

## Zusammenfassung

Computer-Simulationen werden für die Entwicklung neuer Materialien immer wichtiger. Dies ist vor allem auf die Vertiefung unseres mathematisch-physikalischen Verständnisses der Materialien sowie aktueller Fortschritte in der Computer-/Informations-Technologie (IT) zurückzuführen. Ein entscheidender Beitrag der computerorientierten Physik zur Materialforschung besteht in der Entwicklung hochoptimierter Methoden, um Materialeigenschaften mit hoher Genauigkeit modellieren zu können. Die Beschreibung vieler Materialeigenschaften gelingt nur mit einer nahtlosen Beschreibung in allen relevanten Längen- und Zeitskalen. Deshalb stehen skalenübergreifende Algorithmen (multi-scale) und Algorithmen, die verschiedene Physikdisziplinen miteinander verbinden (multi-physics), im Fokus der aktuellen Forschung. Aufgrund des hohen Rechenbedarfs, den diese Methoden mit sich bringen, und der enormen Betriebskosten von Hochleistungsrechenzentren, wird die Optimierung dieser Algorithmen immer entscheidender. Neue komplexe Computer-Technologien erschweren jedoch die Entwicklung/Optimierung neuartiger Algorithmen zunehmend. Dadurch entsteht zwischen Physik und IT eine sich vergrößernde Lücke, die eine neue interdisziplinäre Forschungsausrichtung eröffnet.

Der Gegenstand dieser Arbeit ist die Entwicklung und Implementation einer neuen physikalischen Meta-Sprache, welche die Entwicklung von Algorithmen im Bereich des Computerorientierten Material-Designs (CMD) wesentlich vereinfacht. (i) Moderne Verfahren wurden in dieser Arbeit entwickelt und angewendet, um Sprachelemente zu definieren, mit denen algebraische Ausdrücke hocheffizient auf modernen Rechnerarchitekturen dargestellt und ausgeführt werden können. (ii) Quantenmechanische Algorithmen sind essentiell im Bereich des CMD. Die neue Meta-Sprache unterstützt daher die Dirac-Schreibweise. Dadurch können solche Algorithmen nun in der nativen Sprache der Quantenmechanik intuitiv implementiert werden. (iii) Die Sprache wird durch Elemente abgerundet, mit denen Bewegungsgleichungen einfach und effizient dargestellt werden können. Diese sind wichtig für Strukturalgorithmen wie beispielsweise Molekulardynamik.

Ein wesentliches Ziel dieser Arbeit war es, eine intuitive Programmierschnittstelle für Algebra und Physik mit einer hohen Ausführungsgeschwindigkeit des erzeugten Programmes zu kombinieren. Eine der grössten Herausforderungen bestand darin, dass der Compiler den algebraischen und sogar den quantenmechanischen Kontext „verstehen“ muss, um einen effizienten Maschinencode generieren zu können. Nur so ist es möglich, dass trotz der intuitiven Sprache das erzeugte Programm (mindestens) genauso effizient wie ein manuell-optimierter Code ist. Dies wurde durch die Ableitung neuer hier entwickelter Verfahren ermöglicht, wie z.B. einem vollautomatischen BLAS/LAPACK-Funktionsmapping, dem automatischen Mapping algebraischer Typen sowie anspruchsvoller Template-Techniken. Details wie Speichermanagement, dem effizienten Ausnutzen der Level Caches oder arithmetischer Pipelines mussten früher von Physikern manuell angesteuert werden. Dieser Prozess konnte nun vollständig auf die Seite des Compilers geschoben werden. Mit dem neuen Verfahren der *virtuellen Templates* kann der Compiler nun sogar den quantenmechanischen Kontext von Dirac-Elementen erkennen. Während Dirac-Projektoren, Skalarprodukte mit Metriken, Dirac-Operatoren und Dirac-Vektoren syntaktisch sehr ähnlich aussehen, erlaubt dieses Verfahren das Erkennen der Terme, um hocheffizienten Maschinencode zu erzeugen.

Um die Stärken dieses Ansatzes zu verdeutlichen, wurde basierend auf der neuen Meta-Sprache das ebene-Wellen-Framework S/PHI/nX entwickelt. Der S/PHI/nX-Quellcode ist bemerkenswert kurz und transparent, was die Verwaltung des Paketes sowie die Implementation neuer moderner Methoden deutlich vereinfacht. Benchmarks, die S/PHI/nX anderen Simulationscodes gegenüberstellt, haben gezeigt, dass eine vergleichbare Genauigkeit und sehr hohe Performance erreicht wurden.

Da die Berechnung thermodynamischer Eigenschaften von *ab-initio*-Methoden hohe Anforderungen an die Rechenleistung sowie Genauigkeit stellen, ist die Berechnung solcher Eigenschaften für eine grosse Auswahl technisch wichtiger III-V-Halbleiter ein perfekter Benchmark, um die Effizienz von S/PHI/nX zu demonstrieren. Generelle Trends der Phonon-Spektren, der Lage und der Amplituden der thermischen Anomalien dieser Systeme konnten mit den durchgeführten Rechnungen bestätigt werden. Wir haben LDA- und PBE-Daten mit dem Experiment verglichen und konnten verifizieren, dass LDA eine zuverlässige Basis für die Berechnung dieser Materialeigenschaften für die Klasse von III-V-Halbleitern in der Zinkblende-Phase ist.

Mit S/PHI/nX wird ein hoch-effizientes Simulationspaket für CMD-Anwendungen vorgestellt, welches bereits erfolgreich für eine Vielzahl von Berechnungen unterschiedlicher Systeme eingesetzt wurde. Sein modularer Ansatz erlaubt eine einfache Implementation zukünftiger Methoden.