



Paralelización de integrales multidimensionales

Raúl Quintero-Monsebaiz y Alberto Vela

Departamento de Química, Centro de Investigación y Estudios Avanzados
Av. Instituto Politécnico Nacional 2508, Ciudad de México 07360, México.

Se evalúan diversos métodos numéricos y algoritmos computacionales para la evaluación de las integrales multicéntricas que aparecen en el estudio de la estructura electrónica, particularmente en la teoría del funcional de la matriz de densidad[1].

La búsqueda de los algoritmos considera dos clases de métodos de integración, que son: fórmulas acotadas de Newton y cuadraturas gaussianas. En las primeras, no hay flexibilidad para seleccionar los puntos de la cuadratura y en las segundas se hace una búsqueda tanto de los pesos como de la ubicación de las abcisas[2]. Se discute con especial cuidado como realizar integraciones multidimensionales con singularidades como las se tienen en las ERIS[2][3].

Los algoritmos de integración numérica se diseñaron y programaron en GPUs de propósito general utilizando el lenguaje CUDA.

1. Mario Piris, Peter Otto, One-Particle Density Matrix Functional for Correlation in Molecular Systems, *Int. J. Quantum Chem*, **94**, 317-323,(2003).
2. P. J. Davids y P Rabinowits, *Methods of Numerical Integration*, Segunda Edición, Dover 2007, p 344-415.
3. J.C. Romao y R. Vileta Mendes, Algorithms for multidimensional numerical integration with singularities, *Comput. J.*, **21**, 4,(1977)