

# ПРИМЕНЕНИЕ РАЗЛИЧНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОРГАНИЗАЦИИ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ РАСЧЕТА УГЛЕРОДНЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ

А.В. Высоцкий, Д.М. Доронин, А.Н. Савин, А.С. Тараканов, Н.Е. Тимофеева, К.И. Шоломов

Одной из быстроразвивающихся областей современной науки является углеродная наноэлектроника, которая охватывает все направления электроники, основывающиеся на использовании углеродных наноструктурных материалов (углеродных нанотрубок, фуллеренов, графена и его модификаций, а также других углеродных нанообъектов), обладающих уникальными электронными свойствами (высокая эмиссионная способность углеродных нанотрубок и т.д.).

Основными задачами углеродной наноэлектроники являются разработка материалов элементной базы и исследование физических явлений, составляющих основу работы электронных наноприборов. При этом одним из средств решения этих задач является компьютерное моделирование, позволяющее получить необходимые данные об атомной структуре и свойствах углеродных структур [1].

В настоящее время разработаны различные теоретические методы исследования наноструктур. Одним из них является квантово-химический метод сильной связи, относящийся к классу полуэмпирических [1]. Он основан на решении уравнения Шредингера для атомов и молекул с использованием определенных приближений и упрощений. На первом шаге проводится вычисление интегралов межэлектронного взаимодействия. При увеличении размеров молекулы эти интегралы увеличиваются (следовательно, увеличивается время вычислений). Далее осуществляется оптимизация координат атомов структуры с целью поиска стабильной конфигурации, обладающей минимальной полной энергией.

Как показала практика, вычислительных возможностей одного компьютера, как правило, не хватает для расчёта и оптимизации в разумное время характеристик наноструктур, состоящих уже из нескольких десятков атомов.

Данная работа посвящена исследованию возможности применения различных технологий параллельных вычислений для расчёта характеристик и оптимизации углеродных наноструктур квантово-химическим методом сильной связи.

В работе представлены результаты распараллеливания алгоритма расчёта энергетических характеристик наноструктур методом сильной связи на вычислительной системе с общей памятью с помощью технологий корпорации Intel [2] и корпорации NVIDIA [3].

Распараллеливание задачи поиска глобального минимума полной энергии наноструктур путём подбора координат их атомов, осуществлялось с помощью методов глобальной оптимизации, предложенных в [4, 5].

Распараллеленные с использованием MPICH2 [6] варианты алгоритмов глобальной оптимизации, выполнялись на отдельных узлах параллельной вычислительной системы с разделённой памятью. При этом в качестве целевой функции выступает выражение энергии наноструктуры, а параметрами оптимизации являются координаты атомов, составляющих рассматриваемую структуру.

В результате применения технологий параллельных вычислений удалось осуществить расчёт и оптимизацию углеродных наноструктур, содержащих несколько тысяч атомов.

## ЛИТЕРАТУРА:

1. О.Е. Глухова, И.В. Кириллова, И.Н. Салий, М.М. Слепченко, А.Н. Савин, Д.С. Шмыгин «Теоретические методы исследования наноструктур», Вестник СамГУ, г. 2012 № 9
2. «Кратко о технологии OpenMP», <http://software.intel.com/ru-ru/articles/About-OpenMP/>
3. А.М. Казенов «Основы технологии CUDA», Компьютерные исследования и моделирование, г. 2010 № 3
4. A.A. Eroftiev, N.E. Timofeeva, A.N. Savin. Parallel Computing in Application to Global Optimization Problem Solving // Grid and Visualization Systems: MIPRO, 2011 Proceedings of the 34th International Convention. — Zagreb, Croatia: DENONA, 2011. — P. 185–190.
5. А.Н. Савин, Н.Е. Тимофеева. Применение алгоритма оптимизации методом имитации отжига на системах параллельных и распределённых вычислений // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Математика. Механика. Информатика. — 2012. — Т. 12. Вып. 1. — С. 110–116.
6. «Message Passing Interface», <http://www.mcs.anl.gov>