Méthodes linéairement implicites pour l'équation de Schrödinger non linéaire.

I. Lacroix-Violet

En collaboration avec C. Besse, S. Descombes et G. Dujardin

Institut Elie Cartan de Lorraine Université de Lorraine







Equation considérée

Equation de Schrödinger non linéaire

$$i\partial_t \varphi(t, \mathbf{x}) = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \beta |\varphi(t, \mathbf{x})|^{2\sigma}\right) \varphi(t, \mathbf{x})$$
$$\varphi(0, \mathbf{x}) = \varphi_0(\mathbf{x})$$

- φ : fonction d'onde à valeurs complexes, $\mathbf{x}=(x,y)^t, t>0$
- ullet : force de la non-linéarité
- $\sigma \in \mathbb{N}^*$

Equation considérée

Equation de Schrödinger non linéaire

$$i\partial_t \varphi(t, \mathbf{x}) = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \beta |\varphi(t, \mathbf{x})|^{2\sigma}\right) \varphi(t, \mathbf{x})$$
$$\varphi(0, \mathbf{x}) = \varphi_0(\mathbf{x})$$

Propriétés de préservation :

✓ la masse :

$$\int_{\Omega} |\varphi(t, \mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = \int_{\Omega} |\varphi_0(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x}$$

 \longrightarrow l'énergie : $E(\varphi(t,.))=E(\varphi_0)$ avec

$$E(\varphi) = \frac{1}{4} \int_{\Omega} |\nabla \varphi|^2 + \frac{\beta}{2\sigma + 2} \int_{\Omega} |\varphi|^{2\sigma + 2}$$

Préservation de l'énergie

$$i\partial_t \varphi(t, \mathbf{x}) = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \beta |\varphi(t, \mathbf{x})|^{2\sigma}\right) \varphi(t, \mathbf{x})$$

 \longrightarrow Multiplication par $\overline{\partial_t \varphi}$, intégration sur Ω , partie réelle :

$$\underbrace{Re\left(\int_{\Omega} i|\partial_{t}\varphi|^{2}\right)}_{=0} = \underbrace{Re\left(-\frac{1}{2}\int_{\Omega} \Delta\varphi \overline{\partial_{t}\varphi} + \beta \int_{\Omega} |\varphi|^{2\sigma}\varphi \overline{\partial_{t}\varphi}\right)}_{=\underbrace{dE(\varphi)}{dt}}$$

avec :

$$E(\varphi) = \frac{1}{4} \int_{\Omega} |\nabla \varphi|^2 + \frac{\beta}{2\sigma + 2} \int_{\Omega} |\varphi|^{2\sigma + 2}$$

Quelques méthodes numériques

- Méthodes de splitting : ordre élevé, préserve la masse, ne préserve pas l'énergie
- ☐ Hairer, Lubich, Wanner (Geometric numerical integration)
- Méthodes de Runge-Kutta exponentielle : ordre élevé, ne préserve ni la masse ni l'énergie
- ☐ Hochbruck, Ostermann (2010); Besse, Dujardin, L.-V. (2017)
- Méthodes de Lawson : ordre élevé, préserve la masse, ne préserve pas l'énergie
- ☐ Besse, Dujardin, L.-V. (2017)
- Méthode de relaxation : ordre 2, cas cubique, préserve la masse et une énergie discrète
- ☐ Besse (2004)

Méthode de relaxation, C. Besse 2004, $\sigma = 1$

$$i\partial_t \varphi(t, \mathbf{x}) = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \beta |\varphi(t, \mathbf{x})|^2\right) \varphi(t, \mathbf{x})$$

• Introduction d'une variable γ

$$\begin{cases} \mathbf{\gamma} = |\varphi(t, x)|^2 \\ i\partial_t \varphi(t, \mathbf{x}) = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \beta \mathbf{\gamma}\right) \varphi(t, \mathbf{x}) \end{cases}$$

• Discrétisation aux temps t_n et $t_{n+1/2}$

$$\begin{cases} \frac{\gamma_{n+1/2} + \gamma_{n-1/2}}{2} = |\varphi_n|^2 \\ i\frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{h} = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \beta\gamma_{n+1/2}\right)\frac{\varphi_{n+1} + \varphi_n}{2} \end{cases}$$

avec
$$\varphi_n \approx \varphi(t_n, \cdot), \ \gamma_{n+1/2} \approx |\varphi(t_{n+1/2}, \cdot)|^2$$

Propriétés de la méthode

- Méthode d'ordre 2 en temps
- Méthode linéairement implicite
- Méthode peu coûteuse en temps CPU
- Préserve la masse et une énergie :

$$E_{rlx}(\varphi,\gamma) = \frac{1}{4} \int_{\Omega} |\nabla \varphi|^2 + \frac{\beta}{2} \int_{\Omega} \left(\gamma |\varphi|^2 - \frac{\gamma^2}{2} \right)$$

 $\longrightarrow E_{rlx}$ est consistante avec :

$$E(\varphi) = \frac{1}{4} \int_{\Omega} |\nabla \varphi|^2 + \frac{\beta}{4} \int_{\Omega} |\varphi|^4$$

Preuve de la préservation de E_{rlx}

$$\begin{cases} \frac{\gamma_{n+1/2} + \gamma_{n-1/2}}{2} = |\varphi_n|^2 \\ i \frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{h} = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \beta\gamma_{n+1/2}\right) \frac{\varphi_{n+1} + \varphi_n}{2} \end{cases}$$

 $E_{rlx}(\varphi,\gamma) = \frac{1}{4} \int_{\Omega} |\nabla \varphi|^2 + \frac{\beta}{2} \int_{\Omega} \left(\gamma |\varphi|^2 - \frac{\gamma^2}{2} \right)$

$$\otimes \overline{(\varphi_{m+1} - \varphi_m)}$$
 intégration sur Ω partie réelle

$$\longrightarrow \otimes \overline{(\varphi_{n+1}-\varphi_n)}$$
, intégration sur Ω , partie réelle :

$$\underbrace{Re\left(\int_{\Omega} \frac{i}{h} |\varphi_{n+1} - \varphi_{n}|^{2}\right)}_{=0} = \underbrace{Re\left(-\frac{1}{4} \int_{\Omega} \Delta\left(\varphi_{n+1} + \varphi_{n}\right) \overline{\varphi_{n+1} - \varphi_{n}}\right)}_{=\frac{1}{4} \int_{\Omega} |\nabla \varphi_{n+1}|^{2} - \frac{1}{4} \int_{\Omega} |\nabla \varphi_{n}|^{2}}$$

$$+ \underbrace{\frac{\beta}{2} Re\left(\int_{\Omega} \gamma_{n+1/2} \left(\varphi_{n+1} + \varphi_{n}\right) \overline{\varphi_{n+1} - \varphi_{n}}\right)}_{=\frac{\beta}{2} \int_{\Omega} \gamma_{n+1/2} \left(|\varphi_{n+1}|^{2} - |\varphi_{n}|^{2}\right)}$$

Preuve de la préservation de E_{rlx}

$$\begin{cases} \frac{\gamma_{n+1/2} + \gamma_{n-1/2}}{2} = |\varphi_n|^2 \\ i\frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{h} = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \beta\gamma_{n+1/2}\right)\frac{\varphi_{n+1} + \varphi_n}{2} \end{cases}$$

$$E_{rlx}(\varphi, \gamma) = \frac{1}{4} \int_{\Omega} |\nabla \varphi|^2 + \frac{\beta}{2} \int_{\Omega} \left(\gamma |\varphi|^2 - \frac{\gamma^2}{2}\right)$$

$$\mathbf{0} = \frac{1}{4} \int_{\Omega} |\nabla \varphi_{n+1}|^2 - \frac{1}{4} \int_{\Omega} |\nabla \varphi_n|^2 + \frac{\beta}{2} \int_{\Omega} \underbrace{\gamma_{n+1/2} \left(|\varphi_{n+1}|^2 - |\varphi_n|^2 \right)}_{=A}$$

$$A = \gamma_{n+1/2} |\varphi_{n+1}|^2 - \gamma_{n-1/2} |\varphi_n|^2 - (\gamma_{n+1/2} - \gamma_{n-1/2}) |\varphi_n|^2$$

= $\gamma_{n+1/2} |\varphi_{n+1}|^2 - \gamma_{n-1/2} |\varphi_n|^2 - \frac{1}{2} (\gamma_{n+1/2}^2 - \gamma_{n-1/2}^2)$

Et donc :

$$E_{rlx}(\varphi_{n+1}, \gamma_{n+1/2}) - E_{rlx}(\varphi_n, \gamma_{n-1/2}) = 0$$

Dans cet exposé

Deux "extensions" de la méthode de relaxation :

Permet de considérer des puissances de non linéarités générales

☐ Besse, Descombes, Dujardin, L.-V. (2021)

Relaxation généralisée

Permet de construire des méthodes linéairement implicite d'ordre élevé

☐ Dujardin, L.-V. (2022)

Méthode de relaxation étendue

Méthode de relaxation étendue ($\sigma \ge 1$)

Equation de Schrödinger non linéaire

$$i\partial_t \varphi(t, \mathbf{x}) = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \beta |\varphi(t, \mathbf{x})|^{2\sigma}\right) \varphi(t, \mathbf{x})$$

But : Construire une méthode :

- telle que pour $\sigma=1$ ce soit la méthode de relaxation
- d'ordre 2
- préservant la masse et une énergie

Méthode de relaxation étendue ($\sigma \ge 1$)

$$i\partial_t \varphi(t, \mathbf{x}) = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \beta |\varphi(t, \mathbf{x})|^{2\sigma}\right) \varphi(t, \mathbf{x})$$

1ère idée :

$$\begin{cases} \gamma = |\varphi|^{2\sigma} \\ i\partial_t \varphi = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \beta \gamma\right) \varphi \end{cases}$$

⇒ pas de préservation d'énergie

Méthode de relaxation étendue ($\sigma \ge 1$)

$$i\partial_t \varphi(t, \mathbf{x}) = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \beta |\varphi(t, \mathbf{x})|^{2\sigma}\right) \varphi(t, \mathbf{x})$$

2nde idée :

$$\begin{cases} \gamma^{\sigma} = |\varphi|^{2\sigma} \\ i\partial_t \varphi = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \beta \gamma^{\sigma}\right) \varphi \end{cases}$$

 \implies préservation de E_{rlxe} :

$$E_{rlxe}(\varphi,\gamma) = \frac{1}{4} \int_{\Omega} |\nabla \varphi|^2 + \frac{\beta}{2} \int_{\Omega} \left(\gamma^{\sigma} |\varphi|^2 - \frac{\sigma}{\sigma + 1} \gamma^{\sigma + 1} \right)$$

pour une approximation de $\gamma^{\sigma}=|\varphi|^{2\sigma}=\gamma^{\sigma-1}|\varphi|^2$ bien choisie

Méthode de relaxation étendue ($\sigma \geqslant 1$) : définition

Idée:

$$\begin{cases} \gamma^{\sigma} = |\varphi|^{2\sigma} = \gamma^{\sigma - 1} |\varphi|^2 \\ i\partial_t \varphi = \left(-\frac{1}{2} \Delta + \beta \gamma^{\sigma} \right) \varphi \end{cases}$$

Schéma en temps

$$\begin{cases} \frac{\gamma_{n+1/2}^{\sigma+1} - \gamma_{n-1/2}^{\sigma+1}}{\gamma_{n+1/2}^{\sigma} - \gamma_{n-1/2}^{\sigma}} = \frac{\sigma+1}{\sigma} |\varphi_n|^2 \\ i \frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{h} = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \beta \gamma_{n+1/2}^{\sigma} \right) \frac{\varphi_{n+1} + \varphi_n}{2} \end{cases}$$

Méthode de relaxation étendue ($\sigma \ge 1$) : propriétés

$$\begin{cases} \frac{\gamma_{n+1/2}^{\sigma+1} - \gamma_{n-1/2}^{\sigma+1}}{\gamma_{n+1/2}^{\sigma} - \gamma_{n-1/2}^{\sigma}} = \frac{\sigma+1}{\sigma} |\varphi_n|^2 \\ i\frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{h} = \left(-\frac{1}{2}\Delta + \beta \gamma_{n+1/2}^{\sigma}\right) \frac{\varphi_{n+1} + \varphi_n}{2} \end{cases}$$

- $\sigma = 1 \Longrightarrow$ méthode de relaxation
- Méthode d'ordre 2 en temps
- Préserve la masse et une énergie :

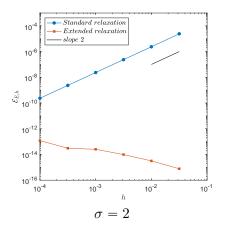
$$E_{rlxe}(\varphi,\gamma) = \frac{1}{4} \int_{\Omega} |\nabla \varphi|^2 + \frac{\beta}{2} \int_{\Omega} \left(\gamma^{\sigma} |\varphi|^2 - \frac{\sigma}{\sigma + 1} \gamma^{\sigma + 1} \right)$$

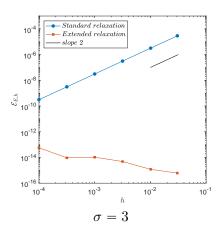
 $\longrightarrow E_{rlxe}$ est consistante avec :

$$E(\varphi) = \frac{1}{4} \int_{\Omega} |\nabla \varphi|^2 + \frac{\beta}{2\sigma + 2} \int_{\Omega} |\varphi|^{2\sigma + 2}$$

Erreur d'énergie ($\mathcal{E}_{E,h}$) pour $\sigma=2$ et $\sigma=3$

$$\begin{cases} i\partial_t \varphi = -\frac{1}{2}\partial_x^2 \varphi - |\varphi|^{2\sigma} \varphi, \\ \varphi(0, x) = \exp(-x^2) \end{cases}$$





Méthode de relaxation généralisée

Méthode de relaxation généralisée

Equation de Schrödinger non linéaire

$$\partial_t u(t,{\bf x})=Lu(t,{\bf x})+N(u(t,{\bf x}))u(t,{\bf x})$$
 avec $L=i\Delta/2$ et $N(u)=-i\beta|u|^2.$

But : Construire une méthode :

- linéairement implicite
- o d'ordre aussi élevé que voulu
- dont la construction est "systématique"

Méthode de relaxation généralisée

Equation de Schrödinger non linéaire

$$\partial_t u(t, \mathbf{x}) = Lu(t, \mathbf{x}) + N(u(t, \mathbf{x}))u(t, \mathbf{x})$$

avec $L = i\Delta/2$ et $N(u) = -i\beta |u|^2$.

But : Construire une méthode :

- linéairement implicite
- d'ordre aussi élevé que voulu
- dont la construction est "systématique"

EDO

$$u'(t) = Lu(t) + N(u(t))u(t)$$

Les méthodes de Runge-Kutta

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = y_0, \quad t \in [0, T]$$

Notations

- $t_0 < t_1 < \cdots < t_N$: subdivision régulière de [0,T]
- $h = t_{n+1} t_n$: pas de temps
- c_1, \cdots, c_s : s réels dans [0,1]
- $\bullet \ t_{n,i} = t_n + c_i h$
- $y_n \approx y(t_n), \quad y_{n,i} \approx y(t_{n,i})$

Les méthodes de Runge-Kutta

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad y(t_0) = y_0, \quad t \in [0, T]$$

Méthode de Runge-Kutta (RK) à s étages

$$\begin{cases} y_{n,i} = y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{i,j} f(t_{n,j}, y_{n,j}), & 1 \leq i \leq s, \\ y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^{s} b_i f(t_{n,i}, y_{n,i}) & 1 \leq s \end{cases}$$

avec $(a_{i,j})_{1 \leq i,j \leq s}$ et $(b_i)_{1 \leq i \leq s}$ des réels tels que $c_i = \sum_j a_{i,j}$.

Les méthodes RK de collocation

Méthode RK à s étages

$$\begin{cases} y_{n,k} = y_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{i,j} f(t_{n,j}, y_{n,j}), & 1 \leq i \leq s, \\ y_{n+1} = y_n + h \sum_{i=1}^{s} b_i f(t_{n,i}, y_{n,i}) & \end{cases}$$

Méthode RK de collocation à s étages

$$a_{i,j} = \frac{1}{h} \int_0^{c_i h} \mathcal{L}_j(\tau) d\tau, \quad b_i = \frac{1}{h} \int_0^h \mathcal{L}_i(\tau) d\tau \quad \mathcal{L}_k(\tau) = \prod_{l \neq k} \frac{\tau/h - c_l}{c_k - c_l}$$

- www méthode implicite
- \rightsquigarrow d'ordre au moins s
- \longrightarrow Gauss points \Longrightarrow ordre 2s (super convergence)

Pour notre problème

$$u'(t) = Lu(t) + N(u(t))u(t)$$

Méthode RK de collocation à s étages

$$\begin{cases} u_{n,i} = u_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{i,j} (Lu_{n,j} + N(u_{n,j})u_{n,j}), & 1 \leq i \leq s, \\ u_{n+1} = u_n + h \sum_{i=1}^{s} b_i (Lu_{n,i} + N(u_{n,i})u_{n,i}) \end{cases}$$

Idées:

- \sim Calculer des approximations γ_{n+c_i} des $N(u(t_n+c_ih))$
- Remplacer les $N(u_{n,k})$ par les γ_{n+c_k}

Relaxation généralisée : définition

$$u'(t) = Lu(t) + N(u(t))u(t)$$

Schéma pour $u_n \sim u(t_n)$, $\gamma_{n+c_i} \sim N(u(t_n+c_ih))$

$$\begin{cases}
\begin{bmatrix} \gamma_{n+c_1} \\ \vdots \\ \gamma_{n+c_s} \end{bmatrix} = D \begin{bmatrix} \gamma_{n-1+c_1} \\ \vdots \\ \gamma_{n-1+c_s} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_s \end{bmatrix} N(u_n) \\
u_{n,i} = u_n + h \sum_{j=1}^{s} \underbrace{a_{i,j}}_{s} (L + \gamma_{n+c_j}) u_{n,j}, \qquad 1 \leq i \leq s. \\
u_{n+1} = u_n + h \sum_{i=1}^{s} \underbrace{b_i}_{t} (L + \gamma_{n+c_i}) u_{n,i}.
\end{cases}$$

- $D \in \mathcal{M}_s(\mathbb{R}), (\theta_i)_{1 \leq i \leq s}$: à choisir
- $(a_{i,j})_{1 \leqslant i,j \leqslant s}, (b_i)_{1 \leqslant i \leqslant s}$: coefficients de collocation

$$\begin{bmatrix} \gamma_{n+c_1} \\ \vdots \\ \gamma_{n+c_s} \end{bmatrix} = D \begin{bmatrix} \gamma_{n-1+c_1} \\ \vdots \\ \gamma_{n-1+c_s} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_s \end{bmatrix} N(u_n)$$

Définition de stabilité

L'étape en γ est dite \emph{stable} si

$$\sup_{n\in\mathbb{N}}\|D^n\|<+\infty,$$

pour une certaine norme de $\mathcal{M}_s(\mathbb{R})$.

L'étape en γ est dite *fortement stable* si $\rho(D) < 1$.

$$\begin{bmatrix} \gamma_{n+c_1} \\ \vdots \\ \gamma_{n+c_s} \end{bmatrix} = D \begin{bmatrix} \gamma_{n-1+c_1} \\ \vdots \\ \gamma_{n-1+c_s} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_s \end{bmatrix} N(u_n)$$

Définition de consistance

L'étape en γ est dite *consistante d'ordre* s si pour tout h > 0,

$$V_c^h = DV_{c-1}^h + \Theta,$$

avec :
$$(V_c^h)_{ij} = (c_i h)^{j-1}$$
, $(V_{c-1}^h)_{ij} = ((c_i - 1)h)^{j-1}$ et $(\Theta)_{i1} = \theta_i$, $(\Theta)_{ij} = 0$, si $j > 1$.

Rmq : Vraie pour tout $h \iff V$ raie pour h = 1

$$\begin{bmatrix} \gamma_{n+c_1} \\ \vdots \\ \gamma_{n+c_s} \end{bmatrix} = D \begin{bmatrix} \gamma_{n-1+c_1} \\ \vdots \\ \gamma_{n-1+c_s} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_s \end{bmatrix} N(u_n)$$

Théorème (G. Dujardin, I. L.-V.)

Soit c_1,\ldots,c_s donnés. Pour tout $\lambda_1,\ldots,\lambda_s\in\mathbb{C}\backslash\{1\}$, il existe un unique $\theta_1,\ldots,\theta_s\in\mathbb{C}$ et une unique matrice $D\in\mathcal{M}(\mathbb{C})$ tels que l'étape en γ soit d'ordre s et tels que les valeurs propres de la matrice D soient $\{\lambda_1,\ldots,\lambda_s\}$.

Si de plus l'ensemble $\{\lambda_1,\dots,\lambda_s\}$ est stable par conjugaison, alors θ_1,\dots,θ_s sont des réels.

Etape en γ : Preuve 1/2

Soit
$$\lambda_1, \ldots, \lambda_s \in \mathbb{C} \setminus \{1\}$$
.

 \rightsquigarrow Ordre s:

$$\begin{split} V_c^1 &= DV_{c-1}^1 + \Theta \Longrightarrow D = V_c^1(V_{c-1}^1)^{-1} - \Theta(V_{c-1}^1)^{-1} \\ \Longrightarrow D &= V_{c-1}^1 \Big[(V_{c-1}^1)^{-1} V_c^1 - (V_{c-1}^1)^{-1} \Theta \Big] (V_{c-1}^1)^{-1} \end{split}$$

$$\longrightarrow$$
 D semblable à $M-Y$, $M=(V_{c-1}^1)^{-1}V_c^1$, $Y=(V_{c-1}^1)^{-1}\Theta$

$$\leadsto$$
 Particularités de $M: M = (V_{c-1}^1)^{-1}V_c^1$

Matrice triangulaire supérieure avec des 1 sur la diagonale.

$$\Longrightarrow M = I - U$$

Particularités de
$$Y:Y=(V_{c-1}^1)^{-1}\Theta$$

$$(Y)_{i1}=y_i,\ (Y)_{ij}=0\ \text{for}\ j>1$$

Etape en γ : Preuve 2/2

Problème équivalent : existence et unicité de y_1,\ldots,y_s tels que le spectre de M-Y soit $\{\lambda_1,\ldots,\lambda_s\}$.

$$\lambda_k \text{ valeur propre de } M-Y: (M-Y)Z_k=\lambda_k Z_k$$

$$\longrightarrow M=I-U, \ YZ_K=z_1^{(k)}(y_1,\cdots,y_s)^t, \ z_1^{(k)}=1, \ U^s=0$$

$$Z_k=\frac{1}{1-\lambda_k}(y_1,\cdots,y_s)^t+\frac{1}{1-\lambda_k}UZ_k$$

$$\Longrightarrow Z_k=\left(\sum_{p=0}^{s-1}\frac{1}{(1-\lambda_k)^{p+1}}U^p\right)(y_1,\cdots,y_s)^t$$

$$\Longrightarrow 1=P_1\left(\frac{1}{1-\lambda_k}\right)y_1+\cdots+P_s\left(\frac{1}{1-\lambda_k}\right)y_s,$$

$$\begin{bmatrix} \gamma_{n+c_1} \\ \vdots \\ \gamma_{n+c_s} \end{bmatrix} = D \begin{bmatrix} \gamma_{n-1+c_1} \\ \vdots \\ \gamma_{n-1+c_s} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_s \end{bmatrix} N(u_n)$$

Corollaire (G. Dujardin, I. L.-V.)

Soit c_1, \ldots, c_s donnés, alors

- Il existe $D \in \mathcal{M}(\mathbb{R})$ et $\theta_1, \dots, \theta_s \in \mathbb{R}$ l'étape en γ soit stable et d'ordre s.
- Il existe $D \in \mathcal{M}(\mathbb{R})$ et $\theta_1, \dots, \theta_s \in \mathbb{R}$ l'étape en γ soit fortement stable et d'ordre s.

Etude de l'ordre dans le cas EDO

$$\Gamma_n = D\Gamma_{n-1} + \Theta N(u_n)$$

$$u_{n,i} = u_n + h \sum_{j=1}^s a_{i,j} (L + \gamma_{n+c_j}) u_{n,j}, \quad 1 \le i \le s.$$

$$u_{n+1} = u_n + h \sum_{j=1}^s b_j (L + \gamma_{n+c_j}) u_{n,j}.$$

Théorème (G. Dujardin, I. L.-V.)

Sous les bonnes hypothèses, le schéma est convergent d'ordre $s.\,$

Convergence cas EDO : idées de la preuve (1/4)

→ Hypothèses :

- $L \equiv 0$
- ullet L'étape en γ est fortement stable et d'ordre s

Convergence cas EDO: idées de la preuve (2/4)

Première étape : Consistance de la méthode

$$R_n^1 = \begin{bmatrix} N(u(t_n + c_1 h)) \\ \vdots \\ N(u(t_n + c_s h)) \end{bmatrix} - D \begin{bmatrix} N(u(t_{n-1} + c_1 h)) \\ \vdots \\ N(u(t_{n-1} + c_s h)) \end{bmatrix} - N(u(t_n)) \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_s \end{bmatrix}$$

$$(R_n^2)_i = u(t_n + c_i h) - u(t_n) - h \sum_{i=1}^n a_{ij} N(u(t_n + c_j h)) u(t_n + c_j h),$$

$$R_n^3 = u(t_{n+1}) - u(t_n) - h \sum_{i=1}^{3} b_i N(u(t_n + c_i h)) u(t_n + c_i h).$$

Convergence cas EDO: idées de la preuve (3/4)

vo Première étape : Consistance de la méthode

Lemme (G. Dujardin, I. L.-V.)

Sous certaines hypothèses, il existe une constante C>0 telle que pour h>0 assez petit :

$$\max_{n \ge 0, \ t_{n+1} \le T} \|R_n^1\| \le Ch^s,$$

$$\max_{n \ge 0, \ t_{n+1} \le T} \|R_n^2\| \le Ch^{s+1},$$

$$\max_{n \ge 0, \ t_{n+1} \le T} |R_n^3| \le Ch^{s+1}.$$

Preuve: Formules de Taylor + méthode RK de collocation + l'étape en γ est d'ordre s.

Convergence cas EDO: idées de la preuve (4/4)

>>> Définition des erreurs de convergence :

- $P_n: (P_n)_i = N(u(t_n + c_i h)) \gamma_{n+c_i}$
- $z_n = \max_{0 \leqslant k \leqslant n} |e_k|$ avec $e_n = u(t_n) u_n$

Deuxième étape : En supposant la solution numérique bornée, on montre que :

$$|P_n|_{\infty} \le Ce^{Cnh} (z_0 + |P_{-1}|_{\infty} + h^s)$$

 $z_n \le e^{Cnh} (z_0 + C(|P_{-1}|_{\infty} + h^s))$

Troisième étape : Pour toute erreur initiale assez petite, la solution numérique est bornée.

Définitions (stabilités des méthodes RK)

Une méthode de Runge-Kutta est dite :

- I-stable si : $|R(\lambda)| \le 1$, $\forall \lambda \in i\mathbb{R}$, où $R(\lambda) = 1 + b^t (I \lambda A)^{-1} \mathbb{1}$
- IS-stable si : $\forall \lambda \in i\mathbb{R}$, $(I \lambda A)$ est inversible et $\lambda \mapsto \lambda b^t (I \lambda A)^{-1}$ uniformément bornée sur $i\mathbb{R}$.
- ISI-stable si : $\forall \lambda \in i\mathbb{R}$, $(I \lambda A)$ est inversible et $\lambda \mapsto (I \lambda A)^{-1}$ uniformément bornée sur $i\mathbb{R}$.
- \hat{I} -stable si elle est I-stable, IS-stable et ISI-stable.

 \longrightarrow Existence d'un algo assurant qu'une méthode de collocation à s-étages soit \hat{I} -stable.

Lemme (G. Dujardin, I. L.-V.)

Soit A la matrice d'une méthode RK de collocation à s-étages aux points $0 \leqslant c_1 < \cdots < c_s \leqslant 1$. On note $\pi = \prod_{i=1}^s (X-c_i)$ le polynôme de degrés s et τ l'application linéaire :

$$\begin{array}{ccc} \mathbb{C}_s[X] & \longrightarrow & \mathbb{C}_s[X] \\ \sum_{k=0}^s a_k X^k & \longmapsto & \sum_{k=0}^s k! a_k X^k \end{array}$$

 $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ valeur propre de $A \iff \tau(\pi)(\lambda) = 0$.

Proposition (G. Dujardin, I. L.-V.)

Une méthode RK de collocation aux points de Gauss à s étages est $I\mbox{-stable}.$

 $\textit{Preuve}: \mathsf{D\'efinition} \ \mathsf{de} \ \tau(\pi) + \mathsf{algorithme} \ \mathsf{de} \ \mathsf{Routh\text{-}Hurwitz} + \mathsf{principe} \ \mathsf{du} \ \mathsf{maximum}.$

Lemme (G. Dujardin, I. L.-V.)

Une méthode RK de collocation telle que $\tau(\pi)$ n'a pas de racine dans $i\mathbb{R}$ est \hat{I} -stable.

Théorème (G. Dujardin, I. L.-V.)

Une méthode RK de collocation à $s\text{-}\mathrm{\acute{e}tages}$ aux points de Gauss est $\hat{I}\text{-}\mathrm{stable}.$

Remarque : On peut construire des méthodes RK de collocation qui sont I-stable, IS-stable mais pas ISI-stable.

Théorème (G. Dujardin, I. L.-V.)

Sous les bonnes hypothèses sur N et la donnée initiale, en supposant que l'étape en γ soit fortement stable et consistante d'ordre s et que la méthode RK de collocation sous-jacente soit \hat{I} -stable, le schéma est convergent d'ordre s.

Preuve : Adaptation du cas EDO utilisant la \hat{I} -stabilité de la méthode RK de collocation sous jacente.

Remarque : Dans le cas Schrödinger, si la méthode RK de collocation sous jacente est une méthode aux points de Gauss, le schéma préserve la masse.

Relaxation généralisée : exemples d'ordre 2

1- Points de Gauss :
$$c_1 = \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}, c_2 = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6},$$

$$\frac{\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6}}{\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}} \begin{vmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \frac{\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6}}{\frac{1}{2}} & \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} & 1/4 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{vmatrix}.$$

2- Points uniformes :
$$c_1 = 0, c_2 = 1$$
,

$$\begin{array}{c|cccc}
0 & 0 & 0 \\
1 & 1/2 & 1/2 \\
\hline
& \frac{1}{2} & \frac{1}{2}
\end{array}.$$

Dans les deux cas $\lambda_1 = 1/2, \lambda_2 = -1/2.$

• Equation :

$$i\partial_t \varphi = -\Delta \varphi - |\varphi|^2 \varphi,$$

Conditions limites :

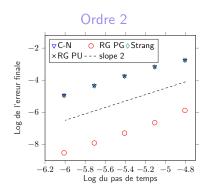
Dirichlet homogène

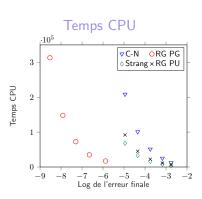
Condition initiale :

$$u_0(x,y) = \sin(2\pi x)\sin(2\pi y)\exp(2i\pi x),$$

• Domaine :







• Equation :

$$i\partial_t \varphi = -\Delta \varphi - |\varphi|^2 \varphi,$$

Conditions limites :

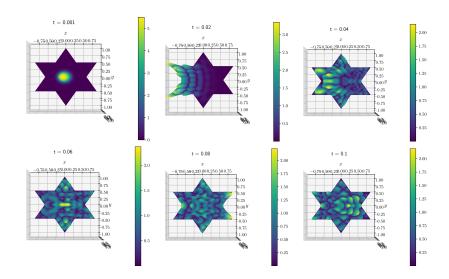
Dirichlet homogène

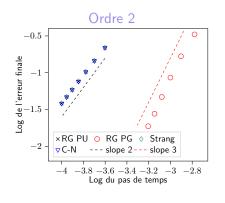
Condition initiale :

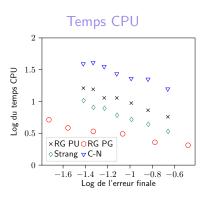
$$u_0(x,y) = \sqrt{\frac{98}{\pi}} \exp(-49(x^2 + y^2)) \exp(-20ix),$$

Domaine :









Conclusion et perspectives

Conclusion

- Relaxation étendue : permet de considérer des non linéarités autres que cubiques, ordre 2, préserve la masse ET une énergie
- Relaxation généralisée : permet de construire des schémas d'ordre élevé ET linéairement implicite préservant la masse.

Perspectives

- Finalisation des tests numériques pour relaxation généralisée.
- Analyse de la méthode de relaxation étendue.
- Préservation d'une énergie pour relaxation généralisée (NLS).