

## Introdução aos clusters computacionais de alto desempenho: Simulando propriedades do Grafeno

Carolline A. Siqueira (IC), Ana Luiza C. Pereira (PQ)

### Resumo

Esse projeto de Iniciação Científica abordou a simulação computacional das propriedades eletrônicas do grafeno, sendo o objetivo principal analisar o desempenho dessas simulações no CENAPAD-SP e no cluster Lascado, da Faculdade de Tecnologia da Unicamp.

*Palavras Chave: Grafeno, clusters, desempenho.*

### Introdução

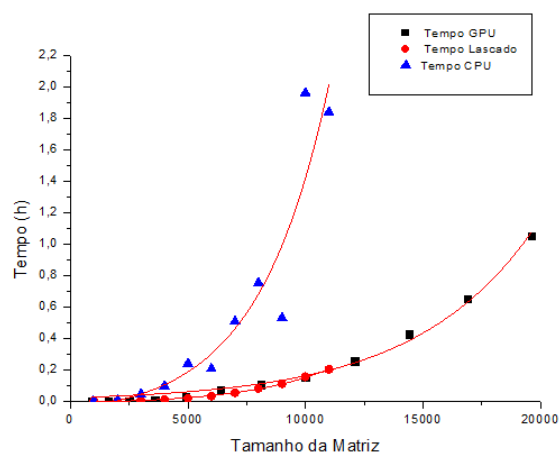
O projeto consiste na simulação computacional das propriedades eletrônicas do grafeno, utilizando-se os ambientes de *clusters* computacionais de alto desempenho para as simulações numéricas dessas propriedades. Nosso foco consistiu em explorar as capacidades do cluster computacional da Faculdade de Tecnologia da Unicamp (Lascado), comparando-se as vantagens e desvantagens deste ambiente em relação a outros ambientes computacionais como o CENAPAD-SP.

### Resultados e Discussão

Primeiramente, implementamos e analisamos as simulações numéricas da Densidade de Carga Eletrônica sobre a rede, considerando-se diferentes tipos de desordem. As simulações numéricas que foram utilizadas envolvem um modelo de rede tight-binding que utilizamos para emular a rede do grafeno. Com este modelo, conseguimos calcular espectros de energia, densidades de estados (DOS) mostrando claramente os efeitos da desordem e ainda as propriedades de transporte e propriedades de localização desses estados eletrônicos.

Por fim, realizaram-se testes para encontrar autovalores das matrizes envolvidas no modelo, que representavam redes de grafeno sem desordens no CENAPAD-SP, nos ambientes CPU e GPU, e no cluster Lascado. Percebeu-se que os tempos de processamento tanto no Lascado quanto no ambiente GPU são parecidos e melhores que no ambiente CPU do CENAPAD. Porém, no cluster Lascado só foi possível calcular os autovalores em matrizes com o tamanho máximo de 100x110, ou seja, redes de 11000 átomos, enquanto no GPU do CENAPAD foi possível calcular para redes até 23000 átomos.

**Figura 2.** Tempo de processamento em função do tamanho da matriz.



### Conclusões

Além de aprender sobre o grafeno, o projeto permitiu aprofundar os conhecimentos em programação e conhecer ambientes computacionais de alto desempenho. O projeto permitiu o mapeamento dos tempos e limites de processamento no cluster Lascado/FT, o qual não havia até então sido utilizado pelo grupo, contribuindo, portanto, de maneira importante para as pesquisas do grupo.

### Agradecimentos

Agradecemos ao CENAPAD-SP e ao cluster Lascado da FT/Unicamp pelo uso dos recursos computacionais e pelo suporte técnico, além do SAE/UNICAMP pelo apoio financeiro.

<sup>1</sup> A. K. Geim and K. S. Novoselov, Nature Materials, 6, 183 (2007)

<sup>2</sup> A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. 81, 109 (2009)..