

# Séminaire : Problèmes spectraux en physique mathématique

Les séminaires ont lieu à l'**Institut Henri Poincaré**, 11 rue Pierre et Marie Curie, 75005 Paris.

Programme du lundi 12 décembre 2016, en **salle 314 (3e étage)**

— 11h15 - 12h15 : **Viet Dang** (Lyon)

## **Equidistribution du cycle conormal d'ensembles nodaux aléatoires.**

A toute fonction  $f$  sur une variété riemannienne compacte  $M$ , on associe un ensemble dans le cotangent  $T^*M$ , appelé la conormale au lieu des zéros de  $f$ ; c'est la version duale de la normale à la sous-variété  $\{f = 0\}$ . Dans un premier temps, j'expliquerai comment interpréter cet objet géométrique comme un courant au sens de De Rham. Dans un second temps, je calculerai l'espérance de ce courant, dans le cas où  $f$  est une combinaison linéaire aléatoire de fonctions propres du Laplacien sur  $M$ , en introduisant des techniques d'intégration supersymétrique à la Berezin. Enfin je montrerai un phénomène d'équidistribution de ce courant dans  $T^*M$ . Il s'agit d'un travail en commun avec Gabriel Rivière.

— 14h - 15h : **Virginie Ehrlicher** (ENPC)

## **Greedy algorithms for electronic structure calculations for molecules.**

Greedy algorithms will be presented in order to compute the lowest eigenvalue and an associated eigenstate for high-dimensional problems and their numerical behaviour will be illustrated for the computation of the ground state electronic wavefunction of a molecule, solution of the many-body Schrödinger equation. The resolution of the many-body Schrödinger equation is a difficult task in practice when the number of electrons is significant, due to the curse of dimensionality. The principle of these methods is to compute an approximation of the wavefunction through an iterative procedure, at each iteration of which, only one Slater determinant is computed, which leads effectively to small-dimensional problems at each stage. As the number of iterations increases, the obtained approximation can be proved to converge to an eigenstate of the many-body Schrödinger operator. Usually, these algorithms are implemented in practice using the Alternating Least-Square algorithm; this leads to some computational difficulties in this particular situation, due to the antisymmetry of the ground state wavefunction. A computational strategy to overcome this difficulty will be presented and illustrated on several molecules. This is a joint work with Eric Cancès and Tony Lelièvre.

— 15h15 - 16h15 : **Konstantin Pankrashkin** (Orsay)

## **Opérateurs autoadjoints du type $\operatorname{div} h \operatorname{grad}$ .**

On va discuter la définition et les propriétés spectrales des opérateurs donnés par l'expression différentielle  $\operatorname{div} h \operatorname{grad}$  dans un domaine borné  $U$ , où la fonction  $h$  est égale à 1 sur une partie de  $U$  et à  $b < 0$  sur le reste de  $U$ . On verra que les propriétés de cet opérateur dépendent fortement du paramètre  $b$ , de la dimension et de la géométrie du domaine. En particulier, on peut avoir un spectre essentiel non vide. Le travail est motivé par l'étude mathématique des métamatériaux à indice négatif. Les résultats sont obtenus en collaboration avec Claudio Cacciapuoti et Andrea Posilicano.

Pour tout renseignement, contacter les organisateurs

Hakim Boumaza ([boumaza@math.univ-paris13.fr](mailto:boumaza@math.univ-paris13.fr))

Mathieu Lewin ([mathieu.lewin@math.cnrs.fr](mailto:mathieu.lewin@math.cnrs.fr))

Stéphane Nonnenmacher ([stephane.nonnenmacher@math.u-psud.fr](mailto:stephane.nonnenmacher@math.u-psud.fr))

<http://ipht.cea.fr/Images/Pisp/snonnenmacher/tournant/seminairetournant.html>