

# Sujet : Etude d'un formalisme tensorielle pour calculer des valeurs propres dans un espace de grande dimension en chimie vibrationnelle.

**Responsables :** O. Coulaud

**Téléphones :** 05 24 57 40 80

**Courriels :** [Olivier.Coulaud@inria.fr](mailto:Olivier.Coulaud@inria.fr)

## Présentation du sujet :

Le calcul de spectre vibrationnel dans l'infra-rouge (IR) est un enjeu important dans différents domaines car il permet de caractériser la composition d'un mélange pour adapter son traitement ou déterminer la présence de polluant dans l'air. Synthétiser les molécules pour obtenir leur spectre infra-rouge est un procédé trop long et trop coûteux pour construire des bases de données de spectre IR. Une alternative est de le déterminer comme un problème aux valeurs propres d'un opérateur en grande dimension ( $N=3N_A-6$  où  $N_A$  est le nombre d'atomes de la molécule). L'opérateur vibrationnel  $H$  est la somme de deux opérateurs : un opérateur harmonique  $H_0$  composé d'une somme d'oscillateurs harmoniques et d'un opérateur polynomial  $V$  qui couple les dimensions. Ce dernier opérateur représente la surface énergétique de la molécule près de son état fondamental. Le problème consiste à calculer les valeurs propres  $H$  pour des fréquences inférieures à  $4\ 000\ \text{cm}^{-1}$ . La solution est approchée par une combinaison linéaire de produit tensoriel de  $N$  fonctions de Hermite unidimensionnelle qui est les vecteurs propres de l'opérateur  $H_0$ . Lorsque l'on traite des molécules de taille moyenne, par exemple  $\text{CH}_3\text{CN}$  le dimension d'espace est 12 et sur des molécules d'intérêt cette dimension peut dépasser 30. Si l'on discrétise chaque dimension par 6 nous avons au maximum un espace discrétisé de taille  $3\ 10^9$  termes nécessitant 16 Go pour stocker un vecteur en mémoire.

Pour pouvoir traiter des problèmes de cette taille voire plus grande, nous écrivons le problème sous forme tensorielle [1]. On cherche une solution sous la forme de  $r$  termes de produit tensoriel ce qui nous permet d'évaluer très rapidement les produits matrice vecteurs sans à avoir à stocker la matrice. A la suite de cette opération, on doit re-projeter le vecteur résultat sur un  $r$ -tenseur.

L'objectif de ce stage est de développer un algorithme pour calculer les valeurs propres de l'Hamiltonien vibrationnel avec une approche tensorielle. La première étape consistera à étudier les différents modes de représentation d'un tenseur (CP-format, Hierarchical format) [2,3]. Puis d'étudier les différents algorithmes de projection d'un tenseur de rang  $K$  sur un tenseur de rang  $r$  avec  $r \ll K$ . A partir de ces deux études, on construira un algorithme pour calculer les  $p$  premières valeurs propres.

Les algorithmes seront validés sur deux molécules (dimension 6)  $\text{CH}_3\text{cN}$  (dimension 12) et on calculera sur une molécule de grande taille (dimension 18).

## Références :

- [1] A. Leclerc and T. Carrington, "Calculating vibrational spectra with sum of product basis functions without storing full-dimensional vectors or matrices." *The Journal of chemical physics*, vol. 140, no. 17, p. 174111, 2014.
- [2] J. Ballani, L. Grasedyck, and M. Kluge, "A Review on Adaptive Low-Rank Approximation Techniques in the Hierarchical Tensor Format," in *Extraction of Quantifiable Information from Complex Systems*, vol. 102, 2014, pp. 195–210.

- [3] W. Hackbusch, *Tensor Spaces and Numerical Tensor Calculus*, vol. 42. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2012.

**Mot-clés :** grande dimension, tenseur, valeur propre, algèbre linéaire

**Commentaires :**

Les codes seront développés en python et en C++

Le stage sera rémunéré par gratification et se déroulera dans l'équipe projet Inria HiePACS au centre Inria Sud-Ouest basé à Bordeaux.