

# Accélération d'Anderson-Pulay: convergence d'algorithmes adaptatifs et application à la chimie quantique

jeudi 3 décembre 2020 15:30 (30 minutes)

Lors de cet exposé, une classe générale d'algorithmes pour la résolution de problèmes de point fixe, baptisée *accélération d'Anderson-Pulay*, est introduite. Cette famille réunit la technique DIIS et sa variante parfois appelée commutateur-DIIS, toutes deux introduites par Pulay [1] dans les années 1980 pour accélérer la convergence de procédures à champ auto-cohérent en chimie quantique, ainsi que l'accélération d'Anderson, qui remonte aux années 1960 [2], et les nombreuses variantes qu'elles ont inspirées. De telles méthodes visent à accélérer la convergence de problèmes de point fixe en combinant à chaque étape plusieurs approximations précédemment obtenues afin de générer la suivante. Ce procédé d'extrapolation est caractérisé par sa profondeur, c'est-à-dire le nombre d'approximations précédentes stockées. Alors que ce paramètre est déterminant dans l'efficacité de la méthode, en pratique, la profondeur est fixée sans garantie de convergence de l'algorithme. Dans cet exposé, nous considérons deux mécanismes permettant de faire varier la profondeur au cours des itérations. Une première façon consiste à laisser la profondeur croître jusqu'au rejet de toutes les approximations stockées (à l'exception de la dernière) et de redémarrer la méthode. Une autre manière de procéder est d'adapter à chaque étape la profondeur en éliminant certaines des plus anciennes, a priori moins pertinentes, approximations.

Dans un cadre abstrait et général et sous des hypothèses naturelles, la convergence locale et l'accélération de ces deux types de méthodes d'accélération d'Anderson-Pulay adaptatives peuvent être prouvées [3]. Le comportement de ces algorithmes est testé pour la résolution numérique de la méthode de Hartree-Fock et du modèle de Kohn-Sham de la théorie de la fonctionnelle de densité. Ces expériences numériques montrent que les variantes avec redémarrage et profondeur adaptative présentent une convergence plus rapide et sont globalement moins coûteuses que la méthode à profondeur fixe, standard dans les codes de chimie quantique.

[1] P. Pulay. Improved SCF convergence acceleration. *J. Comput. Chem.*, 3(4) :556–560,1982.

[2] D. G. Anderson. Iterative procedures for nonlinear integral equations.*J. ACM*,12(4) :547–560, 1965.

[3] M. Chupin, M.-S. Dupuy, G. Legendre, and E. Séré. Convergence analysis of adaptive DIIS algorithms with application to electronic ground state calculations. arxiv :2002.12850 [math.NA], 2020.

**Auteur principal:** DUPUY, Mi-Song (TU Munich)

**Co-auteurs:** SÉRÉ, Eric (Université Paris-Dauphine); LEGENDRE, Guillaume (Université Paris-Dauphine); CHUPIN, Maxime (CNRS, CEREMADE, Université Paris-Dauphine)

**Orateur:** DUPUY, Mi-Song (TU Munich)

**Classification de Session:** Session parallèle 5