

# Développement d'un logiciel de calcul sur les domaines de probabilité maximale (MPDs)

Jérémy Dalphin – Mardi 6 mars 2018



INSTITUT DES SCIENCES  
DU CALCUL ET DES DONNÉES

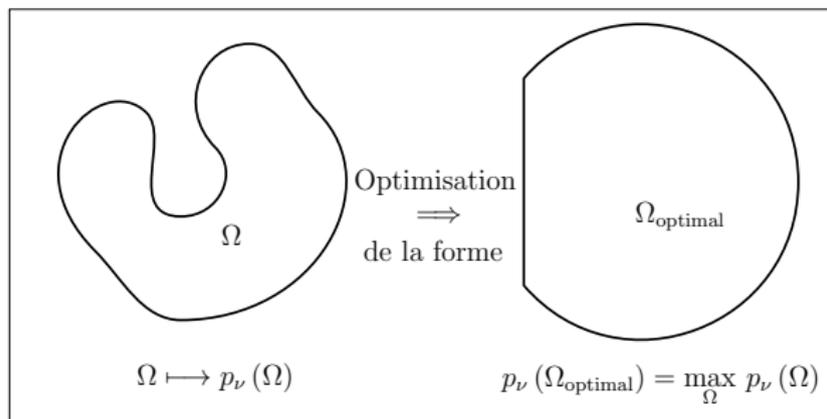


SORBONNE UNIVERSITÉ

Travail en collaboration avec Pascal Frey (ISCD), Benoît Braïda (LCT), Yannick Privat (LJLL), Andreas Savin (LCT), Charles Dapogny (LJK)

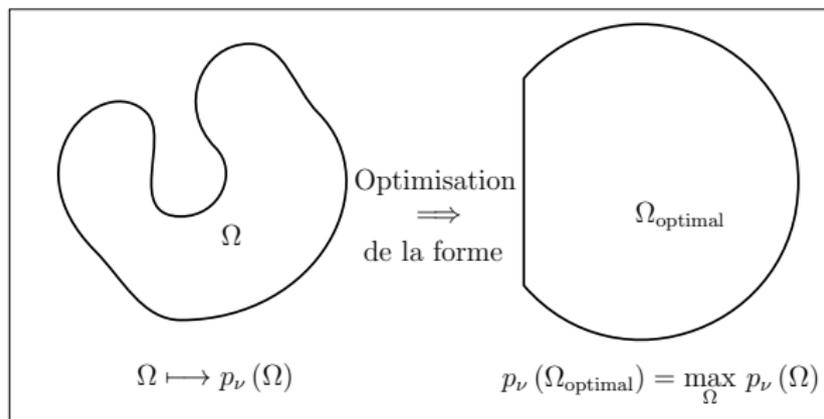
# Introduction : présentation du modèle des MPDs

**Proposition (Savin, 2002)** : tenter de chercher un domaine qui maximise la probabilité  $p_\nu(\Omega)$  de trouver exactement  $\nu$  électrons dans  $\Omega$ , en résolvant un problème d'optimisation.



# Introduction : présentation du modèle des MPDs

**Proposition (Savin, 2002)** : tenter de chercher un domaine qui maximise la probabilité  $p_\nu(\Omega)$  de trouver exactement  $\nu$  électrons dans  $\Omega$ , en résolvant un problème d'optimisation.

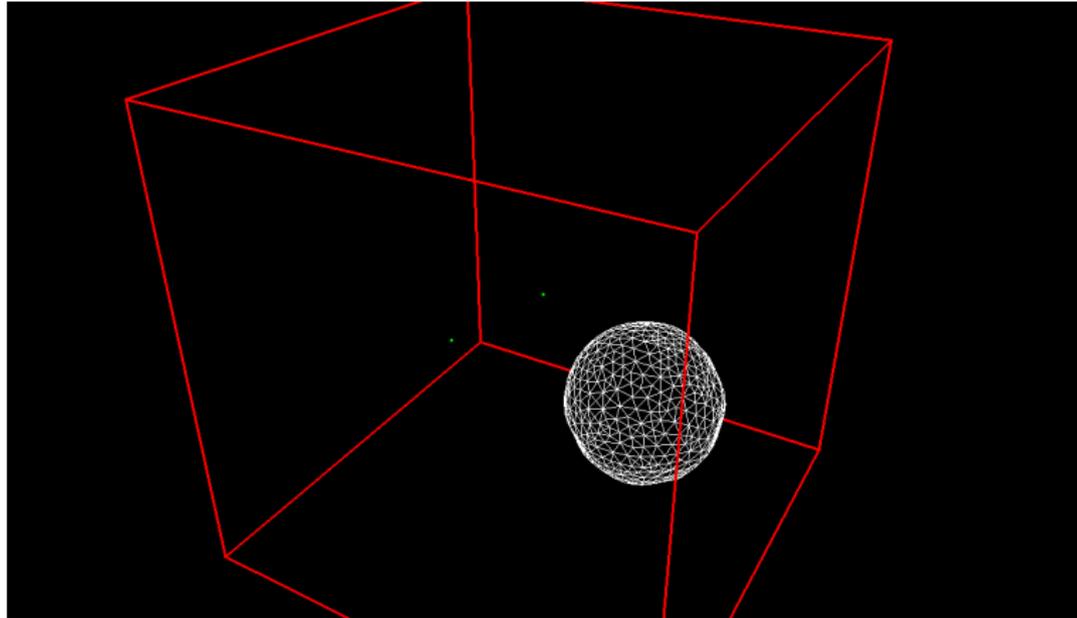


Le modèle des MPDs permet de visualiser dans l'espace réel tridimensionnel la structure électronique des molécules ainsi que leurs interactions.

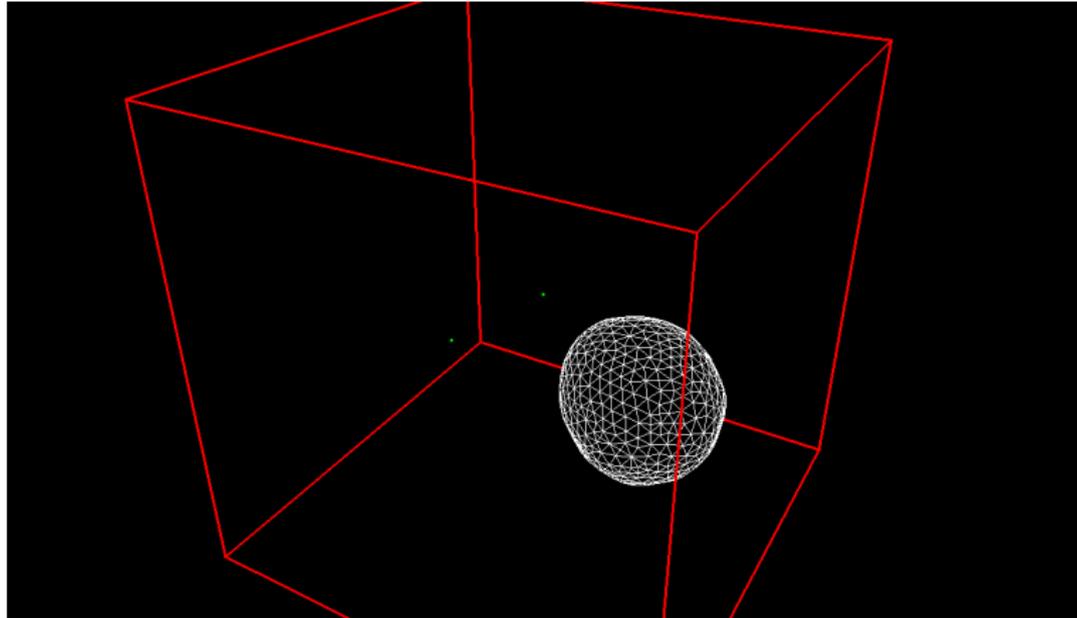
**Objectif** : développer un logiciel pour obtenir numériquement des MPDs.

<https://github.com/ISCDtoolbox/MPD>

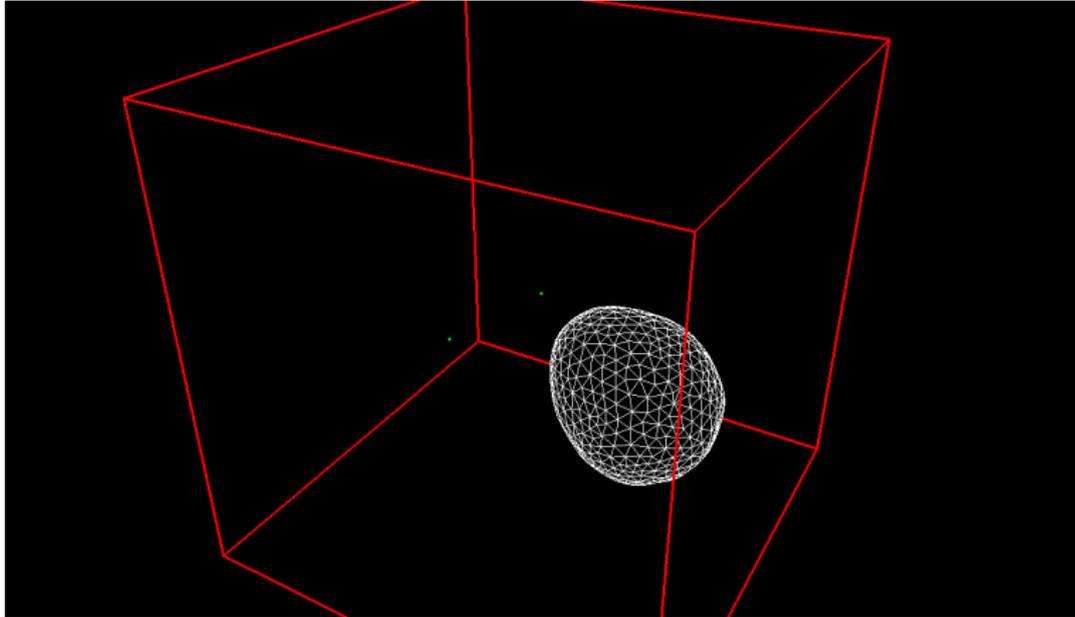
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 0)



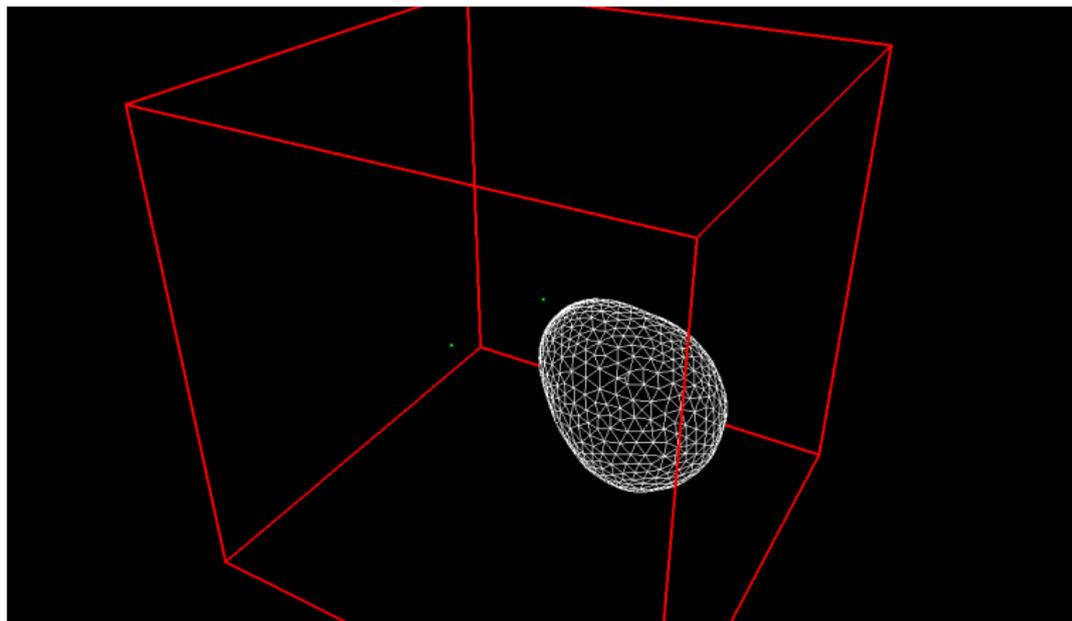
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 1)



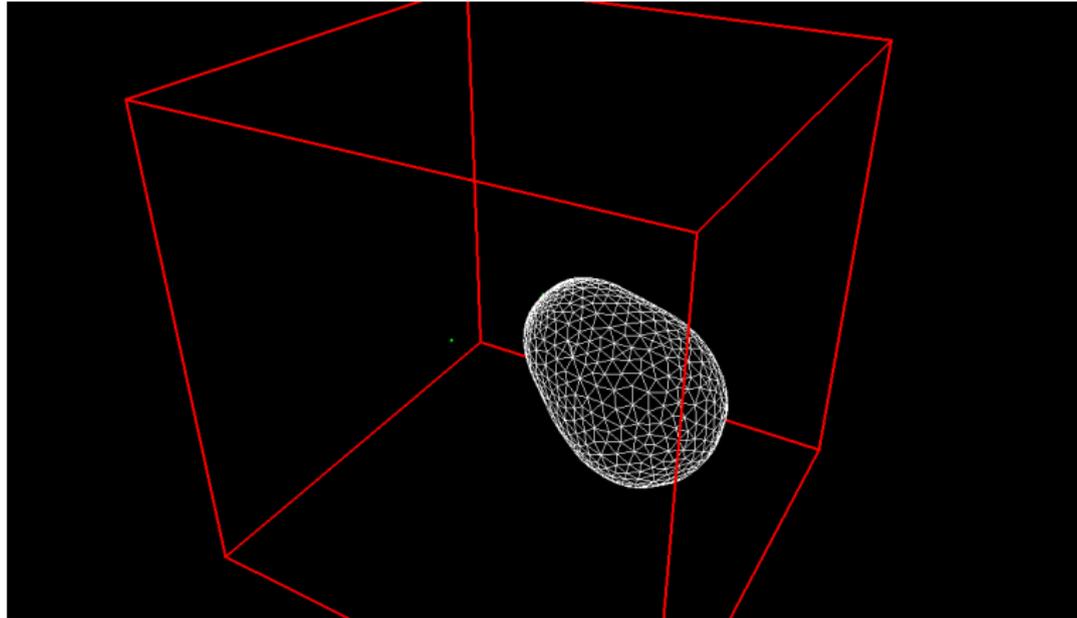
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 2)



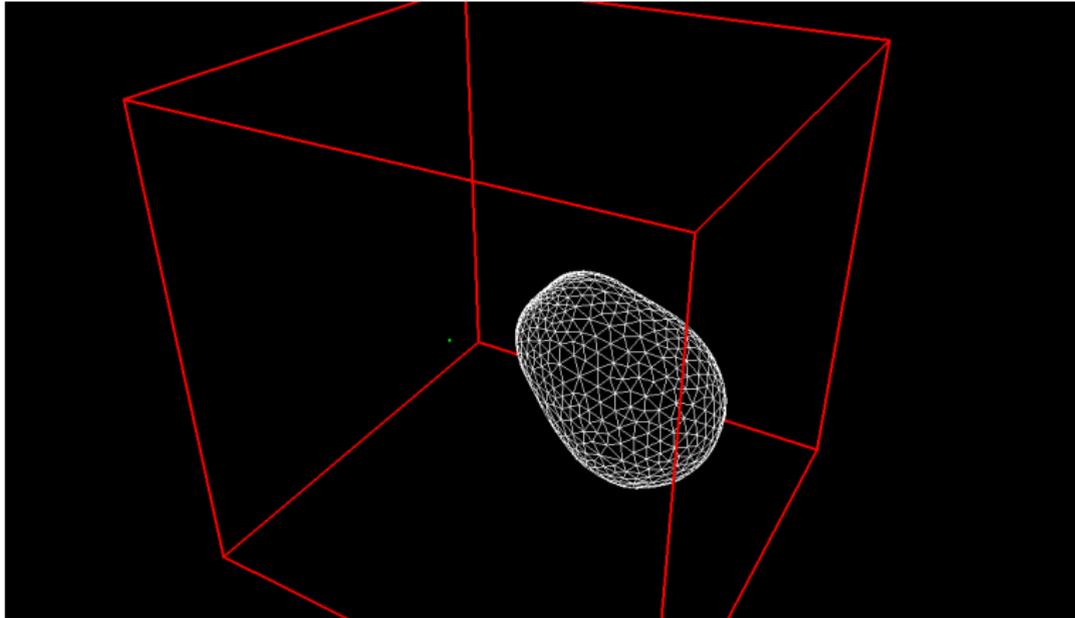
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 3)



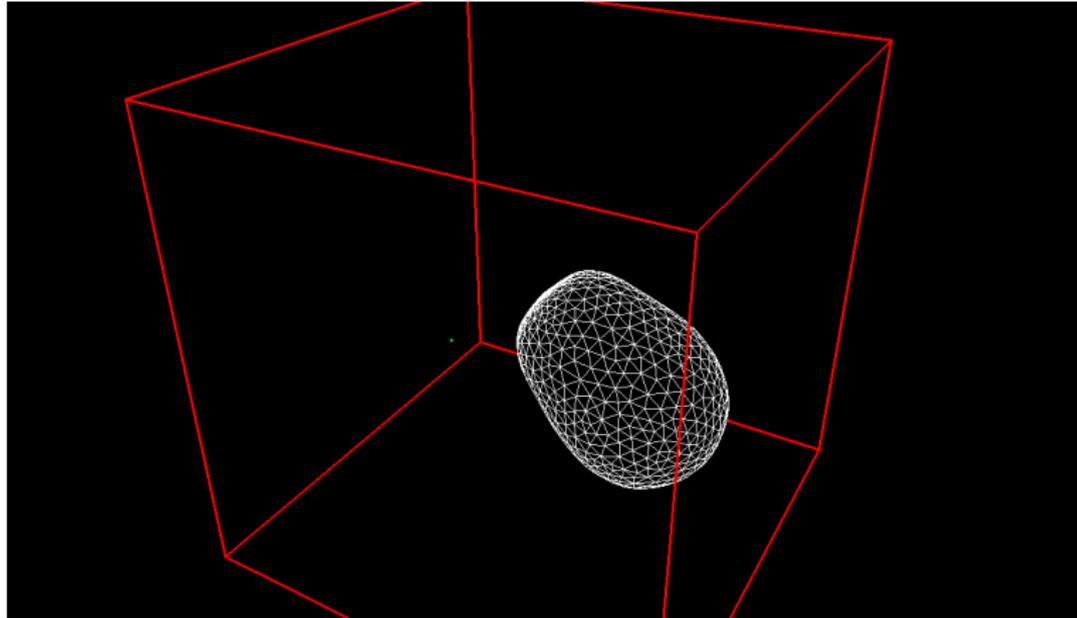
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 4)



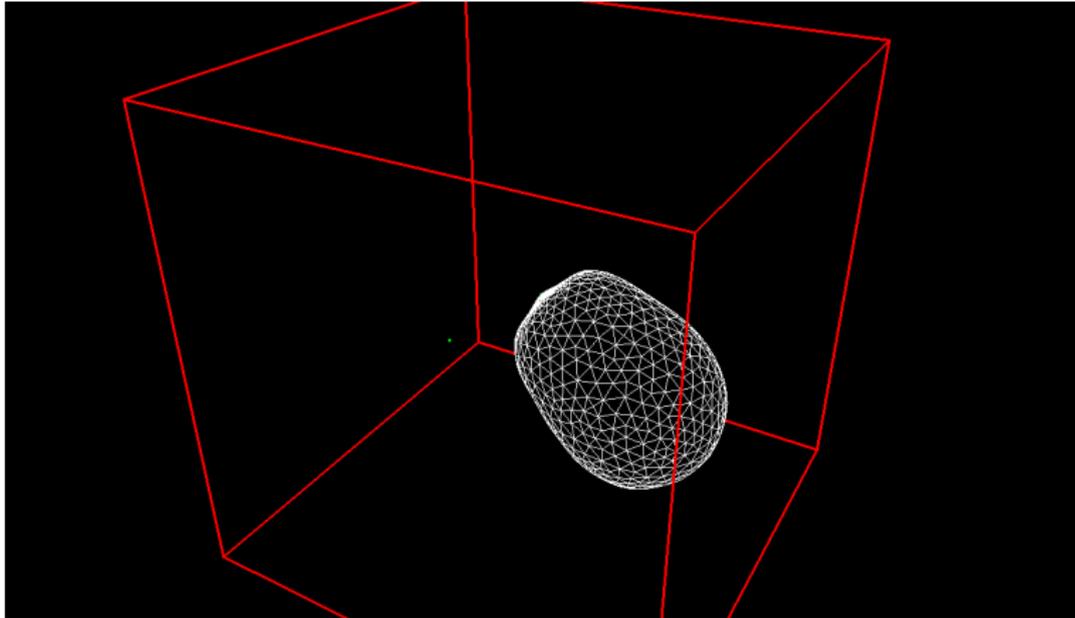
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 5)



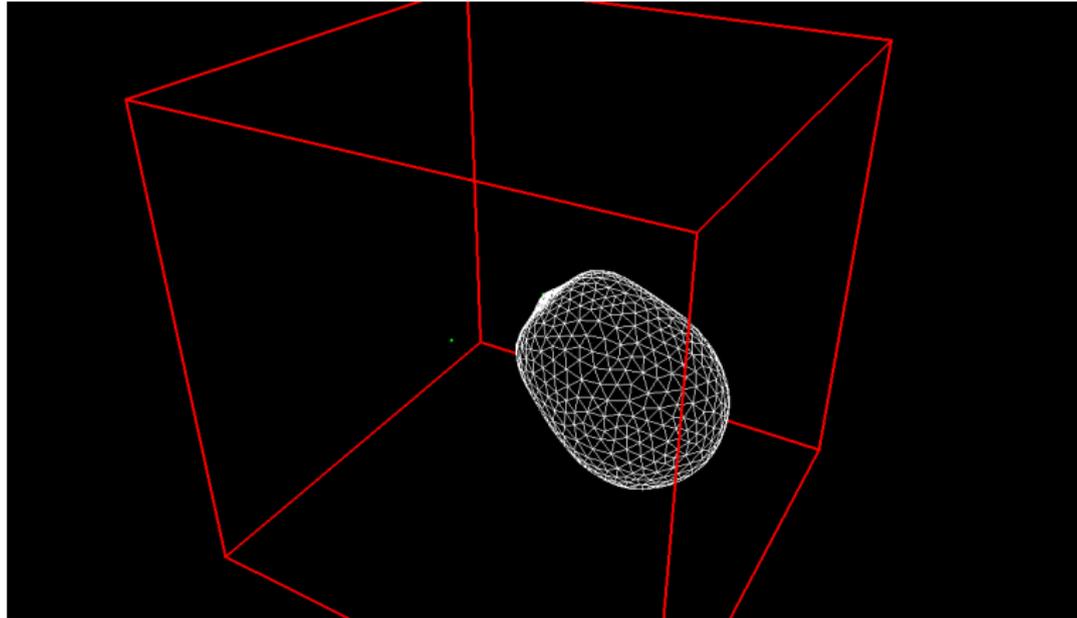
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 6)



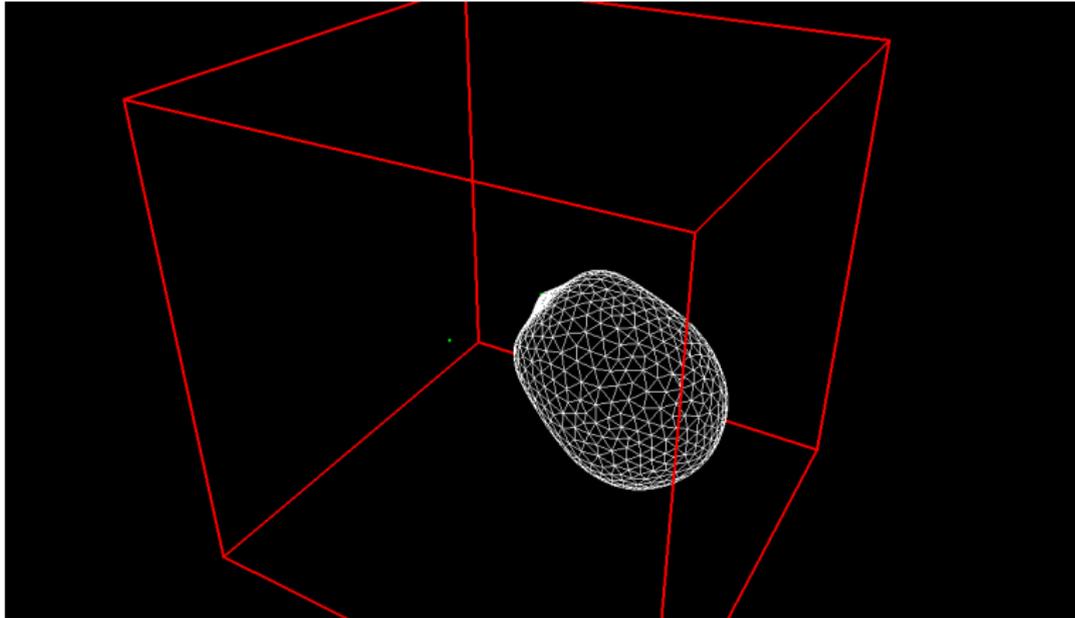
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 7)



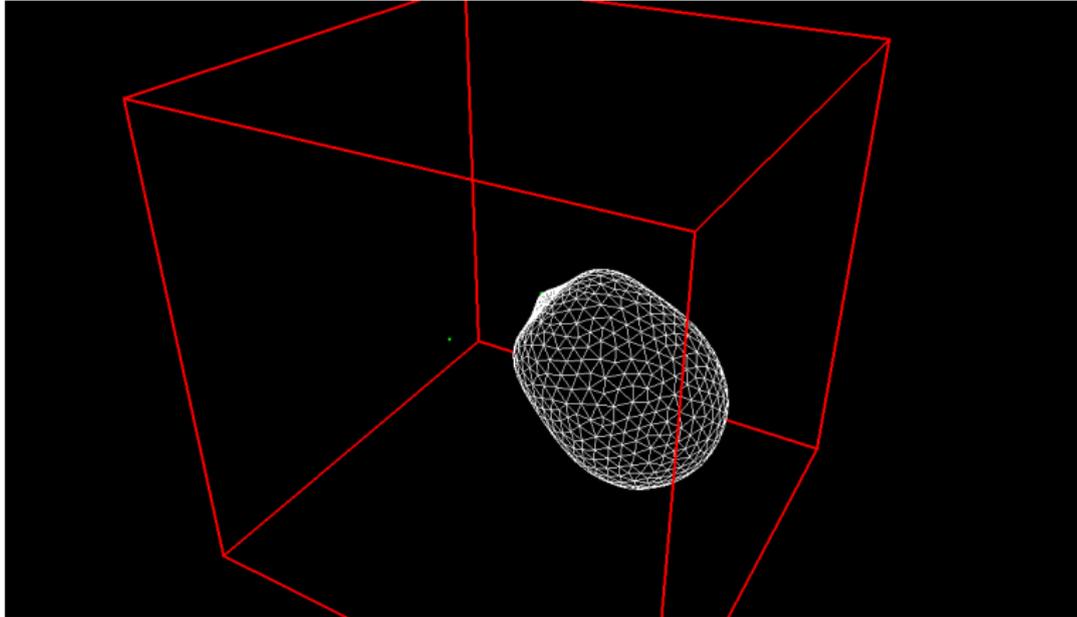
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 8)



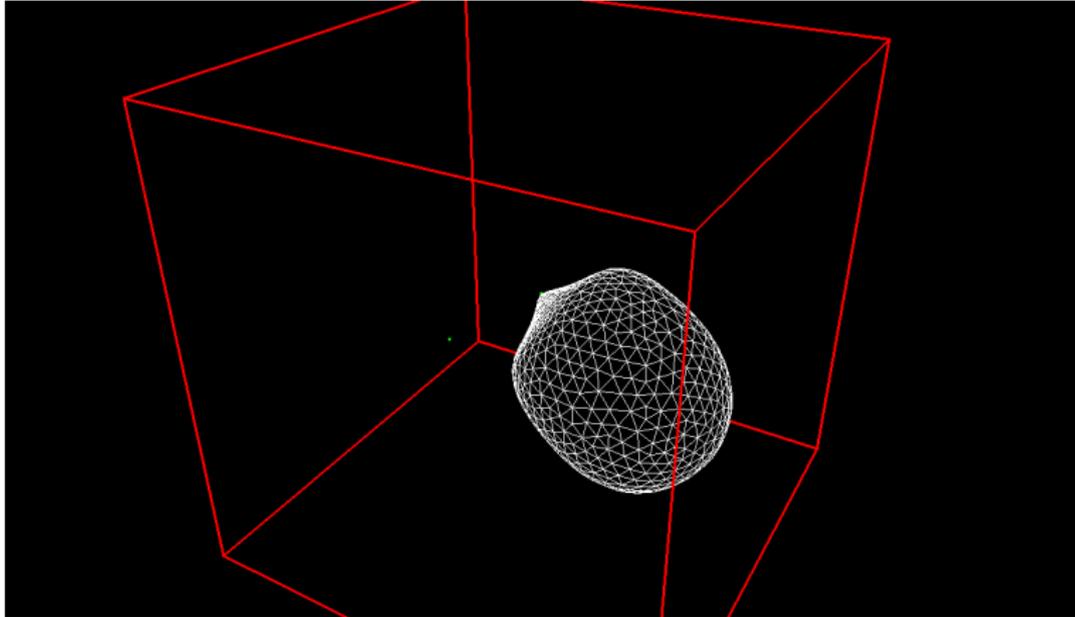
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 9)



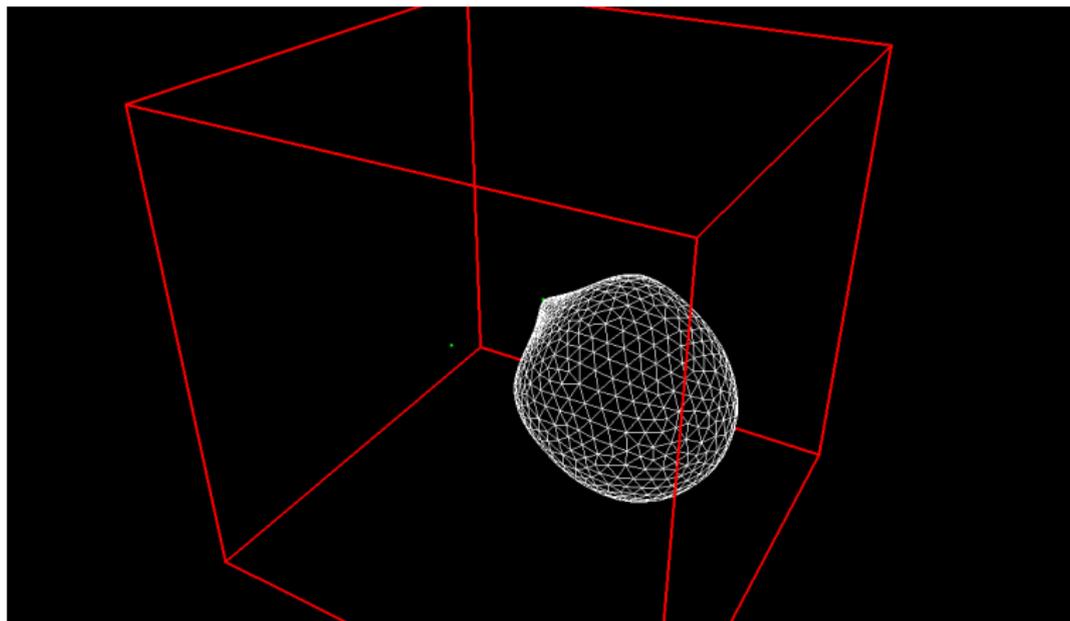
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 10)



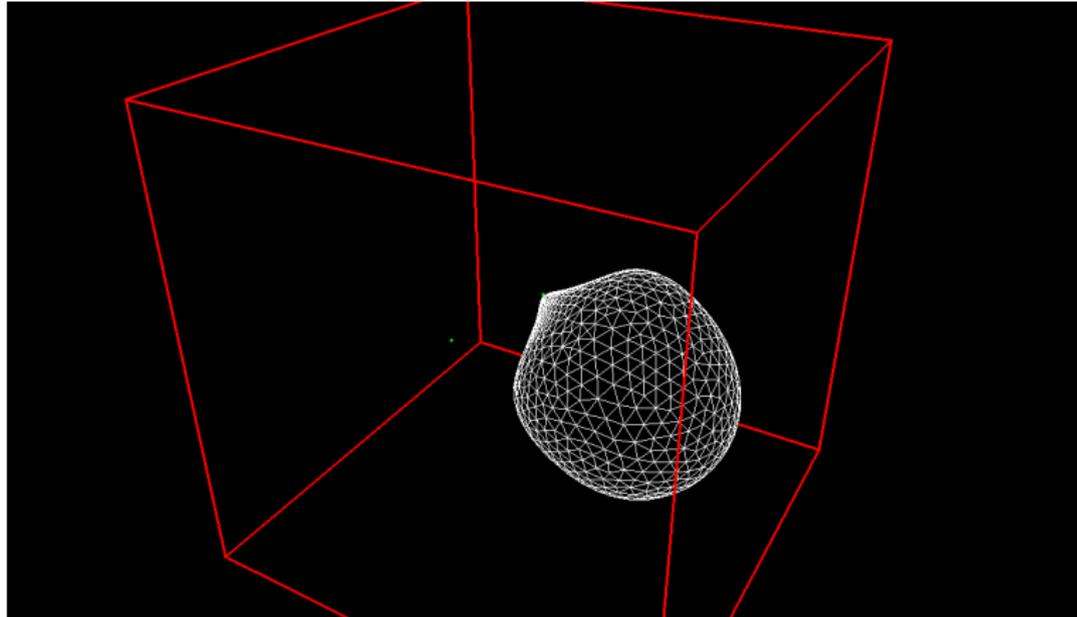
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 20)



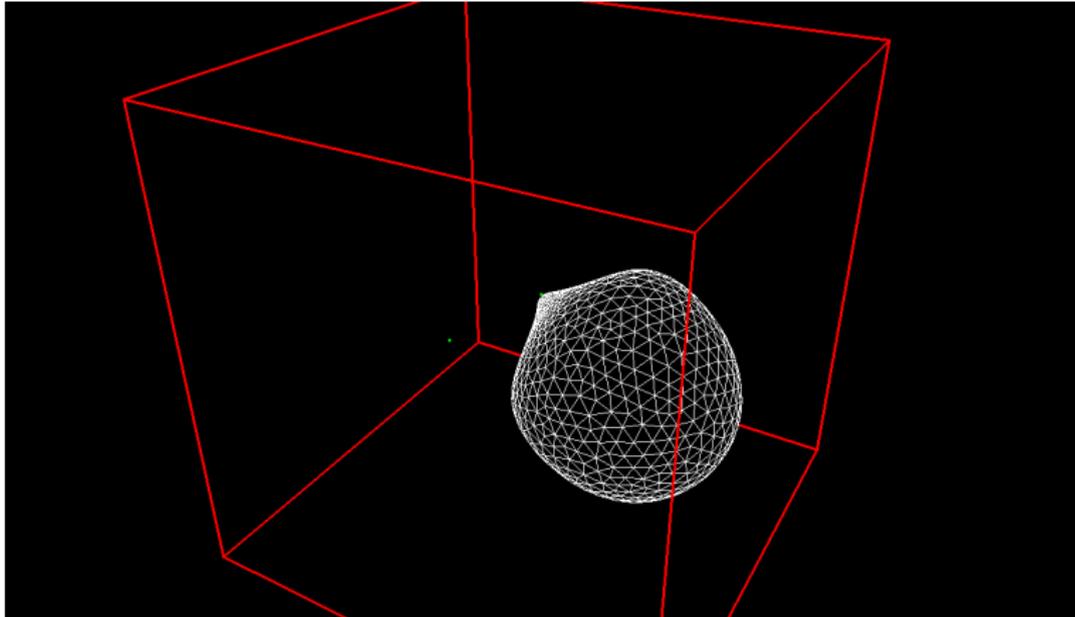
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 30)



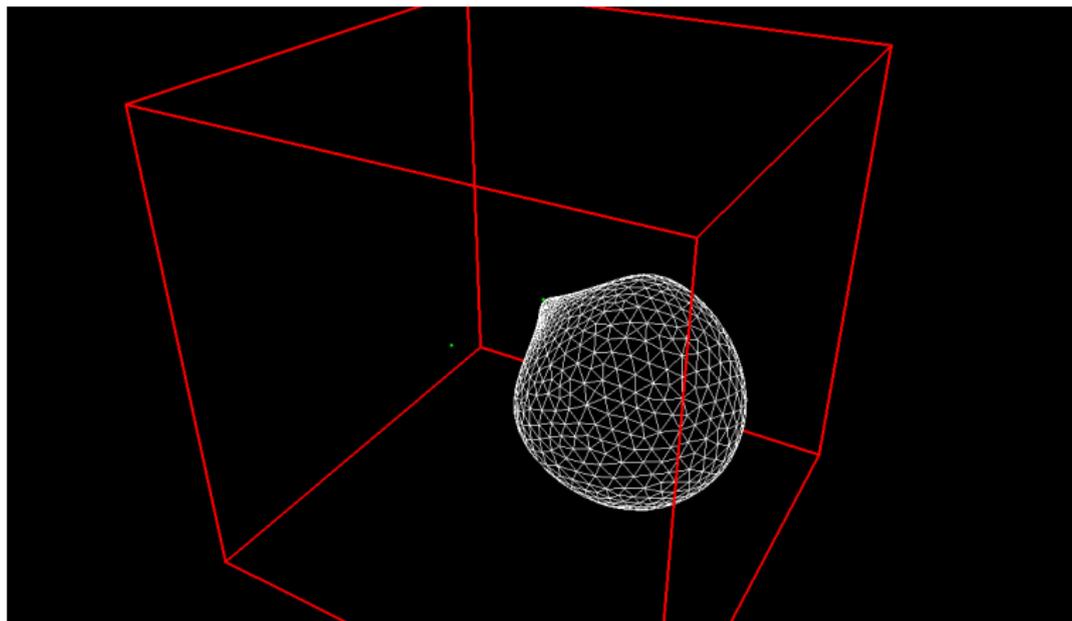
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 40)



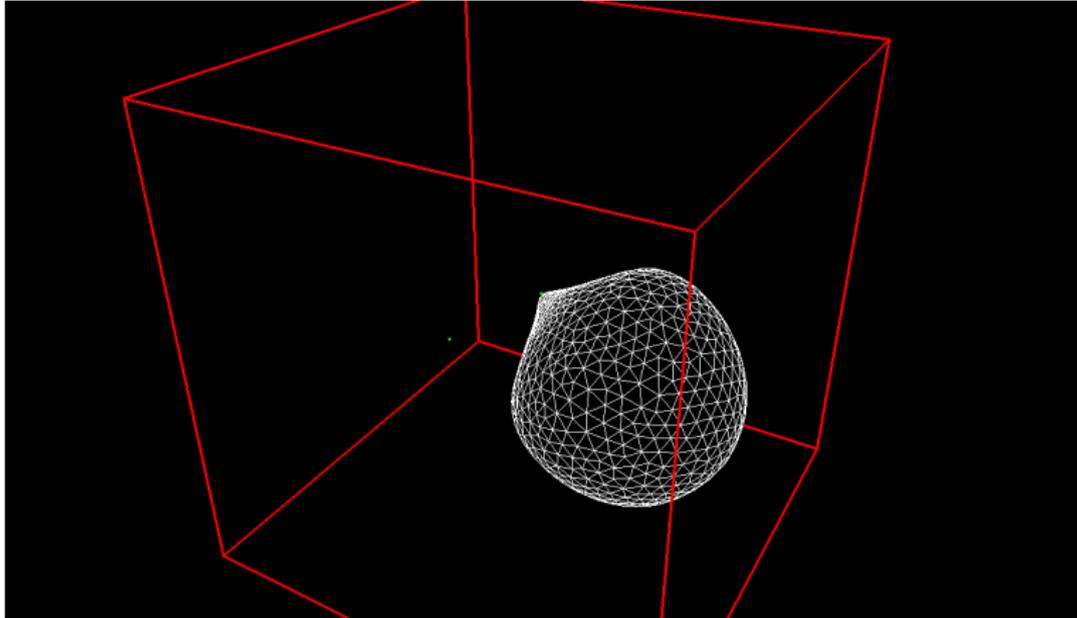
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 50)



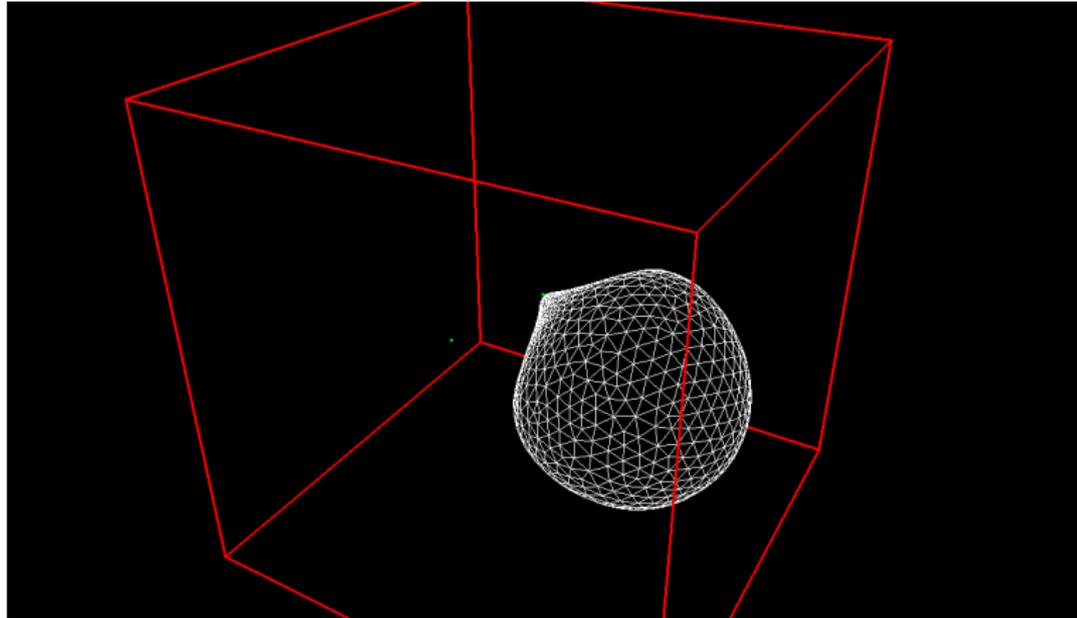
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 60)



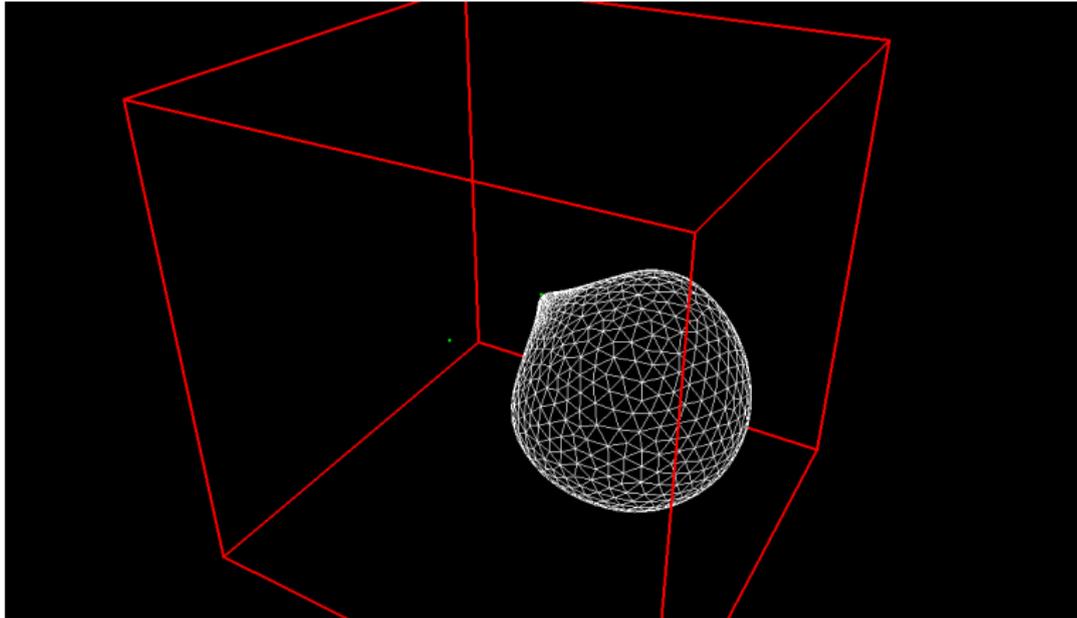
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 70)



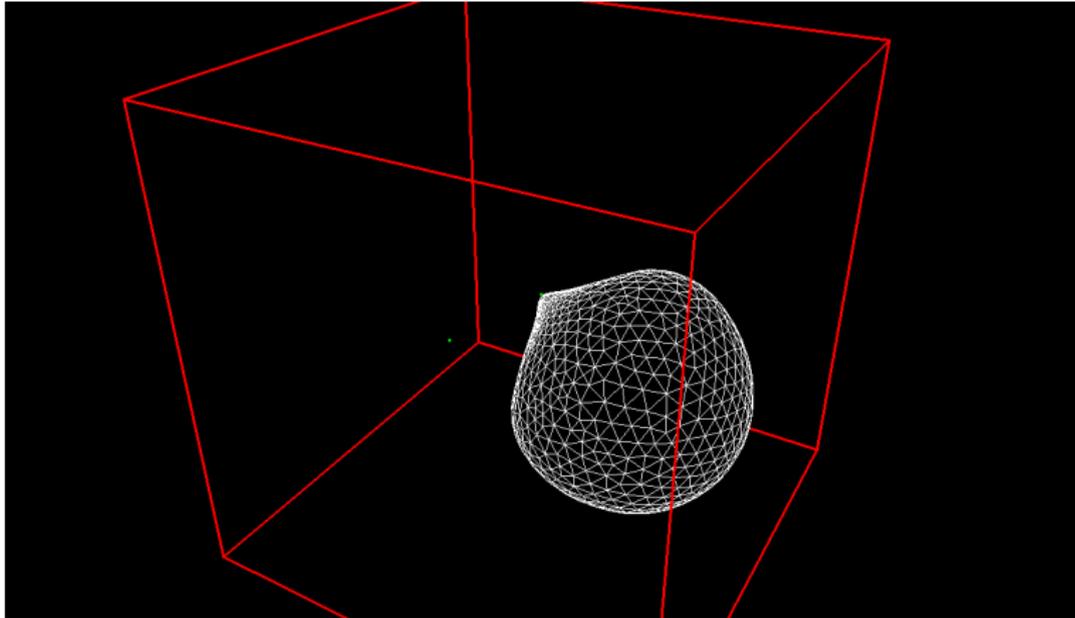
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 80)



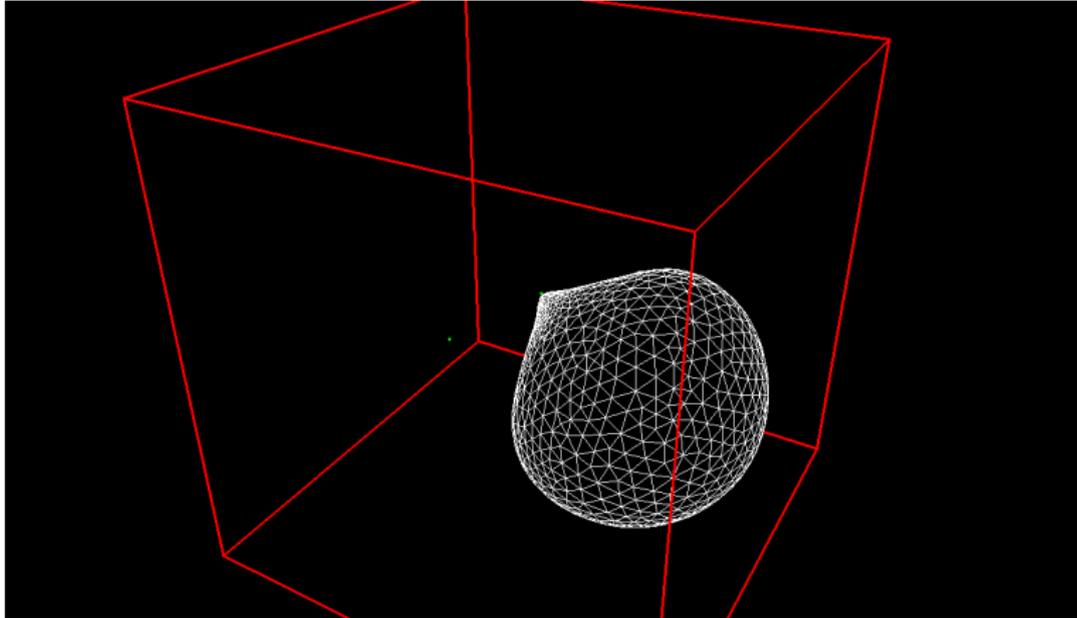
# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 90)



# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 100)

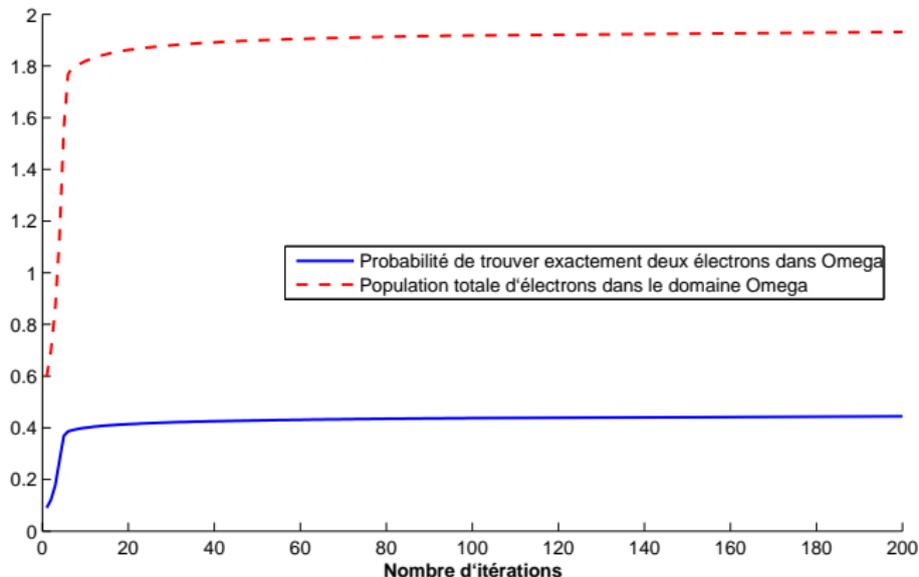


# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$ (itération 200)

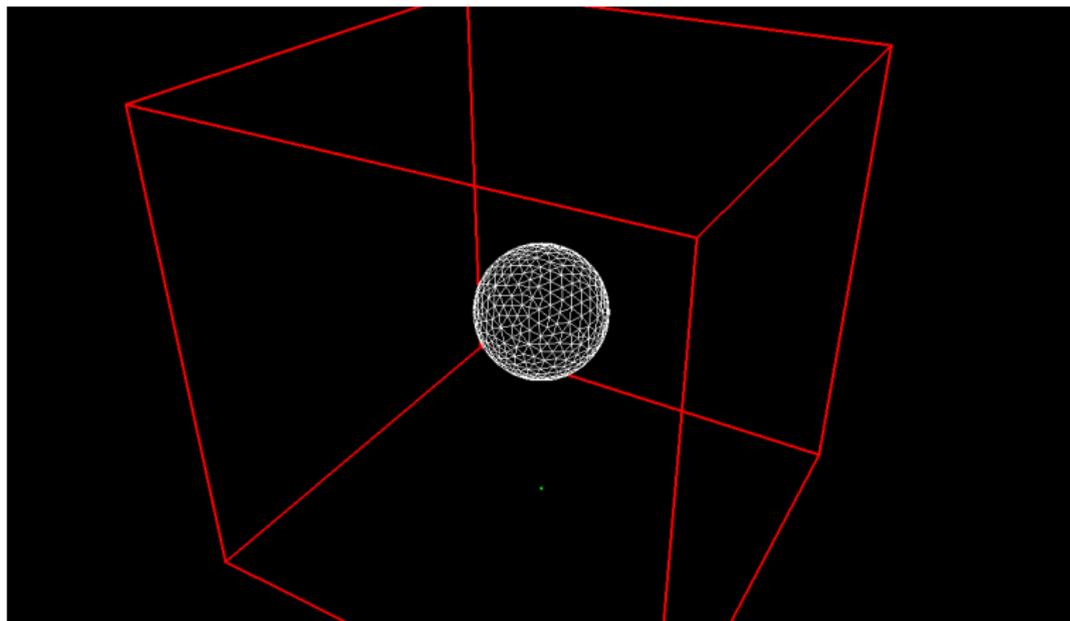


# Résultat I : exemple de la molécule $H_2O$

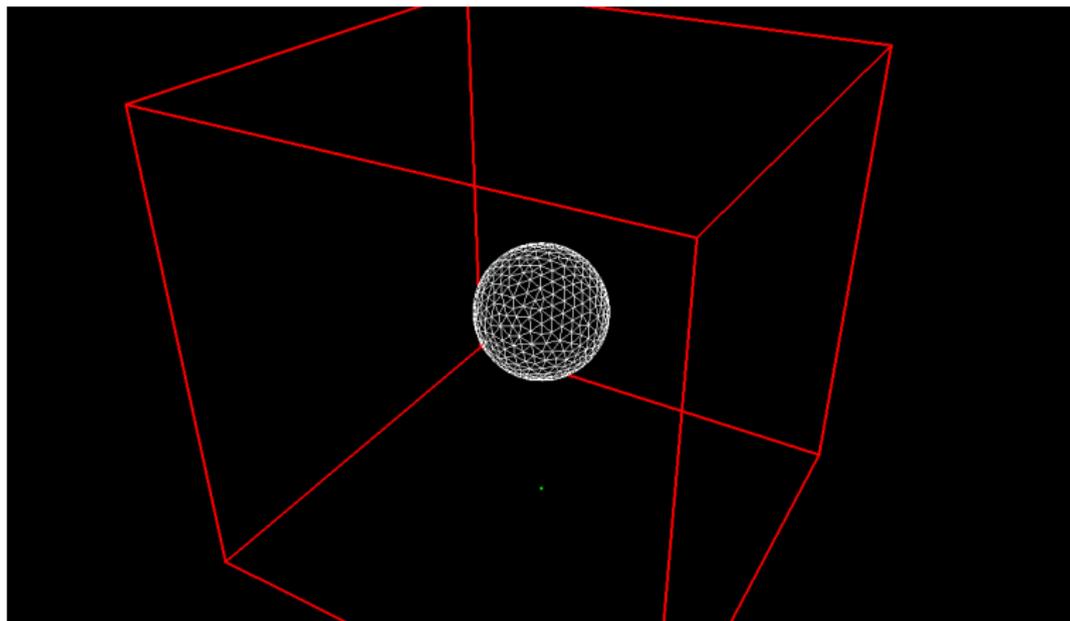
Temps de calcul : 30 sec. par itération soit 5 min. pour 10 itérations.



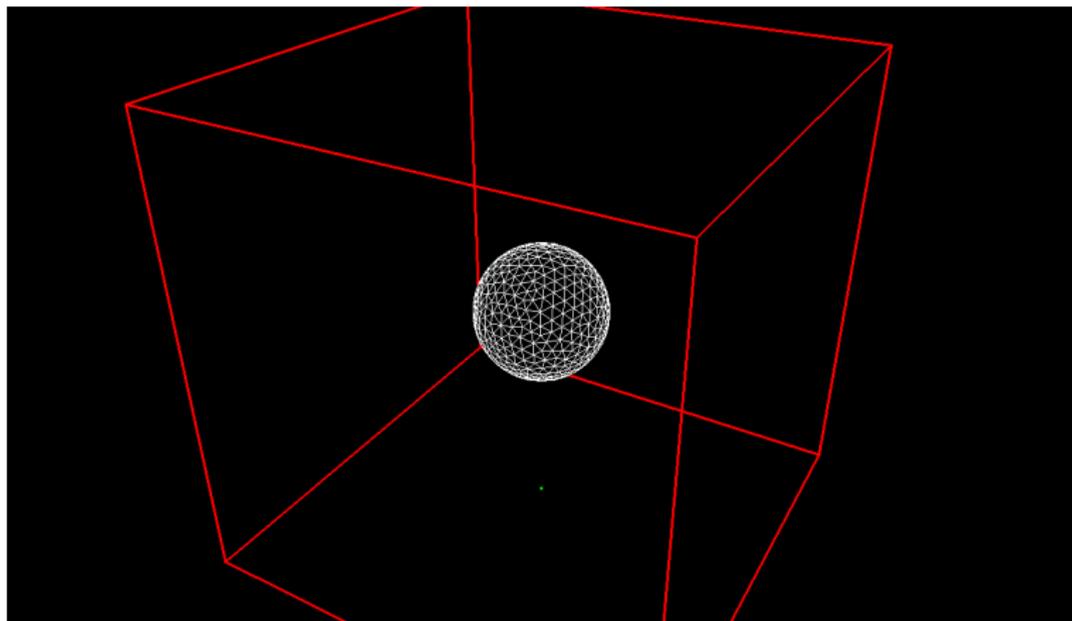
## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 0)



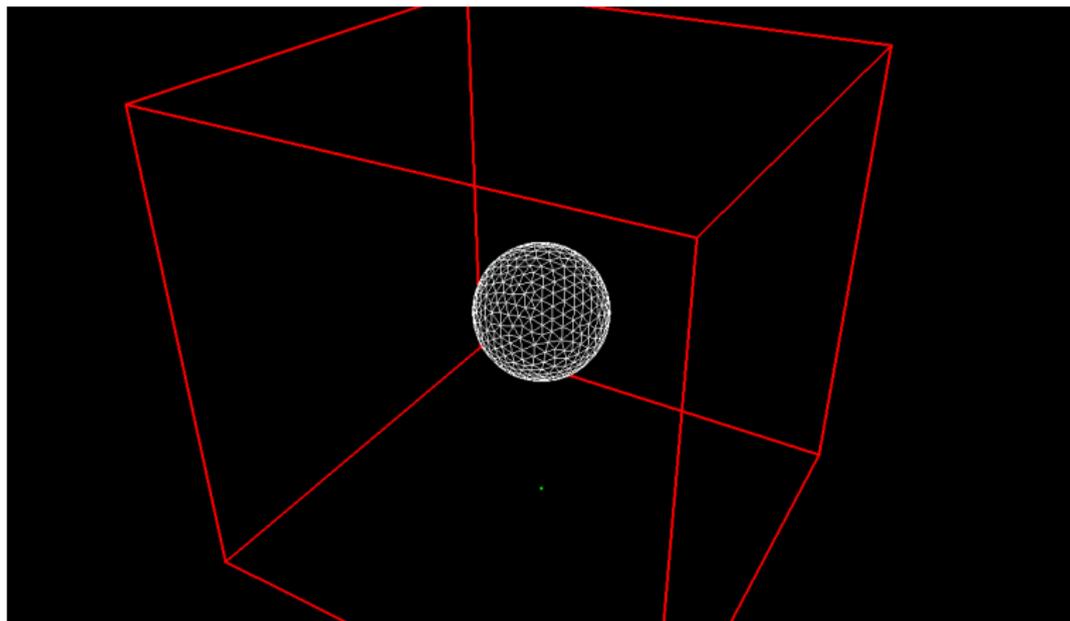
## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 1)



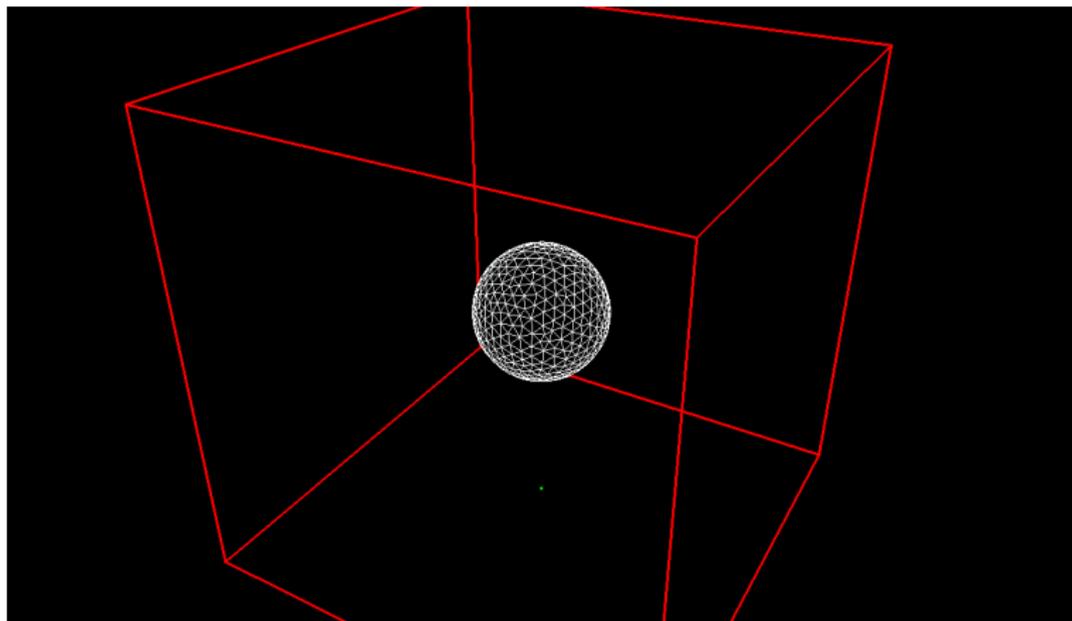
## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 2)



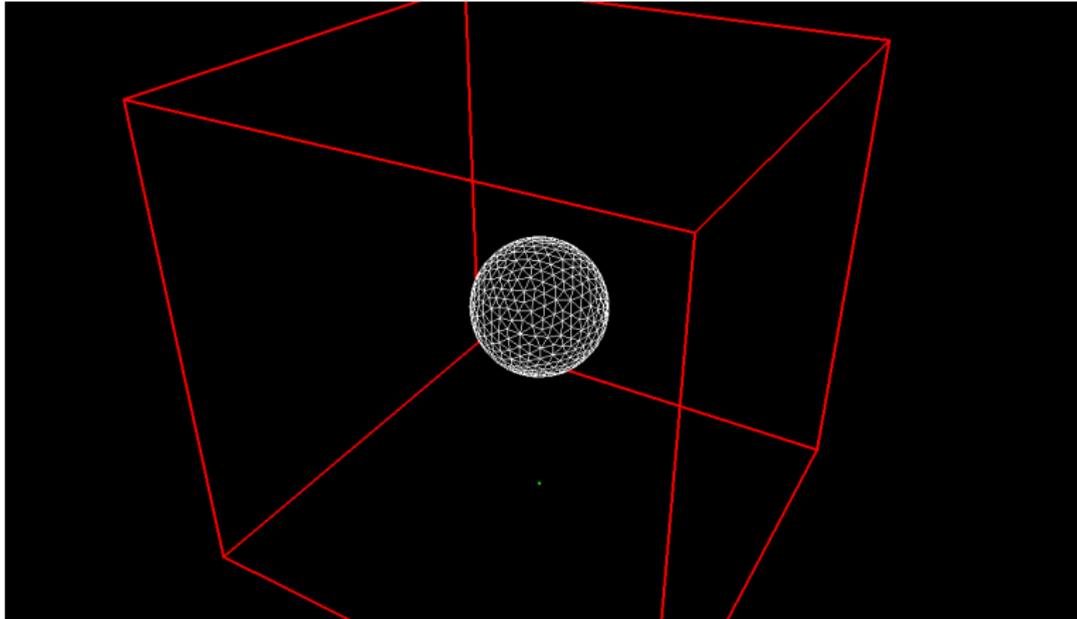
## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 3)



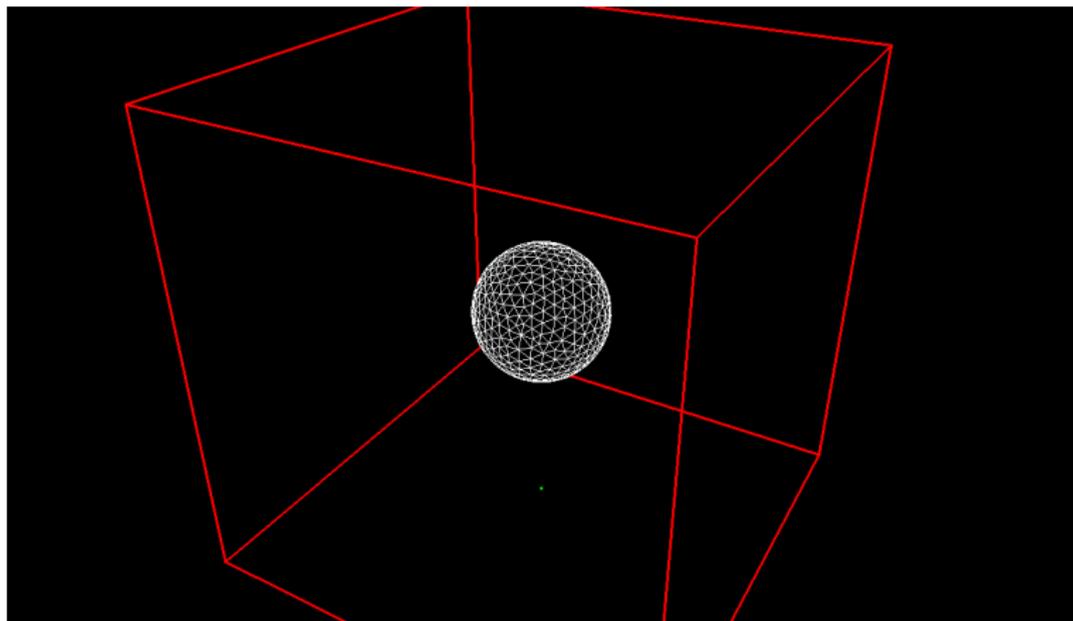
## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 4)



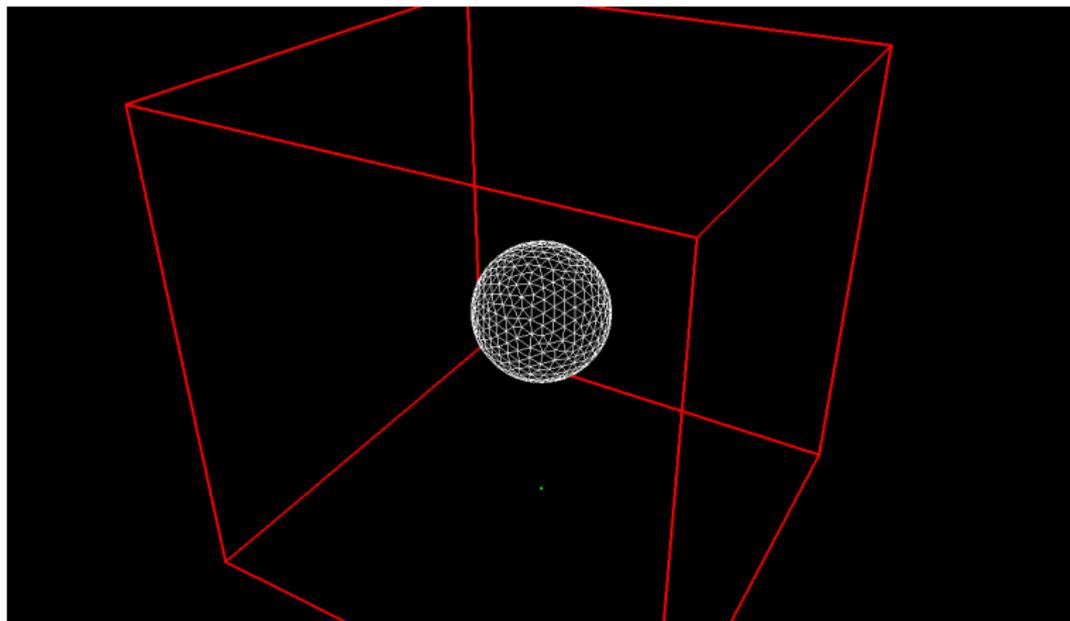
## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 5)



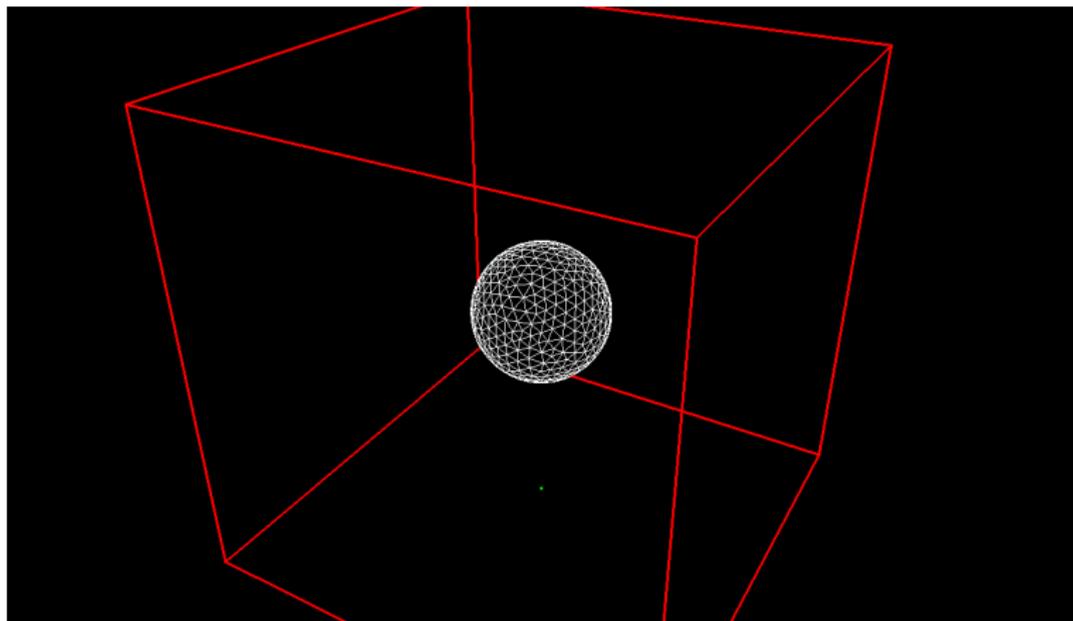
## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 6)



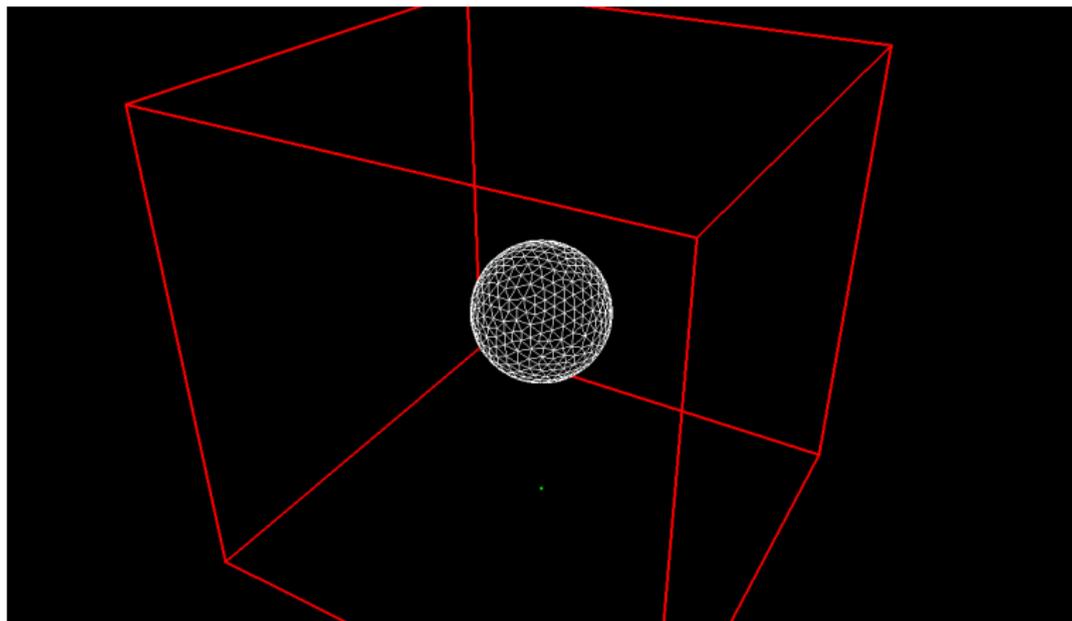
## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 7)



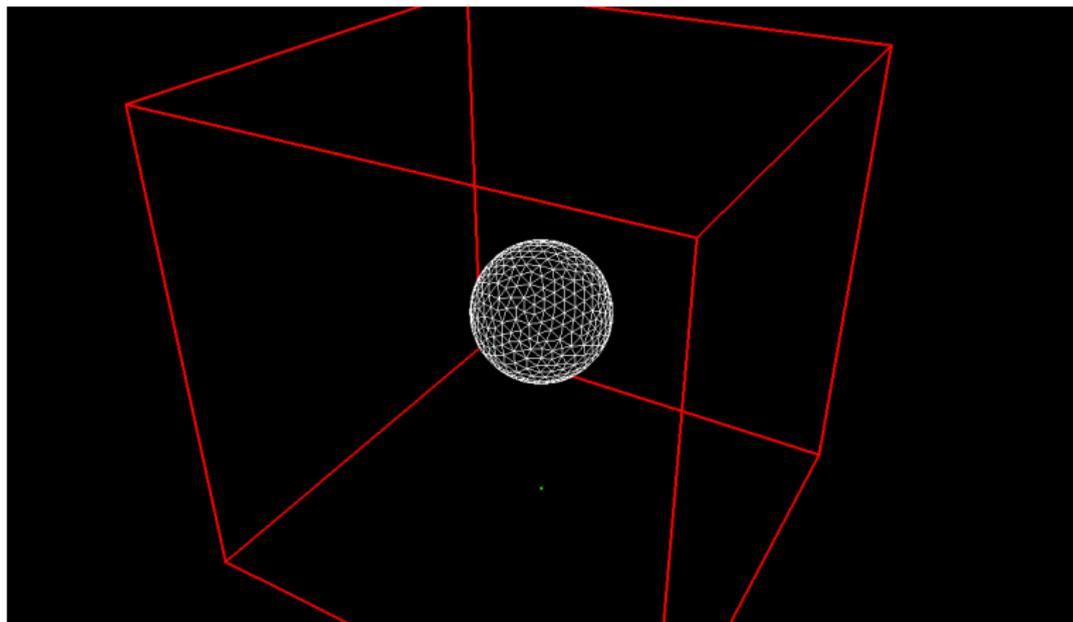
## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 8)



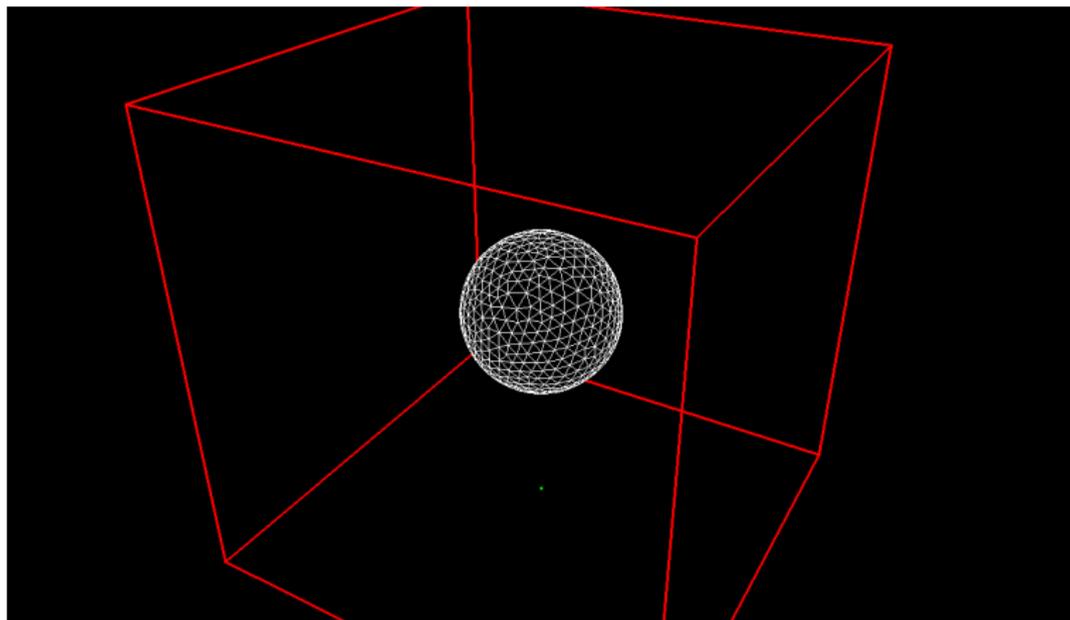
## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 9)



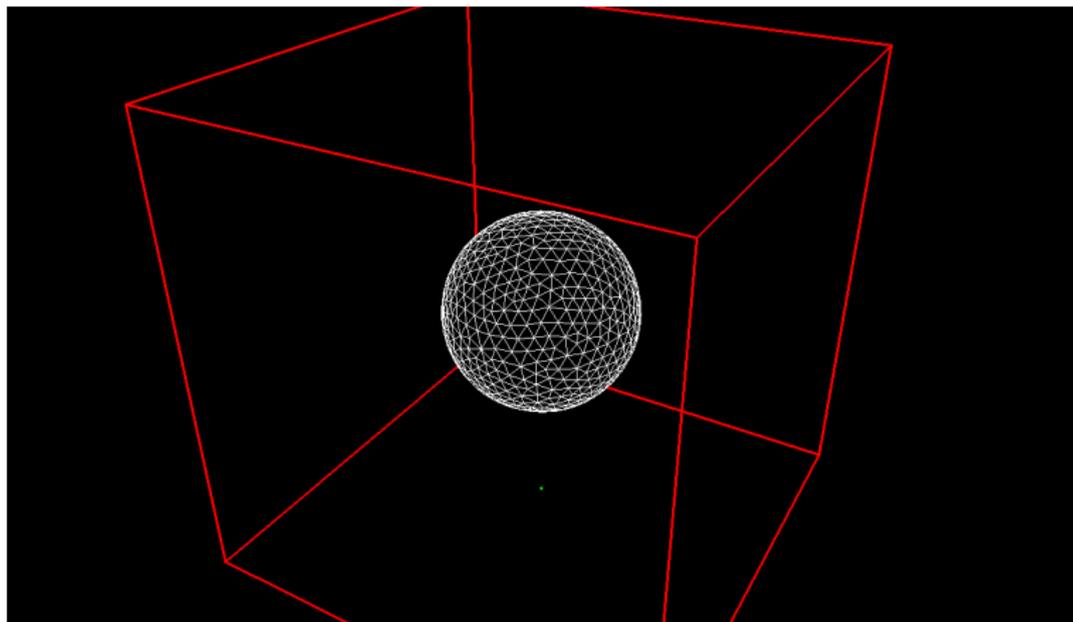
## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 10)



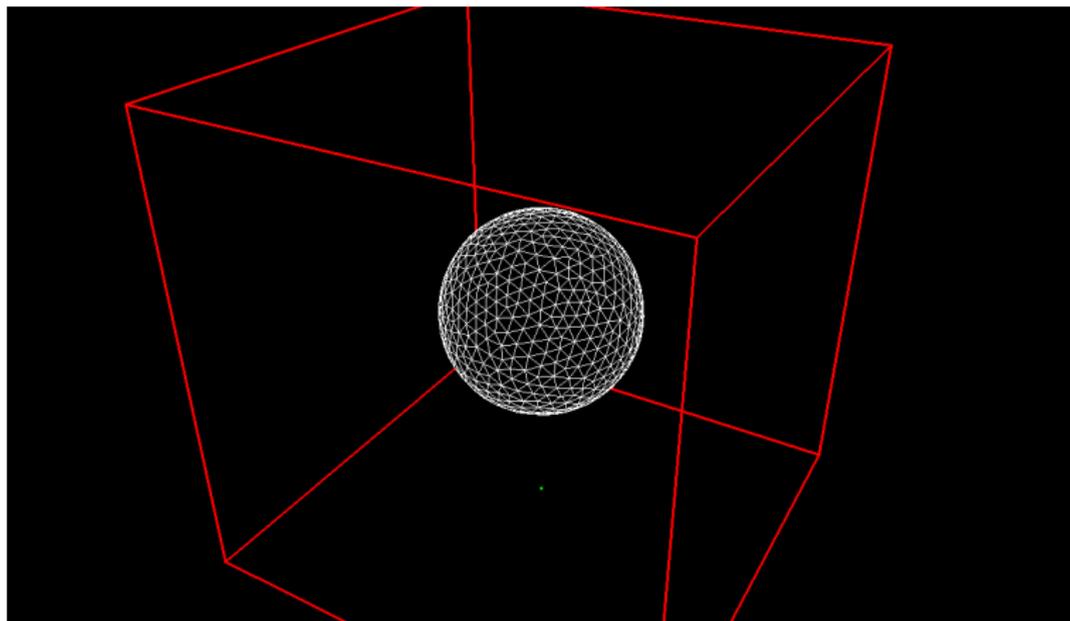
## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 20)



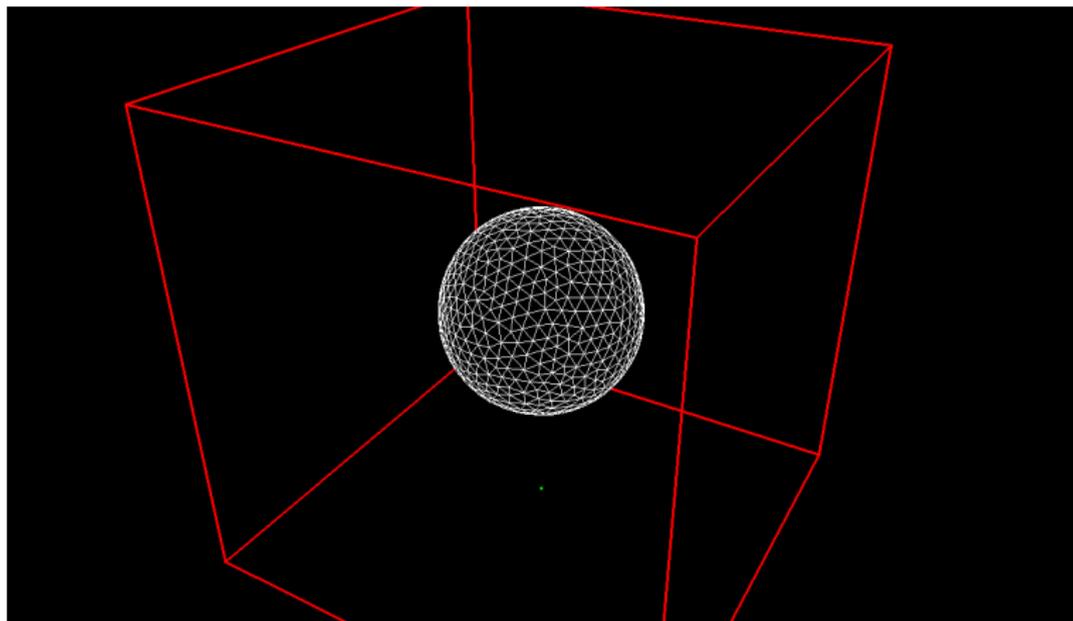
## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 30)



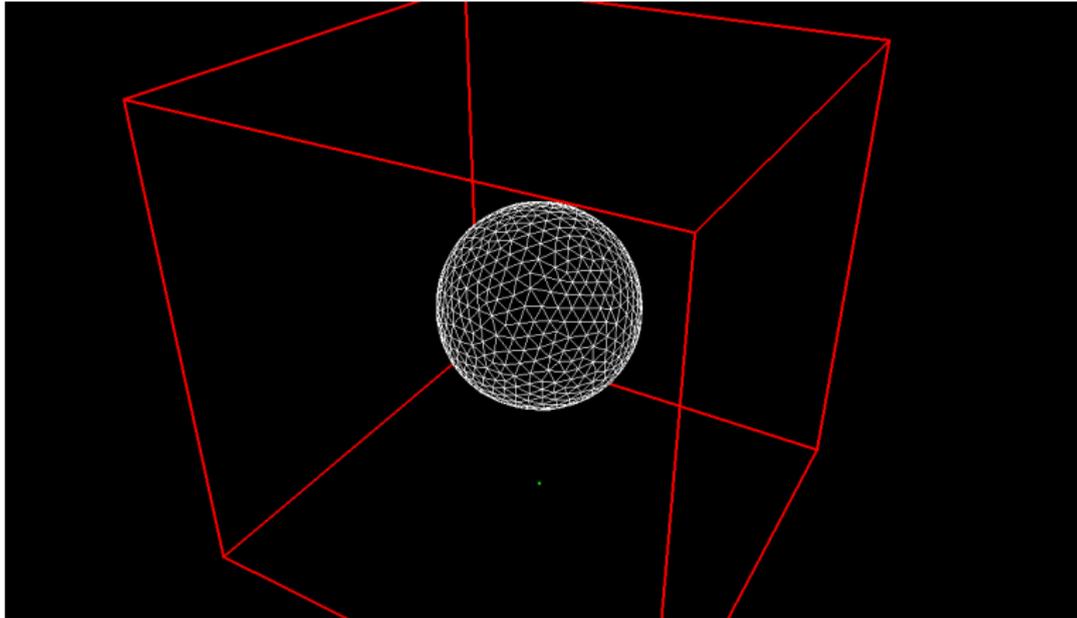
## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 40)



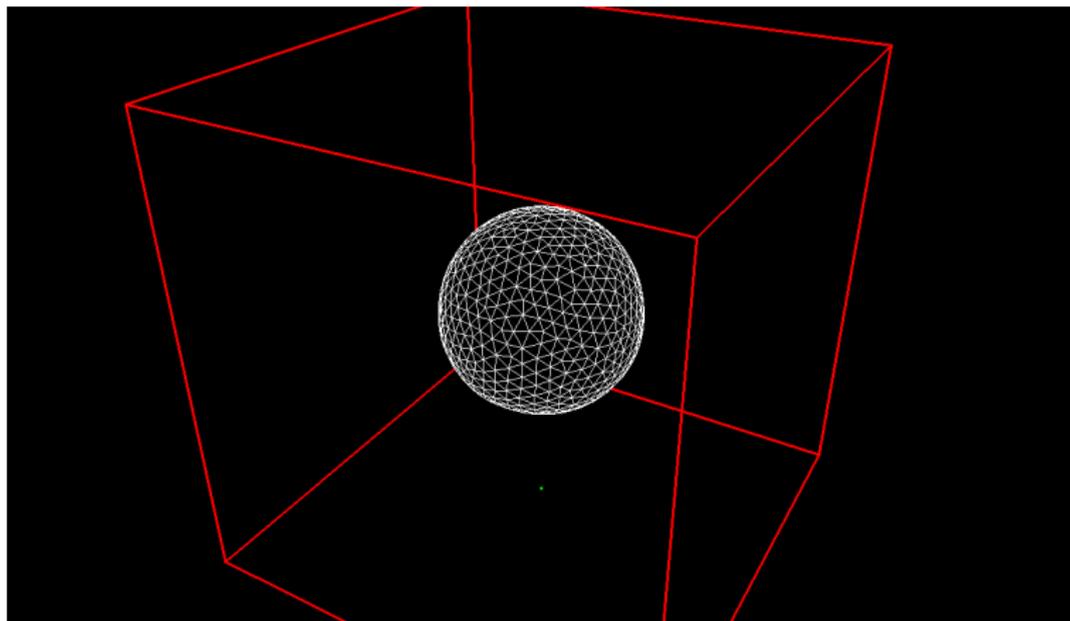
## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 50)



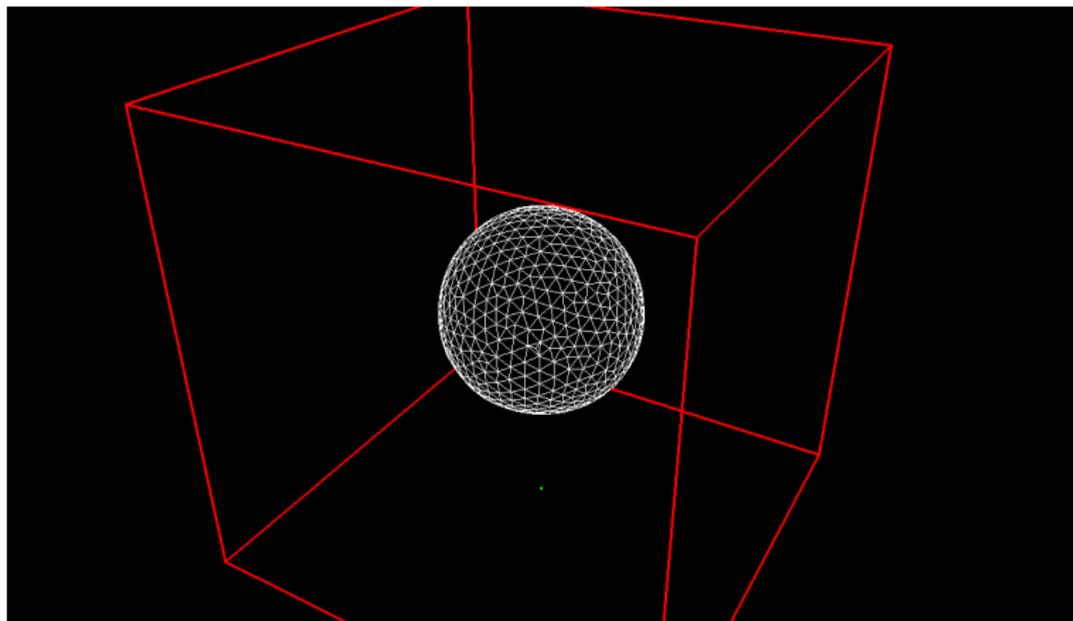
## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 60)



## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 70)

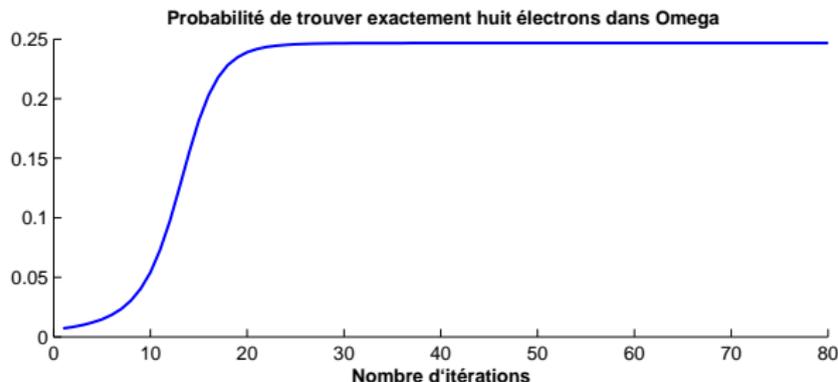


## Résultat II : exemple de la molécule *MoH* (itération 80)



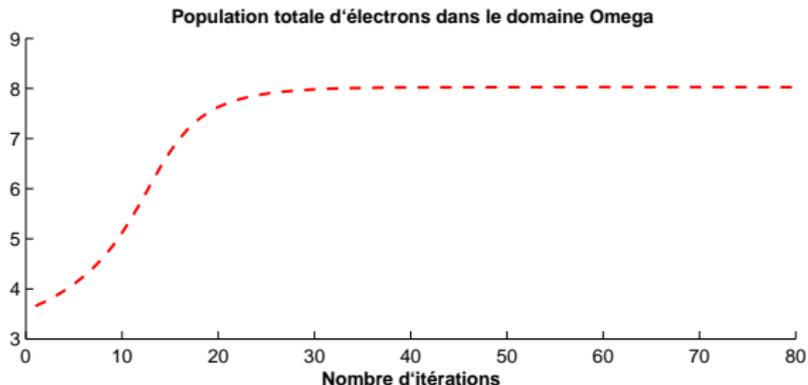
## Résultat II : exemple de la molécule $M_oH$

Temps de calcul : 45 sec. par itération soit 7.5 min. pour 10 itérations.

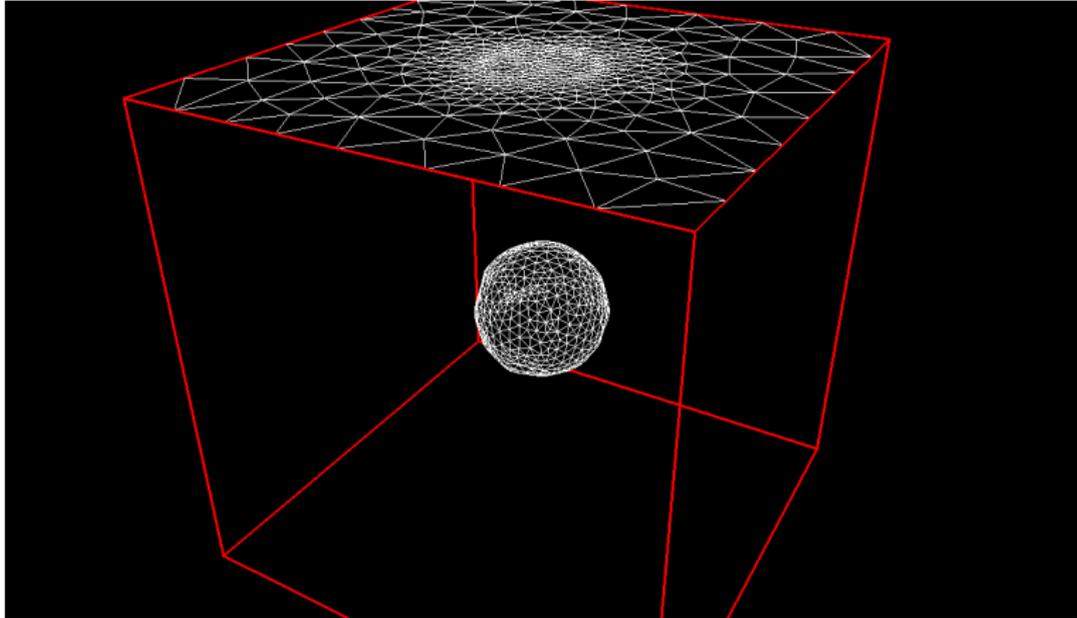


## Résultat II : exemple de la molécule $M_oH$

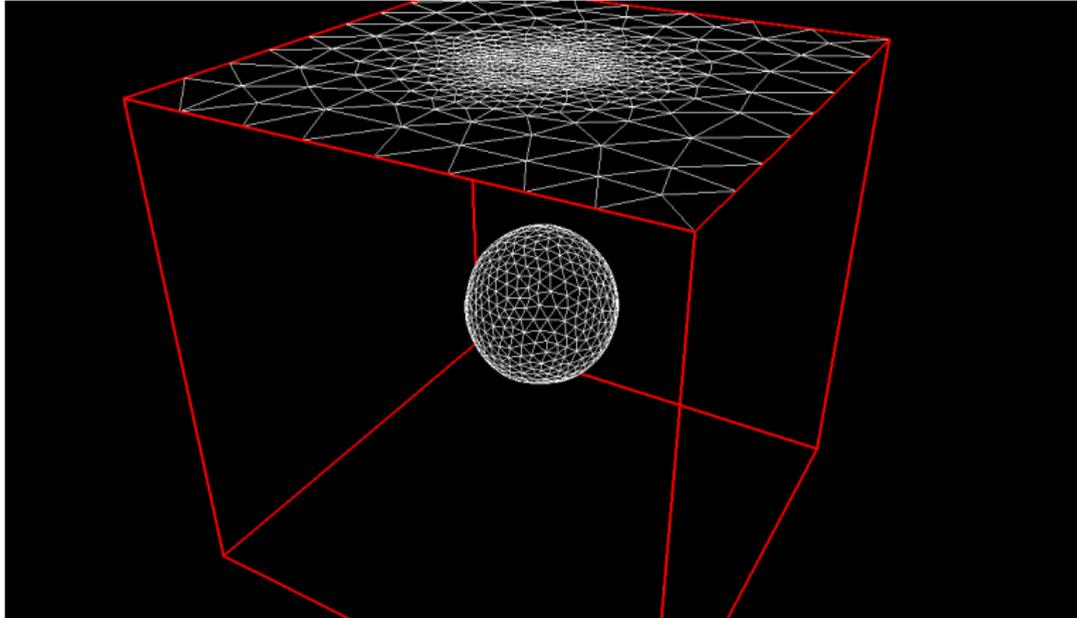
Temps de calcul : 45 sec. par itération soit 7.5 min. pour 10 itérations.



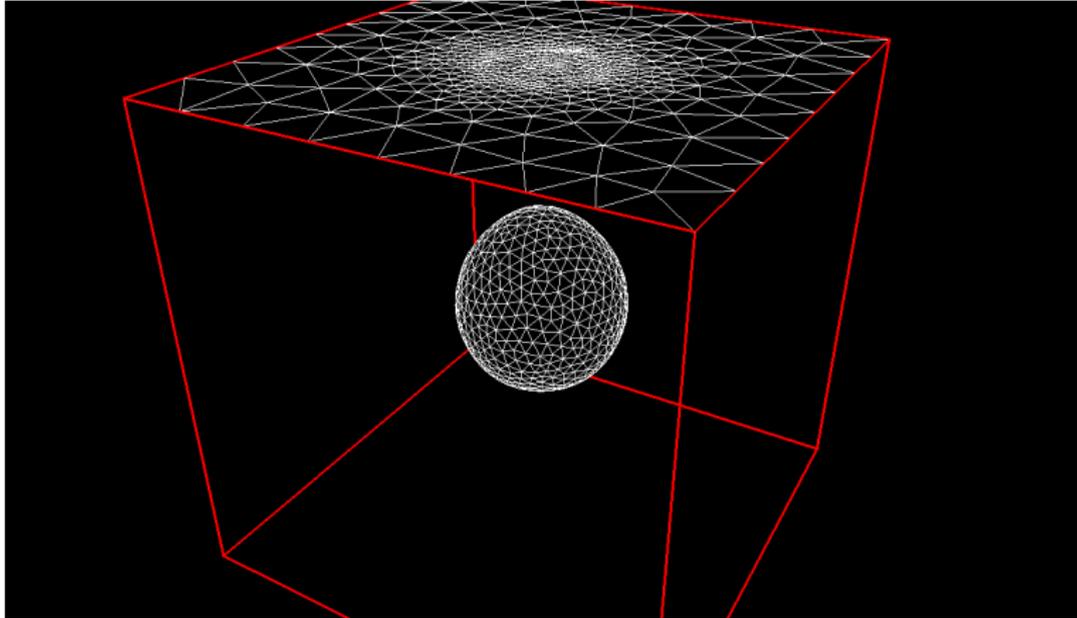
## Résultat III : exemple de la molécule $M_oH$ (itération 0)



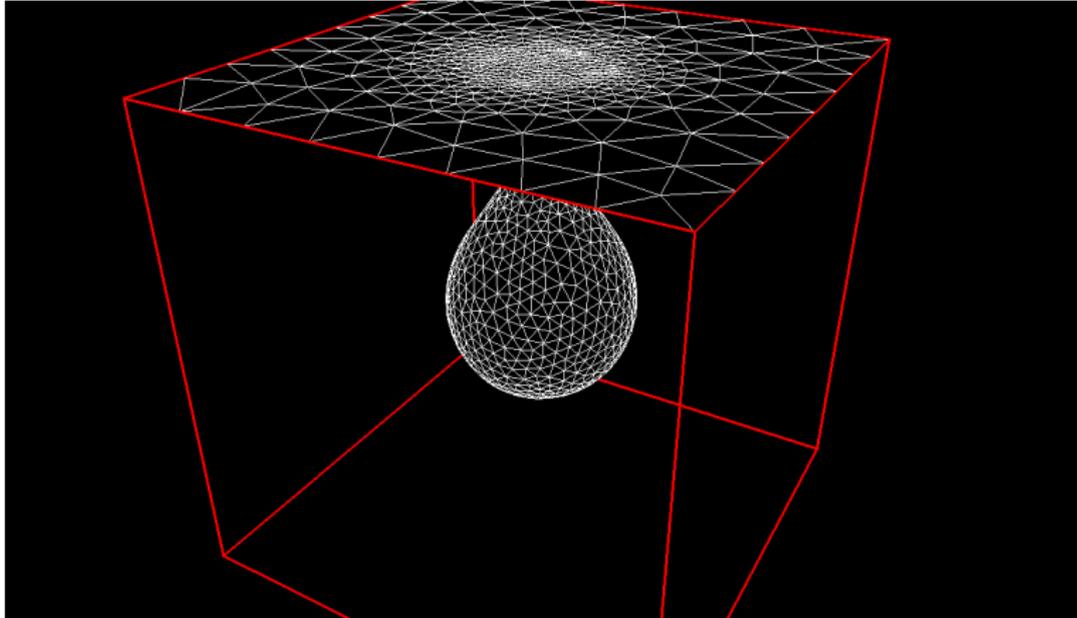
## Résultat III : exemple de la molécule $M_oH$ (itération 10)



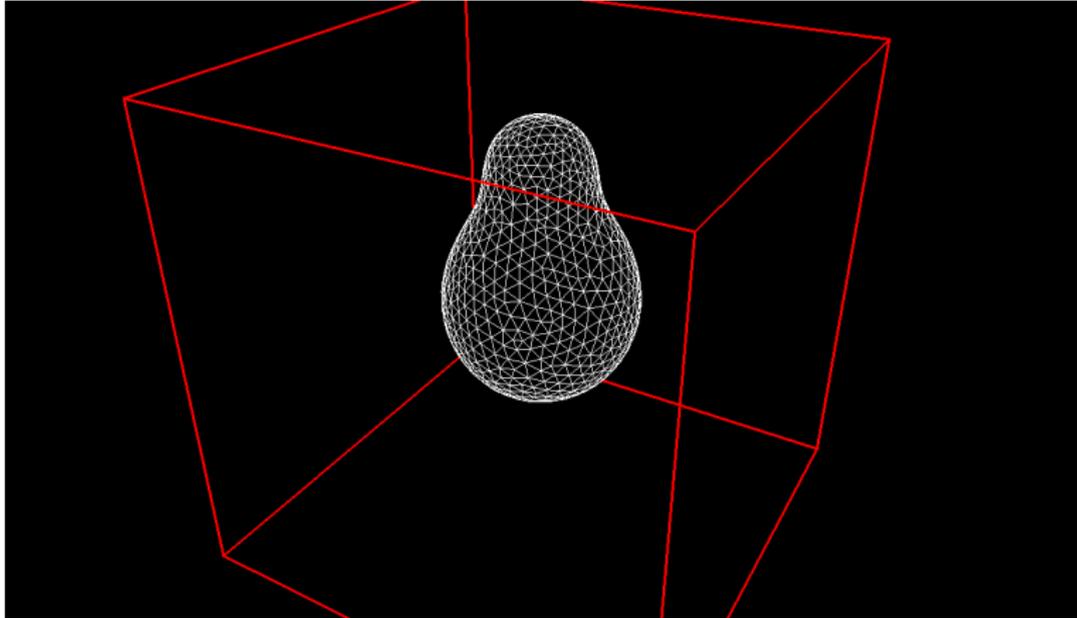
## Résultat III : exemple de la molécule $M_oH$ (itération 20)



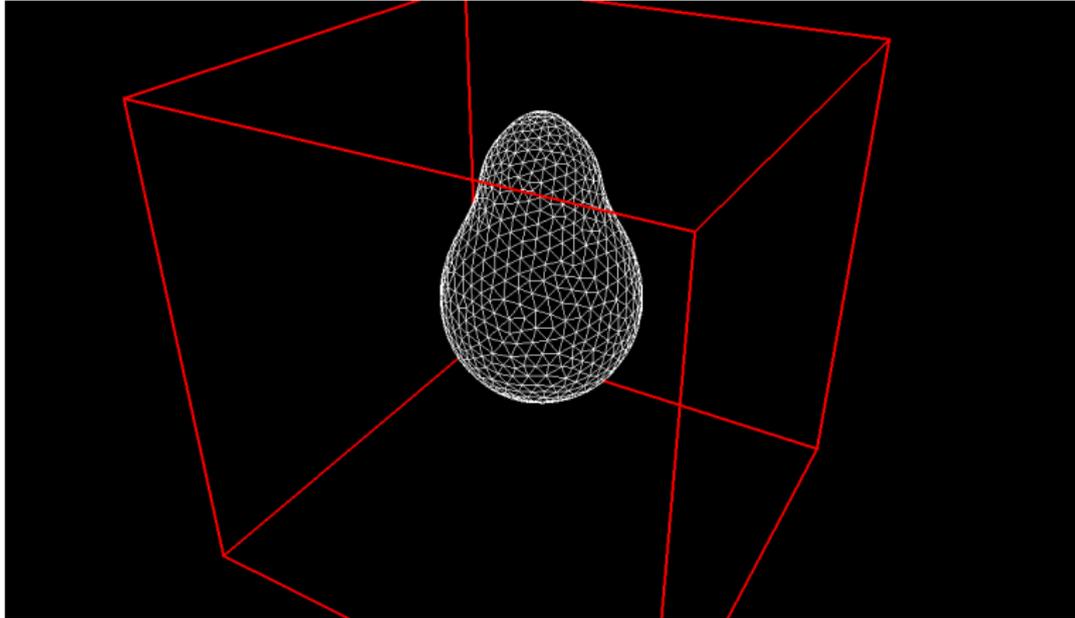
## Résultat III : exemple de la molécule $M_oH$ (itération 30)



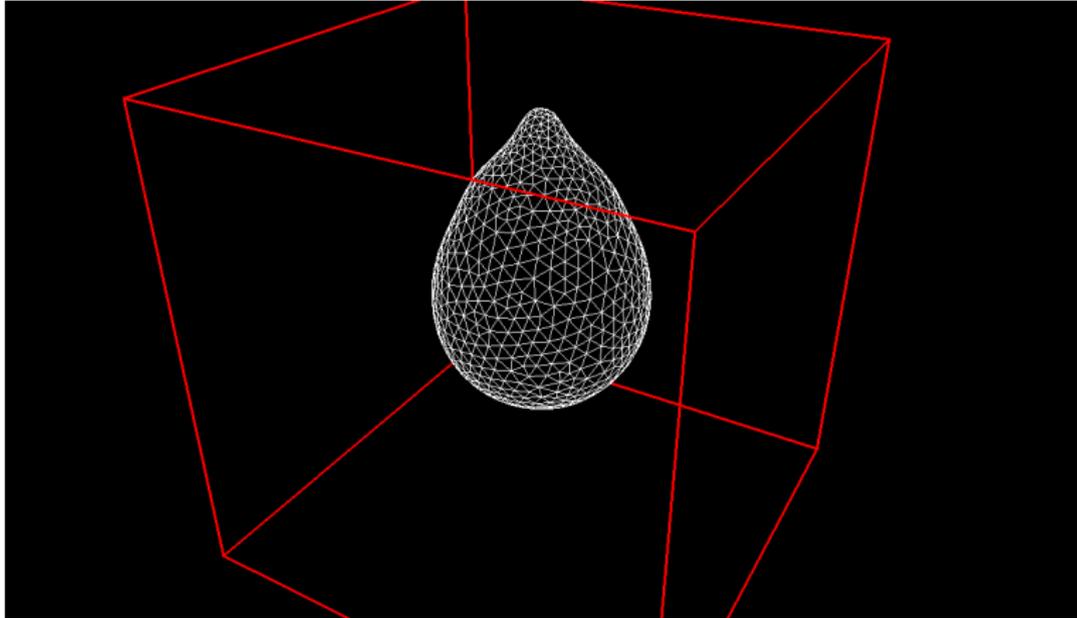
## Résultat III : exemple de la molécule $M_oH$ (itération 40)



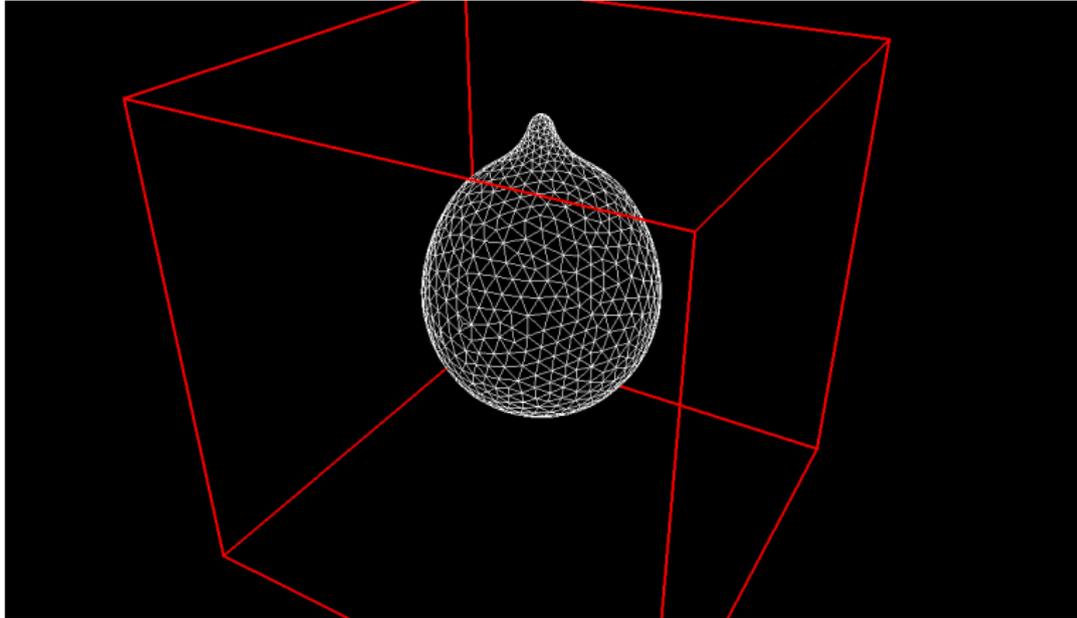
## Résultat III : exemple de la molécule $M_oH$ (itération 50)



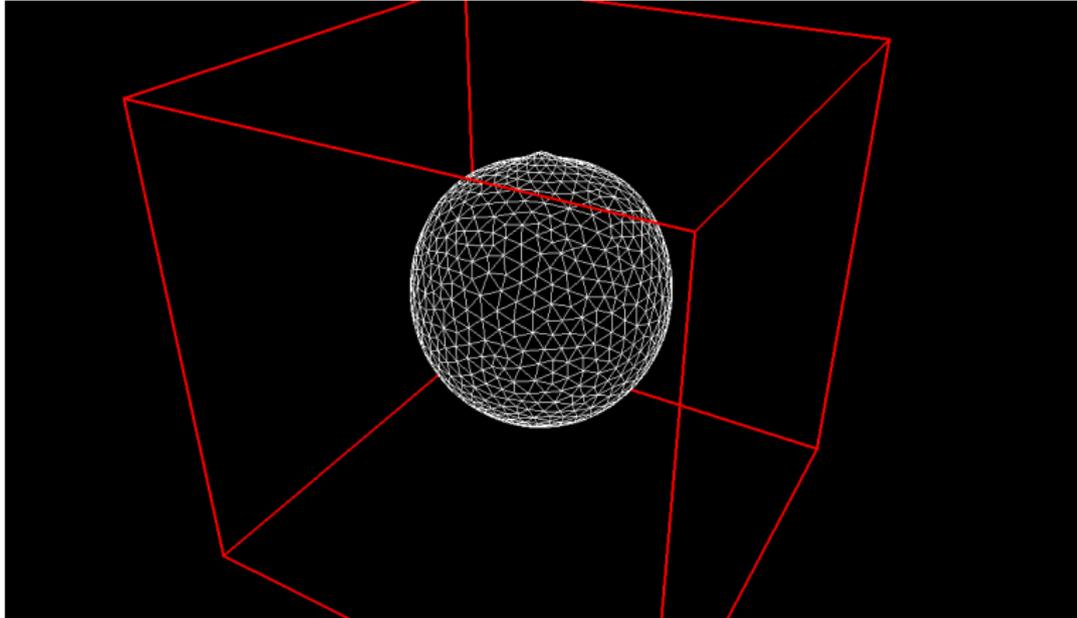
## Résultat III : exemple de la molécule $M_oH$ (itération 100)



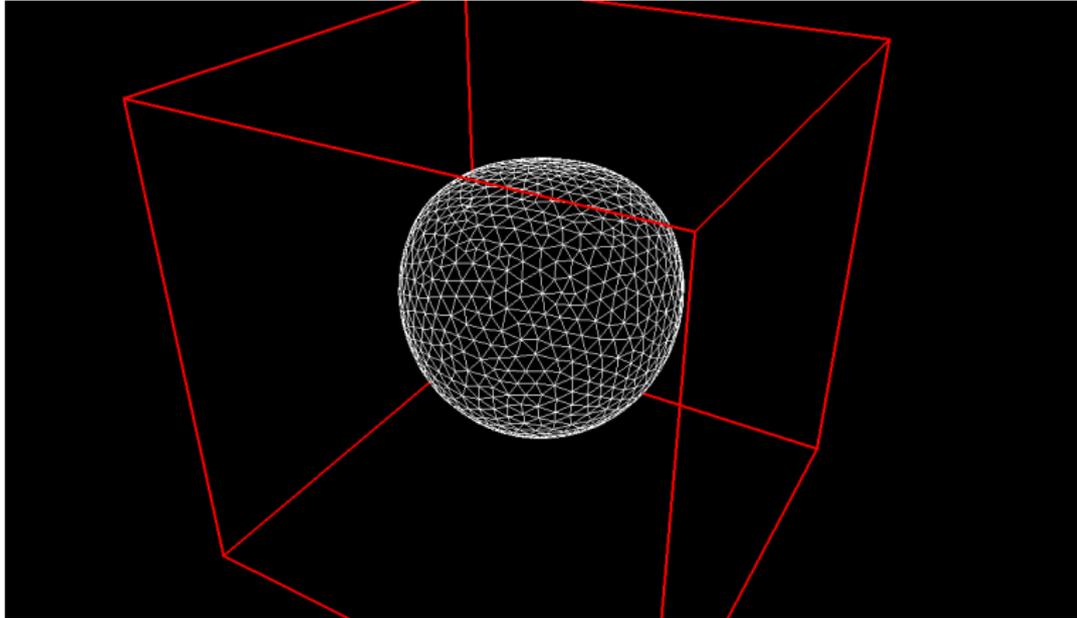
## Résultat III : exemple de la molécule $M_oH$ (itération 150)



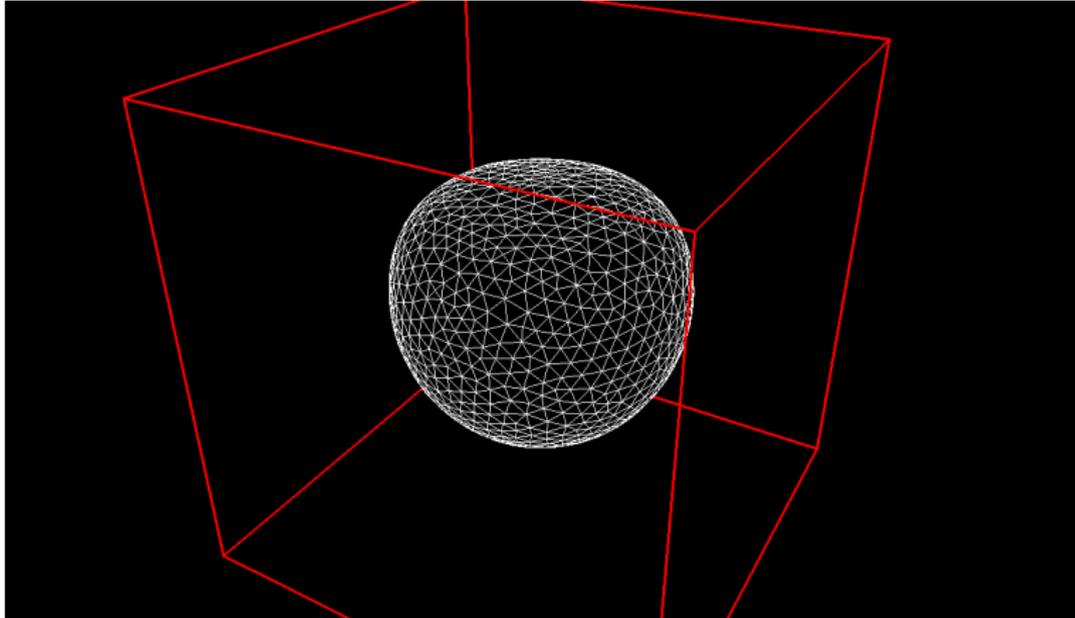
## Résultat III : exemple de la molécule $M_oH$ (itération 200)



## Résultat III : exemple de la molécule $M_oH$ (itération 250)



## Résultat III : exemple de la molécule $M_oH$ (itération 300)



## Résultat III : exemple de la molécule $M_oH$

Temps de calcul : 30 sec. par itération soit 5 min. pour 10 itérations.

