Shape derivative in 1D

A dive note

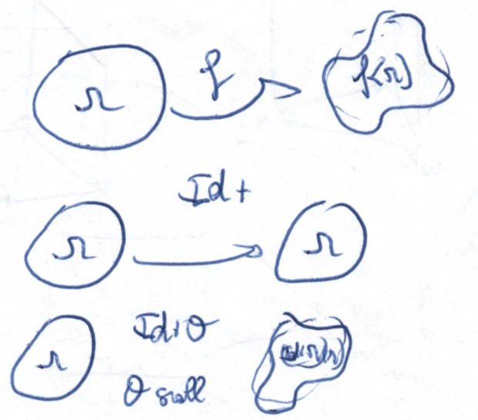
2.1

$$\Omega = [a,b] \qquad F(\Omega) := \int_a^b f(x)\,dx$$

$f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$

pt of view shape — pt of view map

Modify Ω $\Leftrightarrow$ Modify identity



$$\boxed{\begin{aligned} \hat F(0) &= F(Id(\Omega)) = F(\Omega) \\ \hat F(\theta) &:= F(Id+\theta(\Omega)) \end{aligned}}$$

$$\boxed{\begin{aligned} DF : \{\theta\} &\to \mathbb{R} \\ \theta &\mapsto f(b)\theta(b) - f(a)\theta(a) \end{aligned}}$$

$$\| $$

$$\boxed{\int_{\partial\Omega} f(x)\, \underbrace{\theta(x)\cdot n(x)}_{\theta_n(x)}}$$

$f(x)$ Shape derivative

Shape derivative $\to$ ~~diff~~ de $\hat F$ en $\theta = 0$

$$\hat F(\theta) = F(Id+\theta(\Omega)) = \int_{(Id+\theta)(a)}^{(Id+\theta)(b)} f(x)\,dx$$

$dx = (1+\theta'(y))\,dy$

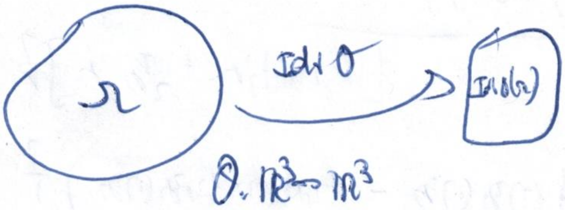
$$x = (Id+\theta)(y) = y + \theta(y) \qquad \theta \text{ petit} \qquad y = (Id+\theta)^{-1}(x)$$

$$\hat F(\theta) = \int_a^b \underbrace{f(y+\theta(y))}_{f(y) + f'(y)\theta(y) + R(\theta)} (1+\theta'(y))\,dy$$

$$= \int_a^b \Big[f(y) + f'(y)\theta(y) + R(\theta)\Big]\Big[1+\theta'(y)\Big]\,dy$$

$$= \int_a^b f(y)\,dy + \int_a^b \Big[f'(y)\theta(y) + f(y)\theta'(y)\Big] + R(\theta) = F(\Omega) + \underbrace{f(b)\theta(b) - f(a)\theta(a)}_{\text{shape derivative of } F \text{ in } \theta} + R(\theta)$$

Shape derivative in multi-D: the same!



$$F(\Omega) = \int_\Omega f(x)\,dx$$

$\theta : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}^3$ small (wrt [illegible])

$f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$

$$\hat F(\theta) = F((Id+\theta)(\Omega))$$

$$= \hat F(0) + D_0 \hat F(\theta) + R(\theta)$$

$$D_0 \hat F : \{\theta\} \longrightarrow \mathbb{R}$$

$$\boxed{\theta \longmapsto \int_{\partial\Omega} f \underbrace{\langle \theta, n_{\partial\Omega}(x)\rangle}_{\theta_n(x)}}$$

On a 1 gradient : on peut faire de l'optimisat°

quel est le meilleur θ pour augmenter $\boxed{F(\Omega)} \leq F((Id+\theta)(\Omega))$

θ petit

$$\hat F(0) \leq \hat F(\theta)$$

$$\int_{\partial\Omega} f\, \theta_n(x) \underset{CS}{\leq} \sqrt{\int_{\partial\Omega} f^2}\sqrt{\int_{\partial\Omega} \theta_n(x)}$$

avec égalité si θ_n ∝ à f si $\boxed{\theta_n = t f}$

(choix t assez petit)

$$\hat F(\theta) = \hat F(0) + t\int_{\partial\Omega} f^2 + R(\theta) \geq \hat F(0)$$

si t assez petit

Pt de vue level set : on écrit ai forma $\partial_n(x) = f(x)$ 3.1

on oublie tout

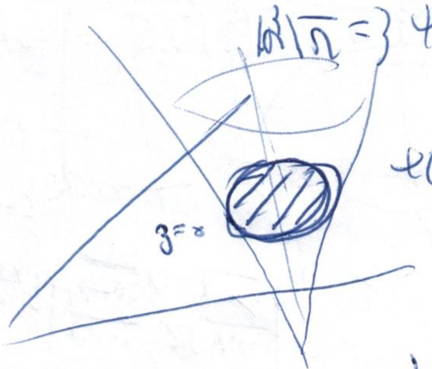
Now $\partial\Omega$ définie implicite comme le place ... de ...

fonct° level set $\partial\Omega = \{ \psi = 0 \}$

$\Omega = \{ \psi < 0 \}$

$\mathbb{R}^d \setminus \overline{\Omega} = \{ \psi > 0 \}$

Exe



cercle centre (x_0, y_0) et rayon R $\boxed{\psi(x,y) = \sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2} - R}$

$\psi = 0$ sur le bord

$\psi < 0$ à int

$\psi > 0$ à ext

fonct° distance signée $\boxed{|\nabla \psi| = 1}$

idée : ψ ... à dl

$\boxed{\psi(x,y) \sim \pm d(\underset{y}{x}, \partial\Omega)}$

signe fn ... int/ext

c'est la bonne fonct°

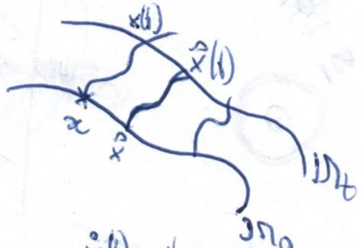
Comment évoluer : On va suivre que ces surfaces soit le level-set

$$\partial\Omega_t = \{\psi_t(x) = 0\}$$

$$\Omega_t = \{\psi_t < 0\}$$

On se donne une courbe $\boxed{x(t)}$, $x(0) = x$

$$\psi_t(x(t)) = 0 \qquad \forall t \in \mathbb{R}$$



On dérive $\boxed{\partial_t \psi_t + \nabla\psi_t \cdot \dot{x}(t) = 0}$

$\dot{x}(t)$ = vitesse
i.e.
$x(t) \approx x(0) + t\,\dot{x}(0)$
c'est cette vitesse de la ... à l'ordre

donc on peut $\dot{x}(t) = \dot{x}(0) = \theta_n(t)\, n_{\partial\Omega}(t)$

$$\partial_t\psi_t + \nabla\psi_t \cdot \theta_n(t)\, \underbrace{n_{\partial\Omega}(t)}_{\frac{\nabla\psi_t}{|\nabla\psi_t|}}$$

$$\left\{\begin{array}{l} \partial_t\psi_t + \theta_n(t)\,|\nabla\psi_t| = 0 \\ \psi_0(x) = \end{array}\right.$$

équation level set à résoudre (choix de méthodes caractéristiques)

- Autres pbs : extension
  - à partir $\theta_n(t)$ défini sur le bord
  - l'extension naturelle n'a pas forcément les qualités (régularité, ...)

- NB : Imp. ψ distance, $|\nabla\psi_t| = 1$

Il vient $\partial_t\psi_t + \theta_n(t) = 0$ $\qquad \boxed{\psi_t(x) = \psi_0(x) + t\,\theta_n(x)}$

... exacte explicite

N : nbre total d'e-

ν : nbre d'e- recherché

$$\max_{\Omega \subseteq \mathbb{R}^3} p_\nu^N(\Omega)$$

Ω : $\boxed{\Omega}$ domaine de $\mathbb{R}^3$

$$p_\nu^\nu(\Omega) = \binom{N}{\nu} \int_{\underbrace{\Omega \times \dots \times \Omega}_{\nu \text{ fois}}} dx_1 \dots dx_\nu \int_{\underbrace{(\mathbb{R}^3 \setminus \Omega) \times \dots \times (\mathbb{R}^3 \setminus \Omega)}_{N-\nu \text{ fois}}} dx_{\nu+1} \dots dx_N \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} \left| \Psi(\overset{\sigma_1}{x_1}, \dots, \overset{\sigma_N}{x_N}) \right|^2$$

* $\boxed{\text{Single ~~électron~~ case}}$: $$\Psi(\overset{\sigma_1}{x_1}, \dots, \overset{\sigma_N}{x_N}) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \left[\begin{pmatrix} \Phi_1(\overset{\sigma_1}{x_1}) \\ \vdots \\ \Phi_N(\overset{\sigma_1}{x_1}) \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} \Phi_1(\overset{\sigma_N}{x_N}) \\ \vdots \\ \Phi_N(\overset{\sigma_N}{x_N}) \end{pmatrix} \right]$$

Φ_i $i = 1 \dots N$ orbital <u>base orthonormée sur $\mathbb{R}^3$</u>

$$S_{ij}(\mathbb{R}^3) = \sum_\sigma \int_{\mathbb{R}^3} \Phi_i \Phi_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases}$$

$$\boxed{S_{ij}(\Omega) = \sum_\sigma \int_\Omega \Phi_i(\overset{\sigma}{x}) \Phi_j(\overset{\sigma}{x}) \, dx}$$

S overlap matrice <u>$N \times N$</u>

<u>Prop</u>: <u>On a</u> : $p_\nu(\Omega) = \sum_{\substack{I_\nu \subseteq [1,N] \\ \mathrm{card}\, I_\nu = \nu}} \det(S_{I_\nu})$ où S_{I_ν} est une $N \times N$ matrice

et $(S_{I_\nu})_{ij} = \begin{cases} S_{ij}(\Omega) & \text{si } i \in I_\nu \\ S_{ij}(\mathbb{R}^3 \setminus \Omega) & \text{si } i \notin I_\nu \end{cases}$

<u>Corollaire</u>: $$\boxed{\sum_{\nu=0}^{N} p_\nu(\Omega) t^\nu = \det\Big(t S(\Omega) + \underbrace{S(\mathbb{R}^3 \setminus \Omega)}_{I - S(\Omega)}\Big) \quad \forall t \in \mathbb{R}}$$

<u>Avantage de cette formule</u> : • S symétrique donc diagonalisable

• peut de calculer rapidement les $p_\nu(\Omega)$ mais aussi les dérivées

→ • retrouver les formules de l'article pour la dérivée de forme !

* Multi-determinant case: $\Psi\begin{pmatrix}\sigma_1 & & \sigma_N\\ x_1, & \dots, & x_N\end{pmatrix} = \sum_{n=1}^{R} \frac{c_n}{\sqrt{N!}} \det \begin{bmatrix} \phi_1^n\binom{x_1}{\sigma_1} & \dots & \phi_1^n\binom{x_N}{\sigma_N} \\ \vdots & & \vdots \\ \phi_N^n\binom{x_1}{\sigma_1} & & \phi_N^n\binom{x_N}{\sigma_N}\end{bmatrix}$

N^2 overlap matrices $\boxed{S_{ij}^{ns}(\Omega) = \sum_\sigma \int_\Omega \phi_i^n\binom{x}{\sigma} \phi_j^s\binom{x}{\sigma}\, dx}$

S^{ns} no more symmetric and $S^{ns}(\mathbb{R}^3)$ is whatever ~~identity~~ identity

Prop: Then $p_\nu(\Omega) = \sum_{n,s=1}^{R} c_n c_s\, p_\nu^{ns}(\Omega)$

$n,s = 1..R$ $\quad p_\nu^{ns}(\Omega) = \sum_{\substack{I_\nu \subseteq [1,N] \\ \mathrm{card}\, I_\nu = \nu}} \det\left(S_{I_\nu}^{ns}\right)$ with $\left(S_{I_\nu}^{ns}\right)_{ij} = \begin{cases} S_{ij}^{ns}(\Omega) & \text{si } i \in I_\nu \\ S_{ij}^{ns}(\mathbb{R}^3\setminus\Omega) & \text{si } i \notin I_\nu\end{cases}$

Corollary: $\forall n,s = 1..R$

$$\boxed{\det\left(t\, S^{ns}(\Omega) + S^{ns}(\mathbb{R}^3\setminus\Omega)\right) = \sum_{\nu=0}^{N} p_\nu^{ns}(\Omega)\, t^\nu} \quad \forall t \in \mathbb{R}$$

- S^{ns} no more symmetric $\to$ not diagonalizable a priori
- $S^{ns}(\Omega)$ and $S^{ns}(\mathbb{R}^3\setminus\Omega) = S^{ns}(\mathbb{R}^3) - S^{ns}(\Omega)$ do not commute anymore
  $\to$ even if S^{ns} diagonalizable, cannot diagonalize in the same basis the 2 matrices
- Hence $\to$ interpolation polynomial in t cost $\boxed{N \times R^2}$ number of orbitals ~~...~~ (number of determinants in the wave fn)^2

~~still~~ a lot

- But can also have the shape derivative by extrapolation same cost NR^2

$$\mathrm{tr}\left[{}^t\mathrm{Com}\left(S^{ns}(\mathbb{R}^3) + (t-1) S^{ns}(\Omega)\right)(t-1)\frac{\partial S^{ns}}{\partial\Omega}\right] = \sum_{\nu=0}^{N} \frac{\partial p_\nu^{ns}(\Omega)}{\partial\Omega}\, t^\nu$$

lin. appl. / first deriv.

Algo : 2 aspects : ~~Pb~~ · $\int_\Omega \Phi_i \Phi_j$ — bien étudier le bord

le ψ & le algo si on a le bord

· calculer le gradient

· évolution

· recalcul

LEVEL CONTOURING

+++

4.1

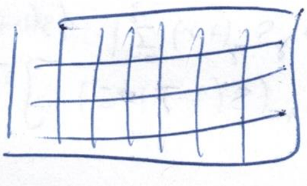
Algo :

- On part d'1 contour initial ou arbitr. fixée
- On calcule les intégrales
- On calcule le gradient de forme (extension à calculer)
- On fait évoluer la surface
- On renormalise la fonction distance

→ difficulté 3D gérer le maillage

ne pas gérer le maillage

2D algo simplifié : grille cartésienne ψ connu aux points du maillage



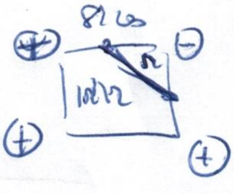
$$\int_\Omega \Phi_i \Phi_j = \int_{\mathbb{R}^3} \Phi_i \Phi_j 1_\Omega \approx \int_{Boîte} \Phi_i \Phi_j 1_\Omega$$

x

implantation en 2D

→ maillage [illegible]

à partir de ψ



gradient de forme (pas d'extension ici)

on fait évoluer le $\psi_{new} = \psi_{old} + t$ gradient (où probablement de faire 1 gradient à pas optimal)

Écrit contour de la surface [illegible] pt par maillage | renormalisation → recherche du pt le + proche avec ses 2 voisins minimisation de la distance en parallèle

4.2

Avantage : pret de ce pb pr le calcul ; difficile ecrire en 3D ; resultat 2D

Pblo : de fond : gradient petit
- ne peut sortir de la zone
- n'arrive pas

solu' : champ fictif
- centre e^{-b}
- etc. capable de obtenir 1 bonne énergie d'équilibre, on sait dire quelque chose

(dt = 1 , idée) <u>dilute on a 4.1</u>

(dt = 5, crack centre 0.5)

He :

$$\rho_1(\Omega) = 2\int_\Omega \varphi^2 \int_{\mathbb{R}^3\setminus\Omega} \varphi^2 = 2I(1-I)$$

NB : adapté en 2D

$\rho \downarrow$

(x_0, y_0) position de l'état

$\zeta > 0$ paramètre

$$I = \int_\Omega \varphi^2$$

$$\varphi(x,y) = \sqrt{\frac{2\zeta^2}{\pi}}\, e^{-\zeta\sqrt{(x-x_0)^2+(y-y_0)^2}}$$

$$\frac{\partial}{\partial\Omega} = \int_{\partial\Omega} 2(1-2I)\, \varphi^2(x)\, dx$$

étude théorique : $x \mapsto 2x(1-x)$ | maximum pr $x = \frac{1}{2}$; global local ; pt critique

Ge : tout fn vérifiant $\int_\Omega \varphi^2 = \frac{1}{2}$ pt maximum global | déphasé : $\forall \Omega$, $\exists$ 1 ... $\rho \downarrow$ ... maximum

De plus au niveau de la dérivée, où on grandit petit on a retrait petit pr la fin pt de CV, état initial

---

Be : donc $dt = 100$

$$\varphi = \varphi_1(1)\varphi_2(2) - \varphi_2(1)\varphi_1(2)$$

1s $\sqrt{\frac{\zeta_1^2}{\pi}}\, e^{-\zeta_1\sqrt{(x-x_0)^2+(y-y_0)^2}}$

2s $\sqrt{\frac{9\zeta_2^2}{64\pi}}\left(\frac{4}{3} - \zeta_2 \sqrt{\quad}\right) e^{-\zeta_2 \sqrt{\quad}/2}$

Be 1/4

Ph