n$$

développables en série entière tels que

$$L_\lambda = e^{ih\Delta} e^{-ih\lambda V} = Q^*(\lambda)\Sigma(\lambda)Q(\lambda)$$

où Σ est un opérateur "croix".

- Dynamique "simple" dans les nouvelles variables.

- Explication des résonnances...

Expérience numérique

$$V(x) = \frac{3}{5 - 4\cos(x)} \quad \text{and} \quad \psi_0(x) = \sin(x)$$

Pas de temps :

résonnant : $h = \dfrac{2\pi}{6^2 - 2^2} = 0.196\ldots$

non-résonnant : $h = 0.2$

- La recherche d'une forme normale fournit une explication de ces résonnances.

Equation homologique

Introduisant $S = Q^*(i\partial_\lambda Q)$ et $X = \Sigma^*(i\partial_\lambda \Sigma)$, on a à résoudre récursivement

$$S_n - e^{ih\Delta} S_n e^{-ih\Delta} = G_n + X_n$$

C'est-à-dire, composante par composante, pour $(k, l) \in \mathbb{Z}^2$,

$$S_{kl}(1 - e^{-ih(k^2-l^2)}) = G_{kl} + X_{kl}$$

- Explication des résonnances.
- Plusieurs solutions hermitiennes à l'équation homologique.
- Comment résoudre sans consommer des dérivées ?

Condition diophantienne

Pour tout $\nu > r > 1$, il existe un $C > 0$ tel que pour tout $h_0 > 0$, l'ensemble des $h \in]0; h_0]$ tels que

$$\exists k \in \mathbb{Z} - \{0\} \qquad \frac{|1 - e^{-ikh}|}{h} < \frac{1}{|k|^\nu}$$

est de mesure inférieure à Ch_0^{r+1}.

- Résultat familier en théorie KAM :

E. Hairer, C. Lubich, G. Wanner, *Geometric Numerical Integration. Structure-preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations.* Springer, Berlin, 2002.

Z. Shang, *Resonant and Diophantine step sizes in computing invariant tori of Hamiltonian systems.* Nonlinearity 13 (2000) 299–308.

Une façon de résoudre l'équation homologique

Pour $(k,l) \in \mathbb{Z}^2$,

$$S_{kl}(1 - e^{-ih(k^2-l^2)}) = G_{kl} + X_{kl}$$

On se donne $M \in \mathbb{N}^*$ et l'on résout

- Si $|k|$ et $|l|$ sont supérieurs à M ou si $k^2 = l^2$: $S_{kl} = 0$ et $X_{kl} = -G_{kl}$.
- Si $|k|$ ou $|l|$ est inférieur à M : $S_{kl} = \frac{G_{kl}}{1-e^{-ih(k^2-l^2)}}$ et $X_{kl} = 0$.
- Intérêt : les opérateurs S et X ont même ordre que G.

Estimation des normes des opérateurs obtenus

On montre qu'il existe $C_1, C_2 > 0$ indépendants de λ tels que

$$\|S_J\|_{\frac{\rho_V}{3}} \leq (C_1 J)^{(2\nu+5)J} \qquad \text{et} \qquad \|X_J\|_{\frac{\rho_V}{3}} \leq (C_2 J)^{(2\nu+5)J}$$

- On obtient des séries divergentes pour la nome $\| \,.\, \|_{\frac{\rho_V}{3}}$.
- On va les tronquer à l'ordre $N \in \mathbb{N}^*$ et résoudre

$$\begin{cases} i\partial_\lambda Q = QS_N \\ Q(0) = id \end{cases} \qquad \text{et} \qquad \begin{cases} i\partial_\lambda \Sigma = \Sigma X_N \\ \Sigma(0) = e^{ih\Delta} \end{cases}$$

Résultats (1/2)

Les opérateurs unitaires $Q_N(\lambda)$ et $\Sigma_N(\lambda)$ ainsi obtenus vérifient

$$\|Q_N(\lambda)L_\lambda {Q_N}^*(\lambda) - \Sigma_N(\lambda)\|_{\frac{\rho_V}{3}} \leq C_N^{(M)}\lambda^{N+1}$$

sous réserve que $M \in \mathbb{N}^*$ soit suffisamment grand.

- On a donc à l'ordre N une dynamique très simple sur les premiers modes dans les nouvelles variables.
- On peut être encore plus précis...

Résultats (2/2)

- Si pour tout $n \in \mathbb{N}$, $\varphi_n = L_\lambda^n \varphi_0$ et $\psi_n = Q_N(\lambda)\varphi_n$, alors

$$\forall n \in \mathbb{N} \qquad \|\varphi_0\|_2 = \|\varphi_n\|_2 = \|\psi_n\|_2 = \|\psi_0\|_2$$

- Pour $s > 0$ et $k \in \{0, \ldots, M\}$, on a

$$k^s \left| (|\psi_k^1|^2 + |\psi_{-k}^1|^2)^{\frac{1}{2}} - (|\psi_k^0|^2 + |\psi_{-k}^0|^2)^{\frac{1}{2}} \right| \leq h\tilde{C}_N \lambda^{N+1} M^{\alpha N+s} \|\psi_0\|_2$$

- On note pour tout $s > 0$ et tout φ, $\|\varphi\|_{M,s} = \sum_{k=1}^{M} k^s (|\varphi_k|^2 + |\varphi_{-k}|^2)^{\frac{1}{2}}$.

On montre que, pour tout $n \in \mathbb{N}$ et tout h non-résonnant tels que $t = nh \leq \lambda^{-(N+1)/2}$,

$$\left| \|\psi_n\|_{M,s} - \|\psi_0\|_{M,s} \right| \leq \tilde{C}_N \|\varphi_0\|_2$$

où $M \in \mathbb{N}^*$ est de l'ordre de $\lambda^{\frac{-1}{2\max\{s,\alpha\}}}$.