

# Construction de matrices de rigidité approchées pour des opérateurs non linéaires par méthode de collocation.

Claire CHAUVIN, LCMI-CNRS Grenoble

Valérie PERRIER, LMC-IMAG Grenoble

**Mots-clés :** Théorie de la Fonctionnelle de la Densité, Opérateur non linéaire, Analyses MultiRésolution orthogonale et biorthogonale, Méthode de collocation, Energie potentielle.

Dans le calcul de structure électronique, l'objectif est de déterminer l'état fondamental d'un système d'atomes (composé de noyaux fixes, et d'électrons), en utilisant une méthode répandue en chimie quantique et en physique: la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité [1].

Dans cette approximation, l'opérateur hamiltonien, décrivant toutes les interactions agissant sur les électrons, contient des termes (potentiels) dépendant uniquement de la densité électronique. Tandis que l'on connaît formellement un potentiel, qui est une fonction de Green de la densité (obtenu en résolvant l'équation de Poisson [2]), le deuxième terme fortement non linéaire n'est pas connu analytiquement: on utilise une méthode empirique dans laquelle pour une densité constante, on peut calculer le potentiel associé. L'algorithme de résolution du problème général est un algorithme de point fixe sur la densité. À chaque itération:

1. La densité est fixée. On construit l'hamiltonien associé, puis l'on détermine ses plus petites valeurs propres algébriques, et les vecteurs propres associés.
2. Ces vecteurs propres, appelés orbitales, permettent de construire une nouvelle densité.

On utilise un algorithme de diagonalisation de type Lanczos pour l'étape 1, et il est préférable en terme de complexité d'exprimer les orbitales (vecteurs propres) dans une base orthogonale. Nous utilisons alors des fonctions d'échelle de Daubechies, ou des Coiflets.

Le potentiel non linéaire se détermine par ses valeurs aux points: nous allons donc l'exprimer dans une base de collocation, i.e. des fonctions interpolantes de Deslauriers et Dubuc.

Dans une méthode de Galerkin, en choisissant comme espaces de discrétisation des espaces issus de l'analyse multirésolution, on aboutit au calcul de coefficients de connection pour appliquer la matrice de rigidité à une fonction [3]. Le problème est que cette application est coûteuse lorsque l'on se place en trois dimensions (par produit tensoriel isotrope de fonctions de base 1D).

Nous présentons dans cette communication une alternative à cette construction, pour laquelle nous obtenons des résultats d'approximation et de complexité de calcul compétitifs. Cette méthode consiste à définir des matrices de rigidités approchées, en utilisant les propriétés de biorthogonalité et d'interpolation des fonctions de base interpolantes. Des tests seront présentés et discutés pour des opérateurs hamiltoniens particuliers.

## Références

- [1] P. HOHENBERG AND W. KOHN, *Inhomogeneous Electron Gas*, Phys. Rev. A, **136**(3), 864–871, 1964.  
W. KOHN AND L.J. SHAM, *Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects*, Phys. Rev. A, **140**(4), 1133–1138, 1965.
- [2] S. GOEDECKER AND C. CHAUVIN, *Combining multigrid and wavelet ideas to construct more efficient multiscale algorithms*, J. Theor. Comput. Chem., **2**(4), 483–495, 2003.
- [3] W. DAHMEN AND C. MICHELLI, *Using the refinement equation for evaluating integrals of wavelets*, SIAM J. Num. Anal., **30**(2), 507–537, 1993.

Claire CHAUVIN – [claire.chauvin@grenoble.cnrs.fr](mailto:claire.chauvin@grenoble.cnrs.fr)  
LCMI-CNRS, 25 rue des Martyrs, 38042 Grenoble cedex 9  
Valérie PERRIER – [valerie.perrier@imag.fr](mailto:valerie.perrier@imag.fr)  
LMC-IMAG, Tour IRMA, BP 38041 Grenoble Cedex 9