MÉTHODE DES BASES RÉDUITES EN CHIMIE QUANTIQUE : RECHERCHE D'UNE MÉTHODE D'ORDRE $\mathcal{O}(N)$ OPTIMALE

BARRAULT MAXIME - SEMINAIRE CERMICS 2002

Eric Cancès
Claude Le Bris
Yvon Maday
Gabriel Turinici
Jean-Louis Vaudescal

Plan de l'exposé

→ Intérêt des Bases Réduites en Chimie Quantique,

→ Algorithmes utilisés en Chimie Quantique,

→ Passage aux Bases Réduites,

→ Conclusions et Futur,

→ Une méthode de type Base Réduite pour les systèmes d'évolution : POD.

Equation de Schrödinger et approximation de Born-Oppenheimer

→ Equation de Schrödinger

$$i\partial_t \Psi = H\Psi, \quad \Psi \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_n \otimes \mathcal{H}_e,$$

H est l'hamiltonien et Ψ décrit l'espace des états physiques.

→ Approximation de Born-Oppenheimer

$$\Psi = \Psi_n \Psi_e.$$

→ Traitement classique des noyaux

$$m_k \frac{d^2 \bar{x_k}}{dt^2}(t) = -\nabla_{\bar{x_k}} W\Big(\bar{x_1}(t), \ldots, \bar{x_M}(t)\Big),$$

avec,

$$W\Big(\bar{x_1}(t), \ldots, \bar{x_M}(t)\Big) = E^{GS}(\bar{x_1}, \ldots, \bar{x_M}) + \sum_{1 \le k < l \le M} \frac{z_k z_l}{\mid \bar{x_k} - \bar{x_l} \mid}.$$

Problème électronique

Soit z la position des noyaux pour une configuration donnée.

$\rightarrow$ Problème électronique sans variables de spin

$$E^{GS}(z) = \inf\{\langle\psi, H(z)\psi\rangle, \quad \psi \in \mathcal{W}_N\},$$

avec,

$$H = -\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2}\Delta_{x_i} - \sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{N} \frac{z_k}{\mid x_i - \bar{x_k} \mid} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{\mid x_i - x_j \mid},$$

et,

$$\mathcal{W}_N = \Big\{\psi \in \mathcal{L}_a^2(\mathbb{R}^{3N}), \quad \int_{\mathbb{R}^{3N}} \mid \psi \mid^2 = 1, \quad \int_{\mathbb{R}^{3N}} \mid \nabla\psi \mid^2 < +\infty\Big\}.$$

Modèles Hartree-Fock : approche variationnelle

On remplace l'espace $\mathcal{W}_N$ par

$$\Big\{\psi(x_1,\ldots,x_n) = \frac{1}{\sqrt{N}} det\big(\phi_i(x_j)\big), \quad \phi_i \in H^1(\mathbb{R}^3),$$

$$, \quad \int_{\mathbb{R}^3} \phi_i \phi_j^* = \delta_{ij}, \quad 1 \leq i,j \leq N\Big\}.$$

→ Conséquences

- 1 fonction de $3N$ variables $\longmapsto$ N fonctions de 3 variables,
- Energie non linéaire en $(\phi_i)_i$.

Théorie de la Fonctionnelle de la Densité

$\rightarrow$ Modèles DFT : approximation de l'Hamiltonien H

On definit $\rho(x) = N \int_{\mathbb{R}^{3(N-1)}} |\psi(x, x_2, \ldots, x_N)|^2 \, dx_2 \ldots dx_N$. On a

$$E^{GS} = E^{GS}(V) = \inf_{\psi \in \mathcal{W}_N} \langle \psi, H\psi \rangle = \inf_{\rho \in \mathcal{R}_{LL}} F_{LL}(\rho) + \int_{\mathbb{R}^3} \rho V,$$

où $F_{LL}(\rho)$, fonctionnelle de Levy-Lieb, est une fonctionnelle universelle de la densité (dépend seulement de N).

De plus,

$$\mathcal{R}_{LL} = \left\{ \rho, \quad \exists \psi \in \mathcal{W}_N, \quad \psi \mapsto \rho \right\} = \left\{ \rho \geq 0, \quad \sqrt{\rho} \in H^1(\mathbb{R}^3), \quad \int_{\mathbb{R}^3} \rho = N \right\}.$$

$\rightarrow$ Khon-Sham

$$F_{LL}(\rho) = T_s(\rho) + J(\rho) + E_{xc}(\rho) \quad \text{avec} \quad \rho(x) = \sum_{i=1}^{N} |\phi_i(x)|^2, \ldots$$

Formulation matricielle

La Chimie Quantique utilisent des approches totalement différentes mais de même structure mathématique.

→ Approximation de Galerkin

$$\forall i = 1, \dots, N \quad \phi_i(x) = \sum_{\mu=1}^{N_b} C_{\mu i} \chi_\mu(x), \quad \int_{\mathbb{R}^3} \phi_i \phi_j^* = \delta_{ij}.$$

→ Formulation matricielle de ces modèles

$$E^{GS} \simeq \inf \left\{ E(D), \quad D \in \mathcal{P} \right\},$$

où

$$\mathcal{P} = \left\{ D \in \mathcal{M}^{N_b, N_b}(\mathbb{R}), \quad D = D^*, \quad Tr(DS) = N, \quad DSD = D \right\},$$

avec,

$$D = CC^* \text{ et } S \text{ la matrice de recouvrement } S_{\mu\nu} = \int_{\mathbb{R}^3} \chi_\mu^* \chi_\nu \, dx.$$

Méthodes générales

→ Réécriture du problème pour RHF

$$\inf\Big\{Tr\big(\mathcal{H}(D)D\big), \quad D = D^*, \quad Tr(DS) = N, \quad DSD = D\Big\},$$

$$\text{avec} \quad \mathcal{H}(D) = 2h + G(D).$$

→ Méthodes directes

- Minimisation directe : gradient projeté,
- Méthodes basées sur le lagrangien du problème : point selle,
- Méthodes de pénalisation,
- Résolution des équations d'Euler-Lagrange par une méthode de point fixe : algorithmes SCF.

La dernière méthode est la plus couramment utilisée (99,9%).

Algorithmes SCF

→ Schéma général

- Initialisation : $D_{in} = D_0$.
- Boucle
  - ∗ Construction de la matrice de Fock : $\mathcal{F}(D_{in}) = h + G(D_{in})$.
  - ∗ Résolution du problème linéaire sous contraintes $\mathcal{P}_l(D_{in})$:

$$D_{out} = \inf\Big\{Tr\Big(\mathcal{F}(D_{in})D\Big), \quad D \in \mathcal{P}\Big\}$$

  - ∗ test de convergence : $D_{in} = D_{out}$?
- Construction de l'énergie du fondamental : $E^{HF}(D_{out})$.

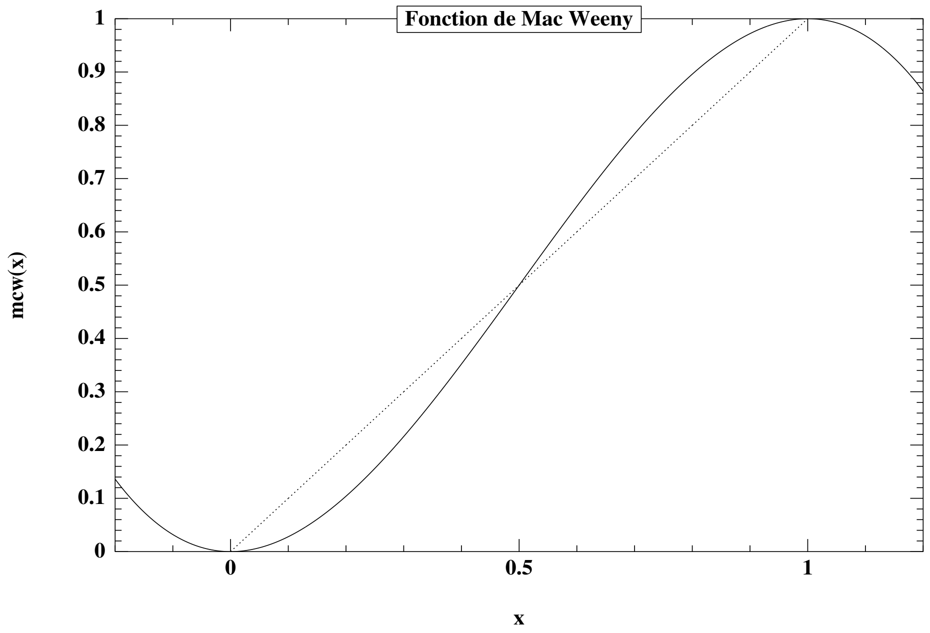
→ Résolution de $\mathcal{P}_l(D_{in})$: diagonalisation de $\mathcal{F}(D_{in})$ et principe aufbau

→ Stratégies améliorant la convergence : Level Shifting, DIIS, ODA, ...

Purification de Mac Weeny

On définit la fonction de Mac Weeny par :

$$mcw : x \longmapsto mcw(x) = 3x^2 - 2x^3.$$



$$\forall x \in]-\frac{1}{2}, 1+\frac{1}{2}[\quad mcw^{\infty}(x) \in \{0,1\}.$$

Purification de Mac Weeny 2

Soit une matrice symétrique R_0 telle que $R_0^2 \neq R_0$. Pour la rendre idempotente, une idée naturelle consiste à minimiser $\frac{1}{2}\|R_0^2 - R_0\|^2$.

$\Longrightarrow R_{n+1} = 3R_n^2 - 2R_n^3$ par une méthode de gradient à pas unitaire.

Et, R_∞ minimise $\{\|R - R_0\|^2, R \text{ idempotente}\}$

$\rightarrow$ Itération de Purification de Mac Weeny

$$D \longmapsto U = 3DSD - 2DSDSD.$$

Alors,

$$USU - U = 4\tilde{D}S\tilde{D}S\tilde{D} - 3\tilde{D}S\tilde{D},$$

avec,

$$\tilde{D} = DSD - D.$$

Résultat de Li, Numes, Vanderbilt

Soit $\mathcal{F}$ une matrice de Fock constante, le minimum de $\mathcal{P}_1$ est un minimum local de $\mathcal{P}_2$.

$$\mathcal{P}_1 = \inf\Big\{Tr(\mathcal{F}D), \quad D \in \mathcal{P}\Big\},$$

$$\mathcal{P}_2 = \inf\Big\{Tr\Big((\mathcal{F} - \epsilon_F I_d)(3DSD - 2DSDSD)\Big), \quad D \in \mathbb{R}^M\Big\}.$$

$\rightarrow$ Nouvel algorithme

On remplace la résolution de $\mathcal{P}_l(D_{in})$ par la résolution de

$$\mathcal{P}_{nl}^{mw}(D_{in}) = \inf\Big\{Tr\Big((\mathcal{F}(D_{in}) - \epsilon_F \mathcal{I}_d)(3DSD - 2DSDSD)\Big), \quad D \in \mathbb{R}^M\Big\}.$$

Algorithmes dérivées de Li, Numes, Vanderbilt

→ Première application

$$\inf\Big\{Tr\big(\mathcal{H}(D)D\big), \quad D = D^*, \quad Tr(DS) = N, \quad DSD = D\Big\}$$

$$\neq \quad \inf\Big\{Tr\Big((\mathcal{H}(D) - \epsilon_F I_d)(3DSD - 2DSDSD)\Big), \quad D \in \mathbb{R}^M\Big\}$$

→ Deux alternatives

- Minimisation d'une fonctionnelle plus complexe sans contraintes

$$\inf\Big\{Tr\Big((\mathcal{H} - \epsilon_F S)(3DSD - 2DSDSD)(3DSD - 2DSDSD)\Big), \quad D \in \mathbb{R}^M\Big\}$$

- Procédure itérative

$$D_0 = \frac{\mathcal{F}(D_{sol}) + I_d}{2},$$

$$D_{n+1} = 3D_nSD_n - 2D_nSD_nSD_n, \quad \text{pour} \quad n \geq 1.$$

Complexité des méthodes

Etape limitante : diagonalisation de la matrice de Fock.

→ Matrices pleines (petites molécules)

- SCF : $\mathcal{O}(N^3)$ car diagonalisation,
- LNV : $\mathcal{O}(N^3)$ car produits matrice-vecteur.

→ Matrices creuses (grosses molécules)

- SCF : $\mathcal{O}(N^3)$,
- LNV : $\mathcal{O}(N)$: assemblage et produits matrice-vecteur en $\mathcal{O}(N)$ en opérations.
- Fonctionnelles de pénalisation (Kohn, Haynes et Payne) : $\mathcal{O}(N)$.

Pour des gros systèmes, l'alternative proposée par LNV, s'avère la plus pertinente.

Méthode des Bases réduites (1)

Soit u_λ solution du problème $\mathcal{P}_\lambda$ qu'on doit résoudre pour un grand nombre de jeux de paramètres $(\lambda_n)_n$:

on cherche u_{λ_n} dans l'espace suivant

$$V_m = Span(u_{\lambda_i}, i = 1, m).$$

→ Applications

- EDP

$$F(u,\lambda) = 0 \quad \text{avec} \quad BC(u,\lambda) = 0.$$

- Problème d'optimisation

$$\inf_{u \in \mathbb{R}^N} \{E(u,\lambda), \quad C(u,\lambda) = 0\}.$$

→ Difficultés

- $BC(u,\lambda)$ dépendant de λ,
- $BC(u)$ non linéaire en u.

Méthode des Bases réduites (2)

$\rightarrow$ Une démarche similaire sur le fond

Calcul grossier et interpolation (Méthodes multi-grilles).

$\rightarrow$ Une forme numérique différente

- Application d'un projecteur
- Estimations a priori et a posteriori plus simples a obtenir

$\longmapsto$ réduction peu conséquente, maillage adaptatif.

$\rightarrow$ Définition d'un nouveau maillage

Questions :

$\ast$ Lequel choisir ?

$\ast$ Comment le choisir ?

$\ast$ Comment l'adapter automatiquement ?

Un exemple numérique : H_2ClCCH_2F

Calcul ab initio précis pour 441 géométries de 441 matrices D, S, DS, h, $G(D)$, $\mathcal{F}(D)$ et $\mathcal{H}(D)$.

$\rightarrow$ Dimensionnement du problème : Analyse en composantes principales

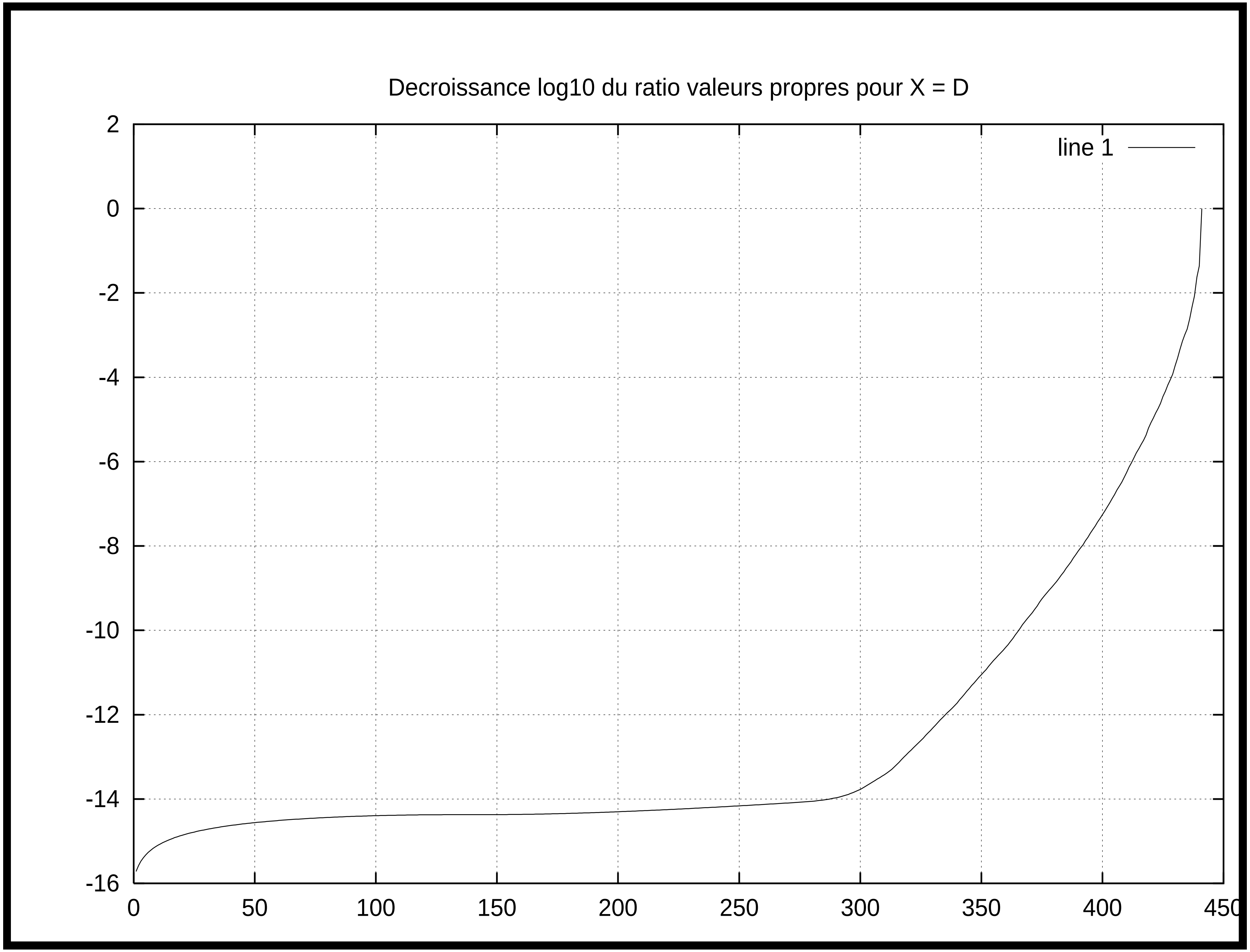
Soient X la matrice $(X_1, \ldots, X_{441})$ et $(\lambda_i)_i$ les valeurs propres de X^*X.

On a regardé la décroissance de la fonction $L(n)$ définie par

$$\forall i = 1, ..., 441 \quad L(i) = \log_{10}\Big(\sum_{k=1}^{i} \lambda_k / \sum_{k=1}^{441} \lambda_k\Big).$$

$\rightarrow$ Conjecture

Les méthodes d'ordre N actuelles ne sont pas optimales. Il semble qu'on puisse remplacer l'espace sur lequel on minimise $\mathbb{R}^M$
$(M = N_b * (N_b + 1)/2)$ par l'espace plus petit $\mathbb{R}^m$, m dimension de la base réduite.


Decroissance log10 du ratio valeurs propres pour X = D
line 1
2
0
-2
-4
-6
-8
-10
-12
-14
-16
0
50
100
150
200
250
300
350
400
450

Formulation à l'aide des Bases Réduites

Soit $V = (D_1, \ldots, D_m)$ la base réduite de dimension m. On cherche D de la forme

$$D = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i D_i, \quad \underline{\alpha} \in \mathbb{R}^m.$$

$\rightarrow$ Algorithmes basés sur le résultat de Li, Numes, Vanderbilt,

$\rightarrow$ Pénalisation des contraintes.

Algorithme premier basé sur Li, Numes, Vanderbilt

$\rightarrow$ Algorithme 1

- Initialisation : $D_0 \in V$,
- Boucle

$$\diamond \; D_n = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i^n D_i,$$

$\diamond$ Construction de la matrice de Fock $\tilde{\mathcal{F}} = \mathcal{F}(D_n)$,

$\diamond$ Calcul de D_{n+1},

$$D_{n+1} = \inf\Big\{Tr\Big((\tilde{\mathcal{F}} - \epsilon_{\tilde{\mathcal{F}}} I_d) f^{mcw}\big(\sum_{i=1}^{m} \alpha_i D_i\big)\Big), \quad \underline{\alpha} \in \mathbb{R}^m\Big\}.$$

$\diamond$ test de convergence : $D_n = D_{n+1}$?

Autres algorithmes

$\rightarrow$ Algorithme 2

Dans la boucle itérative, on remplace le calcul de $\tilde{\mathcal{F}}$ par

- $\tilde{D_n} = 3D_nSD_n - 2D_nSD_nSD_n$,
- on considère l'hamiltonien $\tilde{\mathcal{F}} = \mathcal{F}(\tilde{D_n})$.

$\rightarrow$ Algorithme 3

Dans la boucle itérative, on approche $\tilde{\mathcal{F}}$ par

$$\tilde{\mathcal{F}} = \sum_{i=1}^{m} \beta_i \mathcal{F}_{z_i}(D_i), \ \ \forall i = 1, \ldots, m \quad \beta_i = f(\underline{\alpha}).$$

$\rightarrow$ Algorithme 4

$$D_{sol} = \inf \Big\{ \tilde{E}^{HF}(3DSD - 2DSDSD), \quad D = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i D_i, \quad \underline{\alpha} \in \mathbb{R}^m \Big\}.$$

Pénalisation de la contrainte exacte

$$\mathcal{P}^1_{pen} = \inf\Big\{\mathcal{E}(D), \quad D = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i D_i, \quad \underline{\alpha} \in \mathbb{R}^m\Big\},$$

avec,

$$\mathcal{E}(D) = E^{HF}_{appr}(D) + \frac{1}{\gamma} \parallel DSD - D \parallel^2 + \frac{1}{\epsilon} \mid Tr(DS) - N \mid^2,$$

et,

$$\begin{aligned} E^{HF}_{appr}(D) &= Tr\Big(\tilde{\mathcal{H}}(D)D\Big) + Tr\Big(\hat{\mathcal{H}}(D)D\Big), \\ &= \tilde{E}(D) + \sum_{i=1}^{m} \nu_i \hat{E}_{z_k}(D_k). \end{aligned}$$

On pose

$$\forall i \in 1, \ldots, m \quad \nu_i = f(\underline{\alpha}).$$

Pénalisation d'une contrainte approchée (matrice pleine)

Soit $\bar{D} = DS$. $\bar{D}$ vérifie $\bar{D}^2 = \bar{D}$ et $Tr(\bar{D}) = N$.

- Première approche

On pose $\bar{D} = \sum_{i=1}^{m} \beta_i \bar{D}_i$ avec $\forall i = 1, \ldots, N \quad \beta_i = f(\underline{\alpha})$.

On cherche ensuite à minimiser sur $\mathbb{R}^m$

$$\mathcal{E}(D) = E_{appr}^{HF}(D) + \tfrac{1}{\gamma} \parallel \bar{D}^2 - \bar{D} \parallel^2 + \tfrac{1}{\epsilon} \mid Tr(\bar{D}) - N \mid^2 .$$

- Problème : contraintes imposées trop faibles $\bar{D} \neq DS$.

- Améliorations

$$S \simeq \sum_{i=1}^{m} \gamma_i S_i \quad \text{soit} \quad DS \simeq \tilde{DS} = \sum_{i=1}^{m} \sum_{k=1}^{m} \alpha_i \gamma_k D_i S_k .$$

$$\bar{D} = \sum_{i=1}^{m} \beta_i \bar{D}_i ,$$

avec $\forall i = 1, ..., N \quad \beta_i = \sum_{j=1}^{m} \sum_{k=1}^{m} \lambda_{jk}^{i} \alpha_j \gamma_k , \quad \lambda_{jk}^{i} = Proj_{\bar{D}_i}(D_j S_k)$.

Méthodologie développée

→ Fonctionnelle à minimiser

$$\mathcal{E}(D) = E^{HF}_{appr}(D) + \frac{1}{\gamma} \parallel \bar{D}^2 - \bar{D} \parallel^2 + \frac{1}{\epsilon} \mid Tr(\bar{D}) - N \mid^2 + \frac{1}{\eta} \parallel \bar{D} - \tilde{D S} \parallel^2 .$$

→ Implémentation

- Pénalisation : processus de continuation,
- Minimisation : Newton et recherche de Wolfe.

→ Comportement

convergence vers une solution d'énergie proche du fondamental mais qui satisfait les contraintes de façon pas vraiment satisfaisante.

→ Amélioration : Faire des itérations de Mac Weeny sur D^{brd}_{sol},

$\longmapsto$ On peut voir l'algorithme base réduite comme une méthode d'obtention d'un initial guess pour un algorithme basé sur des itérations de Mac Weeny.

Système : Molécule H_2ClCCH_2F

Molécule $H_2ClCCH_2F \longmapsto$ 21 paires électrons, 18 ddl.

$\rightarrow$ Génération des matrices

On a considéré deux paramètres λ_1 et λ_2 de la molécule. On a fait varier ces deux paramètres entre 0 et 1 avec un pas de 0.05 $\longrightarrow$ 441 matrices engendrées.

$\rightarrow$ Choix de la base réduite

9 matrices : sommets, centre, sommets du carré central.

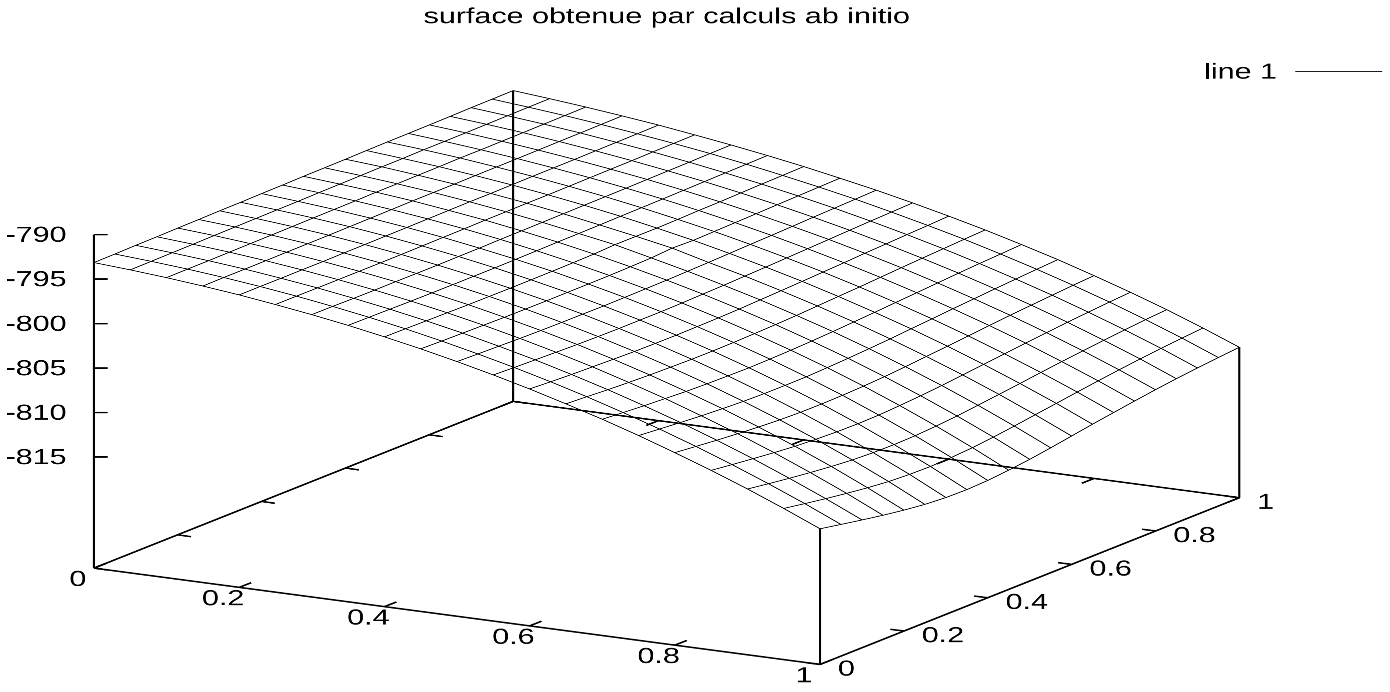
$\rightarrow$ Courbes présentées

On note $(e_r^i, e_{a,j}^i, D_r^i)_i = (E_r(z_i), E_{brd,j}(z_i), D_r(z_i))_i, \quad \forall j = 0, \ldots, 6.$

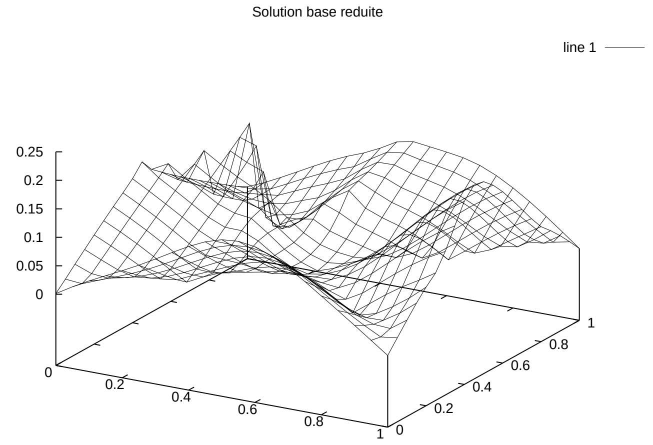
- Erreurs relatives sur l'énergie: $(\| e_r^i - e_{a,j}^i \| / \| e_r^i \|)_i, \quad \forall j = 0, \ldots, 6,$
- Erreurs relatives sur la matrice densité : $(\| D_r^i - D_{a,j}^i \| / \| D_r^i \|)_i.$

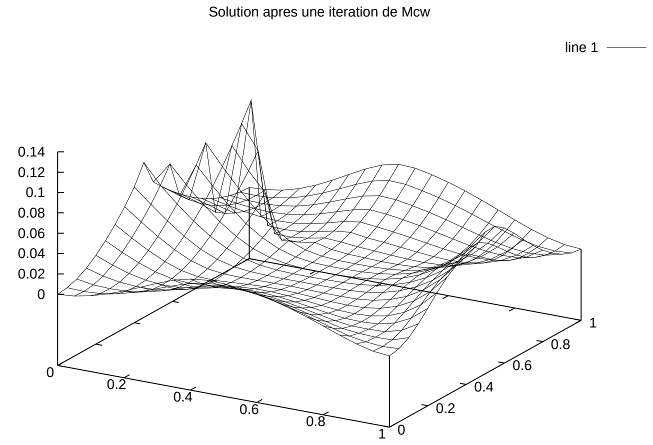
Surface de potentiel réelle

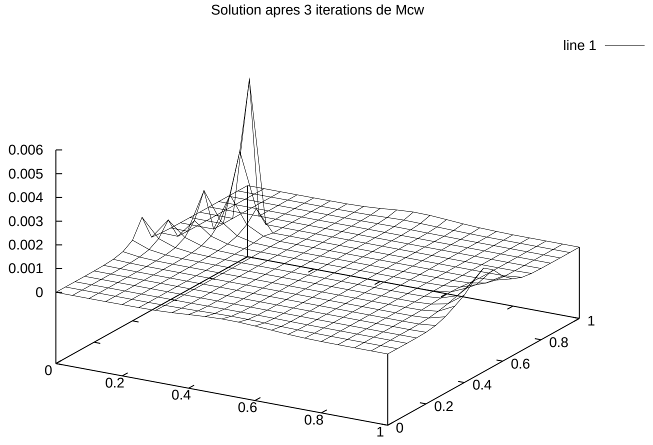
- Surface de potentiel : $(\lambda_1, \lambda_2) \mapsto E_r(\lambda_1, \lambda_2)$

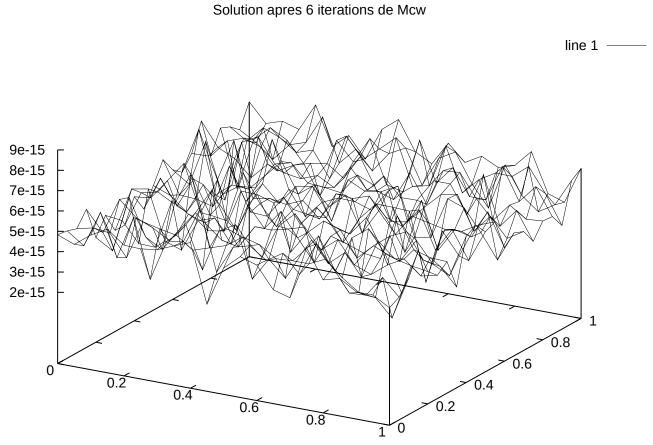


Erreurs sur la contrainte $DSD = D$

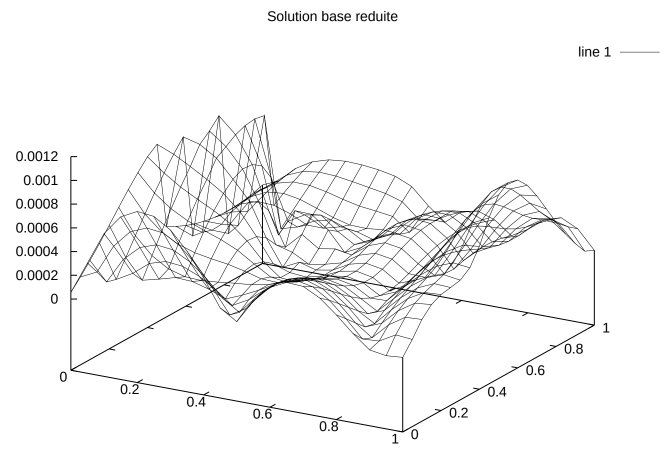


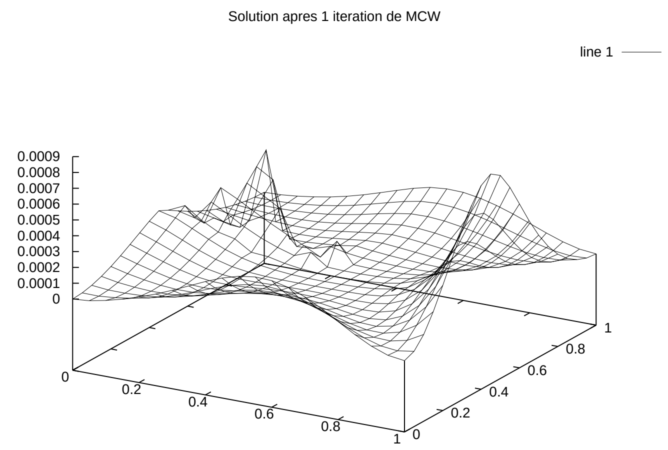


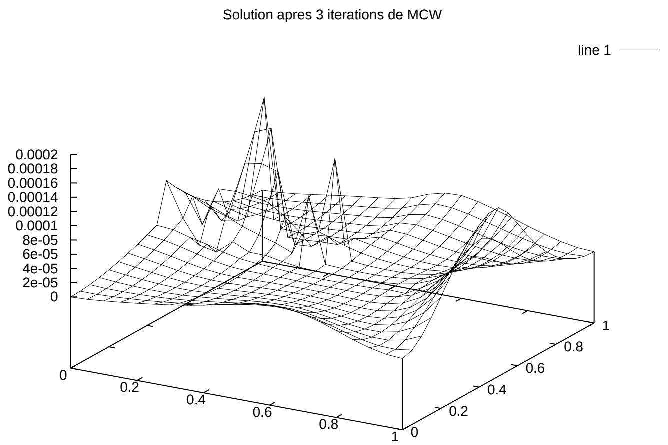


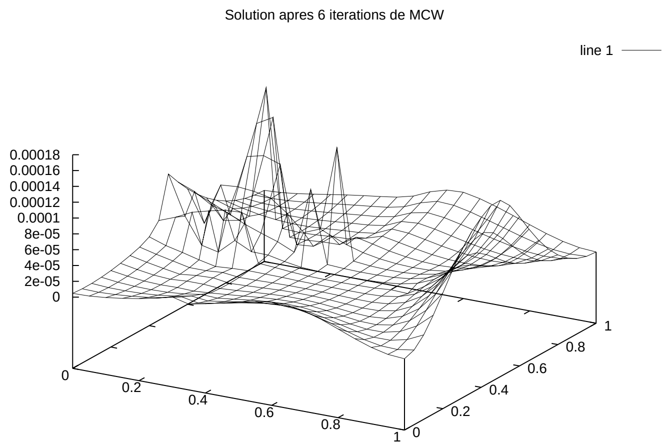


Erreurs relatives sur l'énergie

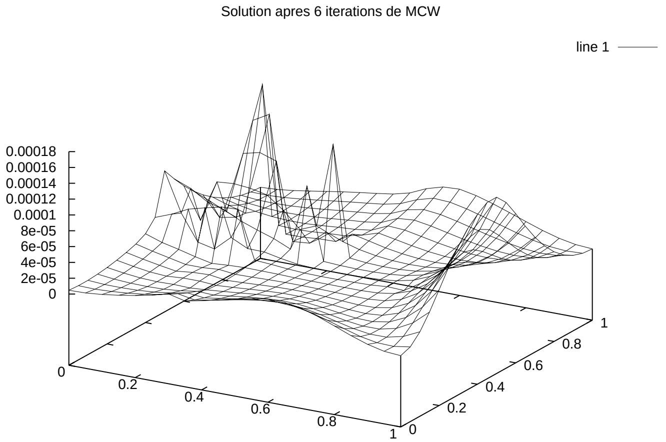


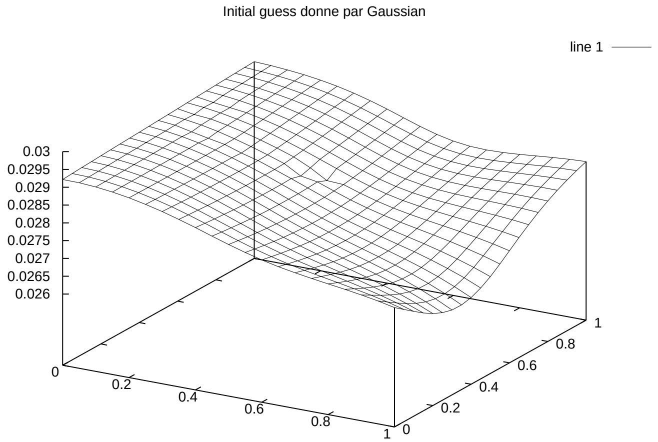


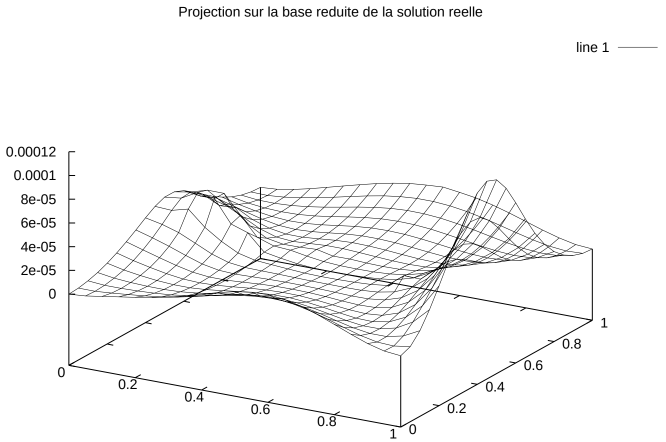




Erreurs relatives après purification d'initial-guess différents







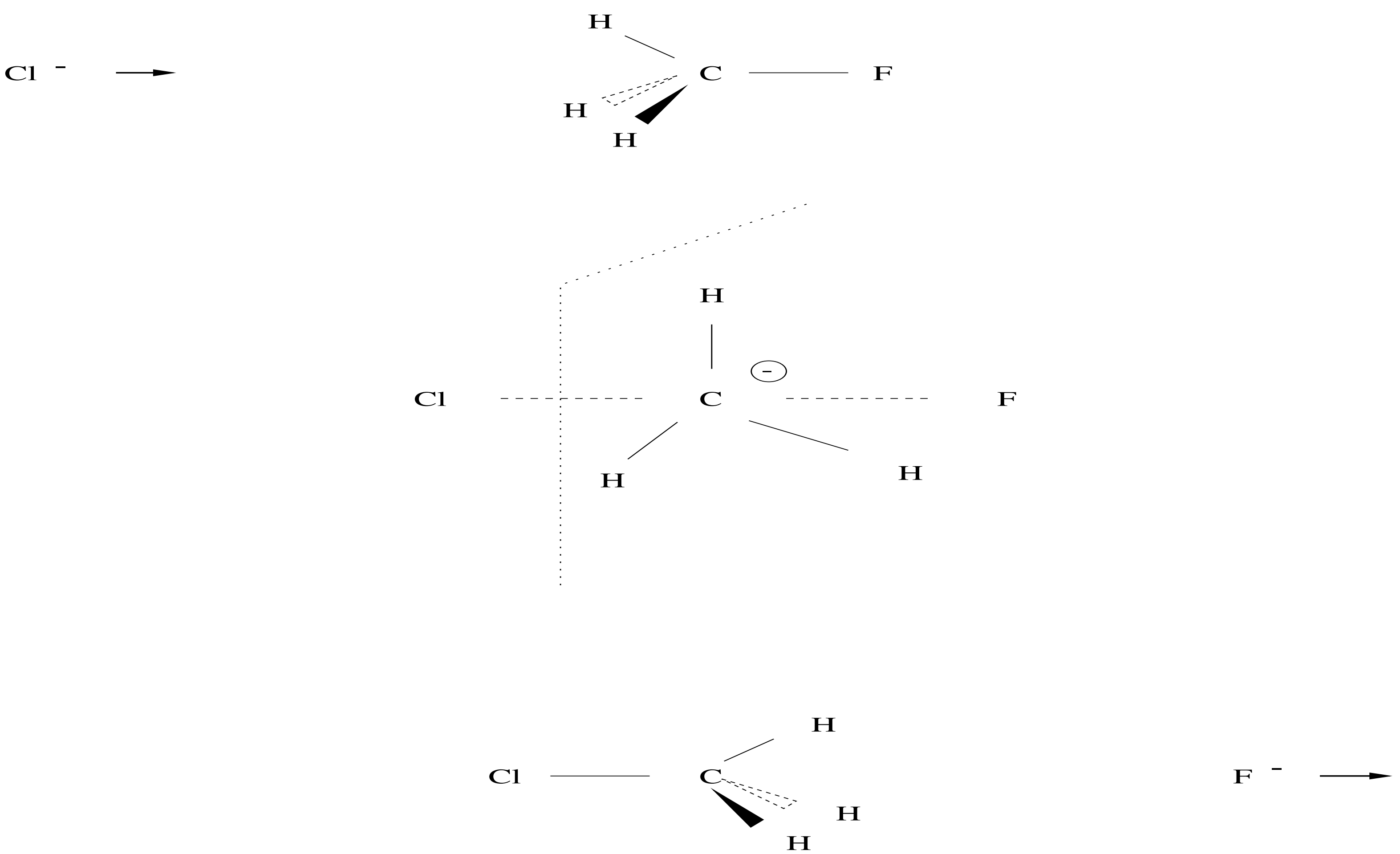
Réaction d'ionisation

→ Génération des matrices

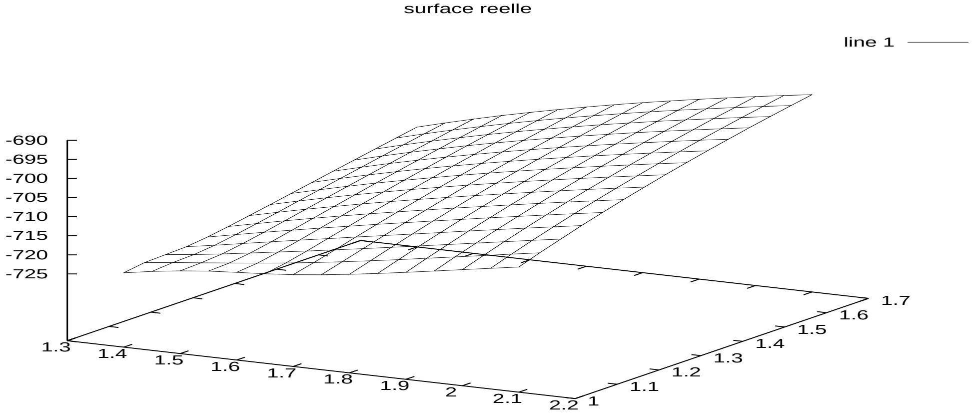
On a considéré les paramètres $c - cl$ et $c - f$ de la molécule. On a effectué une optimisation de géométrie pour 15 valeurs différentes de ces deux paramètres soit 225 matrices engendrées.

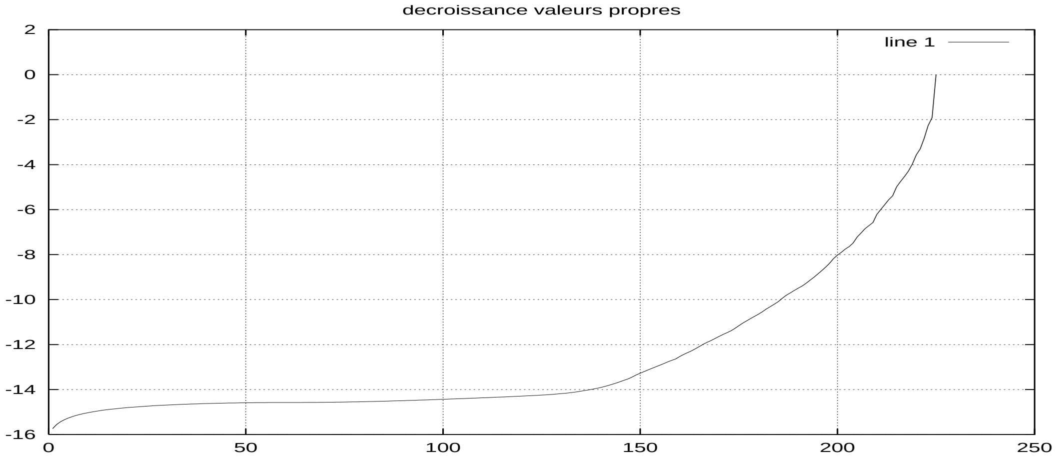
→ Bases réduites choisies

- 9 éléments,
- 5 éléments.

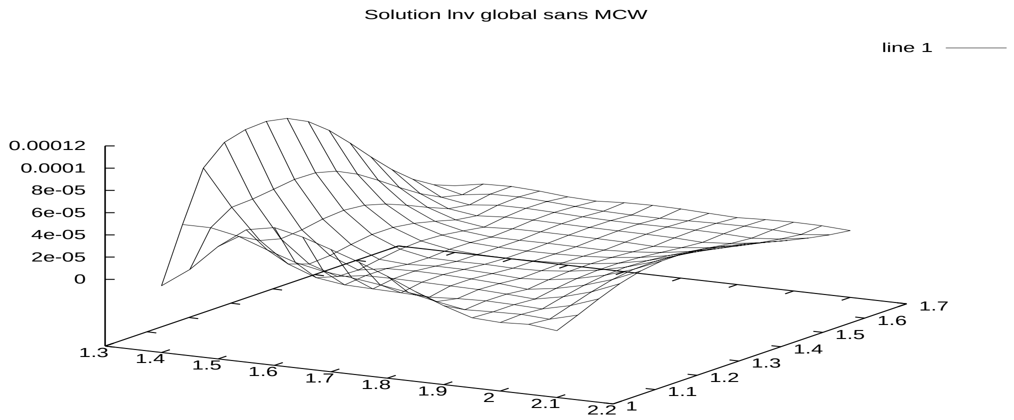

Cl⁻
H
C
F
H
H
H
Cl
C
F
H
H
H
Cl
C
H
H
F⁻

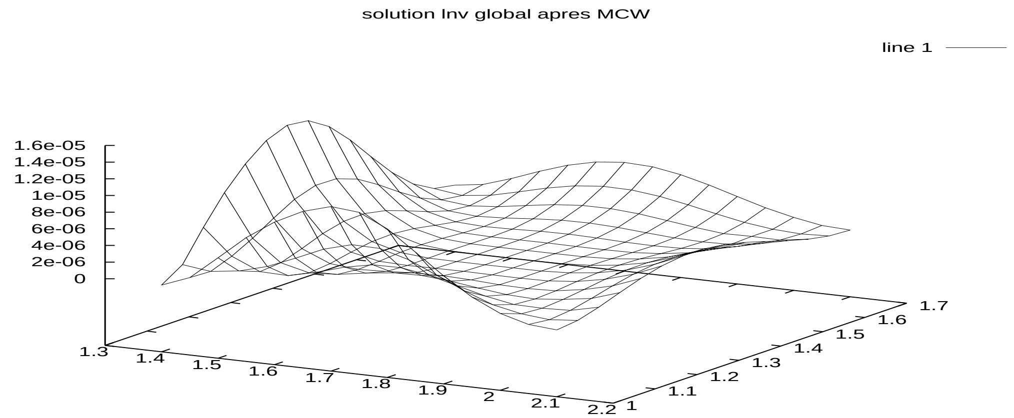
Surface de potentiel réelle et décroissance valeurs propres



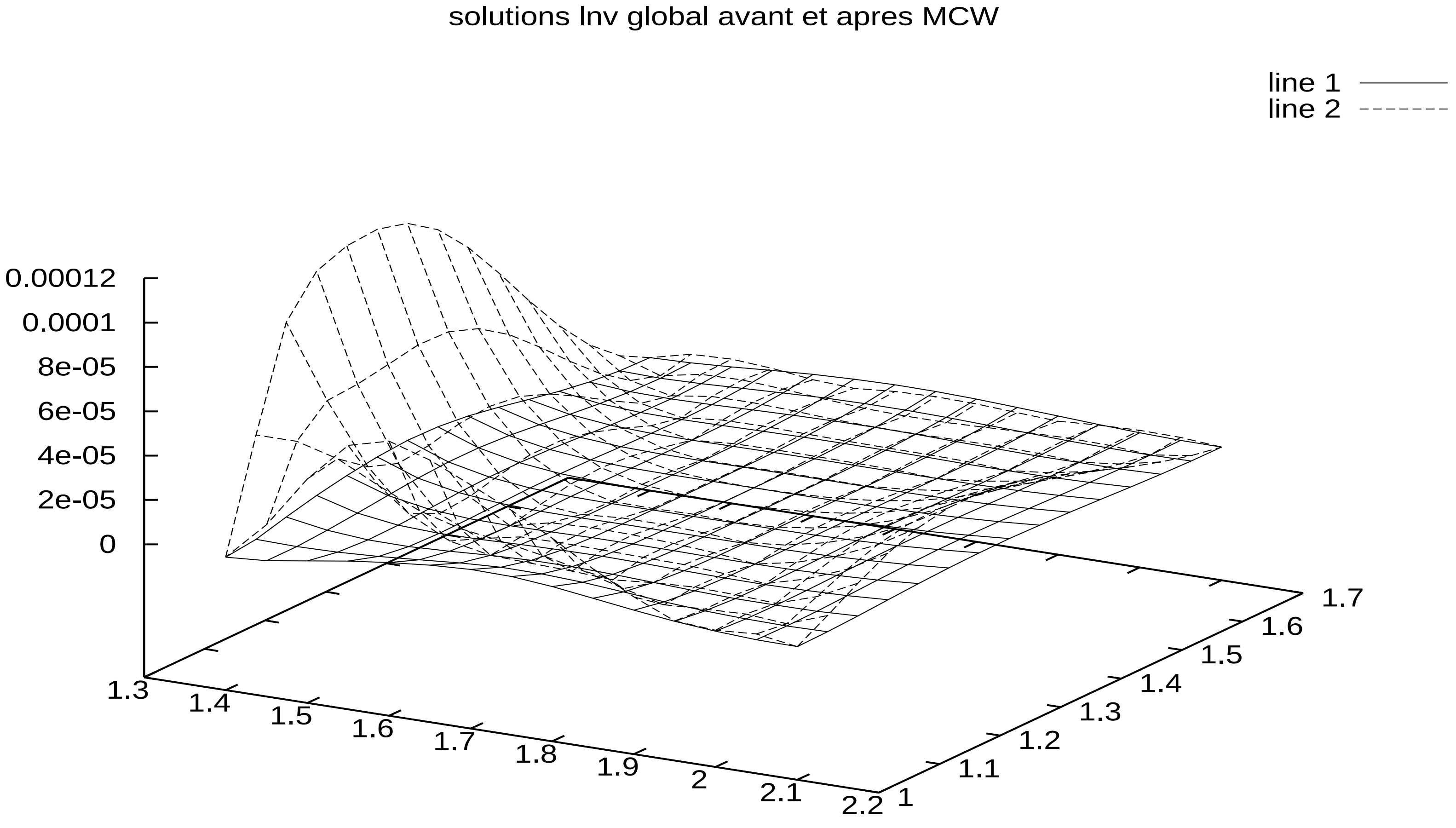


Erreurs relatives sur l'énergie





Erreurs relatives sur l'énergie



Considérations numériques

$\rightarrow$ Coût moyen de l'optimisation

1 itération de Newton requiert :

$*$ L'évaluation de la hessienne,

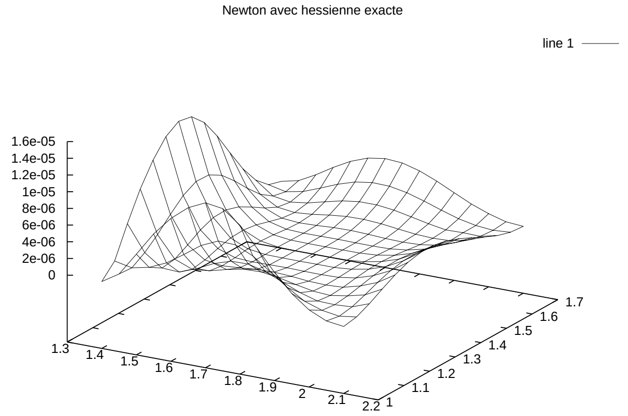
$*$ Un certain nombre d'itérations de recherche linéaire soit d'évaluations de gradient.

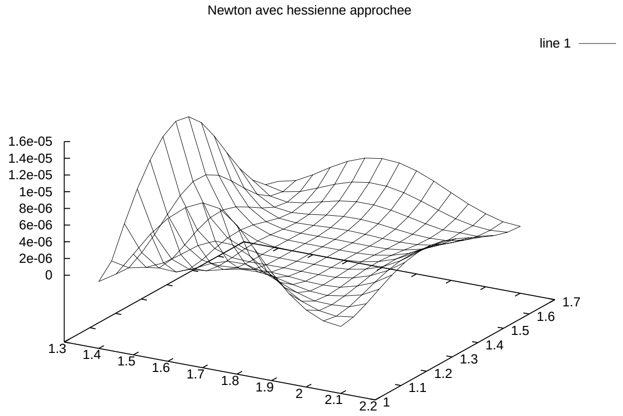
L'algorithme global est bien supérieur aux deux autres algorithmes concernant le nombre d'itérations de Newton et de recherche linéaire.

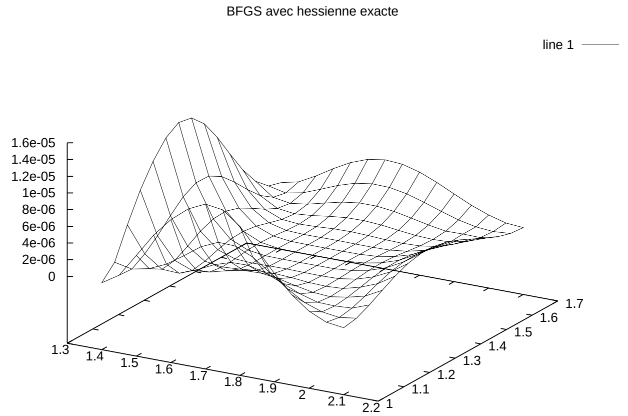
$\rightarrow$ Améliorations

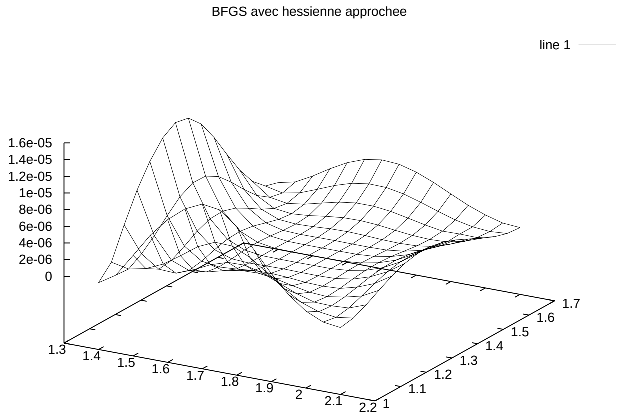
- Newton avec Hessienne simplifiée,
- BFGS avec Hessienne simplifiée.

Résultats

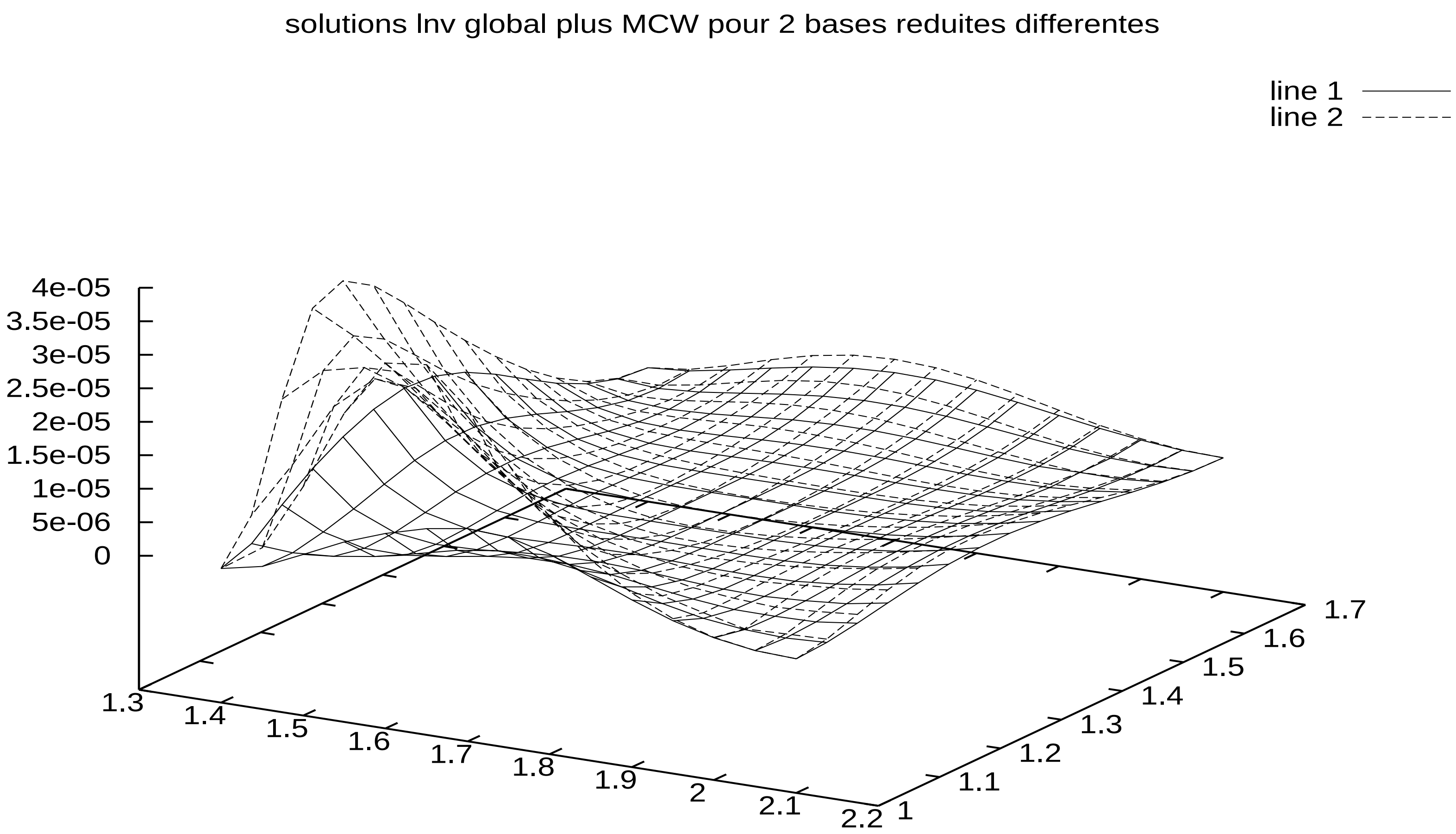

Newton avec hessienne exacte
line 1
1.6e-05
1.4e-05
1.2e-05
1e-05
8e-06
6e-06
4e-06
2e-06
0
1.3 1.4 1.5 1.6 1.7 1.8 1.9 2 2.1 2.2
1 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5 1.6 1.7


Newton avec hessienne approchee
line 1
1.6e-05
1.4e-05
1.2e-05
1e-05
8e-06
6e-06
4e-06
2e-06
0
1.3 1.4 1.5 1.6 1.7 1.8 1.9 2 2.1 2.2
1 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5 1.6 1.7


BFGS avec hessienne exacte
line 1
1.6e-05
1.4e-05
1.2e-05
1e-05
8e-06
6e-06
4e-06
2e-06
0
1.3 1.4 1.5 1.6 1.7 1.8 1.9 2 2.1 2.2
1 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5 1.6 1.7


BFGS avec hessienne approchee
line 1
1.6e-05
1.4e-05
1.2e-05
1e-05
8e-06
6e-06
4e-06
2e-06
0
1.3 1.4 1.5 1.6 1.7 1.8 1.9 2 2.1 2.2
1 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5 1.6 1.7

Test avec une base réduite de taille plus petite



Conclusions et Difficultés

→ Conclusions

- Pénalisation pose des difficultés numériques,
- Pertinence d'itérations de Mac Weeny sur la solution base réduite,
- Algorithme global très performant.

→ Difficultés restantes

- Démarche globale non valable pour les métaux,
- Non connaissance du niveau de Fermi a priori,
- Minimum local : initial guess important,
- Itérations de Mac Weeny peuvent diverger.

Futur

- Molécule plus complexe, système périodique,
- Estimateurs a posteriori, barre d'erreur,
- Modèles semi-empiriques,
- Bases Réduites pour la DFT,
- Bases Réduites sur la fonction d'onde,
- Bases Réduites pour les pseudo-potentiels,
- Stratégie basée sur le calcul des forces,
- Réflexion sur la contrainte relachée $DSD \leq D$.

Synthèse

→ Utilité

- Dynamique moléculaire,
- Optimisation de géométrie,
- Obtention d'un initial guess (ou d'une ébauche en terme météorologique).

→ Difficulté

- Estimateurs a priori et a posteriori,

$\longmapsto$ démarche pragmatique.

→ Concepts liés aux bases réduites

- EOF, POD.
- Interpolation optimale, filtre SEEK.

Décomposition en composantes principales : EOF

Soit $(X_1, \ldots, X_p)$ une série (temporelle) d'états de dimension n. On note $\bar{X}$ le centre de gravité de ce nuage de points. Le problème suivant

$$\min \mathcal{I}_D(X_1, \ldots, X_p) = \sum_{i=1}^{p} \|X_i - P_D(X_i)\|^2 \text{ avec } D \text{ une droite du plan}$$

est équivalent à chercher les valeurs propres de la matrice YY^t où Y désigne la matrice dont les colonnes sont les points $X_i - \bar{X}$.

$\longmapsto$ Les vecteurs propres L_i sont appelés EOF du système.

On cherche alors, pour le nouveau problème, X de la forme

$$X = \bar{X} + \sum_{i=1}^{r} c_i L_i \quad \text{avec } r \ll p.$$

Généralisation : Décomposition orthogonale (POD)

→ Système

On considère le système dynamique suivant

$$\frac{du}{dt} = F(t, u, \mu),\ u(0) = u_0,\ u(t) \in H \quad \forall\, t \in [0, T],$$

où μ désigne un paramètre (géométrique, numérique) du système.

→ Procédure

- $\bar{u} = \dfrac{1}{p} \displaystyle\sum_{i=1}^{p} u_i$, avec $u_i = u(t_i)$,
- $\forall\, i = 1, p \quad \tilde{u}_i = u_i - \bar{u}$,
- $K_{i,j} = \dfrac{1}{p}(\tilde{u}_i, \tilde{u}_j)$,
- Diagonalisation de K : $(\lambda_k)_k$ et $(v_k)_k$ ordonnés,

POD (2)

- $\forall\ k = 1, n \quad \phi_k = \dfrac{\sum_{i=1}^{n} v_k^i \tilde{u}_i}{\| \sum_{i=1}^{n} v_k^i \tilde{u}_i \|}$,
- On cherche u de la forme

$$u(t) = \bar{u} + \sum_{i=1}^{r} a_i(t)\phi_i \quad \text{avec } r \ll p.$$

→ Améliorations

- On pondére chaque état ("snapshot") u_i par l_i,
- On inclue des états déjà connus pour la définition des $(\phi_i)_i$.

→ Remarques

- EOF et POD sont équivalentes : le choix dépend des valeurs de n et p.