



EVALUACIÓN DE INTEGRALES DE REPULSIÓN ELECTRÓNICA DE TRES CENTROS EN UNIDADES DE PROCESAMIENTO GRÁFICO

Xiaomin Huang¹, Jorge Martín del Campo Ramírez¹

¹Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México; México
e-mail: huangchenxiaomin@gmail.com

Uno de los pasos más costosos de un cálculo de estructura electrónica es la evaluación de las integrales de repulsión electrónica. Dichas integrales son de cuatro centros, pero se pueden simplificar a integrales de tres y dos centros, empleando una densidad auxiliar generada a partir de funciones gaussianas. Aunque el número de integrales puede aumentar, la cantidad total de operaciones disminuye¹. Además, se elimina la contracción sobre el $|\text{ket}\rangle$, porque la densidad auxiliar no tiene contracción. Esto da lugar a un caso de muchos datos independientes que se pueden procesar en paralelo en unidades de procesamiento gráfico (GPU). El número de núcleos de trabajo que tienen las GPU reducen los tiempos de cálculo, ya que se pueden ejecutar miles de hilos de manera concurrente.

De acuerdo a Ufimtsev *et al.*^{2,3}, lo más conveniente es realizar la evaluación de integrales primitivas en la GPU y contraerlas en la CPU, ya que se consigue una granularidad más fina y se evita la comunicación entre diferentes hilos y/o bloques. Similar al algoritmo de mapeo que proponen, un hilo por integral primitiva (1T1PI), se implementó la evaluación de integrales de tres centros en GPU en el código Parakata⁴. La validación se realizó con cadenas lineales de hidrógenos.

¹Köster, A. M. Efficient Recursive Computation of Molecular Integrals for Density Functional Methods. *J. Chem. Phys.* **1996**, *11*, 4114-4124.

²Ufimtsev, I. S.; Martinez, T. J. Quantum Chemistry on Graphical Processing Units. 1. Strategies for Two-Electron Integral Evaluation. *J. Chem. Theory Comput.* **2008**, *4*, 222-231.

³Ufimtsev, I. S.; Martinez, T. J. Quantum Chemistry on Graphical Processing Units. 2. Direct Self-Consistent-Field Implementation. *J. Chem. Theory Comput.* **2009**, *5*, 1004-1015.

⁴Flores-Moreno, R. *Parakata*, version XIV-V (downloaded May 2015).