

Sujet de stage de M2 : Transport optimal pour la reconstruction de densité de paires en calcul de structure électronique

- Unité de recherche: Laboratoire de Mathématiques de Besançon (Université Bourgogne Franche-Comté) en collaboration avec le CERMICS (Ecole des Ponts ParisTech)
- Encadrement et contact: Geneviève DUSSON (Laboratoire de Mathématiques de Besançon, genevieve.dusson@math.cnrs.fr) et Virginie EHRLACHER (CERMICS, virginie.ehrlacher@enpc.fr)
- Possibilité de candidater à une bourse de thèse après le stage de M2.
- Rémunération: oui
- Durée: 4 à 6 mois



Ce stage s'inscrit dans le cadre d'une collaboration entre le Laboratoire de Mathématiques de Besançon (Université Bourgogne Franche-Comté) et le CERMICS (laboratoire de mathématiques appliquées de l'École des Ponts ParisTech).

Le sujet de stage porte sur l'étude d'une nouvelle méthode numérique pour des problèmes issus du calcul de structure électronique de molécules. La problématique est la suivante: dans une molécule comportant N électrons, qui sont modélisés comme des particules quantiques, l'état de plus basse énergie de ces électrons est caractérisé par une *fonction d'onde* $\psi(x_1, \dots, x_N)$ où $x_1, \dots, x_N \in \mathbb{R}^3$, appelé état fondamental du système. Cette fonction d'onde a l'interprétation probabiliste suivante: pour tout domaine mesurable $A \subset \mathbb{R}^{3N}$, $\int_A |\psi|^2$ représente la probabilité que les positions (x_1, \dots, x_N) des N électrons appartiennent à l'ensemble A .

En pratique, en particulier lorsque le nombre d'électrons N est grand, il est impossible de calculer numériquement une approximation de la fonction d'onde ψ complète. Il est cependant possible d'obtenir une approximation de la *densité électronique* du système d'électrons, c'est-à-dire la fonction $\rho : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ définie par

$$\forall x \in \mathbb{R}^3, \quad \rho(x) = N \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} |\psi(x, x_2, \dots, x_N)|^2 dx_2 \cdots dx_N.$$

Par ailleurs, il existe également des méthodes numériques, plus chères d'un point de vue du coût de calcul qui permettent d'approcher la *densité de paires* du système d'électrons,

qui est définie par

$$\forall x, y \in \mathbb{R}^3, \quad \rho_2(x, y) = N \int_{\mathbb{R}^{3(N-2)}} |\psi(x, y, x_3, \dots, x_N)|^2 dx_3 \cdots dx_N.$$

Le but du projet sera de proposer, tester et analyser mathématiquement des méthodes numériques permettant de calculer la densité de paires ρ_2 d'un système de N électrons à partir de la connaissance de la densité électronique ρ de ce système. Les outils mathématiques utilisés pour le développement de tels algorithmes reposeront sur l'utilisation de concepts de transport optimal, mettant en oeuvre des généralisations de la notion de barycentres de mesure au sens de la distance de Wasserstein [1] dans l'esprit du travail [2]. Les tests seront effectués via le langage de programmation Julia.

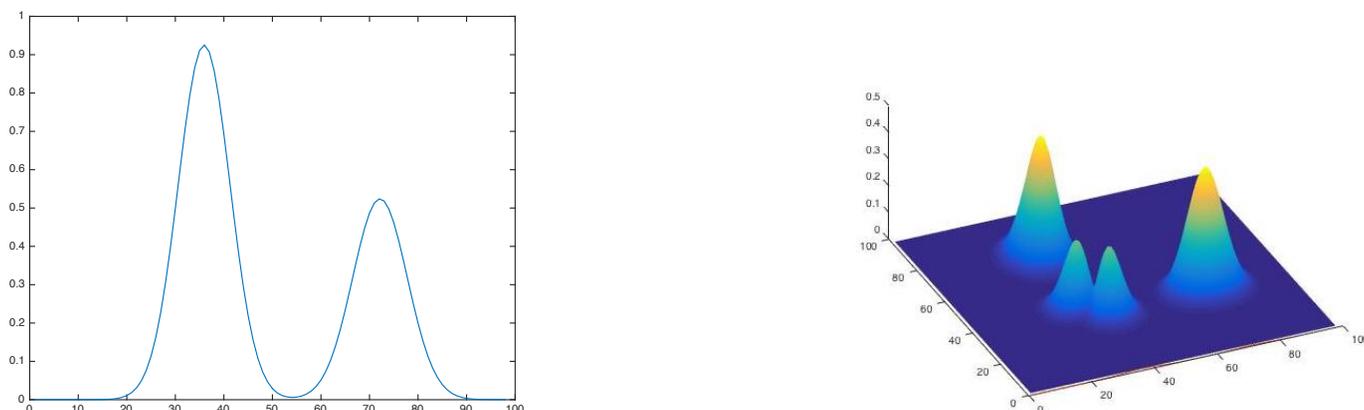


Figure 1: One-dimensional example of electronic density (left) and electronic pair density (right)

Il est attendu que le/la candidat.e ait une formation de niveau M2 en mathématiques appliquées et ait déjà une expérience et une appétence pour l'implémentation de codes numériques. Il sera préférable (mais non obligatoire) que le candidat ait suivi des cours sur la théorie du transport optimal et/ou sur les modèles mathématiques utilisés en calcul de structure électronique.

References

- [1] Martial Agueh, and Guillaume Carlier. "Barycenters in the Wasserstein space." *SIAM Journal on Mathematical Analysis* 43.2 (2011): 904-924.
- [2] Julie Delon, and Agnès Desolneux. "A wasserstein-type distance in the space of gaussian mixture models." *SIAM Journal on Imaging Sciences* 13.2 (2020): 936-970.