

Diagonalisation parallèle pour la théorie de la fonctionnelle de la densité en mécanique quantique

Antoine Levitt, CEA DAM/DPTA

ABINIT est un logiciel libre de calcul de structure électronique développé au CEA entre autres institutions. Il se base sur la théorie de la fonctionnelle de la densité, qui conduit à des équations aux dérivées partielles non-linéaires discrétisées sur une base d'ondes plane. Le principal goulot d'étranglement est le calcul de plus petites valeurs propres d'une matrice, le Hamiltonien. Cette matrice, non creuse, n'est pas calculée explicitement mais est utilisée uniquement via son application sur des vecteurs, qui peut être calculée efficacement par des transformées de Fourier rapides.

L'algorithme de référence dans le domaine pour le calcul des vecteurs et valeurs propres est un algorithme de gradient conjugué, qui minimise le quotient de Rayleigh tout en imposant les contraintes d'orthogonalité entre vecteurs propres. Cet algorithme limite les possibilités d'implémentation parallèle : les FFT et les orthogonalisations imposent des communications qui empêche le scaling à plus d'une centaine de processeurs pour des cas d'intérêt physique.

Je décrirai un travail de recherche visant à augmenter la scalabilité de ce code par l'utilisation de nouveaux algorithmes de recherche de valeurs propres basées sur un filtrage spectral. Parmi les difficultés du problèmes, on peut mentionner le développement d'algorithmes de filtrage, la non-orthogonalité des fonctions de base dans le formalisme Projector-Augmented Wave (PAW), et l'implémentation parallèle efficace.