

# Resolución de la ecuación de Kohn-Sham mediante discretización del espacio real con elementos finitos

## Resolution of the Kohn-Sham equation using real space discretization with finite elements

A. Soba<sup>\*1</sup>, E. A. Bea<sup>2</sup>, y G. Houzeaux<sup>3</sup>

<sup>1</sup> CNEA, CONICET. Av. Gral Paz 1499, San Martín - Buenos Aires - Argentina

<sup>2</sup> IFLYSIB, CONICET, La Plata - Buenos Aires - Argentina

<sup>3</sup> Barcelona Supercomputing Center, Barcelona - España.

Recibido 30/03/2012; aprobado 27/08/2012

En este trabajo se propone utilizar el método de elementos finitos para resolver las ecuaciones que permiten una descripción a principios de sistemas multi-electrónicos dentro del formalismo de Kohn-Sham de la teoría del funcional densidad (DFT, en inglés). Sobre la base de funciones estrictamente locales en el espacio real para representar el dominio. El mismo esquema se aplica a la resolución de la ecuación de Poisson. Utilizando una regla de integración abierta, se obtiene una matriz de masa diagonal, lo que reduce el problema generalizado de autovalores a uno simple. El tratamiento numérico propuesto fue implementado como una herramienta de cálculo, cuyo desarrollo fue dirigido especialmente a un entorno de computación de alto rendimiento, obteniendo como resultado una muy buena performance.

Palabras Claves: Ecuación de Kohn-Sham, DFT, Elementos finitos.

We present a numerical approach using the finite element method to the equations that allow to get a first-principles description of multi-electronic systems within of DFT formalisms. A strictly local polynomial functions basis set is used in order to represent the entire real-space domain. The same schema is used in the case of Hartree equation. Diagonal mass matrix is reached using an open integration rule, reducing the generalized eigenvalue problem to a single one. This framework of electronic structure calculation is embedded in a high performance computing environment obtaining a very good parallel behavior.

KeyWords: Kohn-Sham equation, DFT, Finite element method.

### I. INTRODUCCIÓN

Existen diversos tratamientos para las ecuaciones de la teoría del funcional densidad (DFT, en inglés) que describen sistemas multi-electrónicos dentro del formalismo de Kohn-Sham, donde la integración numérica se basa en métodos de discretización del espacio real. Todos estos tratamientos emplean bases de funciones estrictamente locales para discretizar el espacio, métodos de integración numérica de ecuaciones diferenciales, o una mezcla híbrida de ambos. Por ejemplo, el código SIESTA<sup>(1,2)</sup>, utiliza como base una combinación lineal de orbitales pseudo-atómicos numéricos y una discretización (malla) del espacio real para calcular el potencial y los elementos de matriz del hamiltoniano. Para esto último, utiliza el método de diferencias finitas sobre una malla cartesiana, considerando las condiciones de contorno impuestas sobre el potencial. Otro ejemplo, OCTOPUS<sup>(3)</sup>, todas las cantidades involucradas se representan sobre una malla en el espacio real, y se resuelven en forma directa mediante el método de diferencias finitas, salvo la ecuación de Poisson, que es tratado mediante una transformada rápida de Fourier.

Existen también diversos tratamientos basados en el método de elementos finitos (MEF) que se han reportado en la literatura, tanto a niveles de descripción *all-electron*<sup>(4,5,6)</sup> como pseudo-potencial<sup>(8,9)</sup>. Todos estos trabajos muestran la versatilidad del MEF aplicados a este tipo de problemas. Dentro de las ventajas del métodos se encuentra la posibilidad de utilizar una malla no uniforme<sup>(6)</sup> sin ningún tipo de cálculo adicional, refinándola<sup>(8,9)</sup> alrededor de los núcleos atómicos para aumentar la precisión; o la gran flexibilidad frente a diversas condiciones de contorno aplicadas. Así mismo al utilizar técnicas de partición de dominios, se obtiene una gran eficiencia desde el punto de vista de la computación distribuida<sup>(8,9)</sup>.

En este trabajo proponemos un tratamiento numérico general basado en MEF, haciendo foco en su precisión y versatilidad en condiciones de cómputo de alto rendimiento. Utilizando un esquema de integración abierta, se obtiene una matriz de masa diagonal, simplificando el problema de autovalores generalizado que resulta en el ciclo de auto-consistencia. Hemos obtenido una eficiencia de cómputo aceptable hasta 500 procesadores.

---

\* soba@cnea.gov.ar

## II. TRATAMIENTO NUMERICO

### Ecuación de Kohn Sham<sup>(10)</sup>

Se emplean funciones de forma locales para discretizar el operador Laplaciano de energía cinética (Eq. 1) y los diferentes términos del potencial efectivo (Eq.2).

$$\left[ -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{eff}(r) \right] \Psi_k(r) = \varepsilon_k \Psi_k(r) \quad (1)$$

$$V_{eff}(r) = V_{ion}(r) + V_{hartree}(r) + V_{xc}(r) \quad (2)$$

Siendo el potencial efectivo la suma de un término iónico (Coulombiano o pseudo-nuclear<sup>(15,16)</sup>), de Hartree, y de intercambio-correlación, basado este último en la aproximación de densidad local (LDA)<sup>(16,18)</sup>. El potencial de Hartree se obtiene de la resolución de la ecuación de Poisson, utilizando como función de carga la densidad de auto-estados<sup>(14,18)</sup> (eq. 3). Para resolver esta ecuación se utiliza el mismo mallado utilizado para resolver el Laplaciano.

$$\nabla^2 V_{hartree}(r) = -4\pi \rho(\vec{r}) \quad (3)$$

La densidad electrónica se construye a partir de las funciones de forma locales que conforman las funciones de onda solución de la ecuación de Kohn-Sham.

$$\rho(r) = \sum_{j=1}^{N_{states}} f_{occ} |\psi_j(\vec{r})|^2 \quad (4)$$

La discretización mediante el método de elementos finitos arriba a un problema de autovalores generalizado de la forma  $A \cdot x = \lambda \cdot M \cdot x$ <sup>(11,12,13)</sup>. Eligiendo adecuadamente el método de integración del término de masa, puede transformarse a una ecuación donde la matriz M es diagonal, reduciendo notoriamente la complejidad y el tiempo de cómputo. Un método de gradientes conjugados con deflación es adaptado para resolver este tipo de problemas<sup>(17)</sup>.

El cálculo se desarrolló en un entorno paralelo a través de Alya<sup>(20)</sup>, un poderoso solver de elementos finitos desarrollado en el Barcelona Supercomputing Center<sup>(21)</sup>. La paralelización se basa en el lenguaje MPI y la descomposición del dominio en la herramienta METIS<sup>(19)</sup>. Todos los cálculos se desarrollaron en MareNostrum, un super-ordenador de 10240 procesadores (94.21 teraflops), gestionada por el BSC.

## III. RESULTADOS

Las auto-energías y los auto-estados ocupados del estado fundamental electrónico son obtenidos para el caso de un átomo de Silicio y una molécula de hidruro de berilio (BeH2), ver figs. 1 y 2. En la fig. 1 se muestran para una descripción *all-electron* (todos los electrones) del átomo de Si. En la Fig. 2 se muestran para una descripción pseudo-potencial (solo electrones de valencia) de la molécula BeH2.

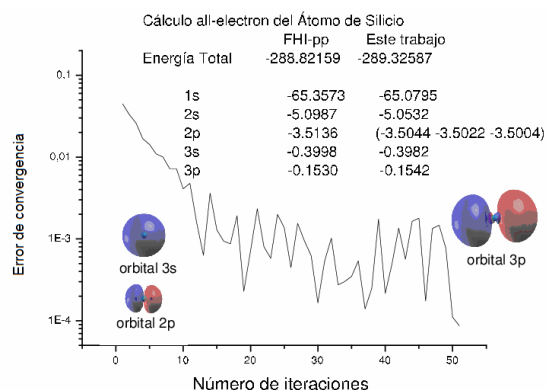


Figura 1: Descripción *all-electron* del estado fundamental del átomo de Si. Convergencia auto-consistente de la energía total.

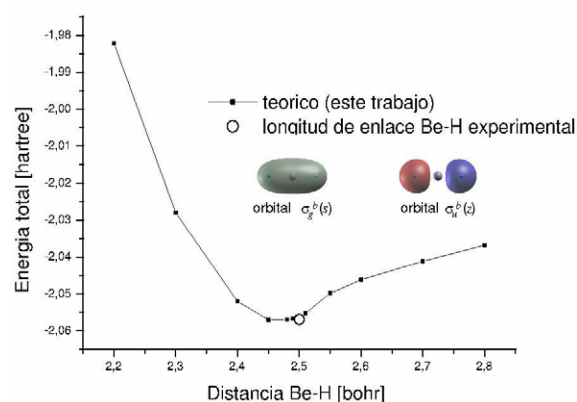


Figura 2: Descripción pseudo-potencial del estado fundamental de la molécula de hidruro de berilio (BeH2). Entalpia de formación en función de la distancia de enlace Be-H.

El ciclo de auto-consistencia se compone básicamente de la resolución del potencial generado por la densidad electrónica y de un problema de autovalores. Para el estudio de la escalabilidad del cálculo en paralelo, se empleó un sistema ficticio de moléculas de metano no interactuantes, con la idea de atender solo al problema computacional involucrado. Para ello se discretizó el dominio con hexaedros bicúbicos de 27 nodos por elemento. Primero, en el régimen de escalado fuerte, se mantuvo fijo el tamaño del sistema y se incrementó el número de partición del dominio (cada partición corresponde a un procesador). Segundo, en el régimen de escalado débil, se incrementó el tamaño de la malla para detectar la relación con el número de partición del dominio. Para el ciclo completo de auto-consistencia, en las figs. 3a) y 3b) se grafica el *speed-up* (relación entre tiempo distribuido y tiempo serial) de la ecuación de Poisson y del solver de autovalores, respectivamente. En todas las medidas, el escalado fuerte tiende a disminuir al aumentar el número de procesadores. Al incrementar el tamaño del sistema (de 2 a 3 millones de grados de libertad) con el mismo número de procesadores, se

recupera la escalabilidad. En la figura 3b) se toman mediciones de tiempos independientes para cada *solver*. Ambas medidas muestran un mejor resultado en promedio para el caso de 2M grados de libertad, pero solo hasta 512 procesadores. Superando este límite con casos de 3M grados de libertad, se obtienen mejores resultados al aumentar la cantidad de cómputo por procesador.

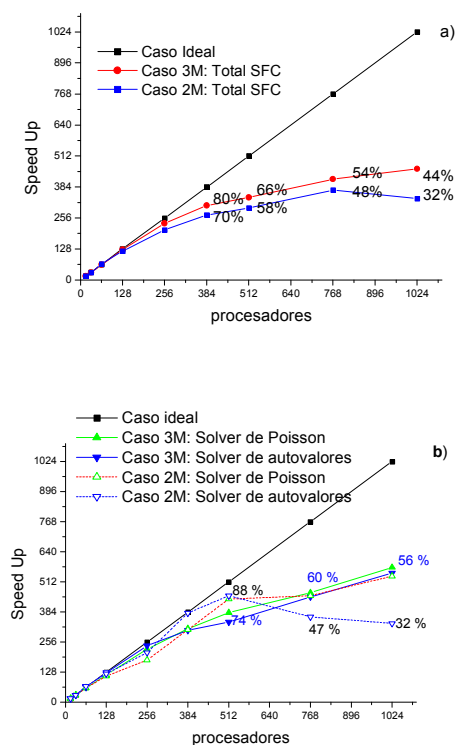


Figura 3: a) Mediciones de Speed Up para el ciclo total de auto consistencia y b) discriminado entre el solver de Poisson y el de autovalores. Ambos casos fueron realizados utilizando una malla de 2 y 3 millones de grados de libertad.

#### IV. CONCLUSIONES

En este trabajo se ha demostrado la gran versatilidad que el método de elementos finitos posee aplicado en este caso a la resolución de la ecuación de Kohn-Sham. Se obtienen resultados de gran precisión, tanto en descripciones *all-electron* como pseudo-potencial. El entorno de alto rendimiento permitió la extensión a sistemas grandes con alta eficiencia computacional. Estas medidas vienen determinadas por la utilización de una descomposición de dominios basada en MPI, lo que permite una división del costo computacional pesado por la cantidad de grados de libertad, lo que permite un balance equilibrado de la cantidad de cómputo que le

corresponde a cada procesador. La implementación, aun en desarrollo, esta siendo extendida para que permita evolucionar en el tiempo la función de onda electrónica en régimen de respuesta lineal debido a perturbaciones externas.

#### Referencias

- 1 - P. Ordejón, E. Artacho, J.M.Soler. Physical review B, 53, 16 (1996).
- 2 - C. F. Sanz-Navarro, R. Grima, A. García, E. A. Bea, A. Soba, J. M. Cela, P. Ordejón. Theor Chem Acc Volume 128, Numbers 4-6, 825-833.
- 3 - A. Castro, M. Marques, et al. Octopus: a tool for the application of time-dependent density functional theory.
- 4 - S. R. White, J.W.Wilkin, M. P. Teter. Physical Review B 39,9, (1989).
- 5 - J. E. Pask, B.M. Klein, P.A Sterne, C.Y. Fong. Computer Physics Communications 135, 1-34 (2001).
- 6 -L. Lehtovaara, V. Havu, M. Puska. Jr Chemical Physics 131, 054103, (2009).
- 7 - J.R. Chelikoswsky, N.Troullier Y. Saad. Physical Review Letters, 72, 8, (1994).
- 8 -D. Zhang, L, Shen, A. Zhou, X. Gong. Physics Letters A, 372 (2008).
- 9 -O. Certik, J. Vackar, J. Plesek. Density functional theory calculations using the finite element method. Proceedings of the Estonian Academy of Sciences, 57, 3, (2008).
- 10 - P. Hohenberg, W. Kohn, Phys. Rev 136 (1964).
- 11 - O.C. Zienkiewicz; R.L. Taylor, "El método de los elementos finitos", 4a Edición. McGrall Hill, Barcelona, España (1994).
- 12 - Klaus-Jürgen Bathe, "Finite Element Procedures", PRENTICE HALL, (1996).
- 13 - Peter Bettess, Infinite Elements. Penschaw Press. 1992.
- 14- M. Fuchs, M. Scheffler. Computer Physics communications, 119 (1999)
- 15 - N. Troullier, J.L. Martins. Physical Review B, 43, 3, (1991)
- 16 - G. Parr, W. Yang. "Density Functional Theory of Atoms and Molecules". R.. Oxford Science publications (1989)
- 17 -R. Aubry, F. Mut, R. Lohner, J. R. Cebral. Journal of Computational Physics 227 (2008).
- 18 - Kresse and Furthmuller.. Phys. Rev. B 54, 11169 (1996).
- 19 - METIS, family of multilevel partitioning algorithms: <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/views/metis>.
- 20 - G. Houzeaux, M. Vazquez, R. Aubry, J.M. Cela. Journal of Computational Physics 228 (2009)
- 21 - www.bsc.es