

Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики



Параллельное решение задачи Хартри-Фока для молекулы графена: масштабируемость и гиперэффективность

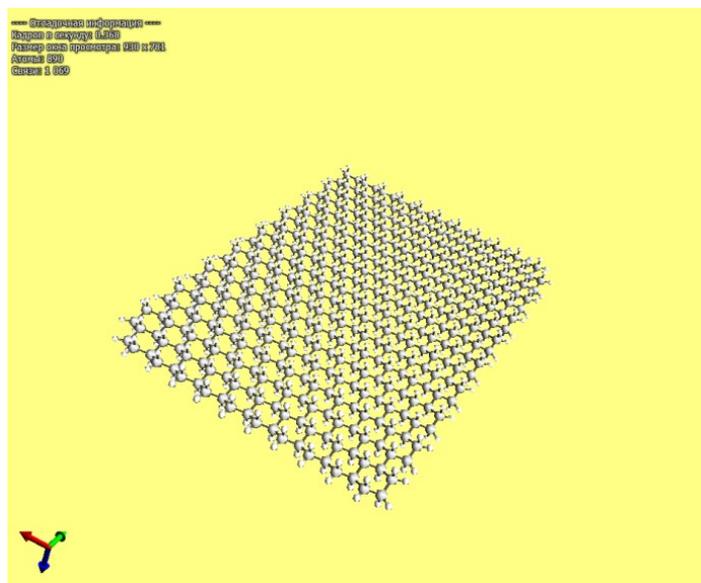
А.И. Свитенков, В.Г. Маслов, А.В. Бухановский

Новороссийск, 2013

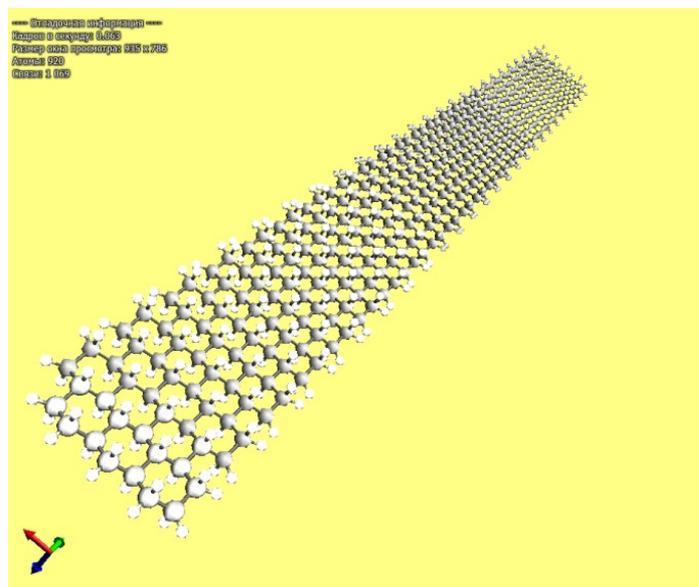
задачи

Расчет электронных и электромеханических свойств графеновых и графановых структур размером порядка **100 тыс. атомов**:

- Электронная плотность, орбитальные энергии, и пр.
- Спектральные характеристики (эмиссия/поглощение света в зависимости от длины волны).



Пластина



Лента

Применение полуэмпирических методов квантовой химии (например, ZINDO/1)

Формальная постановка задачи



Уравнение Хартри-Фока (приближение независимых электронов)

$$\hat{F}_i \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r})$$

$$\hat{F} \equiv -\frac{1}{2} \nabla^2 + (2\hat{J} - \hat{K})$$

$$\hat{K} \psi_k(\mathbf{r}) \equiv \sum_{j \neq k} \left(\int \frac{\psi_j^*(\mathbf{r}') \psi_k(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dV' \right) \psi_j(\mathbf{r})$$

$$\hat{J} \psi_j(\mathbf{r}) \equiv \sum_i \left(\int \frac{\psi_i(\mathbf{r}')^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dV' \right) \psi_j(\mathbf{r})$$

- \mathbf{r} – радиус-вектор
- $\psi_k(\mathbf{r})$ и ε_k - k -я орбиталь и ее энергия соответственно
- \hat{J} - оператор кулоновского взаимодействия с усредненным полем электронов
- \hat{K} - обменный оператор

Основной метод решения – сведение к задаче на собственные значения

$$\psi_j = C_{ij} \varphi_i$$

$$P_{ij} = \sum_{k=1}^N C_{ki} C_{kj} \quad \text{- матрица электронной плотности}$$

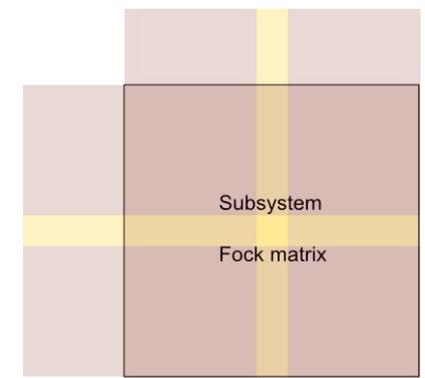
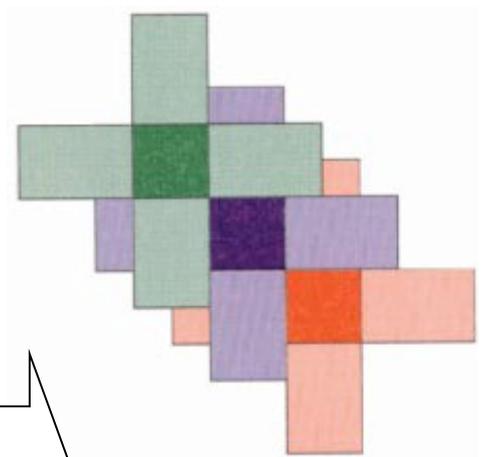
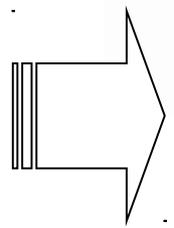
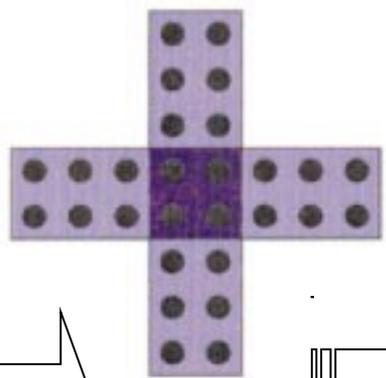
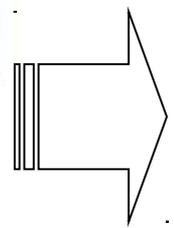
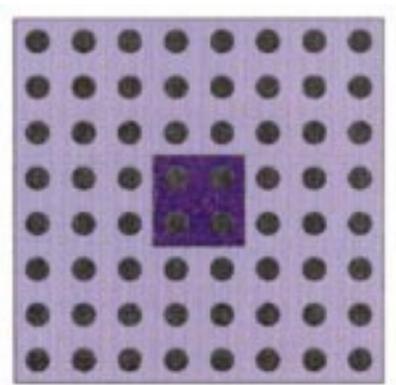
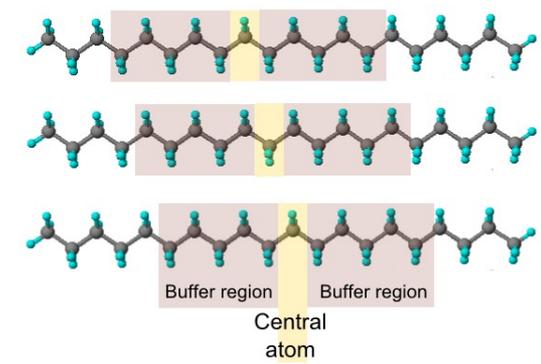
$$\sum_{j=1}^N F_{ij} C_{kj} = \varepsilon_k C_{ki} \quad \text{- матрица Хартри-Фока}$$

Задача самосогласования: итеративное решение задачи на собственные значения с матрицей, зависящей от собственных функций $\sim O(N^3)$

Линейно-масштабируемый DC-алгоритм

DC (Divide and Conquer) – «разделяй и властвуй»

- 1) Разделение общей ХФ-матрицы на блоки: «центральные атомы + буферная зона»
- 2) Решение ПСЗ для каждого из блоков
- 3) Расчет матрицы электронной плотности для блоков
- 4) Построение общей матрицы электронной плотности



Сложность алгоритма $O(N)$