

## Purificação da Matriz Densidade Usando Operações de Álgebra Linear Esparsas baseadas em Orbitais Moleculares Localizados para GPUs.

Júlio Daniel de Carvalho Maia<sup>a</sup> (IC), Gerd Bruno Rocha<sup>b</sup> (PQ)

<sup>a</sup> [juliodaniel.carvalho@gmail.com](mailto:juliodaniel.carvalho@gmail.com)

<sup>b</sup> [gbr@quimica.ufpb.br](mailto:gbr@quimica.ufpb.br)

Keywords: Escalonamento Linear, PDM, GPU, matrizes esparsas e métodos semiempíricos

### INTRODUÇÃO

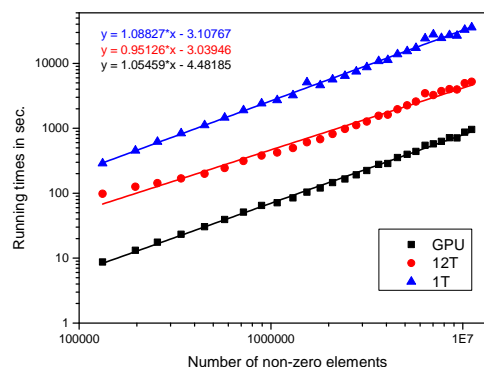
Métodos de estrutura eletrônica baseados na purificação da matriz de densidade (PDM, do inglês *Purification of Density Matrix*) são empregados quando se deseja o cálculo químico quântico completo de sistemas com muitos átomos. Nesses métodos, operações de multiplicações de matrizes (ex.  $P^2 = P \times P$ ) são necessárias durante o *updating* da matriz densidade no SCF. Nesse trabalho algoritmos paralelos para GPU e CPU são propostos para a multiplicação de matrizes esparsas armazenadas no formato SVBR (*Symmetrical Variable Block Row*) para a realização dessa etapa através das equações do algoritmo SP2 [Cawkwell, M. J., *et al*, J. Chem. Theory Comput. 2012, 8, 4094–4101] e usando métodos semiempíricos implementados no programa MOPAC [Maia, J. D. C., *et al*, J. Chem. Theory Comput. 2012, 8, 3072–3081].

### METODOLOGIA

Todos os cálculos foram executados utilizando um processador Intel® Xeon® E5-2620, 12 núcleos, de 2.0 GHz e 64GB de RAM. A GPU utilizada foi uma NVIDIA Tesla K20c com 5.0GB de VRAM dedicada. Para testar a performance dos nossos algoritmos, usamos como *benchmark* um conjunto de caixas de simulação esféricas contendo moléculas de água, rotuladas de  $W_n$ , onde  $n$  representa o raio em angstroms da caixa ( $n = 10$  a  $37\text{Å}$ ). Rotulamos de: i) **GPU**, para os cálculos que foram executados na GPU; ii) **12T**, para os que utilizaram os 12 núcleos do processador; iii) **1T**, para o cálculo serial de referência.

### RESULTADOS E DISCUSSÕES

A figura 1 mostra o escalonamento do algoritmo proposto para a atualização da matriz densidade via o método PDM para os sistemas usados como *benchmark*.



**Figura 1.** Somatório dos tempos de todas as chamadas do procedimento PDM durante a convergência do SCF para caixas com água,  $W_n$ , onde,  $n = 10$  até  $37\text{Å}$ , em escala log-log.

De acordo com os resultados da figura 1, percebemos que todos os protocolos escalonam o tempo de execução do procedimento PDM de forma linear com o aumento do número de elementos não-zeros. Podemos notar também que as equações do método SP2 resolvidas através do algoritmo de multiplicação de matrizes esparsas para GPUs possui um desempenho superior quando executado na CPU com **1T** e **12T**.

### CONCLUSÃO

Com essa etapa finalizada podemos partir para acelerar outras partes do código do MOPAC, como a montagem da matriz de Fock e o cálculo de integrais de dois elétrons e, assim, aplicar os métodos semiempíricos para a modelagem de sistemas moleculares de grande complexidade, tais como proteínas e polímeros.

### ACKNOWLEDGMENTS

Os autores agradecem a PRONEX-FACEPE, CNPq e CAPES.