

Título em Português:	Implementação e manutenção de código computacional em \textit{framework} de cálculo de estrutura eletrônica de semicondutores
Título em Inglês:	Implementation and maintaining code in a semiconductors' electronic structure calculation framework
Autor:	Ian Giestas Pauli
Instituição:	Universidade de São Paulo
Unidade:	Instituto de Física de São Carlos
Orientador:	Guilherme Matos Sipahi
Área de Pesquisa / SubÁrea:	Física da Matéria Condensada
Agência Financiadora:	CNPq - PIBITI

Implementação e manutenção de código computacional em framework de cálculo de estrutura eletrônica de semicondutores

Ian Giestas Pauli, Guilherme Matos Sipahi

IFSC - USP São Carlos

iangiestas@usp.br

Objetivos

O LFC (Laboratório de Física Computacional) ao longo de sua história vem trabalhando em modelos efetivos, usando o método $k \cdot p$ para descrever hetero-estruturas e super-redes. Para tanto, foi criado um software em Fortran para realizar os cálculos de estrutura eletrônica destes sistemas físicos. Possuindo aproximadamente 100 mil linhas escritas em Fortran e 20 anos de existência, o código acabou acumulando uma série de problemas, tornando a manutenção e a implementação de novas funcionalidades uma tarefa muito complicada, sendo então necessária uma revitalização do código original.

Métodos e Procedimentos

Usando técnicas de orientação a objetos e práticas modernas em Fortran e gerenciamento de projetos, este trabalho busca gerar uma *API* (interface para programadores), concisa e de utilização intuitiva. Foram feitas discussões semanais em conjunto com o orientador, a fim de melhorar a arquitetura do projeto, aproveitando as técnicas existentes no código antigo, sempre reavaliando-as quando necessário. Para validar o código foram testados sistemas de trabalhos anteriores do grupo, com o objetivo de checar se os métodos de resolução e construção reproduzem os resultados esperados.

Resultados

Com o código atual, já é possível reproduzir vários dos trabalhos passados, além de agora contar com o método de solução de sistemas

lineares desenvolvido no laboratório, que utiliza como base o **LOBPCG** e o *Folded Spectrum Method*, que em conjunto com técnicas de construção e multiplicação matriz feitas parcialmente, permitem solucionar sistemas que não caberiam na memória. A forma de compilação foi alterada para suportar o *fpm* - *fortran package manager* que facilita a incorporação da biblioteca em outros códigos com a mesma facilidade existente em outras linguagens, como Python (pip) ou Rust (Cargo).

Conclusões

A utilização de orientação a objetos e técnicas modernas de programação tornou a utilização da biblioteca por um programador algo mais fácil, no entanto ainda é necessário elaborar uma interface para usuários comuns (na forma de um programa), isso permitirá a popularização do método empregado e permitirá o uso por colaboradores que não são versados em programação.

Referências Bibliográficas

- 1 CLERMAN, N. S.; SPECTOR, W. Modern Fortran: style and usage. New York: Cambridge University Press, 2011.
- 2 GOLUB, G. H.; VAN LOAN, C. F. Matrix computations. 4th ed. Baltimore: Johns Hopkins University Press, 2013.
- 3 MEYER, C. Matrix analysis and applied linear algebra. Philadelphia: SIAM, 2000

Implementation and maintenance of computational code in semiconductor electronic structure calculation framework

Ian Giestas Pauli, Guilherme Matos Sipahi

IFSC - USP São Carlos

iangiestas@usp.br

Objectives

The LFC (Computational Physics Laboratory) has been working throughout its history in effective models, using the $k \cdot p$ method to describe hetero-structures and super-networks. For that, a software in Fortran was created to perform the calculations of the electronic structure of these physical systems. With approximately 100,000 lines written in Fortran and 20 years of existence, the code ended up accumulating a series of problems, making the maintenance and implementation of new features a very complicated task, requiring a revitalization of the original code.

Methods and Procedures

Using object-oriented techniques and modern practices in Fortran and project management, this work seeks to generate an *API* (interface for programmers), concise and intuitive to use. Weekly discussions were held together with the advisor, in order to improve the project's architecture, taking advantage of existing techniques in the old code, always re-evaluating them when necessary. To validate the code, systems from the group's previous work were tested, with the aim of checking if the resolution and construction methods reproduce the expected results.

Results

With the current code, it is already possible to reproduce several of the past works, relying on the method developed by laboratory that solves linear systems, using as basis **LOBPCG** and the *Folded Spectrum Method*, alongside with

elaborate construction techniques and partially done matrix multiplication, that allows you to solve systems that would not fit in memory otherwise. The compilation process has been changed to support *fpm - fortran package manager* that facilitates the incorporation of the library in other codes with the same ease existing in other languages, such as Python (pip) or Rust (Cargo).

Conclusions

The use of object-oriented and modern programming techniques made it easier for a programmer to use the library, however it is still necessary to develop an interface for common users (in the form of a program), this will allow the popularization of the method employed. and will allow use by non-programming-savvy contributors.

Bibliographical References

- 1 CLERMAN, NS; SPECTOR, W. Modern Fortran: style and usage. New York: Cambridge University Press, 2011.
- 2 GOLUB, GH; VAN LOAN, CF Matrix computations. 4th ed. Baltimore: Johns Hopkins University Press, 2013.
- 3 MEYER, C. Matrix analysis and applied linear algebra. Philadelphia: SIAM, 2000