

Analyse numérique

Dérivation de schémas numériques symplectiques pour des systèmes hamiltoniens hautement oscillants [☆]

Claude Le Bris ^{a,c}, Frédéric Legoll ^{b,c}

^a CERMICS, École nationale des ponts et chaussées, 77455 Marne-La-Vallée cedex 2, France

^b LAMI, École nationale des ponts et chaussées, 77455 Marne-La-Vallée cedex 2, France

^c INRIA Rocquencourt, MICMAC project, domaine de Voluceau, B.P. 105, 78153 Le Chesnay cedex, France

Reçu le 10 octobre 2006 ; accepté le 12 décembre 2006

Disponible sur Internet le 31 janvier 2007

Présenté par Évariste Sanchez-Palencia

Résumé

On introduit ici une classe de schémas symplectiques pour l'intégration numérique de systèmes hamiltoniens hautement oscillants. L'approche est basée sur la formulation Hamilton–Jacobi des équations du mouvement. En appliquant un développement à deux échelles à la solution des équations de Hamilton–Jacobi elle-même, on obtient ainsi, via la fonction génératrice, une classe de schémas symplectiques par construction. Un exemple de schéma ainsi construit est présenté ici sur un cas test habituel de système hautement oscillant, démontrant l'efficacité de l'approche. La dérivation d'autres schémas, et leurs tests dans des situations plus générales, feront l'objet d'une autre publication. *Pour citer cet article : C. Le Bris, F. Legoll, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 344 (2007).*

© 2006 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

Abstract

Derivation of symplectic numerical schemes for highly oscillatory Hamiltonian systems. We introduce here a class of symplectic schemes for the numerical integration of highly oscillatory Hamiltonian systems. The bottom line for the approach is to exploit the Hamilton–Jacobi form of the equations of motion. Because we perform a two-scale expansion of the solution of the Hamilton–Jacobi equations itself, we readily obtain, after an appropriate discretization, a symplectic integration scheme. An example of such an integration scheme, following the general approach, is presented here on a specific commonly used test case. The efficiency of the approach is demonstrated. Further developments will be presented elsewhere. *To cite this article: C. Le Bris, F. Legoll, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 344 (2007).*

© 2006 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Tous droits réservés.

[☆] Les auteurs ont bénéficié du support financier du Ministère de la recherche et des nouvelles technologies, dans le cadre de l'action « Nouvelles interfaces des mathématiques » SIMUMOL, et de l'Agence nationale de la recherche, programme non thématique INGEMOL. Ils remercient Philippe Chartier pour ses commentaires dans l'élaboration de ce texte.

Adresses e-mail : lebris@cermics.enpc.fr (C. Le Bris), legoll@lami.enpc.fr (F. Legoll).

Abridged English version

Our purpose here is to develop efficient integration schemes for the numerical simulation of highly oscillatory Hamiltonian systems. Such systems arise in many applied fields. One instance is molecular dynamics. There have been a lot of efforts to design symplectic integration schemes for Hamiltonian systems. In the specific case when the system is, in addition, highly oscillatory, the derivation of both symplectic and efficient schemes is still a challenging issue. We report here on one possible approach, which we believe to be new. We argue on a simple illustrative case. Further developments will be presented in [3]. Considering the Hamiltonian system (1), (2), the bottom line for the approach is to exploit the Hamilton–Jacobi form (3) of these equations of motion. We perform a formal two-scale expansion (6) of the solution of the Hamilton–Jacobi equations, rather than of the solution of the Newton equations. We discretize the latter in time so as to obtain a numerical approximation (16) of the generating function, which we in turn lift in the original variables to readily obtain a symplectic integration scheme for the original Hamiltonian system. Some results on the commonly used test case of the Fermi–Pasta–Ulam chain are displayed on Fig. 1. They are obtained for a system in which we assume the rapid frequency Ω does not depend on the slow variable. If it does depend on it, the previous approach needs to be slightly modified. Although theoretical considerations (such as a numerical analysis of the convergence of the above schemes) are still missing, and although definite conclusions about the efficiency of these schemes on generic, physically relevant, cases are yet to be obtained, the preliminary results shown here demonstrate the interest of the approach. There are certainly many variants of the derivation presented in this Note that follow the above line. Some of them will be explored in [3].

1. Introduction

L’objectif de cette Note est de décrire une méthode systématique de dérivation d’intégrateurs numériques symplectiques pour les systèmes hamiltoniens hautement oscillants. Comme prototype d’un tel système, on considère :

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H_\varepsilon}{\partial p}(q, p), \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H_\varepsilon}{\partial q}(q, p), \quad (1)$$

$$H_\varepsilon(q_1, q_2, p_1, p_2) = \frac{p_1^T p_1}{2} + \frac{p_2^T p_2}{2} + V_0(q_1, q_2) + (\Omega(q_1))^2 \frac{q_2^T q_2}{2\varepsilon^2}, \quad (2)$$

où on a noté $q = (q_1, q_2) \in \mathbb{R}^l \times \mathbb{R}^r$ et $p = (p_1, p_2) \in \mathbb{R}^l \times \mathbb{R}^r$, les indices supérieurs l et r désignant respectivement les variables lentes et rapides, et où V_0 est une énergie potentielle indépendante de ε . On supposera que la fréquence rapide $\Omega(q_1)$ est un scalaire, et qu’il existe une constante $c > 0$ telle que $\Omega(q_1) \geq c > 0$ pour tout q_1 . Les conditions initiales de (1) dépendent de ε de façon à ce que l’énergie soit bornée par rapport à ε . La discrétisation directe du système est coûteuse car le paramètre ε est petit.

Ce type de système hamiltonien a déjà été étudié p. ex. dans [1,7]. La référence [7, Chap. XIII et XIV] présente de manière unifiée et analyse plusieurs algorithmes développés pour l’intégration de (1). Un nouvel algorithme appartenant à la classe de ceux analysés dans [7] a été proposé dans [5]. Une autre idée, s’appuyant sur un développement de type WKB de la solution de (1), est décrite dans [2].

Pour introduire une classe d’intégrateurs numériques symplectiques *par construction*, notre idée est de travailler sur la forme Hamilton–Jacobi des équations du mouvement. Soit $\bar{S}_\varepsilon(t, q, P)$ la solution de

$$\partial_t \bar{S}_\varepsilon = H_\varepsilon(q + \partial_P \bar{S}_\varepsilon, P), \quad \bar{S}_\varepsilon(0, q, P) = 0. \quad (3)$$

Pour tout (q, p, t) , on sait que $(Q(t), P(t))$ définis implicitement par

$$p = P(t) + \frac{\partial \bar{S}_\varepsilon}{\partial q}(t, q, P(t)), \quad Q(t) = q + \frac{\partial \bar{S}_\varepsilon}{\partial P}(t, q, P(t)) \quad (4)$$

sont solutions de (1) avec les conditions initiales (q, p) . Notre approche consiste à construire (par un Ansatz de type double-échelle) une approximation de la solution $\bar{S}_\varepsilon(t, q, P)$ de (3), ceci pour un paramètre ε petit et pour un pas de temps h petit (mais beaucoup moins petit que ε , d’où l’efficacité de l’approche). On injecte ensuite cette approximation dans (4), qu’on résout pour trouver un intégrateur numérique symplectique de (1), (2). A notre connaissance, cette idée, pourtant naturelle, n’a jamais été mentionnée ni exploitée dans la littérature. Nous en présentons ici *une* possible

mise en oeuvre. De nombreuses variantes peuvent sans doute être adoptées. Soulignons aussi le fait que dans son état actuel l’approche souffre encore de défauts, et reste purement formelle car aucune analyse théorique de validité et de convergence ne vient la fonder. La présente approche est d’une certaine manière *inspirée* par la méthode de construction de schémas symplectiques introduite dans [4].

2. Une version de l’approche dans le cas de fréquences rapides constantes

Notons que la variable q_2 est d’ordre ε , car l’énergie est bornée. On effectue donc dans (3) un changement de variable et de fonction inconnue :

$$\alpha_2 = \frac{\Omega(q_1)}{\varepsilon} q_2 \quad \text{et} \quad S_\varepsilon(t, q_1, \alpha_2, P_1, P_2) = \bar{S}_\varepsilon\left(t, q_1, \frac{\varepsilon \alpha_2}{\Omega(q_1)}, P_1, P_2\right),$$

de sorte que S_ε vérifie

$$\partial_t S_\varepsilon = \sum_{i=1}^2 \frac{P_i^T P_i}{2} + V_0\left(q_1 + \partial_{P_1} S_\varepsilon, \frac{\varepsilon \alpha_2}{\Omega(q_1)} + \partial_{P_2} S_\varepsilon\right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Omega(q_1 + \partial_{P_1} S_\varepsilon)}{\varepsilon}\right)^2 \left(\frac{\varepsilon \alpha_2}{\Omega(q_1)} + \partial_{P_2} S_\varepsilon\right)^2. \quad (5)$$

Dans le cas $\Omega(q_1) \equiv \Omega$ constant, on fait l’Ansatz

$$S_\varepsilon(t, q_1, \alpha_2, P_1, P_2) = S_0(t, \tau, q_1, \alpha_2, P_1, P_2) + \varepsilon S_1(t, \tau, q_1, \alpha_2, P_1, P_2) + \dots \quad (6)$$

où le temps rapide est $\tau = t\Omega/\varepsilon$, et où on impose que les fonctions S_i soient 2π périodiques en τ . L’identification des termes en puissances de ε une fois l’Ansatz inséré dans (5) ne semble pas conduire à une hiérarchie fermée. En revanche, si on développe aussi les équations par rapport à t au voisinage de $t = 0$, la hiérarchie se ferme. Tous calculs effectués, on obtient $\partial_{P_2} S_0 = 0$ (avec le terme $O(1/\varepsilon^2)$), $\partial_\tau S_0 = 0$ (avec celui en $O(1/\varepsilon)$), et les identifications en $t^0 \varepsilon^0$, $t \varepsilon^0$, $t^2 \varepsilon^0$, $t^0 \varepsilon$, $t \varepsilon$ et $t^0 \varepsilon^2$ donnent ensuite :

$$\partial_t S_0(t=0) = \frac{P_1^T P_1}{2} + V_0(q_1, 0), \quad (7)$$

$$\partial_{tt} S_0(t=0) = P_1^T \nabla_1 V_0(q_1, 0), \quad (8)$$

$$S_1(t=0) = \frac{1}{\Omega} \left(\frac{P_2^T P_2 + \alpha_2^T \alpha_2}{2}\right) \tan \tau + \frac{P_2^T \alpha_2}{\Omega} \left(\frac{1}{\cos \tau} - 1\right), \quad (9)$$

$$\partial_t S_1(t=0) = \partial_{tt} S_1(t=0) = 0, \quad (10)$$

$$S_2(t=0) = \frac{1}{\Omega^2} (\nabla_2 V_0(q_1, 0))^T \left(\frac{P_2}{\cos \tau} - P_2 + \alpha_2 \tan \tau\right), \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \partial_t S_2(t=0) &= \frac{-1}{2\Omega^2} (\nabla_2 V_0(q_1, 0))^T \nabla_2 V_0(q_1, 0) - \frac{1}{\Omega^2} P_1^T \nabla_{12} V_0(q_1, 0) P_2 \\ &\quad + \frac{1}{4\Omega^2 \cos^2 \tau} (P_2^T \nabla_{22} V_0 P_2 + \alpha_2^T \nabla_{22} V_0 \alpha_2 + 2 \sin \tau \alpha_2^T \nabla_{22} V_0 P_2), \end{aligned} \quad (12)$$

où il est sous-entendu que toutes les fonctions génératrices sont évaluées en $(t=0, \tau, q_1, \alpha_2, P_1, P_2)$, et où V_0 et ses dérivées sont évaluées en $(q_1, 0)$. Pour le développement ci-dessus, on s’est placé dans le régime $\varepsilon < h < \sqrt{\varepsilon}$, mais d’autres régimes sont sans doute possibles. L’approximation naturelle (cf. [3])

$$S_\varepsilon(h) \approx S_\varepsilon^{\text{nat}}(h) = h \partial_t S_0 + \frac{h^2}{2} \partial_{tt} S_0 + \varepsilon S_1 + \varepsilon^2 S_2 + \varepsilon^2 h \partial_t S_2 \quad (13)$$

injectée dans (4) conduit malheureusement à un schéma numérique formellement symplectique mais mal défini pour certaines valeurs de τ . Une manière de contourner cette difficulté (qui ne change pas l’ordre de l’approximation car elle la modifie de $O(\varepsilon^3) + O(\varepsilon^2 h^2)$) est de remplacer (13) par

$$\begin{aligned} S_\varepsilon(h) &\approx h \left[V_0(q_1, 0) - \frac{\varepsilon^2}{2\Omega^2} (\nabla_2 V_0(q_1, 0))^T \nabla_2 V_0(q_1, 0) + \frac{1}{2} \bar{P}_1^T \bar{P}_1 \right] + \frac{h^2}{2} (\nabla_1 V_0(q_1, 0))^T \bar{P}_1 \\ &\quad + \frac{1}{2} P_2^T \Omega_\varepsilon^{-1}(q_1) \tan(h\Omega_\varepsilon(q_1)) P_2 + \frac{1}{2} \bar{q}_2^T \Omega_\varepsilon(q_1) \tan(h\Omega_\varepsilon(q_1)) \bar{q}_2 + P_2^T (\cos^{-1}(h\Omega_\varepsilon(q_1)) - \text{Id}_r) \bar{q}_2, \end{aligned} \quad (14)$$

avec les notations

$$\bar{q}_2 = q_2 + \frac{\varepsilon^2}{\Omega^2} \nabla_2 V_0(q_1, 0), \quad \bar{P}_1 = P_1 - \frac{\varepsilon^2}{\Omega^2} \nabla_{12} V_0(q_1, 0) P_2, \quad \Omega_\varepsilon(q_1) = \frac{\Omega}{\varepsilon} \text{Id}_r + \frac{\varepsilon}{2\Omega} \nabla_{22} V_0(q_1, 0). \quad (15)$$

La motivation pour introduire (14) et les nouvelles variables et paramètres (15) est notamment que les trois derniers termes de (14) correspondent alors à la fonction génératrice d'un oscillateur harmonique de pulsation $\Omega_\varepsilon(q_1)$, exprimée dans les variables (\bar{q}_2, P_2) .

Le schéma obtenu en injectant (14) dans (4) est parfaitement défini et symplectique. Cependant, il fait intervenir les matrices $\sin(h\Omega_\varepsilon(q_1))$ et $\cos(h\Omega_\varepsilon(q_1))$. Leur calcul ne présente pas de difficulté en petite dimension. Mais lorsqu'on travaille en grande dimension, ce calcul peut au contraire être coûteux. Une possibilité pratique est alors d'approcher numériquement ces matrices, et ceci peut se faire de la manière suivante.

Si l'on dispose de s_ε^a et s_ε^b deux approximations de $\sin(h\Omega_\varepsilon(q_1))$, et de c_ε une de $\cos(h\Omega_\varepsilon(q_1))$, telles que $s_\varepsilon^a, s_\varepsilon^b, c_\varepsilon$ soient des matrices symétriques, que $s_\varepsilon^a, s_\varepsilon^b, c_\varepsilon$ et $\Omega_\varepsilon(q_1)$ commutent deux à deux, et $c_\varepsilon^2 + s_\varepsilon^a s_\varepsilon^b = \text{Id}_r$, alors on peut remplacer (14) par l'approximation suivante de $S_\varepsilon(h)$

$$S_\varepsilon^{\text{mod}}(h) = h \left[V_0(q_1, 0) - \frac{\varepsilon^2}{2\Omega^2} (\nabla_2 V_0(q_1, 0))^T \nabla_2 V_0(q_1, 0) + \frac{1}{2} \bar{P}_1^T \bar{P}_1 \right] + \frac{h^2}{2} (\nabla_1 V_0(q_1, 0))^T \bar{P}_1 + \frac{1}{2} P_2^T \Omega_\varepsilon^{-1}(q_1) s_\varepsilon^a c_\varepsilon^{-1} P_2 + \frac{1}{2} \bar{q}_2^T \Omega_\varepsilon(q_1) s_\varepsilon^b c_\varepsilon^{-1} \bar{q}_2 + P_2^T (c_\varepsilon^{-1} - \text{Id}_r) \bar{q}_2. \quad (16)$$

On injecte maintenant (16) dans (4), et on obtient

$$P_2 = c_\varepsilon p_2 - s_\varepsilon^b \Omega_\varepsilon(q_1) \bar{q}_2, \quad (17)$$

$$Q_2 = \tilde{Q}_2 - \frac{\varepsilon^2}{\Omega^2} \nabla_2 V_0(q_1, 0) - \frac{\varepsilon^2}{\Omega^2} \nabla_{12} V_0(q_1, 0) \left(h \bar{P}_1 + \frac{h^2}{2} \nabla_1 V_0(q_1, 0) \right), \quad (18)$$

avec

$$\tilde{Q}_2 = c_\varepsilon \bar{q}_2 + s_\varepsilon^a \Omega_\varepsilon^{-1}(q_1) p_2. \quad (19)$$

On reconnaît dans (17) et (19) une approximation de la solution, au temps h , du problème

$$\frac{dx_2}{dt} = y_2, \quad \frac{dy_2}{dt} = -\Omega_\varepsilon^2(q_1) x_2, \quad (x_2, y_2) \in \mathbb{R}^r \times \mathbb{R}^r, \quad (x_2^0, y_2^0) = (\bar{q}_2, p_2). \quad (20)$$

Une possibilité est donc de choisir les matrices $s_\varepsilon^a, s_\varepsilon^b$ et c_ε de façon à ce que (17) et (19) correspondent à la solution numérique obtenue par l'intégration du problème (20) avec un pas de temps adapté à la raideur. Notre approche revient donc, comme dans l'algorithme Impulse [6,8], à intégrer numériquement le problème rapide pendant l'intervalle de temps $[0, h]$ et à utiliser ceci dans l'intégration du problème lent. Mais ceci est fait de manière différente. En utilisant le schéma de Velocity Verlet avec un pas de temps $h_\mu = h/k$ ($k \in \mathbb{N}^*$), la solution numérique (x_2^k, y_2^k) de (20) au pas de temps k s'écrit

$$\begin{pmatrix} x_2^k \\ y_2^k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_k & v_k \\ -w_k & u_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_2^0 \\ y_2^0 \end{pmatrix}, \quad (21)$$

où u_k, v_k et w_k sont trois matrices de taille r . On pose alors $s_\varepsilon^a = \Omega_\varepsilon(q_1) v_k, s_\varepsilon^b = \Omega_\varepsilon^{-1}(q_1) w_k$, et $c_\varepsilon = u_k$. Revenant à (4) on obtient maintenant l'approximation des variables lentes. Ainsi :

$$\begin{aligned} \left(\text{Id}_\ell + \frac{h^2}{2} \nabla_{11} V_0 - \frac{\varepsilon^2 h}{\Omega^2} P_2^T \nabla_{112} V_0 \right) \bar{P}_1 &= p_1 - \frac{\varepsilon^2}{\Omega^2} \nabla_{12} V_0 p_2 - h \left(\nabla_1 V_0 - \frac{\varepsilon^2}{\Omega^2} \nabla_{12} V_0 \nabla_2 V_0 \right) \\ &+ \frac{h^2 \varepsilon^2}{2\Omega^2} P_2 \nabla_{112} V_0 \nabla_1 V_0 - \kappa. \end{aligned} \quad (22)$$

Dans (22), les dérivées de V_0 sont toujours évaluées au point $(q_1, 0)$, et on a introduit

$$\forall 1 \leq j \leq \ell, \quad \kappa_j = \frac{\varepsilon}{2\Omega} \frac{h_\mu}{2} \sum_{n=0}^{k-1} \left(x_2^n \frac{\partial \nabla_{22} V_0}{\partial q_{1j}} \Omega_\varepsilon(q_1) x_2^n + x_2^{n+1} \frac{\partial \nabla_{22} V_0}{\partial q_{1j}} \Omega_\varepsilon(q_1) x_2^{n+1} \right), \quad (23)$$

qui est une approximation par méthode des trapèzes de

$$\frac{\varepsilon}{2\Omega} \int_0^h x_2(t) \frac{\partial \nabla_{22} V_0}{\partial q_{1j}} \Omega_\varepsilon(q_1) x_2(t) dt,$$

où $x_2(t)$ est la solution de (20). Le choix de la méthode des trapèzes est dicté par la consistance avec le choix de l’algorithme de Velocity Verlet pour intégrer (20). Avec (22), on obtient donc \bar{P}_1 , puis P_1 grâce à (15). Le schéma pour Q_1 s’obtient directement à partir de (4) et (16).

3. Un test numérique

Nous avons implémenté ce schéma sur une chaîne de ressorts à la Fermi–Pasta–Ulam [7, Sec. XIII.2.1]. Ce cas correspond à $q_1 \in \mathbb{R}^3$, $q_2 \in \mathbb{R}^3$, $\Omega(q_1) = 1$, et V_0 est un polynôme de degré 4 en q dans (2). L’énergie dans le ressort rapide j ($1 \leq j \leq 3$) s’écrit

$$I_j = \frac{p_{2,j}^2}{2} + \frac{q_{2,j}^2}{2\varepsilon^2}$$

et $I = I_1 + I_2 + I_3$ est un invariant adiabatique. On choisit $\varepsilon = 10^{-3}$. On trace sur la Fig. 1 l’erreur relative

$$\text{err} = \max_{t \in [0, 10000]} \frac{|H_\varepsilon(t) - H_\varepsilon(0)|}{H_\varepsilon(0)}$$

dans la conservation de l’énergie sur l’intervalle de temps $[0, 10000]$ en fonction du pas de temps h , et pour plusieurs valeurs de h_μ . Les résonances observées lorsque $h\Omega/\varepsilon$ est un multiple de 2π (en fait absentes dans le cas très particulier où V_0 est une fonction quadratique de q) sont aussi observées pour beaucoup de schémas proposés dans la littérature [7, Fig. XIII.2.5]. Voir [5] pour une alternative possible et [3] pour une étude plus approfondie de cette question.

Le pas $h = 6,5 \times 10^{-2}$ est un pas non résonant. Avec $h_\mu = \varepsilon/(3\Omega)$, on obtient une erreur sur la conservation de H_ε de 1 %. Pour avoir la même précision avec le schéma velocity-Verlet, il aurait fallu prendre un pas $h = 5 \times 10^{-4}$ environ 100 fois plus petit. Pour ces choix de h et h_μ , on observe (voir [3]) que l’invariant adiabatique est conservé avec une erreur relative de 1,5 % (sur la trajectoire exacte, I varie avec une amplitude de 0,4 %), tandis que l’échange entre les I_j est qualitativement bien reproduit.

Signalons pour conclure que l’ensemble de l’approche ci-dessus s’adapte au cas d’un fréquence rapide $\Omega(q_1)$ effectivement variable. Le temps rapide dans l’Ansatz à deux échelles est alors

$$\tau = \frac{t}{2\varepsilon} \left[\Omega(q_1) + \Omega \left(q_1 + \frac{\partial S_0}{\partial P_1}(t, q_1, P_1) \right) \right] \text{ approché par } \frac{h}{2\varepsilon} [\Omega(q_1) + \Omega(q_1 + hP_1)]. \tag{24}$$

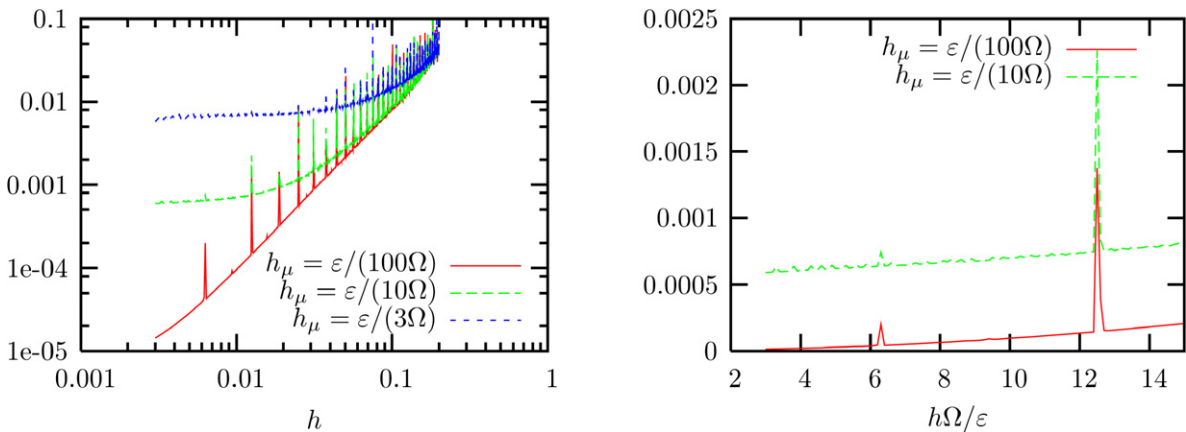


Fig. 1. Variation relative de l’énergie (algorithme issu de (16), $\varepsilon = 10^{-3}$).

Fig. 1. Relative variation of the energy (algorithm based on (16), $\varepsilon = 10^{-3}$).

Un schéma qui fonctionne bien (voir [3]) est obtenu à partir de l'approximation

$$S_\varepsilon^{\text{mod}}(h) = h \left(\frac{P_1^T P_1}{2} + V_0(q_1, 0) \right) + \frac{\varepsilon}{\Omega(q_1)} \left[\frac{\alpha_2^T \alpha_2}{2} \tan \tau + \frac{P_2^T P_2}{2} \tan \tau e^{-\beta} - \alpha_2^T P_2 + \frac{\alpha_2^T P_2}{\cos \tau} e^{-\beta/2} \right] \quad (25)$$

avec $\beta = \frac{h}{\Omega(q_1)} P_1^T \nabla \Omega(q_1)$. A partir de (25), on obtient via (4) un schéma numérique symplectique, qui est implicite en P_1 , puis explicite en P_2 , Q_1 et Q_2 une fois P_1 déterminé. En pratique, un algorithme de Newton peut être utilisé pour calculer P_1 . Nous avons implémenté ce schéma dans le cas scalaire ($q_1 \in \mathbb{R}$, $q_2 \in \mathbb{R}$), avec $\Omega(q_1) = \sqrt{1 + q_1^2}$ et $V_0(q_1, q_2) = (q_1^2 + q_2^2 - 1)^2$. Trois itérations de Newton suffisent. Pour $\varepsilon = 10^{-3}$ et $\varepsilon = 10^{-6}$, le choix d'un pas de temps $h = 2,5 \times 10^{-2}$ conduit à une erreur relative sur H_ε de 2 %, alors qu'il faut choisir $h = 2,5 \times 10^{-4}$ (resp. $h = 2,5 \times 10^{-7}$) pour avoir cette précision avec l'algorithme de Velocity Verlet lorsque $\varepsilon = 10^{-3}$ (resp. $\varepsilon = 10^{-6}$). D'autres développements seront donnés dans [3], notamment concernant l'analyse de ces schémas sur des temps de simulation plus longs, l'adaptation au cas de fréquences rapides matricielles, et quelques variantes possibles des algorithmes présentés ci-dessus.

Références

- [1] F. Bornemann, C. Schuette, Homogenization of hamiltonian systems with a strong constraining potential, *Phys. D* 102 (1997) 57–77.
- [2] F. Castella, Ph. Chartier, E. Faou, en préparation.
- [3] F. Castella, Ph. Chartier, E. Faou, C. Le Bris, F. Legoll, A. Murua, travaux en cours.
- [4] K. Feng, Difference schemes for Hamiltonian formalism and symplectic geometry, *J. Comp. Math.* 4 (1986) 279–289.
- [5] V. Grimm, M. Hochbruck, Error analysis of exponential integrators for oscillatory second-order differential equations, *J. Phys. A* 39 (2006) 5495–5507.
- [6] H. Grubmüller, H. Heller, A. Windemuth, K. Schulten, Generalized Verlet algorithm for efficient molecular dynamics simulations with long range interaction, *Molecular Simulation* 6 (1–3) (1991) 121–142.
- [7] E. Hairer, C. Lubich, G. Wanner, *Geometric Numerical Integration*, Springer, 2006.
- [8] M.E. Tuckermann, B.J. Berne, G.J. Martyna, Reversible multiple time scale molecular dynamics, *J. Chem. Phys.* 97 (1992) 1990–2001.