

КВАНТОВАЯ ХИМИЯ НА ГРАФ. КАРТАХ

И.Е. Захаров

Приложения Вычислительной и Квантовой Химии характеризуются использованием мощных параллельных и распределенных вычислительных ресурсов. До 30% счетного времени современных суперкомпьютеров (по статистике мировых вычислительных центров) уходит на получение результатов в этой области моделирования.

Мы показываем, что использование новых численных методов для решения базовой модели Квантовой Химии (Уравнения Шредингера), приводит к качественно новым результатам. Так же, новые алгоритмы позволяют существенно увеличить эффективность счета из-за линейной масштабируемости этих алгоритмов. Адаптация этих алгоритмов на графические ускорители осуществлена для получения доступа к большому объему вычислительных ресурсов.

Таким образом, закладывается база для точного предсказания свойств наноматериалов, получения новых лекарств и других продуктов вычислений Квантовой Химии.