

## Problema de autovalores envolvendo matrizes esparsas: aplicação à simulação de propriedades do grafeno

Mônica Medeiros Dantas (IC) e Ana Luiza Pereira (PQ)

### Resumo

Esse projeto de iniciação científica trata de simulações computacionais das propriedades eletrônicas do grafeno. O projeto envolveu pesquisa acerca do grafeno, bem como de suas propriedades e aplicações, focando na otimização dos cálculos e processamento por meio de sub-rotinas que se beneficiam do fato de que as matrizes utilizadas nas simulações são esparsas.

Matriz esparsa, simulação, grafeno.

### Introdução

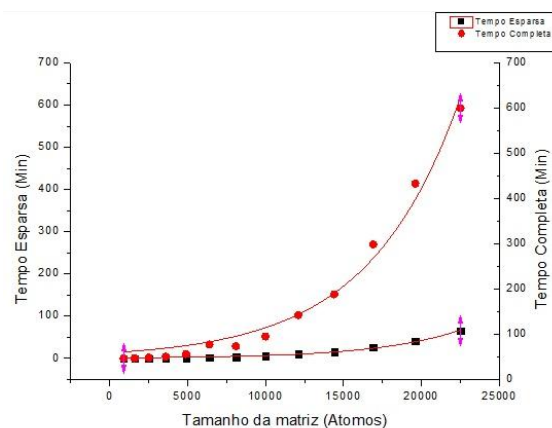
O grafeno desperta interesse de pesquisa por ser um material de propriedades únicas e por ter vasta aplicabilidade. Possui uma enorme resistência mecânica, condutividade térmica e elétrica excepcionais, impermeabilidade a gases, além de ser maleável, flexível e transparente e ser composto apenas de uma camada bidimensional de carbono [1,2].

Os estudos realizados sobre o grafeno envolvem cálculos computacionais com modelo de rede que simulam a rede hexagonal de carbonos para avaliar suas propriedades eletrônicas em diversas situações. Pela sua complexidade e alta demanda de processamento, torna-se interessante se beneficiar de características das matrizes envolvidas, como o fato de serem esparsas (alta porcentagem de elementos nulos), a fim de otimizar as simulações e alcançar resultados mais rapidamente.

### Resultados e Discussão

Utilizou-se o programa Scilab para realizar as primeiras comparações entre as simulações com redes de grafeno sendo consideradas matrizes completas e esparsas. Já foi possível verificar um ganho de tempo quando se considera a sub-rotina para o problema de autovalores e autovetores específica para matrizes esparsas.

Em um segundo momento optou-se por realizar simulações no ambiente GPU (*Graphics Processing Unit*) do CENAPAD-SP a fim de poder aumentar o tamanho da rede de grafeno analisada, comparando-se novamente os casos para uma matriz completa ou esparsa. Essa comparação apresentou os resultados mostrados na Figura 1. A partir dos gráficos gerados foi possível determinar a equação que descreve o tempo de processamento do programa ( $y$ ) em função da dimensão da matriz ( $x$ ), que corresponde ao número de átomos na rede de grafeno, sendo elas:  $y = 13e^{\frac{x}{5833}}$  para as matrizes completas e  $y = 1,1e^{\frac{x}{5427}}$  para a matriz esparsa.



**Figura 1.** Comparação de processamento do programa com e sem utilização de matriz esparsa no ambiente GPU do CENAPAD-SP.

Apesar da sub-rotina utilizada no cálculo dos autovalores de matrizes esparsas só apresentar como resultado seis dos autovalores, apresentam grande acuracidade.

### Conclusões

Foi possível verificar o ganho computacional e de tempo que a utilização de matrizes esparsas acarreta, chegando a demorar nove vezes menos tempo do que um cálculo utilizando uma matriz completa. Além disso, foi possível verificar a acuracidade dos resultados obtidos pela sub-rotina utilizada.

### Agradecimentos

Agradecemos ao SAE/Unicamp pelo apoio financeiro e ao CENAPAD-SP pelo uso dos recursos computacionais e pelo suporte Técnico nos dado. Além disso, a aluna agradece a professora Ana pela orientação dada.

[1] A. K. Geim and K. S. Novoselov, *Nature Materials* 6, 183-190 (2007)

[2] K. S. Novoselov, V. I. Fal'ko, L. Colombo, P. R. Gellert, M. G. Schwab, K. Kim, *Nature* 490, 192-200 (2012)