

PROPOSITION DE SUJET DE THÈSE

Intitulé : Modèles réduits et apprentissage pour des problèmes aux valeurs propres issus du calcul de structure électronique.

Mots-clés : Analyse numérique, bases réduites, analyse *a posteriori*, estimations goal-oriented, calcul de structure électronique, modèles de liaisons fortes, théorie de la fonctionnelle de la densité

Encadrement de la thèse : Geneviève Dusson & Alexei Lozinski (Laboratoire de Mathématiques de Besançon, Université Bourgogne Franche-Comté, France)

La thèse pourra commencer entre octobre 2020 et janvier 2021 et sera effectuée au laboratoire de mathématiques de Besançon.

RÉSUMÉ DU SUJET

Pour simuler des systèmes moléculaires et calculer leurs propriétés physiques, il est commun d'utiliser des modèles permettant de calculer la structure électronique du système, c'est-à-dire le comportement des électrons, étant donné la position des noyaux. Ces modèles nécessitent de résoudre des équations aux dérivées partielles non linéaires, et aux valeurs propres, comme les équations de Hartree-Fock, ou les équations provenant de la théorie de la fonctionnelle de la densité. De tels calculs sont à la base des simulations de dynamique moléculaire, où ils sont répétés pour un grand nombre de configurations des particules, ce qui requiert un temps de calcul important. Il existe des modèles réduits qui permettent de grandement diminuer le temps de calcul, mais ceux-ci conduisent en général à une détérioration de la précision, qui peut être difficile à contrôler.

L'objectif de cette thèse est donc de développer des modèles réduits permettant de garder un contrôle sur la qualité des approximations faites. L'intérêt sera en particulier porté sur le cas où les équations sont résolues de nombreuses fois pour différents paramètres. La thèse sera consacrée à l'analyse numérique des modèles réduits, au développement de bornes d'erreur, ainsi qu'à la mise en oeuvre numérique de ces modèles pour tester leur qualité.

Une première approche pourra consister à réaliser un modèle linéaire de l'opérateur non-linéaire grâce à des méthodes d'interpolation ou d'apprentissage, en se basant par exemple sur [Van der Oord, Dusson, Csányi, Ortner, Machine Learning: Science and Technology, 1 (2020)] et [Dusson, Bachmayr, Csányi, Drautz, Etter, van der Oord, Ortner, arxiv 1911.03550]. Une deuxième approche sera de partir de modèles réduits linéaires existants, comme des modèles de type liaisons fortes, et de les améliorer grâce à la résolution de quelques problèmes non-linéaires, en s'inspirant par exemple de la méthode présentée dans l'article [Maday, Patera, Penn, Yano, ESAIM: Proceedings and Surveys, 50, 144–168 (2015)]. Enfin, on s'intéressera à la prédiction de quantités d'intérêt spécifiques, comme l'énergie du système, et on tâchera d'estimer la qualité des approximations, à la fois dans un contexte de modèle réduit et d'apprentissage, afin de garantir la qualité des approximations et/ou de l'apprentissage réalisé.

FORMATION RECOMMANDÉE

Un master en mathématiques appliquées est attendu. Le candidat retenu aura une solide expérience en méthodes numériques pour les équations aux dérivées partielles. Des compétences en programmation (par exemple Julia, Python, C++) seront également appréciées.

INFORMATIONS PRATIQUES CONCERNANT LES CANDIDATURES

Des informations supplémentaires peuvent être demandées par email à Geneviève Dusson (genevieve.dusson@math.cnrs.fr) et Alexei Lozinski (alexei.lozinski@math.cnrs.fr).

Les candidats sont priés d'envoyer un email contenant un CV ainsi qu'une lettre de motivation à genevieve.dusson@math.cnrs.fr ainsi que alexei.lozinski@math.cnrs.fr.

La date limite pour candidater est le 27 mai 2020.