Calcul scientifique
TD5 – 26 mars 2015

Optimisation avec contraintes

Méthode numérique pour l'équation de Schrödinger

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ un ouvert borné. On pose $V := H_0^1(\Omega)$ et on considère la fonctionnelle $\mathcal{E} : V \to \mathbb{R}$ définie par

$$\mathcal{E}(\psi) = \int_\Omega |\nabla\psi(x)|^2\,dx + \int_\Omega V(x)|\psi(x)|^2\,dx,$$

où $V \in L^\infty(\Omega)$ est donné. L'espace de Hilbert V est muni de son produit scalaire usuel

$$(\psi,\phi)_V = \int_\Omega \nabla\psi\cdot\nabla\phi + \int_\Omega \psi\,\phi,$$

et on note $\|\psi\|_V = (\psi,\psi)_V^{1/2}$.

(1) Montrer que $\mathcal{E}$ est différentiable dans V et calculer $\langle \mathcal{E}'(\psi),\phi\rangle_{V',V}$ pour $\phi \in V$.

(2) Montrer que $\mathcal{E}$ est bornée inférieurement dans le sous-espace de $H_0^1(\Omega)$

$$\mathcal{S} = \left\{\psi \in H_0^1(\Omega)\,;\ \int_\Omega \psi^2 = 1\right\},$$

c'est-à-dire qu'il existe $C > -\infty$ tel que $\mathcal{E}(\psi) \geqslant C$ pour tout $\psi \in \mathcal{S}$.

On considère le problème de minimisation

$$\inf_{\psi\in\mathcal{S}} \mathcal{E}(\psi). \tag{1}$$

Comme l'ensemble $\mathcal{S}$ n'est pas convexe, on ne dispose pas de résultat du cours concernant l'existence d'une solution. La question précédente montre que cet infimum est un nombre réel $E_0 > -\infty$. Nous admettrons qu'il existe un minimiseur global au problème (1), noté ψ_*.

(3) Montrer que la contrainte

$$\Phi(\psi) = \int_\Omega \psi^2 - 1$$

est qualifiée en ψ_*, et que $-\Delta\psi_* + V\psi_* = E_0\psi_*$ au sens des distributions.

(4) Nous allons à présent examiner une méthode numérique pour approcher E_0. On considère une famille de fonctions $\{\phi_i\}_{i\geqslant 1}$ de $H_0^1(\Omega)$ à valeurs réelles, orthonormée pour le produit scalaire de $L^2(\Omega)$,

$$\int_\Omega \phi_i\,\phi_j = \delta_{ij}.$$

Pour un entier $N \geqslant 1$ donné, on considère le problème approché

$$\inf_{\psi\in\widetilde{\mathcal{S}}_N} \mathcal{E}(\psi), \qquad \widetilde{\mathcal{S}}_N = \left\{\psi = \sum_{i=1}^N x_i\phi_i,\ (x_1,\dots,x_N) \in \mathbb{R}^N\,;\ \int_\Omega \psi^2 = 1\right\}. \tag{2}$$

Montrer que le problème approché (2) peut se réécrire sous la forme

$$\inf_{X\in\mathcal{S}_N} \mathcal{F}(X),$$

où

$$\mathcal{S}_N = \Big\{ X \in \mathbb{R}^N,\ |X|^2 = 1 \Big\}, \qquad \mathcal{F}(X) = X^T A_N X,$$

avec A_N symétrique réelle dont on précisera le terme générique $[A_N]_{ij}$, et où $|X|^2 = X^T X = \sum_{i=1}^N x_i^2$. En déduire l'existence d'une solution de (2).

(5) Montrer que cette solution est un vecteur propre de A_N (symétrique réelle donc diagonalisable). On note $\lambda_1^N \leqslant \lambda_2^N \leqslant \cdots \leqslant \lambda_N^N$ les valeurs propres de A_N, et $e_1^N, \ldots, e_N^N$ les vecteurs propres associés. Montrer que

$$\inf_{X \in \mathcal{S}_N} \mathcal{F}(X) = \lambda_1^N,$$

puis que $E_0 \leqslant \lambda_1^{N+1} \leqslant \lambda_1^N$ pour tout $N \geqslant 1$. En déduire que la suite $(\lambda_1^N)_{N \geqslant 1}$ a une limite lorsque $N \to +\infty$.

(6) Dans cette question, l'entier N est **fixé** et on cherche à approcher numériquement une solution de (2) par une variante de l'algorithme de gradient à pas fixe avec projection (on n'utilise pas directement cet algorithme car l'ensemble $\mathcal{S}_N$ n'est pas convexe). Partant de $X^0 \in \mathcal{S}_N$, et pour $n \geqslant 0$, on considère la suite

$$X^{n+1} = \frac{X^n - \alpha A_N X^n}{|X^n - \alpha A_N X^n|},$$

avec un paramètre réel $\alpha > 0$.

- On suppose que α^{-1} n'est pas valeur propre de A_N. En déduire que la matrice $\mathrm{Id} - \alpha A_N$ est inversible et que la suite $(X^n)_{n \geqslant 0}$ est bien définie.
- Montrer par récurrence que $X^n = (\mathrm{Id} - \alpha A_N)^n X^0 / |(\mathrm{Id} - \alpha A_N)^n X^0|$.
- On suppose que $(e_1^N)^T X^0 > 0$ et que

$$\forall i = 2, \ldots, N, \qquad |1 - \alpha \lambda_i^N| < |1 - \alpha \lambda_1^N| < 1. \tag{3}$$

  En décomposant X^n sur la base des vecteurs propres de $\mathrm{Id} - \alpha A_N$ (qui est à l'évidence diagonalisable), en déduire que X^n converge vers e_1^N.
- On suppose que $0 < \lambda_1^N < \lambda_2^N$. Montrer que si $\alpha \in]0, M[$ avec M à préciser, on a

$$|1 - \alpha \lambda_1^N| < 1, \qquad |1 - \alpha \lambda_N^N| < |1 - \alpha \lambda_1^N|,$$

  et que ces inégalités impliquent la condition (3).

Corrigé

Méthode numérique pour l'équation de Schrödinger

(1) Pour $\psi, \phi \in H_0^1(\Omega)$, on a
$$\mathcal{E}(\psi+\phi) = \mathcal{E}(\psi) + A_\psi(\phi) + r(\phi),$$
avec
$$A_\psi(\phi) = 2\int_\Omega \nabla\psi\cdot\nabla\phi + 2\int_\Omega V\psi\phi, \qquad r(\phi) = \int_\Omega |\nabla\phi|^2 + \int_\Omega V\phi^2.$$
On a $|r(\phi)| \leqslant \max(1, \|V\|_{L^\infty})\|\phi\|_V^2$. Par ailleurs, on vérifie facilement que A_ψ est une forme linéaire continue dans $H_0^1(\Omega)$ avec $|A_\psi(\phi)| \leqslant (1+\|V\|_{L^\infty})\|\phi\|_V$. Ceci montre que $\mathcal{E}$ est différentiable et que
$$\langle \mathcal{E}'(\psi), \phi\rangle_{V',V} = 2\int_\Omega \nabla\psi\cdot\nabla\phi + 2\int_\Omega V\psi\phi.$$

(2) On a $\mathcal{E}(\psi) \geqslant \displaystyle\int_\Omega V\,\psi^2 \geqslant -\|V\|_{L^\infty}\int_\Omega \psi^2 = -\|V\|_{L^\infty}$.

(3) Pour tout $w \in H_0^1(\Omega)$, on a $\langle \Phi'(\psi_*), w\rangle_{V',V} = 2\int_\Omega \psi_* w$. Comme $\langle \Phi'(\psi_*), \psi_*\rangle_{V',V} = 2\int_\Omega \psi_*^2 = 2 \neq 0$, on en déduit que $\Phi'(\psi_*) \neq 0$ et donc que la contrainte est qualifiée en ψ_*. Un minimiseur ψ_* satisfait la condition
$$\forall w \in H_0^1(\Omega), \qquad \langle \mathcal{E}'(\psi_*) + \lambda\Phi'(\psi_*), w\rangle_{V',V} = 0.$$
Ainsi,
$$\langle \mathcal{E}'(\psi_*) + \lambda\Phi'(\psi_*), \psi_*\rangle_{V',V} = 0 = 2\mathcal{E}(\psi_*) + 2\lambda\int_\Omega \psi_*^2 = 2(\mathcal{E}(\psi_*) + \lambda).$$
Ceci montre que $\lambda = -E_0$. On a donc, pour tout $\phi \in \mathcal{D}(\Omega) \subset H_0^1(\Omega)$,
$$\langle \nabla\psi_*, \nabla\phi\rangle_{\mathcal{D}',\mathcal{D}} + \langle V\,\psi_*, \phi\rangle_{\mathcal{D}',\mathcal{D}} = E_0\langle \psi_*, \phi\rangle_{\mathcal{D}',\mathcal{D}} = \langle -\Delta\psi_* + V\,\psi_*, \phi\rangle_{\mathcal{D}',\mathcal{D}}.$$
On en conclut que $-\Delta\psi_* + V\psi_* = E_0\psi_*$ au sens des distributions.

(4) La matrice A_N a pour terme générique
$$[A_N]_{ij} = \int_\Omega \nabla\phi_i\cdot\nabla\phi_j + \int_\Omega V\phi_i\phi_j.$$
Cette matrice est bien symétrique réelle. La condition de normalisation est
$$\int_\Omega \left|\sum_{i=1}^N x_i\phi_i\right|^2 = \sum_{i,j=1}^N x_i^2\int_\Omega \phi_i\,\phi_j = \sum_{i=1}^N x_i^2,$$
ce qui se traduit bien par $X^TX = 1$. On minimise donc une fonctionnelle continue dans un ensemble fermé et borné dans un espace de dimension finie, donc compact. Ainsi, la fonctionnelle atteint son minimum.

(5) La condition nécessaire d'optimalité satisfaite par un minimiseur X_* est
$$A_NX_* + \mu X_* = 0.$$
Ceci montre que X_* est vecteur propre de A_N, et donc que $-\mu$ est valeur propre. En multipliant à gauche par X_*^T, on a $X_*^TA_NX_* = -\mu$. Comme cette quantité est minimale, on en déduit que $-\mu = \lambda_1^N$. De plus, comme $\mathcal{S}_N \subset \mathcal{S}_{N+1} \subset \mathcal{S}$, on a immédiatement $E_0 \leqslant \lambda_1^{N+1} \leqslant \lambda_1^N$. La suite $(\lambda_1^N)_{N\geqslant 1}$ étant décroissante minorée, elle converge.

(6) – Il est clair que la matrice $\mathrm{Id} - \alpha A_N$ est inversible si et seulement si α^{-1} n'est pas valeur propre de A_N. Sous cette hypothèse, la suite $(X^n)_{n\geqslant 0}$ est bien définie car $X^n - \alpha A_N X^n = 0$ impliquerait que α^{-1} est valeur propre de A_N.

– On vérifie facilement, par récurrence, que $X^n = \gamma_n(\mathrm{Id} - \alpha A_N)^n X^0$. La constante γ_n est déterminée par la condition $|X^n| = 1$, d'où le résultat.

– Avec la condition de l'énoncé,

$$\begin{aligned}(\mathrm{Id} - \alpha A_N)^n X^0 &= (1-\alpha\lambda_1^N)^n((e_1^N)^T X^0)e_1^N + \sum_{i=2}^{N}(1-\alpha\lambda_i^N)^n((e_i^N)^T X^0)e_i^N \\ &\sim (1-\alpha\lambda_1^N)^n((e_1^N)^T X^0)e_1^N\end{aligned}$$

lorsque $n \to +\infty$. Ainsi, lorsque $n \to +\infty$, $X^n \sim e_1^N$.

– On cherche α suffisamment petit pour que $|1-\alpha\lambda_1^N| < 1$ et $|1-\alpha\lambda_N^N| < |1-\alpha\lambda_1^N|$. Comme $0 < \lambda_1^N < \lambda_N^N$, la valeur limite est donnée par

$$1 - \alpha\lambda_1^N = \alpha\lambda_N^N - 1,$$

soit $M = 2/(\lambda_1^N + \lambda_N^N)$. La condition (3) est alors clairement satisfaite.