

6

Conclusões e Trabalhos Futuros

Os métodos iterativos empregados na química quântica, como a Teoria do Funcional da Densidade, são computacionalmente dispendiosos devido ao grande número de integrais realizadas para obter-se o valor da energia total do sistema físico em estudo. A dificuldade aumenta com o número de átomos e elétrons presentes na simulação. A energia de um sistema físico é, em geral, dividida em cinco termos principais. Com o objetivo de investigar o apoio das GPUs na aceleração de partes dos cálculos envolvidos na DFT, o termo do cálculo do potencial e da energia de Hartree foi alterado para execução em GPU. Métodos de mecânica quântica geralmente possuem um código fonte muito extenso e a codificação usando CUDA é trabalhosa e necessita de cuidados especiais. Entre estes cuidados, temos a memória compartilhada que está sujeita a conflitos de bancos que precisam ser resolvidos manualmente pelo programador para evitar a redução de desempenho. O acesso à memória global, que não possui *cache*, precisa ser projetado para tirar proveito da capacidade de leitura de blocos de dados de 8, 16 ou 32 palavras, em paralelo, em uma única operação. As *threads* de GPUs empregam paralelismo finamente granulado e, preferencialmente, devem ser criadas em múltiplos de 32. Outro ponto importante é minimizar as transferências de memória através do barramento PCI Express, portando partes do código que atuam sobre um mesmo conjunto de dados.

Neste sentido, foram estudadas as equações fundamentais da Teoria do Funcional da Densidade, permitindo identificar trechos de código com características adequadas para o emprego do paralelismo de dados oferecido pelas Unidades de Processamento Gráfico. Entre os algoritmos de código fonte aberto disponíveis, optou-se por fazer uso do SIESTA, o qual foi desenvolvido visando à eficiência computacional.

As integrais para cálculo da energia cinética dos elétrons e o cálculo da contribuição para a energia total relativo ao termo não-local do pseudopotencial são adequados para aceleração por GPUs. Os termos da energia de troca e

correlação, o potencial e a energia de Hartree e a parte local do pseudopotencial do hamiltoniano do SIESTA são calculados sobre uma mesma matriz de densidades.

O termo referente ao potencial e a energia de Hartree foi acelerado através da execução em GPUs, conseguindo-se um ganho em torno de 30 vezes. A reordenação de dados em GPU apresentou um ganho inferior às demais funções para GPU, contudo sua importância é devida à redução do volume de transferências de memória através do barramento PCI Express. O cálculo do dipolo elétrico pode ser acelerado até duas ordens de grandeza na GPU. A continuação do trabalho deveria se concentrar prioritariamente nas integrais para o cálculo da energia relativo ao termo local do pseudopotencial do SIESTA e no cálculo da energia de troca e correlação. Assim, a matriz de densidade poderia ser inicializada e trabalhada na memória do dispositivo, reduzindo drasticamente as transferências de memória entre CPU e GPU, pois seriam transferidos somente os parâmetros de inicialização e os resultados das integrais.

Cálculos da energia e da estrutura de bandas de nanotubos e da otimização da geometria estrutural de fulerenos foram realizados usando a versão seqüencial original e a versão alterada para a execução de trechos de código do SIESTA em GPUs. Estes cálculos foram realizados para comprovar a eficiência das GPUs em calcular o termo do potencial de Hartree, a energia de Hartree e o dipolo elétrico.

A aplicação de técnicas inteligentes (redes neurais, algoritmos genéticos e programação genética), em trabalhos futuros, para redução do esforço necessário para obtenção de código fonte eficiente para GPUs contribuiria para facilitar o desenvolvimento de aplicações. Neste caso, uma ferramenta deveria ser projetada para administrar o uso das memórias, evitando conflitos de banco na memória compartilhada e minimizando o desperdício de largura de banda da memória global. Um desafio a ser enfrentado seria a coordenação da execução concorrente de um grande número de *threads* leves de forma automática, sem perder em eficiência. Sua utilização para a evolução de uma Transformada de Fourier mais eficiente que a atualmente disponibilizada pela NVIDIA, poderia ser empregada na resolução da equação de Poisson do SIESTA, para melhorar a aceleração obtida no termo do potencial e da energia de Hartree.

A continuação do trabalho, alterando o código fonte para execução em GPUs dos demais termos sugeridos, poderia trazer reduções significativas do

tempo total de cálculo do programa SIESTA. Isto contribuiria para as pesquisas realizadas na química computacional e na física dos materiais, reduzindo o tempo de espera por previsões precisas baseadas em cálculos teóricos *ab initio*.