Examen de Chimie Quantique Numérique

28 mai 2003

Soit Ω un ouvert borné de $\mathbb{R}^d$, $W \in L^\infty(\Omega)$,

$$E(\phi_1, \phi_2) = \frac{1}{2}\int_\Omega |\nabla \phi_1|^2 + \frac{1}{2}\int_\Omega |\nabla \phi_2|^2$$

et

$$E_N(\phi_1, \phi_2) = E(\phi_1, \phi_2) + N\left(\int_\Omega W\phi_1\phi_2\right)^2$$

définies sur $H_0^1(\Omega)$.

On considère le problème d'optimisation sous contraintes

$$I = \inf\left\{E(\phi_1, \phi_2), \quad \phi_1 \in H_0^1(\Omega), \quad \phi_2 \in H_0^1(\Omega), \quad \int_\Omega \phi_1^2 = 1, \quad \int_\Omega \phi_2^2 = 1, \quad \int_\Omega W\phi_1\phi_2 = 0\right\} \tag{1}$$

et la suite de problèmes pénalisés

$$I_N = \inf\left\{E_N(\phi_1, \phi_2), \quad \phi_1 \in H_0^1(\Omega), \quad \phi_2 \in H_0^1(\Omega), \quad \int_\Omega \phi_1^2 = 1, \quad \int_\Omega \phi_2^2 = 1\right\}. \tag{2}$$

Le problème (1) est une simplification d'un problème intervenant dans la mise en œuvre de méthodes de décomposition de domaine en chimie quantique.

Question 1. Montrer que pour $N \in \mathbb{N}$ fixé, (2) admet une solution (ϕ_1^N, ϕ_2^N).

Question 2. Montrer que (1) admet une solution.

Question 3. Vérifier que (I_N) est une suite croissante et que $\forall N \in \mathbb{N}$, $I_N \leq I$.

Question 4. Montrer que (I_N) converge en fait vers I et qu'on peut extraire de la suite (ϕ_1^N, ϕ_2^N) une sous-suite qui converge vers une solution de (1).

Question 5. Pour N fixé, écrire les équations d'Euler-Lagrange du problème (2) et vérifier que les contraintes sont qualifiées.

Question 6. Soit N fixé. Soit ψ_1^0 et ψ_2^0 dans $H_0^1(\Omega)$. On considère la suite (ψ_1^k, ψ_2^k) définie par récurrence par

$$\begin{cases} E_N(\psi_1^{k+1}, \psi_2^k) = \inf\left\{E_N(\phi, \psi_2^k), \quad \phi \in H_0^1(\Omega), \quad \int_\Omega \phi^2 = 1\right\} \\ E_N(\psi_1^{k+1}, \psi_2^{k+1}) = \inf\left\{E_N(\psi_1^{k+1}, \phi), \quad \phi \in H_0^1(\Omega), \quad \int_\Omega \phi^2 = 1\right\} \end{cases}$$

Donner une caractérisation de $(\psi_1^{k+1}, \psi_2^{k+1})$ reliée à la théorie spectrale.

Question 7. Discrétiser le problème (2) pour N fixé en utilisant une approximation de type Galerkin.

Question 8. Proposer, au vu de la question 6, un algorithme numérique pour résoudre le problème discrétisé obtenu à la question 7.

Question 9. Exhiber une solution de (1) dans le cas où Ω est le rectangle $]0, 2\pi[\times]0, \pi[$ de $\mathbb{R}^2$ et où $W = 1$.

Question 10. *(Plus difficile).* Etudier la convergence de la suite (ψ_1^k, ψ_2^k) définie à la question 6.