

Approximation de rang faible haute performance et application aux tenseurs en chimie quantique

M. BEAUPÈRE, L. GRIGORI
Inria Paris,

Email : matthias.beupere@inria.fr

Mots Clés : Approximation de rang faible, Algèbre linéaire numérique, Décomposition de tenseurs, Calcul haute performance, Chimie quantique

Biographie – Une fois diplômé de l’Ensimag à Grenoble, j’ai participé au développement d’une start-up à Nancy avant d’effectuer un master spécialisé dans le calcul haute performance à Versailles. Depuis le printemps 2019 je suis en stage puis en thèse à Inria Paris sous la direction de Laura Grigori. Je participe au projet ERC¹ de Laura Grigori, Y. Maday, É. Cancès et J.P. Piquemal visant à améliorer les performances des algorithmes de simulation de molécule dans le cadre de la chimie quantique.

Resumé :

Pour simuler un système moléculaire et obtenir des propriétés intéressantes de ce système comme sont énergie à l’état stable, on cherche à résoudre l’équation de Schrödinger électronique $H\Psi = E\Psi$. Le hamiltonien H doit être diagonalisé pour obtenir les états propres du système, permettant ainsi de connaître l’énergie du système à l’état le plus stable. Lorsqu’on discrétise cet opérateur à l’aide d’une méthode variationnelle, on obtient un tenseur de très grande dimension. La plus petite valeur propre du tenseur est ensuite calculée grâce à un algorithme appelé Density Matrix Renormalisation Group (DMRG) [5]. Cette technique implique un grand nombre d’opérations de compression sur le tenseur.

Pour former, stocker et manipuler ce tenseur dans un environnement numérique où la mémoire et la capacité des processeurs est finie, on a recours à un format appelé train de tenseurs [4]. On exprime ainsi le tenseur comme un produit de tenseurs d’ordres trois et quatre, permettant de maîtriser la complexité des données.

Le calcul d’une telle décomposition ainsi que sa manipulation au cours de l’algorithme DMRG nécessite la compression de très grandes matrices. Nous présentons des algorithmes permettant de compresser de telles matrices en utilisant une machine hautement parallèle. La décomposition QR tronquée avec pivotage par colonne [2] permet de calculer une approximation de rang faible d’une matrice A sous la $A = Q_k R_k$ où Q_k est une matrice très fine formée à partir des colonnes de A , et R_k est une matrice très plate. Les algorithmes CARRQR [3] et QRTP [1] permettent de sélectionner les colonnes à placer dans Q_k pour des matrices très grandes, trop grandes pour être contenues en mémoire sur un unique nœud de calcul, comme c’est le cas pour le tenseur du hamiltonien discrétisé. On procède donc à cette décomposition par blocs. CARRQR permet de partitionner la matrice en blocs de colonnes, alors que QRTP permet un partitionnement en deux dimensions. Nous présenterons des résultats de précision de ces algorithmes, ainsi que leurs performances d’exécution sur un ensemble de 1024 processeurs.

1. <https://erc-emc2.eu/>

Références

- [1] Matthias Beaupère and Laura Grigori. Communication avoiding low rank approximation based on QR with tournament pivoting. preprint, January 2021.
- [2] Peter Businger and Gene H. Golub. Linear least squares solutions by householder transformations. *Numerische Mathematik*, 7(3) :269–276, June 1965.
- [3] James W Demmel, Laura Grigori, Ming Gu, and Hua Xiang. Communication avoiding rank revealing QR factorization with column pivoting. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 36(1) :55–89, 2015.
- [4] Ivan V. Oseledets. Tensor-Train Decomposition. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 33(5) :2295–2317, January 2011.
- [5] Steven R. White. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Physical Review Letters*, 69(19) :2863–2866, November 1992.