|  |  |
| --- | --- |
| SZEGEDY LÓRÁNTFizika alapszak (BSc)BSc, 7. félévBudapesti Műszaki és Gazdaságtudományi EgyetemTermészettudományi Kar |  |

Témavezető:

|  |
| --- |
| Dr. Kállay Mihályegyetemi docens, BME VBK |

A korrelációs energia számítása nagy rendszerekre lokális közelítésekkel

Nagy molekulák, szupramolekuláris rendszerek fizikai és kémiai tulajdonságainak pontos ismerete számos tudományterület számára alapvető fontosságú. Ezen rendszerek tulajdonságainak elméleti meghatározásához a Schrödinger-egyenlet közelítő megoldására van szükségünk. Ehhez manapság a legpontosabb eljárás a coupled-cluster (CC) módszer, amellyel az elektronok korrelációs energiáját tetszőleges pontossággal számíthatjuk. Ha csak az egyszeres és kétszeres gerjesztéseket veszünk figyelembe, akkor az ún. CCSD (CC singles and doubles) módszert kapjuk. Pontosabb közelítést kapunk, ha a háromszoros gerjesztéseket perturbatívan figyelembe vesszük. Ezt CCSD(T)-nek (CC singles, doubles and perturbative triples) nevezzük. Ezeknek a módszereknek a számításigénye a rendszer méretének a hatodik, ill. hetedik hatványával nő.

Ezeknek a módszereknek a hátránya a számításigény rohamos növekedése. Azonban ez nagymértékben csökkenthető, ha a távoli elektronok korrelációját elhanyagolhatjuk. Az ilyen közelítéseket lokális közelítéseknek nevezzük. A vizsgált rendszer egyes részeit különálló rendszereknek (domének) tekintjük, ezekre külön-külön megoldjuk a CCSD, ill. CCSD(T) egyenleteket. Ezzel a technikával jóval kisebb lesz a számításigény, mivel a domének mérete jóval kisebb, mint a teljes rendszeré, és lineárisan fog skálázódni.

Célom egy hatékony lokális CCSD(T) program kifejlesztése volt. A manapság használt programok mindegyikét nagy méretű bázisra optimalizálták, emiatt szükséges volt egy olyan program megírására, amely teljesítménye kisméretű bázis esetén optimális. A programot egy legalább 8GB méretű memóriával rendelkező számítógépre terveztem. Az I/O műveletek számát minimalizáltam, mivel ezek a leglassabbak. A CCSD, ill. CCSD(T) egyenleteket mátrixműveletek formájában programoztam, amiket nagy hatékonyságú ún. BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms) rutinokkal számol ki a program. Az egyenleteket úgy írtam át, hogy a műveleteket a lehető leghatékonyabban számolhassam, azaz a legkisebb memória és I/O művelet felhasználásával és a legkevesebb lebegőpontos művelet elvégzésével.

Tesztszámolásokat végeztem szénhidrogénekre különböző bázisokban mind a hagyományos, mind a lokális CCSD(T) módszerekkel. Ezek alapján az általam írt program hagyományos CCSD számításokra több, mint kétszer gyorsabb, mint a jelenlegi leggyorsabb program. Lokális számolásoknál pedig a futási idő drasztikusan csökken.