

Introduction à l'analyse rétrograde et applications aux systèmes Hamiltoniens. Algèbres de Hopf.

Erwan Faou

INRIA Rennes & ENS Cachan Bretagne

25 novembre 2008

- 1 Phénomènes numériques
- 1 Analyse numérique des équations différentielles et arbres
- 2 Analyse rétrograde
- 3 Systèmes Hamiltoniens
- 4 Estimations rigoureuses : Faire converger une série divergente

Un exemple numérique

Propriétés qualitatives des flots

- Système différentiel sur \mathbb{R}^n

$$\begin{cases} \dot{y}(t) = f(y(t)), & t > 0 \\ y(0) = y_0 \end{cases}$$

- On peut lire tout plein de propriétés qualitatives de la solution directement sur f .

Propriétés qualitatives des flots

Exemple : Modèle de Lotka-Volterra

$$\begin{aligned}\dot{u} &= u(2 - v) \\ \dot{v} &= v(u - 1)\end{aligned}$$

Propriétés qualitatives des flots

Exemple : Modèle de Lotka-Volterra

$$\begin{aligned}\dot{u} &= u(2 - v) \\ \dot{v} &= v(u - 1)\end{aligned}$$

- $(u, v) = (1, 2)$ point stable
- Si $u_0 > 0$ et $v_0 > 0$, c'est vrai pour tout temps.
- Si $I(u, v) = \ln u - u + 2 \ln v - v$ alors

$$\frac{d}{dt} I(u, v) = \frac{1 - u}{u} \dot{u} - \frac{v - 2}{v} \dot{v} = 0.$$

$I(u, v)$ est un **invariant** : les trajectoires sont des courbes fermées.

Méthodes numériques

- Euler Explicite : $y_{n+1} = y_n + hf(y_n)$
- Euler Implicite : $y_{n+1} = y_n + hf(y_{n+1})$
- Euler Symplectique :

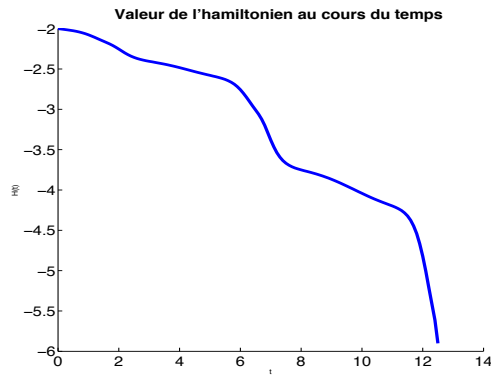
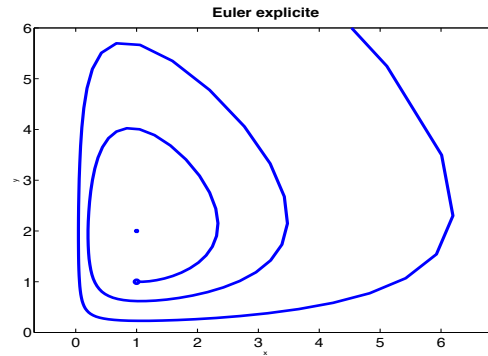
$$\begin{cases} \dot{u} = a(u, v) \\ \dot{v} = b(u, v) \end{cases} \implies \begin{cases} u_{n+1} = u_n + ha(u_{n+1}, v_n) \\ v_{n+1} = v_n + hb(u_{n+1}, v_n) \end{cases}$$

Ici

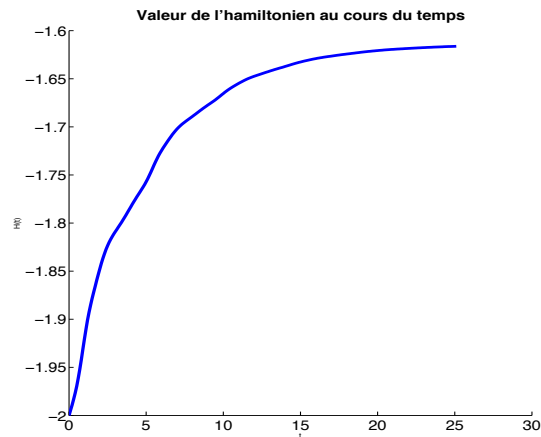
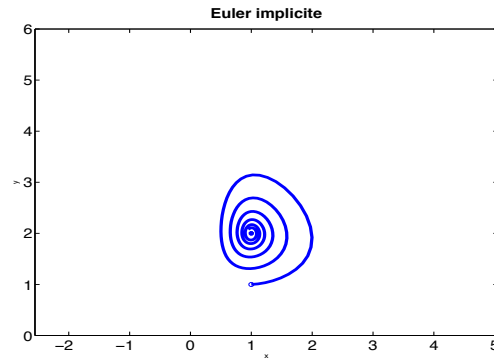
$$u_{n+1} = \frac{u_n}{1 - h(2 - v_n)} \quad \text{et} \quad v_{n+1} = v_n(1 + h(u_{n+1} - 1))$$

- Dans les trois cas : $h = 0.1$.

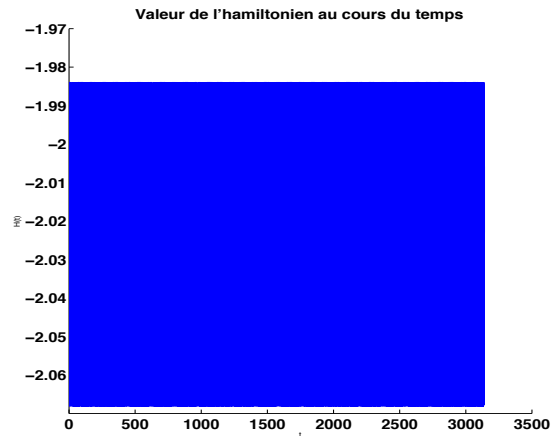
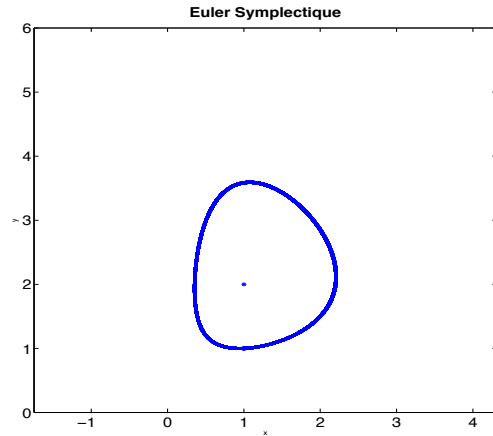
Méthode d'Euler explicite



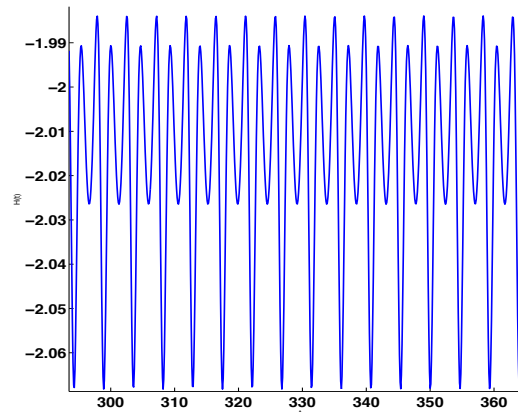
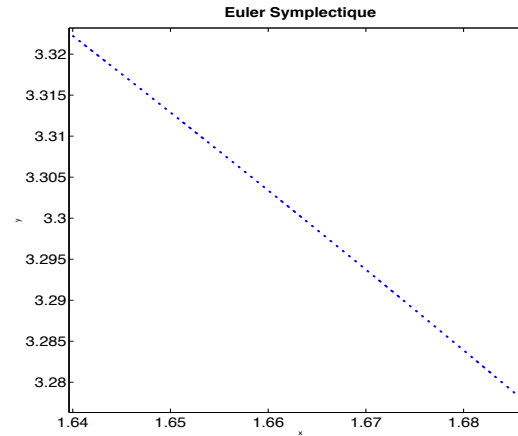
Méthode d'Euler implicite



Méthode d'Euler Symplectique



Méthode d'Euler Symplectique : ZOOM



Commentaires :

Euler explicite et implicite :

- Très mauvais comportement en temps long.
- La fonction H n'est plus un invariant (pas de courbe fermées).

Euler Symplectique :

- Très bon comportement en temps long.
- H n'est pas un invariant exact (oscillations).
- Mais la trajectoire se situe sur une courbe fermée $K(u, v) = 0$.
- Existence d'un invariant modifié ??

Analyse numérique des équations différentielles et arbres

Méthodes numériques

- Pour un système différentiel $\dot{y}(t) = f(y(t))$, par définition

$$y(t) = y(0) + \int_0^t f(y(s)) ds$$

- Méthode numérique : Approximation de l'intégrale. Par exemple
 - ▶ $y(t) \simeq y(0) + tf(y(0))$. **Méthode d'Euler explicite.**
 - ▶ $y(t) \simeq y(0) + tf(y(t))$. **Méthode d'Euler implicite.**
 - ▶ $y(t) \simeq y(0) + \frac{t}{2}(f(y(0)) + f(y(t)))$. **Méthode des trapèzes.**

Méthodes numériques

- Principe : pour simuler $y(t)$, $t > 0$ on subdivise $[0, t]$ en petits intervalles en introduisant des temps discrets $t_n = nh$ où h est un petit **pas de temps**.

- Flot numérique :

$$y_{n+1} = \Phi_h(y_n)$$

où par exemple $\Phi_h(y) = y + hf(y)$ (Euler explicite)

- $\Phi_h(y)$ est une approximation du flot exact $\varphi_t(y)$.
- Après n itération : **y_n est une approximation de $y(t_n)$** .

Convergence d'un schéma numérique

- Principe : on développe en h (Taylor)

$$\begin{aligned}y(h) &= y_0 + hy'(0) + \frac{h^2}{2}y''(0) + \mathcal{O}(h^3) \\ &= y_0 + hf'(y(0)) + \frac{h^2}{2}f'(y(0))f(y(0)) + \mathcal{O}(h^3)\end{aligned}$$

tandis que la solution d'Euler explicite est donnée par

$$y_1 = y_0 + hf(y(0)).$$

donc

$$y(h) - y_1 = \mathcal{O}(h^2). \quad \text{Erreur locale .}$$

- En accumulant, on trouve $y(t_n) - y_n = \mathcal{O}(h)$. Erreur globale .

Méthodes numériques

Euler implicite : Développement de Taylor

$$y_1 = y_0 + hf(y_1)$$

on obtient y_0 in f, f', \dots)

$$y_1 = y_0 + h \underbrace{f}_{=y'} + \mathcal{O}(h^2),$$

$$y_1 = y_0 + h \underbrace{f}_{=y'} + h^2 \underbrace{f'f}_{=y''} + \mathcal{O}(h^3),$$

$$y_1 = y_0 + h \underbrace{f}_{=y'} + h^2 \underbrace{f'f}_{=y''} + h^3 \underbrace{\left(f'f'f + \frac{1}{2}f''(f, f) \right)}_{\neq y^{(3)}=f'f'f+f''(f, f)} + \mathcal{O}(h^4).$$

On voit vite que les notations sont horribles.

Arbres



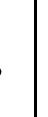






Definition (Arbres racinés)

L'ensemble des arbres racinés (rooted trees) est défini par récurrence :

- ① $\bullet \in \mathcal{T}$, $\sigma(\bullet) = 1$.
- ② si $(t_1, \dots, t_n) \in \mathcal{T}^n$ sont des arbres distincts, alors
 $t = \underbrace{[t_1, \dots, t_1]}_{r_1}, \dots, \underbrace{[t_n, \dots, t_n]}_{r_n} \in \mathcal{T}$ et $\sigma(t) = \prod_{i=1}^n r_i! \sigma(t_i)^{r_i}$.

L'ordre d'un arbre $|t|$ est son nombre de sommets.

Exemples :

Tree t									
Order $ t $	1	2	3	3	4	4	4	4	4
Symetry $\sigma(t)$	1	1	2	1	6	1	2	1	1

Arbres et éléments différentiels

Definition

Pour chaque $t \in \mathcal{T}$, l'élément différentiel $F(t)$ associé à t est l'application de \mathbb{R}^n à \mathbb{R}^n , définie par récurrence par la formule

- 1 $F(\bullet)(y) = f(y)$,
- 2 $F([t_1, \dots, t_n])(y) = f^{(n)}(y) \left(F(t_1)(y), \dots, F(t_n)(y) \right)$.

Exemples

$$\begin{aligned} F(\text{root})(y) &= f'(y)f(y), \\ F(\text{left})(y) &= f'(y)f'(y)f(y), \\ F(\text{right})(y) &= f^{(3)}(y) \left(f(y), f(y), f(y) \right). \end{aligned}$$

Butcher-Series

Definition (B-Series)

Soit $a : \mathcal{T} \rightarrow \mathbb{R}$. On définit $B(a, y)$, la B-series associée à a comme la série formelle

$$B(a, y) = y + \sum_{t \in \mathcal{T}} \frac{h^{|t|}}{\sigma(t)} a(t) F(t) = y + ha(\bullet)f(y) + h^2 a(\bullet\bullet)(f'f)(y) + \dots$$

Par exemple pour la solution exacte de $\dot{y} = f(y)$ on obtient

$$B(1/\gamma, y) = y + hf(y) + \frac{h^2}{2}(f'f)(y) + \frac{h^3}{6}f''(f, f)(y) + \frac{h^3}{6}f'f'f'(y) + \dots$$

Les coefficients $\gamma(t)$ se calculent par la formule

$$\gamma([t_1, \dots, t_n]) = |t|\gamma(t_1) \cdots \gamma(t_n).$$

B-series

- **Euler explicite** : $y + hf(y) = B(a, y)$ avec $a(\bullet) = 1$ et $a(t) = 0$ pour tout $t \neq \bullet$.
- **Euler Implicite** : $Y = y + hf(Y)$ et $y + hf(Y) = B(a, y)$ avec $a(t) = 1$ pour tout $t \in \mathcal{T}$.

Conservation d'invariants

- Soit $I(y)$ un invariant : $I(\varphi_t(y)) = I(y)$ pour tout (t, y) .
- L'"intégrateur" $B(a, y)$ preserve I ssi pour tout y , $I(B(a, y)) = I(y)$.

Theorem

L'intégrateur $B(a, y)$ preserve I pour tout couple (f, I) d'un champ de vecteur f et d'une intégrale première I , si et seulement si $a(\cdot) = 1$ et a satisfait

$$\forall m \geq 2, \forall (t_1, \dots, t_m) \in \mathcal{T}^m, a(t_1) \cdots a(t_m) = \sum_{j=1}^m a(t_j \circ \prod_{i \neq j} t_i).$$

Ici $s \circ \prod_j t_j$ est l'application connectant toutes les racines de t_j à la racine de s .

Analyse rétrograde

Analyse rétrograde

- Existence d'un invariant $I(y)$ pour un système $\dot{y}(t) = f(y(t))$.

Fastoche :

$$\nabla I(y)^T f(y) = \sum_{i=1}^n \partial_{y_i} I(y) f_i(y) \equiv 0.$$

- Pour un flot numérique $y_{n+1} = \Phi(y_n)$

$$I(y_{n+1}) = I(y_n)$$

soit

$$I(\Phi_h(y)) - I(y) \equiv 0$$

Beaucoup plus dur (et non linéaire en f).

Analyse rétrograde

- Soit un flot numérique $\Phi_n(y)$ et une trajectoire numérique

$$\forall n \geq 0, \quad y_{n+1} = \varphi_h(y_n)$$

- Analyse rétrograde : chercher une **équation différentielle modifiée**

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{y}(t) &= f_h(\tilde{y}(t)), \quad t > 0 \\ \tilde{y}(0) &= y_0 \end{aligned}$$

telle que pour toute trajectoire numérique

$$\forall n \geq 0, \quad y_n = \tilde{y}(nh).$$

- Invariant modifié : I_h tel que

$$\nabla I_h^T(y) f_h(y) \equiv 0.$$

Analyse rétrograde

- On cherche f_h sous la forme

$$f_h(y) = f(y) + hf_1(y) + h^2 f_3(y) + \dots$$

- Le flot numérique peut se développer

$$\varphi_h(y) = y + hf(y) + hd_2(y) + \dots$$

- Euler explicite : trivial.
- Euler implicite :

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + hf(y_{n+1}) \\ &= y_n + hf(y_n + hf(y_{n+1})) \\ &= y_n + hf(y_n) + h^2 f'f(y_n) + h^3 \dots \end{aligned}$$

Analyse rétrograde

- Flot modifié : $\tilde{\varphi}_h(y)$ solution de

$$\frac{d}{dt}\tilde{\varphi}_t(y) = f_h(\tilde{\varphi}_t(y)).$$

- On a pour tout s

$$\begin{aligned}\tilde{\varphi}_s(y) &= y + s \frac{d}{dt}\tilde{\varphi}_t(y)|_{t=0} + \frac{s^2}{2!} \frac{d^2}{dt^2}\tilde{\varphi}_t(y)|_{t=0} + \dots \\ &= y + s f_h(y) + \frac{s^2}{2!} f'_h f_h(y) + \dots \\ &= y + s(f(y) + h f_1(y) + h^2 f_2(y) + \dots) \\ &\quad + \frac{s^2}{2!} (f'(y) + h f'_1(y) + \dots) (f(y) + h f_1(y) + \dots) + \dots\end{aligned}$$

Analyse rétrograde

- En faisant $s = h$, on identifie

$$\tilde{\varphi}_h(y) = \Phi_h(y) = y + h d_1(y) + h^2 d_2(y) + \dots$$

- On trouve

$$f_1(y) = d_1(y)$$

$$f_2(y) = d_2(y) - \frac{1}{2!} f' f(y)$$

$$f_3(y) = d_3(y) - \frac{1}{3!} (f''(f, f)(y) + f' f' f(y)) - \frac{1}{2!} (f' f_1(y) + f_1' f(y))$$

- Les $f_n(y)$ s'expriment en termes d'arbres : on peut écrire dans un certain sens $f_h = \log(B(a, y))$.
- Problème : La série est-elle convergente ? Partie 3.

Analyse rétrograde

- Soit $\varphi_h(y)$ le flot exact. On a

$$\varphi_h(y) = y + hf(y) + \frac{h^2}{2!} f'f(y) + \dots$$

- Si $\Phi_h(y) = \varphi_h(y) + \mathcal{O}(h^{p+1})$ alors

$$f_h(y) = f(y) + \mathcal{O}(h^p)$$

- Euler implicite ou explicite : $p = 1$.
- Bonnes propriétés sur les systèmes Hamiltoniens pour les intégrateurs symplectiques....

Systemes Hamiltoniens

Systèmes Hamiltoniens

- Espace des phases : $(p, q) \in \mathbb{R}^{2d}$.
- Systèmes de la forme

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}(p, q) \quad j = 1, \dots, d$$

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}(p, q) \quad j = 1, \dots, d$$

- $H(p, q) \in \mathbb{R}$ Hamiltonien (Energie)
- Mécanique classique

$$H(p, q) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d \frac{p_i^2}{m_i} + V(q_1, \dots, q_d)$$

- Se réécrit

$$m_i \ddot{q}_i = -\partial_{q_i} V(q), \quad i = 1, \dots, d.$$

Exemple

- Cas linéaire (oscillateur harmonique)

$$H(p, q) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d \left(p_i^2 + \omega_i^2 q_i^2 \right)$$

soit

$$\ddot{q}_i = -\omega_i^2 q_i$$

- Solutions de la forme $q_i = A_i \cos(\omega_i t) + B_i \sin(\omega_i t)$.
- Les trajectoires sont des ellipses.
- $d = 1$, décrit les **petites oscillations** du *Pendule*

$$\ddot{q} = -\sin(q)$$

- Plus généralement : Fond d'un puit de potentiel
- Encore plus généralement : Equation aux dérivées partielles ($d \rightarrow \infty$).

Systèmes Hamiltoniens

- Matrice symplectique :

$$J = \begin{pmatrix} 0 & I_d \\ -I_d & 0 \end{pmatrix}$$

- Propriétés :

$$J^T = -J, \quad J^2 = -I_{2d}, \quad J^{-1} = -J$$

- Réécriture d'un système Hamiltonien : $y = (p, q)^T \in \mathbb{R}^{2d}$

$$\dot{y} = J^{-1} \nabla H(y)$$

Systèmes Hamiltoniens

- Conservation de l'énergie : Le long de la solution $y(t)$

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}H(y) &= \nabla H(y)^T J^{-1} \nabla H(y) \in \mathbb{R} \\ &= (\nabla H(y)^T J^{-1} \nabla H(y))^T \\ &= \nabla H(y)^T J^{-T} \nabla H(y) \\ &= -\nabla H(y)^T J^{-1} \nabla H(y) \\ &= 0.\end{aligned}$$

- Conséquence de l'antisymétrie de J .

Transformations symplectiques

- 2-forme symplectique :

$$\omega(\xi, \eta) = \xi^T J \eta, \quad \xi, \eta \in \mathbb{R}^{2d}.$$

- Matrices symplectiques :

$$A^T J A = J$$

(cf. groupe orthogonal)

- Transformation symplectique : $g : \mathbb{R}^{2d} \subset U \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ différentiable

$$(\partial_y g(p, q))^T J \partial_y g(p, q) = J$$

avec

$$\partial_y g(p, q) = \left(\frac{\partial g_i}{\partial y_j}(p, q) \right)_{i,j=1,\dots,d}$$

Théorème de Poincaré (1899)

Soit un système Hamiltonien avec une énergie C^2 .

$$\dot{y} = J^{-1}\nabla H(y)$$

Alors son flot $y \mapsto \varphi_t(y)$ est une transformation symplectique.

Théorème de Poincaré (1899)

- On note $\varphi_t(y_0)$ le flot Hamiltonien et $\Psi_t = \partial_y \varphi_t(y_0)$.
- Equation variationnelle

$$\dot{\Psi}_t = J^{-1} \nabla^2 H(\varphi_t(y_0)) \Psi_t, \quad \Psi_0 = I_{2d}$$

avec

$$\nabla^2 H = \left(\frac{\partial^2 H}{\partial y_i \partial y_j} \right)_{i,j=1,\dots,d}$$

- on dérive

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \Psi^T J \Psi &= \Psi^T \nabla^2 H^T J^{-T} J \Psi + \Psi^T J J^{-1} \nabla^2 H \Psi \\ &= \Psi^T \left(-\nabla^2 H^T + \nabla^2 H \right) \Psi \\ &= 0 \end{aligned}$$

Préserveration du volume

- Puisque $\Psi_t^T J \Psi_t = J$ alors on a

$$\det \Psi_t \equiv 1.$$

- Soit $f : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ une fonction à support compact. Alors

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} f(x) dx = \int_{\mathbb{R}^{2d}} f(\varphi_t(x)) dx$$

- Conservation du volume (vrai pour toute transformation symplectique)
- Important en dynamique moléculaire.

Lien avec l'analyse rétrograde

- Soit un système Hamiltonien

$$\dot{y} = J^{-1} \nabla H(y)$$

- Soit un intégrateur **symplectique** $\Phi_h(y)$:

$$\forall y \in \mathbb{R}^{2d} \quad (\partial_y \Phi_h(y))^T J \partial_y \Phi_h(y) = J.$$

- Alors le champ modifié f_h est Hamiltonien :

$$f_h(y) = J^{-1} \nabla H_h(y)$$

où

$$H_h(y) = H(y) + h^p H_p(y) + h^{p+1} H_{p+1}(y) + \dots$$

- On a donc $f_j(y) = J^{-1} \nabla H_j(y)$ pour tout $j \geq 1$.

Lemme d'intégrabilité

Lemme : Soit $D \subset \mathbb{R}^n$ un ouvert étoilé, et $f : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ de classe C^1 . Supposons que le jacobien $\partial_y f(y)$ soit symétrique pour tout $y \in D$. Alors il existe une fonction H sur D telle que

$$f(y) = \nabla H(y)$$

Preuve :

$$H(y) = \int_0^1 y^T f(ty) dt = \sum_{j=1}^n \int_0^1 y_j f_j(ty) dt.$$

On a

$$\begin{aligned} \frac{\partial H}{\partial y_k}(y) &= \int_0^1 \left(f_k(ty) + \sum_{j=1}^n y_j \frac{\partial f_j}{\partial y_k}(ty) \right) dt \\ &= \int_0^1 \frac{d}{dt} \left(t f_k(ty) \right) dt = f_k(y) \end{aligned}$$

Champs modifié Hamiltonien

- Champs modifié

$$f(y) = J^{-2}\nabla H(y) + hf_1(y) + h^2f_2(y) + \dots$$

- Supposons que $f_j(y) = J^{-1}\nabla H_j(y)$ pour $j = 0, \dots, r-1$.
- On considère le champ

$$f^{[r]}(y) = f_0(y) + \dots + h^{r-1}f_{r-1}(y)$$

et le flot associé $\varphi_h^{[r]}(y)$

- alors on a

$$\Phi_h(y) = \varphi_h^{[r]}(y) + h^r f_r(y) + \mathcal{O}(h^{r+1}).$$

et

$$\partial_y \Phi_h(y) = \partial_y \varphi_h^{[r]}(y) + h^r \partial_y f_r(y) + \mathcal{O}(h^{r+1}).$$

Champs modifié Hamiltonien

- On a donc

$$\begin{aligned} J &= (\partial_y \Phi_h)^T J \partial_y \Phi_h \\ &= (\partial_y \varphi_h^{[r]})^T J \partial_y \varphi_h^{[r]} + h^r \left((\partial_y f_r)^T J + J \partial_y f_r \right) + \mathcal{O}(h^{r+1}) \\ &= J + h^r \left((\partial_y f_r)^T J + J \partial_y f_r \right) + \mathcal{O}(h^{r+1}) \end{aligned}$$

D'où

$$(J \partial_y f_r)^T = J \partial_y f_r$$

- Et on conclut par le lemme d'intégrabilité.

Exemples d'intégrateurs symplectiques

Point milieu

$$y_{n+1} = y_n + J^{-1} \nabla H \left(\frac{y_n + y_{n+1}}{2} \right)$$

On calcule que

$$\left(I - \frac{h}{2} J^{-1} \nabla^2 H \right) \partial_y \Phi_h = \left(I + \frac{h}{2} J^{-1} \nabla^2 H \right)$$

et on montre directement la symplecticité.

Exemples d'intégrateurs symplectiques

Point milieu

$$y_{n+1} = y_n + J^{-1} \nabla H \left(\frac{y_n + y_{n+1}}{2} \right)$$

On calcule que

$$\left(I - \frac{h}{2} J^{-1} \nabla^2 H \right) \partial_y \Phi_h = \left(I + \frac{h}{2} J^{-1} \nabla^2 H \right)$$

et on montre directement la symplecticité.

Euler symplectique

Exemples d'intégrateurs symplectiques

Point milieu

$$y_{n+1} = y_n + J^{-1} \nabla H \left(\frac{y_n + y_{n+1}}{2} \right)$$

On calcule que

$$\left(I - \frac{h}{2} J^{-1} \nabla^2 H \right) \partial_y \Phi_h = \left(I + \frac{h}{2} J^{-1} \nabla^2 H \right)$$

et on montre directement la symplecticité.

Euler symplectique

Comme son nom l'indique !

Exemples d'intégrateurs symplectiques

Schéma de Störmer-Verlet

- Hamiltoniens :

$$H(p, q) = \frac{1}{2} p^T p + V(q)$$

- Le schéma s'écrit

$$p_{n+1/2} = p_n - \frac{h}{2} \nabla_q V(q_n)$$

$$q_{n+1} = q_n + h p_{n+1/2}$$

$$p_{n+1} = p_{n+1/2} - \frac{h}{2} \nabla_q V(q_{n+1})$$

- Schéma symplectique. Peut-être vu comme schéma de *splitting*.

Intégrateurs symplectiques et B-series

- Intégrateur Φ_h associé à une B-series $B(a, y)$.
- Alors Φ_h est symplectique si et seulement si

$$a(t_1)a(t_2) = a(t_2 \circ t_1) + a(t_1 \circ t_2).$$

- La même condition que pour la conservation des **invariants quadratiques** .

Estimations rigoureuses

Le cas linéaire

- Systèmes linéaires ($A \in M_n(\mathbb{R})$).

$$\dot{y} = Ay$$

- Considérons le point milieu

$$y_{n+1} = y_n + hA\left(\frac{y_n + y_{n+1}}{2}\right)$$

soit

$$y_{n+1} = \left(I - \frac{h}{2}A\right)^{-1} \left(I + \frac{h}{2}A\right) y_n =: R(hA)y_n$$

- $R(hA)$ fonction de stabilité.

Le cas linéaire

- On a donc ($t_n = nh$)

$$y_n = R(hA)^n y_0 = R(hA)^{t_n/h} y_0$$

- D'où

$$\tilde{y}(t) = R(hA)^{t/h}.$$

- Et donc

$$\dot{\tilde{y}}(t) = \frac{1}{h} \ln R(hA) \tilde{y}(t)$$

- **Matrice modifiée :**

$$\frac{1}{h} \ln R(hA) = A + hb_1 A^2 + h^2 b_3 A^3 + \dots$$

Série **convergente** pour h assez petit.

Cas général

- Cas général : $\dot{y} = f(y)$ et intégrateur Φ_h .
- Soit un compact $K \subset \mathbb{R}^n$ supposons que f soit analytique sur une boule complexe contenant K

$$\exists M, R \text{ t.q. } \forall j \geq 0, \quad \|f_j\| \leq M \left(\frac{j}{R}\right)^j.$$

- $\|\cdot\|$ norme sup sur la boule.
- Outils : Combinatoire (séries génératrices) + estimation de Cauchy.

Séries divergentes !

- Problème :

$$\|f_h\| \leq M \sum_{j \geq 0} \left(\frac{hj}{R}\right)^j = +\infty.$$

- La série diverge pour tout $h > 0$
- Mais on peut toujours écrire (Taylor)

$$\begin{aligned} \|f_h\| &\leq M \sum_{j \geq 0}^{N-1} \left(\frac{hj}{R}\right)^j + \left(\frac{hN}{\rho}\right)^N \\ &= \|F_N(y)\| + R_N \end{aligned}$$

Troncature optimale

- $R_N = \left(\frac{hN}{\rho}\right)^N$. On prend

$$N \simeq \frac{\rho}{he}$$

- Le reste s'écrit

$$R_N = \left(\frac{hN}{\rho}\right)^N = e^{-N} = \exp\left(-\frac{c}{h}\right)$$

- De plus, pour ce N on peut montrer que

$$\|F_N(y)\| < C \quad \text{et} \quad \|f(y) - F_N(y)\| < Ch^p$$

Flot modifié

- Si maintenant on pose $\tilde{\varphi}_h$ le flot de $F_N(y)$ alors

$$\|\Phi_h(y) - \tilde{\varphi}_h(y)\| \leq hC \exp\left(-\frac{c}{h}\right)$$

tant que $y \in K$.

Flot modifié

- Si maintenant on pose $\tilde{\varphi}_h$ le flot de $F_N(y)$ alors

$$\|\Phi_h(y) - \tilde{\varphi}_h(y)\| \leq hC \exp\left(-\frac{c}{h}\right)$$

tant que $y \in K$.

- Dans le cas Hamiltonien, si Φ_h est symplectique alors

$$F_N(y) = J^{-1}\nabla H_N(y)$$

où

$$H_N(y) = H(y) + h^p H_p(y) + \cdots + h^{N-1} H_{N-1}(y)$$

est donc un **invariant du flot modifié**.

Hamiltonien modifié

- Soit $y_{n+1} = \Phi_h(y_n)$ la trajectoire numérique Alors

$$\begin{aligned} |H_N(y_{n+1}) - H_N(y_n)| &= |H_N(\Phi_h(y_n)) - H_N(\tilde{\varphi}_h(y_n))| \\ &\leq hC \exp\left(-\frac{c}{h}\right) \end{aligned}$$

tant que $y_n \in K$. (H_N uniformément Lipschitz en h ...)

- En accumulant, on a donc

$$|H_N(y_n) - H_N(y_0)| \leq nhC \exp\left(-\frac{c}{h}\right)$$

C'est le *shadow hamiltonian*.

Oscillations du vrai hamiltonien

- On a

$$|H_N(y_n) - H_N(y^0)| \leq nhC \exp\left(-\frac{c}{h}\right)$$

d'où

$$|H(y_n) - H(y_0)| \leq Ch^p + nhC \exp\left(-\frac{c}{h}\right)$$

soit

$$\forall nh \leq \exp\left(\frac{c}{2h}\right), \quad |H(y_n) - H(y_0)| \leq Ch^p$$

- Conservation du Hamiltonien sur des temps exponentiellement longs.

Retour sur Lotka Volterra

- Le système initial est symplectique après changement de variable

Retour sur Lotka Volterra

- Le système initial est symplectique après changement de variable
- Euler symplectique aussi !

Retour sur Lotka Volterra

- Le système initial est symplectique après changement de variable
- Euler symplectique aussi !

Référence :

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