

Problèmes d'ergodicité en dynamique moléculaire: Théorie KAM et shakers stochastiques.

Erwan Faou

INRIA Rennes
ENS Cachan Bretagne

- 1 Principe de la dynamique moléculaire
- 2 Intégrateurs symplectiques et analyse rétrograde
- 3 Introduction à la théorie KAM
- 4 Shakers stochastiques et EDS conservatives

Principe de la dynamique moléculaire

Dynamique moléculaire

- Les molécules obéissent aux lois de la dynamique classique (Newton).
- Degrés de libertés des particules: $q = (q_i)_{i=1}^d \in \mathbb{R}^d$,
 d TRES GRAND (de 2 à 10^6).
- Equations du mouvement:

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

$V(q)$ potentiel. Typiquement

$$V(q_1, \dots, q_d) = \sum_{i \neq j} \frac{\sigma_{ij}}{\|q_i - q_j\|}$$

Système du premier ordre (p vitesse ou moment)

$$\dot{q}_i = p_i / m_i, \quad \text{et} \quad p_i = -\partial_{q_i} V(q).$$

Dynamique moléculaire

Systèmes Hamiltoniens:

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

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

$H(p, q) \in \mathbb{R}$ Hamiltonien (Energie) . Ici:

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

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:

$$A^T J A = J$$

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

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

avec

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

Si g est symplectique et si $z = g(y)$, alors

$$\dot{y} = J^{-1} \nabla H(y) \quad \text{devient} \quad \dot{z} = J^{-1} \nabla K(z) \quad \text{avec} \quad K \circ g = H$$

Flot symplectique

Théorème (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.

Preuve: si $\Psi_t = \partial_y \varphi_t(y_0)$. Alors

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

on dérive

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

Préservation du volume

Puisque $\partial_y \varphi_t(y)^T J \partial_y \varphi_t(y) = J$, alors on a

$$\det \partial_y \varphi_t(y) \equiv 1.$$

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

Principe de la dynamique moléculaire

Deux propriétés essentielles des systèmes Hamiltoniens:

- Conservation de l'énergie

$$\forall t \geq 0, \quad H(y(t)) = H(y(0))$$

- Conservation du volume

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

car le flot est symplectique .

Principe de la dynamique moléculaire

Surfaces d'isoenergie

$$\Sigma_z := \{y \in \mathbb{R}^{2d} \mid H(y) = z\}$$

Formule de la coaire

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} f(y) dy = \int_{\mathbb{R}} dz \int_{\Sigma_z} f(y) \frac{d\sigma(y)}{\|\nabla H(y)\|}.$$

Conservation de l'énergie et du volume

$$\int_{\mathbb{R}} dz \int_{\Sigma_z} f(y) \frac{d\sigma(y)}{\|\nabla H(y)\|} = \int_{\mathbb{R}} dz \int_{\Sigma_z} f(\varphi_t(y)) \frac{d\sigma(y)}{\|\nabla H(y)\|}.$$

Principe de la dynamique moléculaire

Conservation de la **mesure microcanonique**

$$d\mu_z = \frac{d\sigma(y)}{\|\nabla H(y)\|} \quad \text{sur} \quad \Sigma_z.$$

Moyenne NVE sur une surface d'isoénergie Σ_z

$$\langle f \rangle_{NVE} = \int_{\Sigma_z} f(y) \frac{d\sigma(y)}{\|\nabla H(y)\|}.$$

C'est elle qui intéresse les chimistes (quantité macroscopique).

f observable

Principe de la dynamique moléculaire

Pour des grands systèmes, on espère que le système est ergodique:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T f(\varphi_t(y)) dt = \langle f \rangle_{NVE}.$$

On simule le **membre de gauche** pour calculer le **membre de droite**

$$\frac{1}{T} \int_0^T f(\varphi_t(y)) dt \simeq \frac{1}{K} \sum_{k=0}^K f(y_k)$$

où les y_k sont obtenus par discrétisation d'une ODE Hamiltonienne en temps T long .

Principe de la dynamique moléculaire

- **Problème 1** : Comment simuler des y_k qui préservent la mesure microcanonique?
- **Problème 2** : En général, l'hypothèse ergodique est fausse
- **Problèmes $n + 1$** : En pratique:
 - ▶ Calculs très lourds (codes “usines à gaz”)
 - ▶ trajectoires ne visitent pas tout l'espace des phases
 - ▶ autres mesures que NVE
 - ▶ etc..

Intégrateurs symplectiques et analyse rétrograde

Approximation numérique des systèmes Hamiltoniens

Système

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

Flot exact: $\varphi_t(y)$.

Flot numérique: $\Phi_h(y) \simeq \varphi_h(y)$ pour un petit pas de temps h .

Trajectoire discrète:

$$y_{n+1} = \Phi_h(y_n) \simeq \varphi_{t_{n+1}}(y), \quad t_n = nh.$$

Approximation d'une trajectoire **en temps fini** : bien compris
Méthodes d'ordre élevé: erreur en h^p (Runge-Kutta, splitting, etc..)

Approximation numérique des systèmes Hamiltoniens

Problématique en dynamique moléculaire:

Conservation d'une énergie et du volume en des temps **TRES LONGS**
(pour faire la moyenne ergodique).

Sans pour autant approcher une trajectoire exacte (**sampling**) .

Emploi de schémas d'intégration **symplectiques**

Approximation numérique des systèmes Hamiltoniens

Exemple: Schéma de Störmer- Verlet $H(p, q) = \frac{1}{2}p^T M^{-1}p + V(q)$.
 $(p_1, q_1) = \Phi_h(p_0, q_0)$ défini par

$$p^{1/2} = p_0 - \frac{h}{2}\nabla_q V(q_0)$$

$$q_1 = q_0 + h \frac{p^{1/2}}{m_k}$$

$$p_1 = p^{1/2} - \frac{h}{2}\nabla_q V(q_1)$$

Méthode de composition: $H(q, p) = T(p) + V(q)$

$$\varphi_t^V : \begin{cases} \dot{q} = 0 \\ \dot{p} = -\nabla V(q) \end{cases} \quad \varphi_t^T : \begin{cases} \dot{q} = M^{-1}p \\ \dot{p} = 0 \end{cases}$$

Approximation numérique des systèmes Hamiltoniens

Schéma de Verlet: schéma de **splitting** associé à la décomposition

$$H(p, q) = T(p) + U(q).$$

$$\Phi_h(p_0, q_0) = \varphi_{h/2}^V \circ \varphi_h^T \circ \varphi_{h/2}^V(p_0, q_0) \simeq \varphi_h^{T+V}(p_0, q_0)$$

Conséquence: **schéma symplectique** $\partial_{y_0} \Phi_h(y_0)^T J \partial_{y_0} \Phi_h(y_0) = J$

Donc **le schéma préserve le volume** .

Analyse rétrograde

Problème: a-t'on la conservation de l'énergie $H = T(p) + U(q)$?

Analyse rétrograde : Peut-on écrire le flot numérique comme un flot exact

$$\varphi_{h/2}^V \circ \varphi_h^T \circ \varphi_{h/2}^V = \varphi_h^{\tilde{H}_h}$$

Avec \tilde{H}_h un **Hamiltonien modifié**

$$\tilde{H}_h = T + V + \mathcal{O}(h^p)$$

qui est préservé le long du flot numérique.

Analyse rétrograde

Cas **linéaire**

$$\frac{d}{dt}y = (A + B)y.$$

Solution: $\varphi_t(y) = \exp(t(A + B))y$.

Formule de Baker-Campbell-Hausdorff: Pour h assez petit

$$\exp(hA)\exp(hB) = \exp(C(h))$$

avec

$$C(h) = h(A + B) + \frac{h^2}{2}[A, B] + \sum_{k \geq 3} h^k C_k$$

avec $[A, B] = AB - BA$. C_k empilement de commutateurs.

Cette série converge pour

$$h(\|A\| + \|B\|) < 2\pi.$$

Analyse rétrograde

Pour le splitting de **Strang**

$$\exp(hA/2) \exp(hB) \exp(hA/2) = \exp(C(h))y$$

avec

$$C(h) = h(A + B) + h^3 \left(-\frac{1}{24}[A, [A, B]] + \frac{1}{12}[B, [B, A]] \right) + \sum_{k \geq 4} h^k C_k$$

Le schéma de Verlet est d'ordre 2 (contre ordre 1 pour le schéma de Lie).

$$\| \exp(hA/2) \exp(hB) \exp(hA/2) - \exp(h(A + B)) \| = \mathcal{O}(h^3).$$

$$\| \exp(hA) \exp(hB) - \exp(h(A + B)) \| = \mathcal{O}(h^2).$$

Analyse rétrograde

Cas non linéaire: $H = T + V$. Alors formellement on peut écrire

$$\varphi_h^T \circ \varphi_h^V = \varphi_h^{Z(h)}$$

avec

$$Z(h) = T + V + \frac{h}{2}\{T, V\} + \sum_{k \geq 4} t^k Z_k$$

Où cette fois $\{K, Q\}$ est le crochet de Poisson

$$\{K, Q\} = (\nabla K^T)(J^{-1})(\nabla V) = \sum_{i=1}^d \frac{\partial K}{\partial q_i} \frac{\partial Q}{\partial p_i} - \frac{\partial K}{\partial p_i} \frac{\partial Q}{\partial q_i}$$

Lien formel:

$$\varphi_t^H = \exp(tD_H)$$

où D_H est l'opérateur différentiel associé à H : $D_H[g] = g'J\nabla H$.

Analyse rétrograde

Formellement on peut trouver une solution $Z(t) = \sum_{k \geq 0} h^k Z_k$

Estimation analytique (dur):

$$|Z_k(y)| \leq (Ck)^k. \quad \text{La série diverge.}$$

Troncature à un ordre N :

$$\varphi_h^T \circ \varphi_h^V = \varphi_h^{Z_N(t)} + \mathcal{O}(h^N (CN)^N)$$

On prend alors $N = 1/(Ceh)$. Le reste s'écrit

$$t^N (CN)^N = e^{-N} = e^{-c/h}$$

Tout petit....

En fait le résultat est très général

Analyse rétrograde

Théorème (Benettin & Giorgilli (1994), Hairer & Lubich (1997))

Soit Φ_h un intégrateur symplectique d'ordre p , et $y_{n+1} = \Phi_h(y_n)$, $n \geq 0$

On suppose que $\{y_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ est bornée.

Alors à des termes d'erreurs TRES petits ($\exp(-c/h)$) près, y_n coïncide avec la solution exacte $\tilde{y}(nh)$ s'un système hamiltonien modifié

$$\frac{d\tilde{y}}{dt}(t) = J^{-1} \nabla \tilde{H}_h(\tilde{y}(t))$$

sur des temps TRES longs ($nh \leq \exp(c/h)$) et on a

$$\tilde{H}_h(y) = H(y) + \mathcal{O}(h^p)$$

Conséquence:

$$\forall nh \leq \exp(c/h), \quad |H(y_n) - H(y_0)| \leq Ch^p.$$

Analyse rétrograde

En résumé pour le schéma de Verlet on a

- Conservation du volume (car schéma symplectique)
- Conservation d'une énergie modifiée $\tilde{H} = H + \mathcal{O}(h^2)$
- Et donc conservation d'une mesure microcanonique modifiée

$$\frac{d\sigma(y)}{\|\nabla\tilde{H}\|} \quad \text{sur} \quad \tilde{\Sigma} = \{ \tilde{H}(y) = \tilde{H}(y_0) \}.$$

Alors on a gagné?

Contre exemple

Exemple

$$H(p_1, p_2, q_1, q_2) = \frac{1}{2}p_1^2 + \frac{1}{2}p_2^2 + V(q_1, q_2)$$

avec

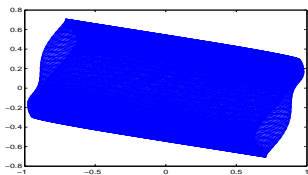
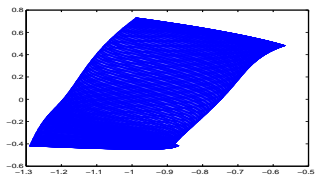
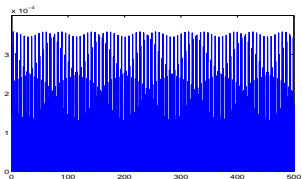
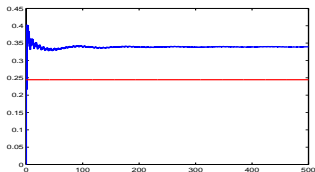
$$V(q_1, q_2) = \frac{1}{2}\omega_1^2 q_1^2 + \frac{1}{2}\omega_2^2 q_2^2 + \mathcal{O}(q^3).$$

Valeur initiale: proche de $(p, q) = (0, 0)$...
et donc le reste (conservation de l'énergie).

La dynamique est proche de celle l'oscillateur harmonique.

Approximation par le schéma de Verlet.

Contre exemple



Bonne conservation de l'énergie, mais les moyennes temporelles sont fausses....

Explication: Théorie KAM.

Introduction à la théorie KAM

Oscillateur harmonique et variables action-angles

Collection d'oscillateurs harmoniques:

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

où $\Omega^2 = \text{diag}(\omega_1^2, \dots, \omega_d^2)$.

Chaque paire (p_i, q_i) oscille dans son coin à la fréquence ω_i :

$$\ddot{q}_i + \omega_i^2 q_i = 0.$$

Géométriquement: **Invariants** $I_i = \frac{1}{2}p_i^2 + \frac{1}{2}\omega_i^2 q_i^2$ satisfont

$$\{I_i, I_j\} = 0 \quad \text{et donc} \quad \{I_j, H\} = 0.$$

Oscillateur harmonique et variables action-angles

Changement de variables action-angle: On pose

$$p_i = \sqrt{2a_i} \cos \theta_i \quad \text{et} \quad q_i = \frac{\sqrt{2a_i}}{\omega_i} \sin \theta_i.$$

$(p_i, q_i) \mapsto (a_i, \theta_i) \in \mathbb{R} \times \mathbb{T}$ est **symplectique**. $a_i = I_i = \frac{1}{2}p_i^2 + \frac{1}{2}\omega_i^2 q_i^2$.

La dynamique s'écrit

$$\forall i = 1, \dots, d, \quad \begin{cases} \dot{a}_i &= 0 \\ \dot{\theta}_i &= \omega_i \end{cases}$$

Hamiltonien:
$$H(a, \theta) = \sum_{i=1}^d \omega_i a_i.$$

Systèmes complètement intégrables

Système **complètement intégrable**: il existe (localement) des variables action-angles $(a, \theta) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{T}^d$ telles que

$$(p, q) \mapsto (a, \theta) \text{ symplectique}$$

et telle que dans les nouvelles variables, $H(p, q) = K(a)$ ne dépende que de a . Dynamique:

$$\begin{cases} \dot{a} &= 0 \\ \dot{\theta} &= \omega(a) \end{cases}$$

avec $\omega(a) = \partial_a K(a)$.

Conséquence: le tore $a = a_0$ est invariant
(mauvais pour l'ergodicité par rapport à NVE).

Systèmes complètement intégrables

Théorème (Arnold-Liouville)

Soit un système hamiltonien associé à $H : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}$ dont les trajectoires restent bornées en tout temps.

Alors s'il existe d fonctions I_j , avec $I_1 = H$ en involution $\{I_i, I_j\} = 0$ telles que les gradients ∇I_j soit linéairement indépendant en tout points. Alors le système est localement complètement intégrable: il existe des variables action-angles (a, θ) locales autour d'un tore $\{a_0\} \times \mathbb{T}^d$.

Exemples: Kepler, Toda lattice, discrétisation de NLS, etc...

Les variables a sont les actions.

Théorie des perturbations

Problématique: que dire des **perturbations** de systèmes intégrables?

$\varepsilon > 0$, Hamiltonien

$$H^\varepsilon(a, \theta) = H_0(a) + \varepsilon H_1(a, \theta).$$

Dynamique:

$$\begin{cases} \dot{a} &= -\varepsilon \partial_\theta H_1(a, \theta) \\ \dot{\theta} &= \omega(a) + \varepsilon \partial_a H_1(a, \theta). \end{cases}$$

Meta-théorème : Sous une condition *générique* de non résonance sur ω , le système $H^\varepsilon(a, \theta)$ reste complètement intégrable.

Il existe une transformation symplectique $(a, \theta) \mapsto (b, \psi)$ telle que

$$H^\varepsilon(a, \theta) = K^\varepsilon(b)$$

En plus, $b = a + \mathcal{O}(\varepsilon)$ et $\psi = \theta + \mathcal{O}(\varepsilon)$

Théorie des perturbations

Principe d'attaque: on cherche une transformation

$$(b, \psi) = \varphi_\varepsilon^\chi(a, \theta)$$

où $\chi(a, \theta) = \chi^\varepsilon$ est un Hamiltonien à déterminer.

Changement de variables:

$$H^\varepsilon(a, \theta) = K^\varepsilon(\varphi_\varepsilon^\chi(a, \theta)).$$

Pour tout Hamiltonien G

$$\begin{aligned} G(\varphi_\varepsilon^\chi(a, \theta)) &= G(a, \theta) + \varepsilon \nabla G^T \frac{d}{d\varepsilon} \varphi_\varepsilon^\chi(a, \theta) \Big|_{\varepsilon=0} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ &= G + \varepsilon (\nabla G)^T J^{-1}(\nabla H) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ &= G + \varepsilon \{G, \chi\} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

Théorie des perturbations

On veut $K^\varepsilon(b, \psi) = K_0(b) + \varepsilon K_1(b) + \dots$

$$\begin{aligned} H^\varepsilon(a, \theta) &= H_0(a) + \varepsilon H_1(a, \theta) \\ &= K^\varepsilon(\varphi_\varepsilon^\chi(a, \theta)) \\ &= K^\varepsilon + \varepsilon\{K^\varepsilon, \chi\} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ &= K_0(a) + \varepsilon\left(\{K_0, \chi\}(a, \theta) + K_1(a)\right) + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

On obtient donc $K_0(a) = H_0(a)$ et

$$\{H_0, \chi_0\}(a, \theta) + K_1(a) = H(a, \theta).$$

Equation homologique. A l'ordre n , $\chi^\varepsilon = \sum_{k \geq 0} \varepsilon^k \chi_k$

$$\{H_0, \chi_n\} + K_n = G_n(\chi_j, K_j \mid j < n).$$

Théorie des perturbations

Supposons qu'on y arrive. Par récurrence, χ_n . On pose

$$\chi^{(n)} = \chi_0 + \varepsilon\chi_1 + \cdots + \varepsilon^n\chi_n.$$

$$H^\varepsilon(\mathbf{a}, \theta) = (K_0 + \varepsilon K_1 + \cdots + \varepsilon^n K_n)(\mathbf{b}) + \mathcal{O}(\varepsilon^{n+1}).$$

Transformation action angle

$$(\mathbf{b}, \psi) = \varphi_\varepsilon^{\chi^{(n)}}(\mathbf{a}, \theta) = (\mathbf{a}, \theta) + \mathcal{O}(\varepsilon).$$

Et le système dans les nouvelles variables est donc intégrable à ε^{n+1} près...

Equation homologique

Clef: résolution de l'équation homologique.

Soit $G(a, \theta)$ donné. Trouver $\chi(a, \theta)$ et $G(a)$ tels que:

$$\{H_0, \chi\}(a, \theta) + K(a) = G(a, \theta).$$

- C'est une équation de transport pour le flot hamiltonien.
- Problème: cette équation à un gros noyau (toute fonction ne dépendant que de a).

Equation homologique

$$\{H_0, \chi\}(a, \theta) + K(a) = G(a, \theta).$$

On a

$$\begin{aligned}\{H_0, \chi\}(a, \theta) &= \frac{\partial H_0}{\partial a} \cdot \frac{\partial \chi}{\partial \theta} - \frac{\partial H_0}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \chi}{\partial a} \\ &= \omega(a) \cdot \partial_\theta \chi(a, \theta).\end{aligned}$$

L'équation s'écrit donc

$$\omega(a) \cdot \partial_\theta \chi(a, \theta) = G(a, \theta) - K(a).$$

On décompose tout le monde en série de Fourier:

$$\chi(a, \theta) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} \chi_k(a) e^{ik \cdot \theta}, \quad G(a, \theta) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} G_k(a) e^{ik \cdot \theta},$$

Equation homologique

L'équation en Fourier de

$$\omega(a) \cdot \partial_\theta \chi(a, \theta) = G(a, \theta) - K(a).$$

Pour $k = 0$:

$$K(a) = G_0(a) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{T}^d} G(a, \theta) d\theta$$

Pour $k \neq 0$,

$$[ik \cdot \omega(a)] \chi_k(a) = G_k(a).$$

avec pour $k = (k_1, \dots, k_d) \in \mathbb{Z}^d$, $k \cdot \omega = k_1 \omega_1 + \dots + k_d \omega_d$.

La solution dépend donc de la présence de **petits diviseurs** $k \cdot \omega(a) \simeq 0$.

Equation homologique

Hypothèse de non résonance (Siegel): Il existe γ et ν tels que

$$\forall k \neq 0, \quad |k \cdot \omega| \geq \frac{\gamma}{|k|^\nu} \quad (1)$$

avec $\omega = \omega(a_0)$ fixé. **Hypothèse fair-play?** Si $\nu > d - 1$, alors

$$\text{meas}\{\omega \in \mathbb{R}^d \mid \|\omega\| \leq B \text{ et } \omega \text{ ne satisfait pas (1)}\} \leq C\gamma.$$

Donc presque tous les ω satisfont la condition pour un certain γ .

Equation homologique

On suppose $G(a, \theta)$ analytique: dans un voisinage de a_0 on a

$$|G_k(a)| \leq C e^{-|k|\rho}$$

Alors sous l'hypothèse de non résonance, on peut définir

$$\chi(a, \theta) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^d | k \neq 0} \frac{G_k}{ik \cdot \omega(a)} e^{ik \cdot \theta}$$

On a

$$|\chi(a, \theta)| \leq C \sum_{k \in \mathbb{Z}^d | k \neq 0} |k|^\nu e^{-\rho|k|} < \infty$$

On a donc défini K_1 et χ_0 . Et après on itère!!

Attention: ω dépend en réalité de a ... Mais l'estimation diophantienne reste vrai uniformément, pour des fréquences assez élevées: C'est l'*ultraviolet cut-off* d'Arnold (1963).

Le nouveau système

Variables (b, ψ) dans un voisinage de $\{a_0\} \times \mathbb{T}^d$

Dynamique:

$$\begin{cases} \dot{b} = \mathcal{O}(\varepsilon^{N+1}) \\ \dot{\psi} = \omega_\varepsilon(b) + \mathcal{O}(\varepsilon^{N+1}) \end{cases}$$

avec $\omega_\varepsilon(b) = \partial_a K^\varepsilon(b) = \omega(b) + \varepsilon \partial_a K_1(a) + \dots$.

De plus, le changement de variable est proche de l'identité

$$(b, \theta) = (a, \theta) + \mathcal{O}(\varepsilon)$$

On a donc

$$\begin{cases} \|b(t) - b(0)\| \leq \varepsilon \\ \|\psi(t) - t\omega_\varepsilon(b(0)) - \psi(0)\| \leq \varepsilon \end{cases} \quad \text{pour } t \leq C_N \varepsilon^{-N}.$$

50 ans de KAM

Donc une perturbation de système complètement intégrable est presque complètement intégrable, sur des temps très longs...

Dans cette même direction

- On peut rendre le ε^N en $\exp(-\varepsilon^{-\alpha})$ (Nekhoroshev 77).
- On peut faire converger le processus (Eliasson 96)
- On peut utiliser un autre type de transformation, où $\varepsilon = 1$ mais $H = \mathcal{O}(\|b\|^2)$ et le reste est en $\|b\|^N$ (Pöschel 63, méthode de Birkhoff).
- On peut itérer différemment le processus en résolvant avec les nouveau $\omega_\varepsilon = \omega + \varepsilon\omega_1$. Alors on a des reste en ε^{2^n} qui vont converger. C'est le théorème KAM: Kolmogorov (54)- Arnold (63) - Moser (62).
Stabilité des tores invariants.
- Mêmes questions sur les EDPs... (Bourgain, Kuksin, Eliasson, Pöschel, Bambusi, Grébert...) des années 90 à aujourd'hui.

Et les intégrateurs symplectiques?

$H_0(y)$ hamiltonien complètement intégrable. Φ_h méthode symplectique.

Trajectoire numérique \simeq solution d'un système Hamiltonien modifié

$$\tilde{H}_h = H_0 + hH_1 + h^2H_2 + \dots$$

sur des temps exponentiellement longs $\exp(c/h)$.

Perturbation de systèmes intégrables ($\varepsilon = h$) .

Technique des perturbations s'applique!

Théorème (Hairer-Lubich-Wanner (2002))

Soit H un hamiltonien complètement intégrable, I_j ses d invariants et (p_n, q_n) la trajectoire obtenue par une méthode numérique symplectique d'ordre p . Alors si on démarre au voisinage d'un tore invariant $I_j = I_j^0$ non résonnant on a

$$\|I_j(p_n, q_n) - I_j(p_0, q_0)\| \leq Ch^p \quad \text{pour} \quad t = nh \leq \exp(-h^{-\alpha})$$

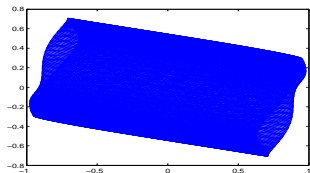
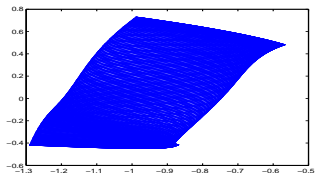
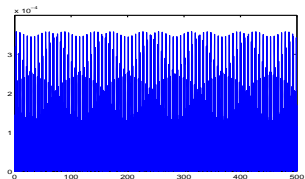
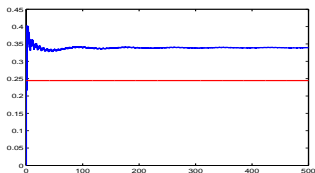
Preuve: combine analyse rétrograde et théorie des perturbations. Le théorème est encore vrai pour des perturbations de systèmes intégrables.

Extension possible aux résultats type Birkhoff et KAM.

Extension aux EDP: Faou, Grébert, Patrel (2008)

Cohen, Gauckler, Hairer, Lubich (2008).

HLW - KAM



Ce qu'on voit, ce sont des projections de tores.

Retour au problème de dynamique moléculaire

- Théorie KAM: mauvaise nouvelle pour la dynamique moléculaire!
- Les tores invariants de dimension d sont stables, et donc pas d'espoir d'être ergodique pour la mesure NVE qui est portée par les surfaces d'isoénergie (dimension $d - 1$).
- Situation générique pour tout fond de puit de potentiel.

Matrice symplectique dépendant du temps?

- **Idée** : systèmes du type

$$\frac{d}{dt}y(t) = J(t)\nabla H(y(t))$$

$\forall t$, $J(t)$ est antisymétrique.

- Conservation du **volume** et de l'**énergie** :

$$\operatorname{div}_y J(t)\nabla H(y) = 0.$$

\Rightarrow **Préservation de la mesure microcanonique**

- **Espoir** : $J(t)$ va secouer le système pour briser les autres invariants (shakers).

Skew-systems

$J(t)$ est quasipériodique. Le système s'écrit

$$\begin{aligned}\dot{y} &= J(\varphi)\nabla H(y) \in \mathbb{R}^{2N} \\ \dot{\varphi} &= \omega \in \mathbb{T}^d.\end{aligned}\quad (\text{skew-systems}).$$

- Dans le cas du potentiel harmonique $H(y) = \frac{1}{2}\|y\|^2$
 \implies Résultats d'ergodicité par Eliasson (1991).
- Les systèmes ergodiques et non ergodiques co-existent. L'ensemble des systèmes ergodiques est de mesure nulle (on fait varier ω).
- Attention pour l'approximation numérique: pas d'analyse rétrograde, pas de conservation de l'énergie garantie.
- Quitte à faire bouger J , autant la prendre stochastique...

Shakers stochastiques et EDS conservatives (Travail avec T. Lelièvre)

EDS conservatives

$J(t)$ stochastique? On considère des EDS du type

$$dX(t) = f(X(t))dt + \sigma(X(t)) \circ dW(t),$$

En coordonnées cartésiennes:

$$dX^i(t) = f^i(X(t))dt + \sum_{\ell=1}^D \sigma_{[\ell]}^i(X(t)) \circ dW^{[\ell]}(t),$$

- $f(x) = (f^i(x))_{i=1}^N$ champs de vecteur
- $\sigma(x) = (\sigma_{[\ell]}^i(x))$, matrice $N \times D$.
- $W^{[\ell]}(t)$ mouvements browniens dans \mathbb{R}^D à composantes indépendantes
- \circ produit Stratonovich. Correspond à l'équation Itô

$$dX^i = \left(f^i(X) + \frac{1}{2} \sigma_{[\ell]}^k \partial_k \sigma_{[\ell]}^i(X) \right) dt + \sigma_{[\ell]}^i(X) dW_t^{[\ell]}$$

Conservation de l'énergie

$$dX(t) = f(X(t))dt + \sum_{\ell=1}^D \sigma_{[\ell]}(X(t)) \circ dW^{[\ell]}(t),$$

On suppose que $\forall x \in \mathbb{R}^N$ et $\forall \ell = 1, \dots, D$

$$\langle \nabla H(x), f(x) \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle \nabla H(x), \sigma_{[\ell]}(x) \rangle = 0$$

Ceci implique

$$\forall t \geq 0, \quad H(X(t)) = H(X(0)).$$

(par calcul d'Itô: on a tout fait pour!).

On suppose dans la suite $H(X(0)) = 0$. On définit

$$\Sigma_z = \{x \in \mathbb{R}^N \mid H(x) = z\} \quad \text{et} \quad \Omega^\varepsilon = \{x \in \mathbb{R}^N \mid H(x) < \varepsilon\}.$$

Conservation du volume

$$dX(t) = f(X(t))dt + \sum_{\ell=1}^D \sigma_{[\ell]}(X(t)) \circ dW^{[\ell]}(t),$$

Oopérateur de Kolmogorov associé:

$$Lv = f^i \partial_i v + \frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^D \sigma_{[\ell]}^i \partial_i (\sigma_{[\ell]}^j \partial_j v).$$

Soit $v(t, x)$ tel que
$$\begin{cases} \partial_t v = Lv \\ v(0, x) = f(x) \end{cases}$$

On a

$$v(t, x) = \mathbb{E} f(X(t, x))$$

où $X(t, x)$ est la solution telle que $X(0, x) = x$.

Conservation du volume

La conservation du volume s'écrit: $L^T \mathbf{1} = 0$ (adjoint dans \mathbb{R}^N)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega^\varepsilon} \mathbb{E}(f(X(t, x))) dx &= \langle L \mathbb{E} f(X(t, x)), \mathbf{1} \rangle_{L^2(\Omega^\varepsilon)} \\ &= \langle \mathbb{E} f(X(t, x)), L^T \mathbf{1} \rangle_{L^2(\Omega^\varepsilon)} \\ &= 0 \end{aligned}$$

Conservation du volume

La conservation du volume s'écrit: $L^T \mathbf{1} = 0$ (adjoint dans \mathbb{R}^N)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{\Omega^\varepsilon} \mathbb{E}(f(X(t, x))) dx &= \langle L \mathbb{E} f(X(t, x)), \mathbf{1} \rangle_{L^2(\Omega^\varepsilon)} \\ &= \langle \mathbb{E} f(X(t, x)), L^T \mathbf{1} \rangle_{L^2(\Omega^\varepsilon)} \\ &= 0 \end{aligned}$$

Conservation du **volume** et de **l'énergie** :

\implies préservation de la **mesure microcanonique** :

$\forall z \in (-\varepsilon, \varepsilon)$, pour toute fonction φ définie sur Σ_z ,

$$\frac{d}{dt} \int_{\Sigma_z} \mathbb{E}(\varphi(X(t, y)) \frac{d\sigma(y)}{\|\nabla H(y)\|}) = 0$$

Remarque si le bruit est nul: même chose que dans le cas déterministe (flot à divergence nulle)

Ellipticité

Dernière hypothèse: $\forall z \in (-\varepsilon, \varepsilon)$,

$$\forall \xi \in T_x \Sigma_z \quad \sum_{\ell=1}^D \langle \sigma_{[\ell]}, \xi \rangle^2 \geq \Lambda \|\xi\|^2$$

- $T_x \Sigma_z$ espace tangent à Σ_z
- Λ **uniforme** en z .
- Implique que l'opérateur de Kolmogorov L est **elliptique sur Σ_z** (mais pas sur Ω^ε)

Exemple: Shakers stochastique

On introduit les EDS (somme des indices répétés)

$$dX^i(t) = J^{ik} \partial_k H(X(t)) dt + B_{[\ell]}^{ik} \partial_k H(X(t)) \circ dW^{[\ell]}(t)$$

- J matrice symplectique
- $W^{[\ell]}(t)$ Mouvement Brownien de dimension $D = N(N-1)/2$.
- $(B_{[\ell]})_{1 \leq \ell \leq N(N-1)/2}$ est une base des matrices antisymétriques. $N = 3$:

$$B_{[1]} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B_{[2]} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad B_{[3]} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

- Energie et volume conservés.
- Condition d'ellipticité satisfaite.

EDS conservatives: ergodicité

Hypothèse $\Sigma_z = H^{-1}(z)$ est lisse et **compacte** dans \mathbb{R}^{2N} (dans un voisinage de $z = 0$).

- La loi de $X(t, y)$ converge exponentiellement vers la mesure microcanonique: avec **C uniforme en $z \in (-\varepsilon, \varepsilon)$** , $\forall y \in \Sigma_z$,

$$\forall t \geq 0, \quad \left| \mathbb{E}(\varphi(X(t, y))) - \int_{\Sigma_z} \varphi(y) \frac{d\sigma(y)}{\|\nabla H(y)\|} \right| \leq C \exp(-\gamma t).$$

- $X(t, y)$ est ergodique pour la mesure microcanonique: pour tout φ définie sur Σ_z , $\forall y \in \Sigma_z$,

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T \varphi(X(t, y)) dt = \int_{\Sigma_z} \varphi(y) \frac{d\sigma(y)}{\|\nabla H(y)\|},$$

Ergodicité: idée de preuve

Coordonnée orthogonale: $F_s(x)$ solution de

$$\frac{d}{ds} F_s(x) = \frac{\nabla H(F_s(x))}{\|\nabla H(F_s(x))\|^2}, \quad F_0(x) = x \in \mathbb{R}^N,$$

Alors $H(F_s(x)) = s - H(x)$.

- Representation $\Omega^\varepsilon \simeq \Sigma_0 \times (-\varepsilon, \varepsilon)$ avec l'application

$$\Sigma_0 \times (-\varepsilon, \varepsilon) \ni (y, z) \mapsto F_z(y) \in \Sigma_z \subset \Omega^\varepsilon.$$

- But: exprimer L comme un opérateur sur la variété $\Sigma_0 \times (-\varepsilon, \varepsilon)$ avec D la **dérivée covariante**.
- Then $L = L(y, D; z)$ elliptique sur Σ_0 uniformément en z . (Laplace Beltrami)

Ergodicité: idée de preuve

- $d\mu_z = \mu(z)d\Sigma_0$ mesure microcanonique sur $\Sigma_z \simeq \{z\} \times \Sigma_0$.
La conservation du volume implique que

$$\forall z, \quad L^*(y, D; z)\mu(z) = 0 \quad (\text{adjoint dans } L^2(\Sigma_0)).$$

- $v(t)$ solution de l'équation de Kolmogorov telle que $\int v(0)d\mu_z = 0$.

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \partial_t \int_{\Sigma_0} v(t)^2 d\mu_z \\ &= \int_{\Sigma_0} L(y, D; z) v^2(t) d\mu(z) - \sum_{\ell=1}^D \int_{\Sigma_0} \langle \sigma_{[\ell]}, Dv(t) \rangle^2 d\mu_z \\ &= - \sum_{\ell=1}^D \int_{\Sigma_0} \langle \sigma_{[\ell]}, Dv(t) \rangle^2 d\mu_z \end{aligned}$$

Ergodicité: idée de preuve

- Dernier ingrédient: estimation de Poincaré uniforme en $z \in (-\varepsilon, \varepsilon)$

$$\|v(t)\|_{\mu_z} \leq \gamma_0 \sum_{\ell=1}^D \|\langle \sigma_{[\ell]}, Dv(t) \rangle\|_{\mu_z}^2.$$

$\gamma_0 \simeq 1/\lambda_1$ la plus petite valeur propre de Δ_{Σ_0} .

- Avec ça on obtient pour $J \geq 1$ et uniformément en z ,

$$|D^J v(t)| \leq c_J \exp(-\gamma_J t)$$

Approximation numérique

- Plus de structure symplectique.
Donc pas d'analyse rétrograde, même avec avec des intégrateurs symplectiques.
- Solution possible: Projection à chaque pas.

Approximation numérique

$$dX(t) = f(X(t))dt + \sigma_{[\ell]}(X(t)) \circ dW^{[\ell]}(t).$$

Méthode à deux étages (pour être consistant avec Stratonovich) + un pas de projection:

$$X_{n+1/2} = X_n + \frac{1}{2}hf(X_n) + \frac{1}{2}\sqrt{h}\sigma_{[\ell]}(X_n)\mathcal{G}_n^{[\ell]}$$

$$\tilde{X}_{n+1} = X_n + hf(X_{n+1/2}) + \sqrt{h}\sigma_{[\ell]}(X_{n+1/2})\mathcal{G}_n^{[\ell]}$$

$$X_{n+1} = P(X_{n+1})\tilde{X}_{n+1}$$

- $P(X_{n+1})$ projection sur Σ_0 .
- $\mathcal{G}_n^{[\ell]}$ gaussiennes indépendantes normalisées.

Approximation numérique

Dans le cas des shakers stochastiques

$$dX^i(t) = J^{ik} \partial_k H(X(t)) dt + B_{[\ell]}^{ik} \partial_k H(X(t)) \circ dW^{[\ell]}(t)$$

Algorithme du gradient symétrique stochastique:

$$X_{n+1} = X_n + (hJ^{-1} + \sqrt{h}B_{[\ell]}G_n^{[\ell]}) \bar{\nabla} H(X^n, X^{n+1}), \quad (2)$$

avec par exemple

$$\bar{\nabla} H(\hat{y}, y) = \nabla H(\bar{y}) + \frac{H(\hat{y}) - H(y) - \nabla H(\bar{y})^T \Delta y}{\|\Delta y\|^2} \Delta y$$

avec $\bar{y} = \frac{1}{2}(\hat{y} + y)$ and $\Delta y = \hat{y} - y$. **Conservation de l'énergie.**
[midpoint discrete gradient, Gonzalez 96].

Ergodicité du schéma numérique

Soit X_n la solution numérique au temps $t_n = nh$. Si

- $H(X_n) = 0$ (projection)
- Le schéma est **consistant** avec l'EDS
- Les lignes (X_n, X_{n+1}) sont **contenues** dans Ω^ε (stabilité)

Alors pour toute fonction f définie sur Σ_0 , on a uniformément en n et z

$$\forall n \in \mathbb{N} \quad \left| \mathbb{E}f(X_n) - \mathbb{E}f(X(t_n)) \right| \leq C h$$

Différence majeure avec le cas déterministe: on peut contrôler la constante C grâce aux estimations exponentielles.

Ergodicité du schéma numérique

Corollaire : comme Σ_0 est compacte, il existe une unique mesure de probabilité $d\rho_h$ telle que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N f(X_p) = \int_{\Sigma_0} f(x) d\rho_h(x)$$

Comme

$$\left| \mathbb{E} \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N f(X_p) - \mathbb{E} \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N f(X(t_p)) \right| \leq Ch$$

on a

$$\left| \int_{\Sigma_0} f d\rho_h - \int_{\Sigma_0} f d\mu_0 \right| \leq Ch$$

$d\mu_0$ mesure microcanonique sur Σ_0 .



Ergodicité du schéma numérique: idée de preuve

Soit $u(t, x)$ une solution de $\partial_t u = Lu$ avec valeur initiale $f(x)$. On a

$$\mathbb{E}f(X_p) = \mathbb{E}u(0, X_p)$$

Ergodicité du schéma numérique: idée de preuve

Soit $u(t, x)$ une solution de $\partial_t u = Lu$ avec valeur initiale $f(x)$. On a

$$\begin{aligned}\mathbb{E}f(X_p) &= u(t_p, x) \\ &+ \mathbb{E} \sum_{i=0}^{p-1} u(t_i, X_{p-i}) - u(t_i, X_{p-i-1}) \\ &+ \mathbb{E} \sum_{i=0}^{p-1} u(t_i, X_{p-i-1}) - u(t_{i+1}, X_{p-i-1})\end{aligned}$$

Ergodicité du schéma numérique: idée de preuve

Soit $u(t, x)$ une solution de $\partial_t u = Lu$ avec valeur initiale $f(x)$. On a

$$\begin{aligned}\mathbb{E}f(X_p) &= \mathbb{E}f(X(t_p)) \\ &+ \mathbb{E} \sum_{i=0}^{p-1} u(t_i, X_{p-i}) - u(t_i, X_{p-i-1}) \\ &+ \mathbb{E} \sum_{i=0}^{p-1} u(t_i, X_{p-i-1}) - u(t_{i+1}, X_{p-i-1})\end{aligned}$$

Ergodicité du schéma numérique: idée de preuve

Soit $u(t, x)$ une solution de $\partial_t u = Lu$ avec valeur initiale $f(x)$. On a

$$\begin{aligned}\mathbb{E}f(X_p) &= \mathbb{E}f(X(t_p)) \\ &+ \mathbb{E} \sum_{i=0}^{p-1} h(Lu)(t_i, X_{p-i-1}) + h^2 \mathcal{O}(\|D^J u(t_i)\|) \\ &+ \mathbb{E} \sum_{i=0}^{p-1} u(t_i, X_{p-i-1}) - u(t_{i+1}, X_{p-i-1})\end{aligned}$$

Ergodicité du schéma numérique: idée de preuve

Soit $u(t, x)$ une solution de $\partial_t u = Lu$ avec valeur initiale $f(x)$. On a

$$\begin{aligned}\mathbb{E}f(X_p) &= \mathbb{E}f(X(t_p)) \\ &+ \sum_{i=0}^{p-1} h(Lu)(t_i, X_{p-i-1}) + h^2 \mathcal{O}(\|D^J u(t_i)\|) \\ &- \sum_{i=0}^{p-1} h(Lu)(t_i, X_{p-i-1}) + h^2 \mathcal{O}(\|D^J u(t_i)\|)\end{aligned}$$

Ergodicité du schéma numérique: idée de preuve

Donc on a

$$\begin{aligned} |\mathbb{E}f(X_p) - \mathbb{E}f(X(t_p))| &\leq Ch^2 \sum_{k=0}^{p-1} \sup_{J=1,\dots,4} \|D^J u(t_k)\| \\ &\leq Ch^2 \sum_{k=0}^{p-1} e^{-\gamma t_k} = Ch^2 \sum_{k=0}^{p-1} e^{-\gamma kh} \leq Ch \end{aligned}$$

Talay & Tubaro (1990)

Particularité: il ne faut obtenir que des dérivées tangentes D dans le reste.

Exemple numérique

Potentiel double puit:

$$H(p, q) = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + (q_1^2 - 1)^2 + (q_2 + q_1^2 - 1)^2$$

- Valeur initiale: telle que la trajectoire soit piégée dans le puit ($q_2 < 0$).
- Pour les systèmes classique: comportement KAM (première partie).
- Intégration numérique avec le schéma du gradient symétrique (shakers).

Simulation des moyennes temporelles

$$\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N f(X_k)$$

Numerical approximation

$h = 10^{-3}$, $N = 10^6$ itérations.

$\langle q_1 \rangle$	-0.94586433	$[-0.94624855, -0.94548011]$
$\langle q_1^2 \rangle$	0.93083849	$[0.93010635, 0.93157063]$
$\langle q_1^4 \rangle$	0.99427365	$[0.99284432, 0.99570297]$
$\langle q_2 \rangle$	0.06681681	$[0.06558902, 0.06804460]$
$\langle q_2^2 \rangle$	0.25452992	$[0.25413767, 0.25492217]$
$\langle p_1^2 \rangle$	0.24496566	$[0.24448132, 0.24545001]$
$\langle p_1^2 \rangle$	0.24494130	$[0.24446834, 0.24541426]$
$\langle V(q_1, q_2) \rangle$	0.25504601	$[0.25483346, 0.25525856]$

Intervalle de confiance de 95% obtenu avec 30 simulations indépendantes.

Stochastic Störmer-Verlet

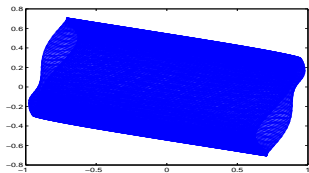
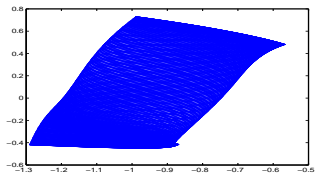
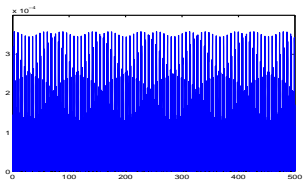
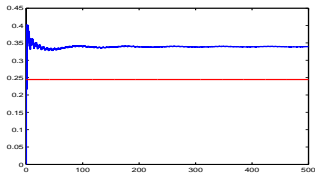
Problème: le pas de projection coûte cher.

Dans le cas où $H(p, q) = \frac{1}{2}p^T p + V(q)$ on peut étendre l'algorithme de **Störmer-Verlet** de la manière suivante:

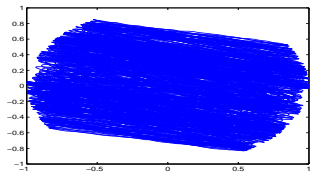
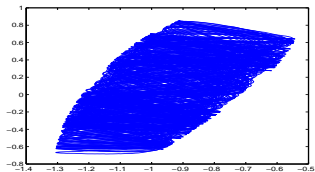
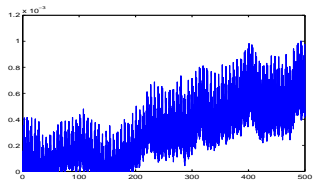
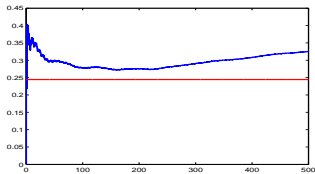
$$\begin{aligned}\text{draw } K_h &= hI_N + \varepsilon\sqrt{h}\mathcal{G} \\ p^{1/2} &= p^0 - \frac{1}{2}K_h \nabla V(q^0) \\ q^1 &= q^0 + K_h^T p^{1/2} \\ p^1 &= p^{1/2} - \frac{1}{2}K_h \nabla V(q^1)\end{aligned}$$

- \mathcal{G} : $N \times N$ matrice aléatoire à entrées gaussienne.
- Discrétisation explicite d'EDS du type précédent, mais $B_{[q]}$ n'est pas une base de l'ensemble des matrices anti-symétrique.
- Ergodicité???. On n'a pas de conservation de l'énergie.
- Mais les résultats ne sont pas mauvais...

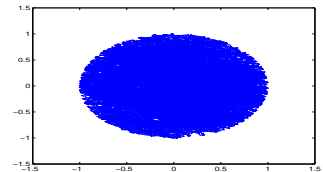
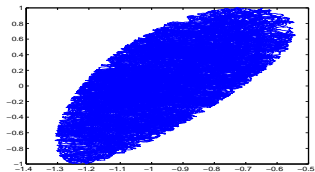
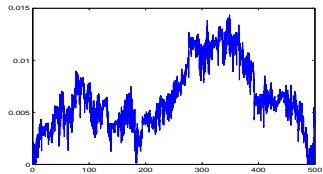
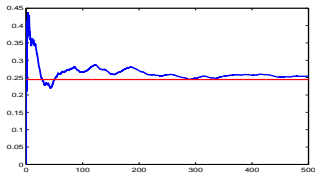
Störmer-Verlet algorithm, $\varepsilon = 0$, $h = 0.01$.



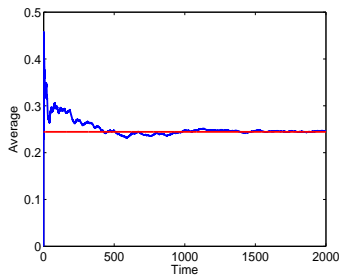
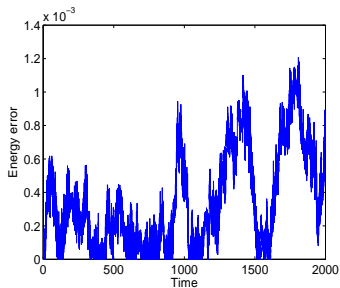
Stochastic Störmer-Verlet, $\varepsilon = 0.01$, $h = 0.01$



Stochastic Störmer-Verlet, $\varepsilon = 0.1$, $h = 0.01$



Stochastic Störmer-Verlet, $\varepsilon = 0.1$, $h = 10^{-3}$



30 moyennes de simulations précédentes

Stochastic Störmer-Verlet

On peut expliquer la bonne conservation de l'énergie:

- A chaque pas de temps n , on utilise l'analyse rétrograde avec la matrice symplectique (constante)

$$J_h^{(n)} = \begin{pmatrix} 0 & K_h^{(n)} \\ -(K_h^{(n)})^T & 0 \end{pmatrix}$$

- A chaque pas de temps, il existe une énergie modifiée: typiquement

$$H^{(n)} = T + V + h^2(\nabla T)^T J_h^{(n)}(\nabla^2 V) J_h^{(n)}(\nabla T) + \text{autres termes}$$

- On a $H^{(n)}(y_{n+1}) = H^{(n)}(y_n)$.
- Le drift en énergie s'écrit donc

$$\delta H = \sum_{n \geq 0} H^{(n+1)}(y_n) - H^{(n)}(y_n)$$

Stochastic Störmer-Verlet

- Mais pour y_n fixé, la loi de $H^{(n+1)}(y_n)$ et celle de $H^{(n)}(y_n)$ est la même.
- Donc en espérance, le drift en énergie est nul.

$$\mathbb{E}\delta H = 0.$$

euh... à des exponentiellement petits près...

- Combinaison de l'analyse rétrograde et de l'analyse stochastique
Espoir de montrer l'ergodicité numérique
(travail avec N. Champagnat).

Références

- E. Hairer, C. Lubich, G. Wanner, *Geometric Numerical Integration: structure preserving algorithm*, Springer (2002).
- E. Faou, T. Lelièvre, *Conservative stochastic differential equations: Mathematical and numerical analysis*, Math. Comp. (2009)