

Sujet : Solveur d'algèbre linéaire au format tenseur train – Application au calcul de spectres vibrationnels

Responsables : O. Coulaud, L. Giraud, J.R. Poirier

Téléphones :

Courriels : olivier.coulaud@inria.fr, luc.giraud@inria.fr, poirier@laplace.univ-tlse.fr

Présentation du sujet :

Des problèmes en grande dimension sont rencontrés dans de nombreux domaines d'intérêt pratique comme les équations stochastiques, les problèmes de quantification des incertitudes, la chimie quantique et vibratoire, l'optimisation, l'apprentissage machine, Pour aborder ces problèmes, de nouvelles techniques ont été introduites telles que la réduction des variables, la réduction de modèles et les algorithmes randomisés. Cependant, la dimension typique des problèmes ne cesse de croître rendant obsolètes, dans de nombreuses situations, les techniques précédemment citées. Par ailleurs, l'étude théorique [1, 2] des méthodes des tenseurs de rang faible s'est développée et a atteint un niveau de maturité telles qu'elles peuvent être envisagées comme des alternatives. Une nouvelle approche particulièrement bien adaptée consiste à rechercher un format de tenseur hiérarchique de bas rang qui capture la structure algébrique du système. Dans ce contexte, des formats tels que le Tucker hiérarchique [2] et le train tenseur [1] ont été introduits, et se sont avérés efficaces et stables pour fournir une représentation de données clairsemées pour les systèmes en très haute dimension. En revanche, les méthodes itératives efficaces pour résoudre soit un système linéaire soit un problème aux valeurs propres restent mal compris et peu analysés ; ce qui constitue le cœur du sujet proposé.

L'objectif de ce stage est de reprendre dans ce formalisme tensoriel, les méthodes classiques de résolution de systèmes linéaires et de résolution de problèmes aux valeurs propres qui incluent des méthodes de type point fixe (e.g., Richardson, puissance itérée ...) et des approches basées sur des sous-espaces de Krylov (e.g., gradient conjugué, GMRES, Arnoldi ...). Il s'agira en particulier d'essayer de comprendre les différences par rapport à l'approche classique basée sur les matrices et les vecteurs dans le cas de tenseur de bas ordre ou des liens naturels existent. Les développements et expérimentations numériques seront réalisés en utilisant notre bibliothèque PTTS : Parallel Tensor Train Solver.

Les méthodes développées seront validées dans différents contextes, des plus académiques jusqu'à des applications en chimie computationnelle pour calculer les spectres de molécules de grande taille (12, 18 ou 24).

Mot-clés :

Décomposition tenseur train, algèbre linéaire, valeur propre, système linéaire

Profil souhaité :

Un esprit curieux et ouvert à des nouvelles problématiques ayant de solides connaissances en algèbre linéaire.

Commentaires :

Le sujet pourra se prolonger en thèse, toutefois le financement n'est pas acquis.

Références :

- [1] W. Hackbusch, *Tensor Spaces and Numerical Tensor Calculus*, vol. 42. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- [2] T. G. Kolda and B. W. Bader, "Tensor Decompositions and Applications," *SIAM Review*, vol. 51, no. 3, pp. 455–500, 2009.