

Méthode de supercellules pour les cristaux

David Gontier, CEREMADE, Université Paris-Dauphine

Un cristal est modélisé par opérateur périodique. Afin de calculer numériquement ses propriétés, cet opérateur est étudié uniquement sur une supercellule, c'est à dire sur une boîte contenant L fois la périodicité du cristal, avec des conditions périodiques aux bords. Le but de cet exposé est de démontrer que l'erreur faite par cette approximation est exponentiellement petite par rapport à L .