

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

Guillaume DUJARDIN, INRIA Rennes

Erwan FAOU, INRIA Rennes

Dans cet exposé, nous nous intéressons à l'approximation numérique de l'équation de Schrödinger linéaire apparaissant en dynamique moléculaire quantique:

$$i\varepsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi, \quad (1)$$

où  $\psi = \psi(x, t)$  est la fonction d'onde dépendant de variables d'espace  $x = (x_1, \dots, x_N)$  avec  $x_k \in \mathbb{R}^d$  ( $d = 1$  ou  $3$ ) et du temps  $t \in \mathbb{R}$ . Le hamiltonien  $H$  admet une décomposition  $H = T + V$  en opérateurs d'énergie cinétique et potentielle

$$T = - \sum_{k=1}^N \frac{\varepsilon^2}{2m_k} \Delta_{x_k} \quad \text{et} \quad V = V(x),$$

où  $m_k > 0$  représente la masse de la particule et où  $\Delta_{x_k}$  est le laplacien en variable  $x_k \in \mathbb{R}^d$ . Le potentiel  $V$  est une fonction réelle.

Compte tenu du coût de l'évaluation de  $V$ , les méthodes de splitting du type

$$\psi_1 = \exp(-i(\delta t)T) \exp(-i(\delta t)V) \psi_0. \quad (2)$$

sont très employées en pratique, la partie cinétique pouvant se calculer simplement à l'aide de transformations de Fourier rapide, et la partie potentielle se traitant comme une équation différentielle ordinaire sur une grille.

Le but de cet exposé est de montrer que la persistance des propriétés qualitatives de (1) par le schéma d'approximation (2) ne sont pas automatiques (conservation de l'énergie, du domaine d'analyticité,...) et que des problèmes de résonances peuvent apparaître. Nous montrerons comment les techniques classiques d'intégration géométrique utilisées dans le cas des équations différentielles ordinaires ne peuvent s'appliquer ici (voir [1]). Nous montrerons ensuite dans un cas simple (le tore en dimension 1) d'où viennent les résonances, et quelles sont les propriétés du schéma dans le cas où on les évite à l'aide d'une hypothèse diophantienne sur les valeurs propres de  $T$  et sur le pas de temps (similaire aux petits diviseurs en théorie KAM, voir [1, 2]).

## Références

- [1] E. HAIRER, C. LUBICH, G. WANNER, *Geometric Numerical Integration. Structure-preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*. Springer, Berlin, 2002.
- [2] Z. SHANG, *Resonant and Diophantine step sizes in computing invariant tori of Hamiltonian systems*. Nonlinearity 13 (2000) 299–308.

Guillaume DUJARDIN – [Guillaume.Dujardin@irisa.fr](mailto:Guillaume.Dujardin@irisa.fr)

IRISA, Campus Beaulieu, 35042 Rennes Cedex

Erwan FAOU – [Erwan.Faou@irisa.fr](mailto:Erwan.Faou@irisa.fr)

IRISA, Campus Beaulieu, 35042 Rennes Cedex