

# Contrôle d'erreur en théorie de la fonctionnelle de densité

*mardi 17 octobre 2023 10:00 (1 heure)*

Cette présentation porte sur des travaux récents autour du contrôle d'erreur en théorie de la fonctionnelle de densité (DFT), et plus particulièrement sur le calcul de propriétés des matériaux. En effet, la DFT est aujourd'hui l'un des modèles les plus utilisés en sciences des matériaux et calculs de structure électronique grâce au bon compromis coût / précision qu'elle offre. Nous présenterons donc dans un premier temps les modèles en question avant de présenter une estimation de l'erreur pour des quantités d'intérêt comme les forces interatomiques : bien qu'ils ne soient pas garantis, ils ont l'avantage d'être suffisamment précis pour des modèles non linéaires complexes et d'intérêt pratique. Dans un second temps, nous nous intéresserons au calcul de réponses linéaires, étape de pré-processing nécessaire pour obtenir des informations sur les propriétés de matériaux, et comment améliorer la robustesse des solveurs numériques sous-jacents.

**Orateur:** KEMLIN, Gaspard (CERMICS, ENPC et Inria Paris)