Formes normales de Birkhoff et méthodes de splitting pour les EDP hamiltoniennes.

Erwan Faou

INRIA Rennes & ENS Cachan Bretagne

23 octobre 2008

Travail en commun avec Benoît Grébert et Eric Paturel (Univ. Nantes)

Le problème : un exemple numérique

Equation de Schrödinger non linéaire (NLS)

$$i\partial_t \psi = -\Delta\psi + V \star \psi + |\psi|^2\psi$$

- $\psi(x,t) \in \mathbb{C}$ fonction d'onde, $x \in \mathbb{T}^1$.
- $\Delta = \partial_{xx}$ Laplacien
- $V(x)$ fonction réelle. $\psi \mapsto V \star \psi$ opérateur diagonal en Fourier.
- Conservation de la norme L^2 et de l'énergie .
- Donnée initiale : ψ_0 très régulière et petite.

Le problème : un exemple numérique

- Résolution numérique : méthode de splitting. h paramètre de discrétisation en temps.

$$\psi(x,h) = \varphi^h_{H_0+P}(\psi_0) \simeq \psi_1 = \varphi^h_{H_0} \circ \varphi^h_P(\psi_0)$$

- $\varphi^h_{H_0}$ flot au temps h de la partie linéaire (diagonale en Fourier)

$$i\partial_t \psi = H_0 \psi = (-\Delta + V\star)\psi$$

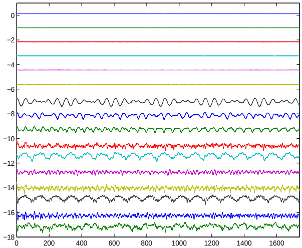
- φ^h_P flot de la partie non linéaire (équation différentielle ordinaire)

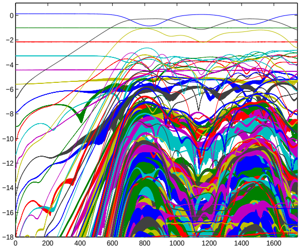
$$i\partial_t \psi = \nabla_{\bar{\psi}} P = |\psi|^2 \psi$$

- Schéma symplectique. Conservation de la norme L^2.
- Entre les deux : FFT.

Le problème : un exemple numérique

On représente les actions : $I_k(\psi) := |\widehat{\psi}_k|^2 + |\widehat{\psi}_{-k}|^2$ en échelle log.





- A gauche : $h = 0.174$.
- A droite : $h = 2\pi/(\omega_7 - \omega_1) = 0.1745947\ldots$ où les ω_ℓ sont les fréquences de H_0.

Le problème : un exemple numérique

- Ce phénomène ne peut pas s'expliquer en utilisant les techniques classiques d'intégration géométrique pour les EDOs.
  Erreur d'analyse rétrograde : hypothèse de stabilité dépendant de la dimension.
- Comportement en temps long d'EDP hamiltoniennes : théorie KAM-like en dimension infinie.
  Bourgain, Kuksin, Eliasson, Bambusi, Grébert, Pöschel, Craig, etc...
- Utilisation de techniques de formes normales pour expliquer le comportement des schémas numériques.
- Cas linéaire : Dujardin & Faou 2007.

EDP Hamiltoniennes : Formulation abstraite

- Un exemple : NLS

$$i\partial_t\psi = -\Delta\psi + V \star \psi + \partial_2 g(\psi, \bar{\psi}), \quad x \in \mathbb{T}^d$$

- Non linéarité : $g(\psi, \bar{\psi}) \in \mathbb{R}$ et $g(\psi, \bar{\psi}) = \mathcal{O}(|\psi|^3)$.
- Hamiltonien :

$$H(\psi, \bar{\psi}) = \int_{\mathbb{T}^d} |\nabla\psi|^2 + \bar{\psi}(V \star \psi) + g(\psi, \bar{\psi})\, \mathrm{d}x$$

EDP Hamiltoniennes : Formulation abstraite

Dans le cas $d = 1$, soit $\phi_k(x) = e^{ik\cdot x}$, la base de Fourier, $k \in \mathbb{Z}$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_k \xi_k \phi_k(x) \quad \text{et} \quad \bar{\psi} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_k \eta_k \bar{\phi}_k(x)$$

Le Hamiltonien s'écrit

$$\sum_{k\in\mathbb{Z}} \omega_k \xi_k \eta_k + \sum_{j_1,\ldots,j_p,k_1,\ldots,k_q} a_{\mathbf{jk}} \xi_{j_1} \cdots \xi_{j_p} \eta_{k_1} \cdots \eta_{k_q}$$

où les ω_k sont les valeurs propres de l'opérateur

$$\psi \mapsto -\Delta\psi + V \star \psi.$$

EDP Hamiltoniennes : Formulation abstraite

- Espace abstrait : Variables $(\xi_j, \eta_k) \in \mathbb{C}^{\mathbb{N}} \times \mathbb{C}^{\mathbb{N}}$,
- Structure symplectique :

$$i \sum_{j \geq 0} \mathrm{d}\xi_j \wedge \mathrm{d}\eta_j.$$

- Normes de Sobolev :

$$\|(\xi, \eta)\|_s^2 := \sum_{j \geq 0} |j|^{2s}(|\xi_j|^2 + |\eta_j|^2)$$

- Pour deux fonctions F et G, le crochet de Poisson s'écrit

$$\{F, G\} = i \sum_{j \geq 0} \frac{\partial F}{\partial \eta_j}\frac{\partial G}{\partial \xi_j} - \frac{\partial F}{\partial \xi_j}\frac{\partial G}{\partial \eta_j}.$$

EDP Hamiltoniennes : Formulation abstraite

- Systèmes Hamiltonien complexes :

$$\left\{\begin{array}{rcll} \dot{\xi}_j & = & -i\dfrac{\partial H}{\partial \eta_j}(\xi,\eta) & j \geq 0 \\ \dot{\eta}_j & = & i\dfrac{\partial H}{\partial \xi_j}(\xi,\eta) & j \geq 0. \end{array}\right.$$

- Si $H(\xi,\bar{\xi}) \in \mathbb{R}$. et si $\xi_j^0 = \bar{\eta}_j^0$ alors

$$\forall\, t > 0 \qquad \xi_j^t = \bar{\eta}_j^t$$

et les deux équations sont redondantes.

EDP Hamiltoniennes : Formulation abstraite

$$H(\xi,\eta) = H_0(\xi,\eta) + P(\xi,\eta) = \sum_{j\geq 0} \omega_j \xi_j \eta_j + P(\xi,\eta),$$

- ω_j fréquences, $|\omega_j| \leq C|j|^a$, $\forall j \geq 0$ (NLS : $a = 2$)
- $P(\xi,\eta) = \mathcal{O}(|(\xi,\eta)|^3)$ non linéaire :

$$P(\xi,\eta) = \sum_{\mathbf{j},\mathbf{k}} P_{\mathbf{jk}} \xi_{j_1} \cdots \xi_{j_p} \eta_{k_1} \cdots \eta_{k_q}$$

  somme sur des indices tels que

$$j_1 + \cdots + j_p + k_1 + \cdots + k_q = 0$$

- Système Hamiltonien :

$$\begin{cases} \dot{\xi}_j & = & -i\omega_j \xi_j - i\dfrac{\partial P}{\partial \eta_j}(\xi,\eta) & j \geq 0 \\ \dot{\eta}_j & = & i\omega_j \eta_j + i\dfrac{\partial P}{\partial \xi_j}(\xi,\eta) & j \geq 0. \end{cases}$$

EDP Hamiltoniennes : Splitting abstrait

- Décomposition : $H = H_0 + P$
- A $t = nh$, on approche le flot exact φ_H^t par

$$\varphi_H^t \simeq \left(\varphi_{H_0}^h \circ \varphi_P^h\right)^n.$$

- Systèmes discrétisés en espace : P est tel que

$$\frac{\partial P}{\partial \xi_j} \equiv \frac{\partial P}{\partial \eta_j} \equiv 0 \quad \text{pour} \quad |j| > K.$$

Espaces invariants : $\{(\xi, \eta) \,|\, \xi_j = \eta_j = 0, \; |j| > K\}$

- K : paramètre de discrétisation en fréquence.

EDP Hamiltoniennes : Exemples

Equation des ondes : $(u(t,x) \in \mathbb{R})$

$$u_{tt} - u_{xx} + V(x)u = G'(u), \quad x \in \mathbb{T}^1, \quad t \in \mathbb{R}.$$

- $v = u_t$, Hamiltonien

$$H(u,v) = \int_{\mathbb{T}} \frac{1}{2}(v^2 + u_x^2 + Vu^2) + G(u)\,\mathrm{d}x,$$

- $A := (-\partial_{xx} + V)^{1/2}$, $q := A^{1/2}u$ et $p = A^{-1/2}v$.

$$H = \frac{1}{2}\big(\langle Ap, q\rangle_{L^2} + \langle Aq, q\rangle_{L^2}\big) + \int_{\mathbb{T}} G(A^{-1/2}q)\,\mathrm{d}x.$$

EDP Hamiltoniennes : Exemples

- Décomposition $q = \sum_j q_j\phi_j$, $p = \sum_j p_j\phi_j$ dans la base propre de A.

$$H = \sum_{j\geq 0} \omega_j \frac{p_j^2 + q_j^2}{2} + P(p, q)$$

- ω_j valeurs propres de A.
- Nouvelles variables

$$\xi_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_j + ip_j) \quad \text{and} \quad \eta_j = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_j - ip_j).$$

Le système s'écrit de la forme précédente.

EDP Hamiltoniennes : Exemples

- Schémas de splitting symplectiques pour l'équation des ondes : Méthode de Deuflhard (1979), Mollified impulse methods.

  Ref : Hairer, Lubich & Wanner : *Geometric Numerical Integration*.

- Equation de Schrödinger : déjà vu
- Equation des poutres, Maxwell, etc....

EDP Hamiltoniennes : Résultat de Bambusi et Grébert

Idée : transformer le sytème de Hamiltonien

$$H = H_0 + P,$$

tel que dans les nouvelles variables (symplectiques) , le système s'écrive

$$H = H_0 + Z + R$$

où

- Z ne dépend que des actions $I_j = \xi_j \eta_j$ $(= |\xi_j|^2$ si $\xi_j = \bar{\eta}_j)$
- $R = \mathcal{O}(|(\xi, \eta)|^r)$ où r est un nombre arbitraire fixé au départ.
- Idée : $\{I_j, H\} = \{I_j, R\} = \mathcal{O}(|(\xi, \eta)|^r)$.
  Donnée petite (d'ordre ε) reste petite sur des temps ε^{-r+1}.
- Normes de Sobolev : $\sum_j |j|^{2s} I_j$.

EDP Hamiltoniennes : Résultat de Bambusi et Grébert

- Preuve : le changement de variable est construit par récurrence.
  A chaque étape, on construit φ_χ^1 où χ est un hamiltonien inconnu.
- Idée : On élimine les termes polynomiaux de degrés k à chaque étape.
- Exemple : Première itération

$$\begin{aligned} H \circ \varphi_\chi^1 &= H + \{H, \chi\} + h.o.t. \\ &= H_0 + P + \{H_0, \chi\} + h.o.t. \\ &= H_0 + Z + R \end{aligned}$$

- Equation homologique :

$$\{H_0, \chi\} = Z - P$$

EDP Hamiltoniennes : Résultat de Bambusi et Grébert

On résout successivement des équations du type

$$\{H_0, \chi\} + Z = G = \sum_{p+q=m} G_{\mathbf{jk}} \xi_{j_1} \cdots \xi_{j_p} \eta_{k_1} \cdots \eta_{k_q}$$

- G est d'ordre m et dépend des termes construits aux ordres précédents.
- Les coefficients satisfont des hypothèses de régularité (Delort, Szeftel)
- G satisfait des conditions de symétrie $G_{\mathbf{jk}} = \bar{G}_{\mathbf{kj}}$ (Hamiltoniens réels).
- En composantes :

$$i\,\Omega(\mathbf{j}, \mathbf{k})\,\chi_{\mathbf{jk}} + Z_{\mathbf{jk}} = G_{\mathbf{jk}}$$

où

$$\Omega(\mathbf{j}, \mathbf{k}) = \omega_{j_1} + \cdots + \omega_{j_p} - \omega_{k_1} - \cdots - \omega_{k_q}.$$

EDP Hamiltoniennes : Résultat de Bambusi et Grébert

- Equation homologique : $i\,\Omega(\mathbf{j},\mathbf{k})\,\chi_{\mathbf{jk}} + Z_{\mathbf{jk}} = G_{\mathbf{jk}}$
- Hypothèse de non résonance :

$$\forall\,(\mathbf{j},\mathbf{k}),\quad \mathbf{j}\neq\mathbf{k},\quad |\Omega(\mathbf{j},\mathbf{k})| \geq \frac{\gamma}{\mu(\mathbf{j},\mathbf{k})^{\alpha}}$$

  $\mu(\mathbf{j},\mathbf{k})$ est le troisième plus grand entier parmi $|j_1|,\cdots,|k_q|$.

- Hypothèse générique pour un grand ensemble de multiplicateurs V (Schrödinger en dimension d, Ondes en dimension 1, etc..)
- Résolution :

$$\mathbf{j}=\mathbf{k} : \begin{cases} Z_{\mathbf{jk}} = G_{\mathbf{jk}}, \\ \chi_{\mathbf{jk}} = 0, \end{cases} \qquad \mathbf{j}\neq\mathbf{k} : \begin{cases} Z_{\mathbf{jk}} = 0 \\ \chi_{\mathbf{jk}} = -i\Omega(\mathbf{j},\mathbf{k})^{-1}\,G_{\mathbf{jk}}. \end{cases}$$

- On conclut en contrôlant la régularité après chaque étape.

EDP Hamiltoniennes : Résultat de Bambusi et Grébert

Théorème [Bambusi & Grébert, 2006]

Soit r fixé. Sous l'hypothèse de non résonance alors pour s assez grand et ε assez petit, si $\|\psi_0\|_s \leq \varepsilon$ alors

$$\|\psi(t)\|_s \leq 2\varepsilon \quad \text{pour} \quad t \leq \frac{C}{\varepsilon^{r-1}}$$

et pour les actions

$$\forall j \geq 0, \quad |I_j(t) - I_j(0)| \leq \frac{\varepsilon^3}{j^{2s}} \quad \text{pour} \quad t \leq \frac{C}{\varepsilon^{r-2}}$$

Formes normales pour les méthodes de splitting :

- Peut-on trouver une transformation τ telle que

$$\tau \circ \varphi_{H_0}^h \circ \varphi_P^h \circ \tau^{-1} = \varphi_{H_0}^h \circ \varphi_{Z+R}^h.$$

- Ecrire $\varphi_{H_0}^h = 1 + ihH_0 + \cdots$ ne marche pas.
- On travaille avec des flots et pas au niveau du Hamiltonien .
- Idée : considérer la famille de transformation

$$[0,1] \ni \lambda \mapsto \varphi_{H_0}^h \circ \varphi_P^\lambda$$

  et dériver en λ.
- Détails glissés sous le tapis.

Formes normales pour les méthodes de splitting :

L'équation homologique devient

$$\chi \circ \varphi_{H_0}^h - \chi + Z = G$$

- $h \to 0$, l'équation devient (formellement) celle du cas continu.
- Action du flot $\varphi_{H_0}^h$:

$$\xi_j \mapsto e^{-ih\omega_j}\xi_j \quad \text{et} \quad \eta_j \mapsto e^{ih\omega_j}\eta_j$$

- En composantes :

$$(e^{ih\Omega(\mathbf{k},\mathbf{j})} - 1)\chi_{\mathbf{jk}} + Z_{\mathbf{jk}} = G_{\mathbf{jk}}.$$

Un premier résultat

- Equation homologique : $(e^{ih\Omega(\mathbf{k},\mathbf{j})} - 1)\chi_{\mathbf{jk}} + Z_{\mathbf{jk}} = G_{\mathbf{jk}}$.
- Première idée : Faire l'hypothèse de non résonance du cas continu

$$|e^{ih\Omega(\mathbf{k},\mathbf{j})} - 1| \geq \frac{h\gamma}{\mu(\mathbf{j},\mathbf{k})^{\alpha}}.$$

- On peut recopier la preuve du cas continu.
- Même types de résultats.
- Condition générique ? ?

Un premier résultat

- Système discrétisés : $j < K$. Hypothèse CFL

$$h|\Omega(\mathbf{k},\mathbf{j})| \leq hCK^a < \pi/2.$$

Hypothèse précédente vérifiée

$$|e^{ih\Omega(\mathbf{k},\mathbf{j})} - 1| \geq ch|\Omega(\mathbf{k},\mathbf{j})| \geq h\gamma\mu(\mathbf{k},\mathbf{j})^{-\alpha}$$

sous l'hypothèse de non résonance de B & G.

- Résultats similaires :
  - Cohen, Hairer & Lubich 2008 (équation des ondes)
  - Gauckler & Lubich 2008 (Schrödinger)

  Technique : Modulated Fourier expansions.

- Dans l'exemple numérique : $h = 0.17\ldots$ et $K \simeq 1000$...

Un premier résultat : Le problème

$$|e^{ih\Omega(\mathbf{k},\mathbf{j})} - 1| \geq \frac{h\gamma}{\mu(\mathbf{j},\mathbf{k})^\alpha}$$

- Pour Schrödinger, $\omega_j \simeq j^2$.
- Supposons que $j_1 = N$, $k_1 = N + 1$ et que tous les autres indices sont plus petits que 1 en module. On a $\mu(\mathbf{j},\mathbf{k}) = 1$.
- Mais $h\Omega(\mathbf{j},\mathbf{k}) \simeq h(N+1)^2 - hN^2 \simeq 2hN$ pour N grand.
  La condition devient

$$\forall\, N \quad \text{grand}, \qquad |e^{i2hN} - 1| \geq h\gamma.$$

  Hypothèse non générique sur h.
- Cette condition n'explique pas les résonances numériques !

Un résultat de forme normale

Condition de non résonance :

$$\forall \mathbf{j}, \mathbf{k}, \quad \mathbf{j} \neq \mathbf{k}, \quad |j_i|, |k_\ell| \leq N, \quad |e^{ih\Omega(\mathbf{k},\mathbf{j})} - 1| \geq \frac{h\gamma}{N^\alpha}$$

- Hypothèse générique sur les multiplicateurs V et sur $h \in [0, h_0]$:

$$\mathrm{meas}\{\, h \leq h_0 \,|\, h \text{ ne satisfait pas la condition } \} \leq C h_0^{1+\sigma}$$

- Résolution de l'équation homologique sur les modes $\leq N$.

Un résultat de forme normale

Théorème : Sous la condition (générique) de non résonance, il existe un changement de variable dans lequel le schéma de splitting peut s'écrire

$$\varphi_{H_0}^{h} \circ \varphi_{hZ+R}^{1}$$

- Z contient des termes qui
  - soit ne dépendent que des actions
  - soit contiennent au moins deux indices $> N$.
- R admet un zéro d'ordre r.

Problème : deux indices grands peuvent toujours interagir et donner de l'énergie dans les basses fréquences.

Un résultat de forme normale

- Termes rédisuels avec deux indices grands :
  Effets numériques dus au pas de temps h
- Au final, $N \simeq \varepsilon^{-\sigma}$.
  Cut-off à haute fréquence en fonction de la taille de la donnée initiale. Permet
  - Que les restes soient petits
  - Que les normes ne soient pas trop grosses...
- Système complètement discrétisé ($j < K$) :

  Si $K \leq N \simeq \varepsilon^{-\sigma}$ alors Z ne dépend que des actions !
- Moralement : dimension finie (mais grande).

Un résultat de forme normale

Théorème

Soit la solution numérique

$$\psi^n = \left(\varphi^h_{H_0} \circ \varphi^h_P\right)^n(\psi^0), \quad n > 0$$

associée à une EDP discrétisée en espace (paramètre K) .
Soit r fixé, sous l'hypothèse de non résonance sur h, et pour s assez grand, si $\|\psi_0\| \leq \varepsilon$ et $K \leq \varepsilon^{-\sigma}$ alors

$$\|\psi^n\| \leq 2\varepsilon \quad \text{pour} \quad n \leq \frac{C}{\varepsilon^{r-1}}$$

et pour les actions $j < K$,

$$|I_j(n) - I_j(0)| \leq \varepsilon^3 \quad \text{pour} \quad n \leq \frac{C}{\varepsilon^{r-2}}$$

Cachez ces hautes fréquences que je ne saurais voir !

- Que se passe t'il si $K > \varepsilon^{-\sigma}$? ?
- Soit une fréquence $n > \varepsilon^{-\sigma}$. Supposons que ψ soit analytique. Alors

$$|\widehat{\psi}_n| \leq Ce^{-n} \leq C \exp(-\varepsilon^{-\sigma})$$

- Pour des valeurs raisonnables de ε, on a

$$|\widehat{\psi}_n| \leq TOL \simeq 10^{-32}.$$

- Que signifie créer de l'énergie entre deux composantes plus petites que l'erreur numérique ? ?
- Le phénomène est décrit par un autre modèle (stochastique).

Cachez ces hautes fréquences que je ne saurais voir !

- Opérateur de projection :

$$\forall j, \quad \left(\Pi_{\eta,s} z\right)_j = \begin{cases} z_j & \text{if} \quad |j|^s |z_j| \geq \eta \\ 0 & \text{if} \quad |j|^s |z_j| < \eta. \end{cases}$$

- Schémas de splitting arrondis :

$$\Pi_{\eta,s} \circ \varphi^h_{H_0} \circ \varphi^h_P$$

Pertinent si $\eta < TOL$.

- A chaque pas : drift en ε^r dans les hautes fréquences (à cause de R).
- Idée : on peut prendre $\eta = \varepsilon^r << TOL$ car r arbitraire.

Un résultat de forme normale

Théorème

Soit r fixé, sous l'hypothèse de non résonance sur h, et pour s assez grand, si $\|\psi_0\|_s \leq \varepsilon$ et soit la solution

$$\psi^n = \left(\Pi_{\eta,s} \circ \varphi^h_{H_0} \circ \varphi^h_P\right)^n(\psi^0), \quad n > 0, \quad \eta = \varepsilon^r$$

Alors

$$\|\psi^n\|_s \leq 2\varepsilon \quad \text{pour} \quad n \leq \frac{C}{\varepsilon^{r-1}}$$

et pour les actions

$$\forall j \quad |I_j(n) - I_j(0)| \leq \frac{\varepsilon^3}{j^{2s}} \quad \text{pour} \quad n \leq \frac{C}{\varepsilon^{r-2}}$$