

Responsable :  
Martine Logé  
☎ 01 69 08 51 67

# SEMINAIRE



**Service de Recherches de Métallurgie Physique**

DEN/DANS/DMN

Bibliothèque du SRMP – Bâtiment 520 - Pièce 109

## *Ondelettes et adaptativité dans les calculs de structure électronique*

*Luigi GENOVESE*

*Institut de Nanosciences et Cryogénie,  
SP2M/L Sim, CEA-Grenoble*

Parmi les différentes familles de fonctions ondelettes, les ondelettes de Daubechies présentent des caractéristiques très particulières qui les rendent adaptées pour leur utilisation dans des calculs de structure électronique. Le projet européen BigDFT a développé un code ab initio sur la base de ces fonctions. À présent, il existe une version stable et robuste de ce code, qui fournit une approche systématique avec un très bon taux de convergence, et d'excellentes performances pour le calcul parallèle.

Une autre famille d'ondelettes, les fonctions d'échelles interpolantes issues de l'autocorrélation des fonctions de Daubechies, a des caractéristiques optimales pour la résolution de problèmes d'électrostatique. Sur la base de ces fonctions, deux solveurs ont été développés pour la résolution de l'équation de Poisson en conditions isolées aux bords ou de type surface.

Ces solveurs offrent une approche directe basée sur l'équation de Green associée, qui est une méthode à la fois précise et explicite, évitant le recours à des traitements supplémentaires tels que l'utilisation de termes de compensation, permettant ainsi un traitement immédiat des systèmes chargés.

Ces trois codes sont librement disponibles sous license GNU-GPL. En particulier, les solveurs de Poisson ont déjà été intégrés dans d'autres codes DFT existants (ABINIT, OCTOPUS, CP2K) livrés sous la même license.

Durant ce séminaire nous présenterons les caractéristiques principales de ces codes en ondelettes, et plus particulièrement les solveurs de Poisson, afin de montrer les possibilités et la puissance de ce formalisme.

**Jeudi 12 Juin 2008 à 10h30**

**N.B :**                    *Les visiteurs de nationalité étrangère hors Union Européenne sont priés de bien vouloir avertir impérativement 3 semaines à l'avance - les visiteurs de l'Union Européenne 1 ou 2 jours avant le séminaire*  
- *le Secrétariat du Service de leur entrée sur le Centre :*  
*Tel : 01 69 08 66 64 - Fax : 01 69 08 68 67*