

## Sujet de stage de M2 : Résolution efficace et bornes d'erreur garanties pour des problèmes aux valeurs propres issus du calcul de structure électronique

- Unité de recherche: Laboratoire de Mathématiques de Besançon (Université Bourgogne Franche-Comté)
- Encadrement et contact: Geneviève Dusson (genevieve.dusson@math.cnrs.fr) et Alexei Lozinski (alexei.lozinski@univ-fcomte.fr)
- Possibilité de continuer en thèse après le stage de M2.
- Rémunération: oui
- Durée: 4 à 6 mois



Le sujet de stage porte sur le développement de méthodes numériques efficaces et garanties pour des problèmes aux valeurs propres issus du calcul de structure électronique. Plus précisément, on s'intéressera au problème jouet suivant : trouver l'état fondamental, i.e. la valeur propre la plus basse  $\lambda$  et le vecteur propre correspondant  $u$  solution de l'équation en une dimension d'espace

$$(-\Delta + z_1\delta_0 + z_2\delta_\mu)u = \lambda u,$$

où  $\mu$ ,  $z_1$  et  $z_2$  sont des paramètres, qui modélisent de manière très simplifiée une molécule constituée de deux noyaux de charge  $z_1$  et  $z_2$  placés en 0 et  $\mu$ , et un électron.

Le but de ce stage sera d'analyser la discrétisation de ce problème en approchant la solution par une combinaison linéaire de fonctions gaussiennes (ou produits de gaussiennes et polynômes) centrées sur les noyaux, de développer des bornes de l'erreur de discrétisation qui soient garanties et calculables *a posteriori*, et enfin de proposer des stratégies adaptatives pour optimiser les paramètres des fonctions de base choisies.

Ces fonctions appelées "orbitales de type gaussiennes" (GTO pour Gaussian-type orbitals en anglais) que l'on propose de considérer ici sont utilisées en chimie computationnelle pour le calcul des structures électroniques depuis longtemps, mais l'analyse *a priori* de la convergence de ce type de méthode de discrétisation est assez récente [1], et il n'existe pas pour l'instant de borne garantie de l'erreur. De plus, contrairement au cas des éléments finis où l'on peut raffiner le maillage de manière systématique pour faire converger les solutions approchées du problème, il n'existe pas de méthode systématique pour enrichir une base de gaussiennes, ce qui fait qu'en pratique, la convergence peut saturer à un niveau de précision qu'il est difficile de dépasser.

Développer des bornes d'erreur pour ce type de discrétisation serait donc très utile pour garantir que l'erreur entre la solution exacte et les solutions approchées du problème est plus petite qu'une tolérance donnée. On s'appuyera en particulier sur le travail [2] pour développer de telles bornes. En plus de cela, le développement de stratégies adaptatives permettrait de minimiser le nombre de fonctions de base nécessaires pour atteindre un niveau de précision donné, ce qui servirait *in fine* à économiser des ressources de calcul lors de la résolution du problème.

Les tests seront effectués via le langage de programmation Julia ou Python.

Il est attendu que le/la candidat·e ait une formation de niveau M2 en mathématiques appliquées et ait déjà une expérience et une appétence pour l'analyse numérique ou l'implémentation de codes numériques.

## References

- [1] Bachmayr, M., Chen, H., Schneider, R.: Error estimates for Hermite and even-tempered Gaussian approximations in quantum chemistry. *Numer. Math.* 128, 137–165 (2014). <https://doi.org/10.1007/s00211-014-0605-5>
- [2] Cancès, E., Dusson, G., Maday, Y., Stamm, B.: Guaranteed and robust a posteriori bounds for Laplace eigenvalues and eigenvectors: conforming approximations. *SIAM Journal on*. (2017)