

**Universidade de São Paulo  
Instituto de Física de São Carlos**

**XI Semana Integrada do Instituto de  
Física de São Carlos**

**Livro de Resumos**

**São Carlos  
2021**

# Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 11

## Coordenadores

Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato

Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luiz Vitor de Souza Filho

Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luís Gustavo Marcassa

Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

## Comissão Organizadora

Arthur Deponte Zutião

Artur Barbedo

Beatriz Kimie de Souza Ito

Beatriz Souza Castro

Carolina Salgado do Nascimento

Edgard Macena Cabral

Fernando Camargo Soares

Gabriel dos Reis Trindade

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Gabriel Henrique Armando Jorge

Giovanna Costa Villefort

Inara Yasmin Donda Acosta

Humberto Ribeiro de Souza

João Hiroyuki de Melo Inagaki

Kelly Naomi Matsui

Leonardo da Cruz Rea

Letícia Cerqueira Vasconcelos

Natália Carvalho Santos

Nickolas Pietro Donato Cerioni

Vinícius Pereira Pinto

## Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrandionio

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

(11: 06 set. - 10 set. : 2021: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XI Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por João H. Melo Inagaki [et al.]. São Carlos: IFSC, 2021.

412 p.

Texto em português.

1. Física. I. Inagaki, João H. de Melo, org. II. Título

ISBN 978-65-993449-3-0

CDD 530

## IC40

# Implementação e manutenção de código computacional de estrutura eletrônica de semicondutores

PAULI, I. G.<sup>1</sup>; SIPAHI, G.<sup>1</sup>

iangiestas@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

O LFC desenvolveu um framework de cálculo de estrutura eletrônica de semicondutores, que permite utilizar o máximo de desempenho possível usando um computador de mesa. No entanto, ao longo de 20 anos de desenvolvimento o código acabou se tornando muito complexo de manter ou realizar novas modificações. Baseando-se em uma série de observações feitas no período anterior do presente projeto, está sendo desenvolvida uma nova versão, que já reproduz resultados de trabalhos anteriores utilizando o código antigo, através de métodos de diagonalização direta (1-2) disponíveis no LAPACK. No entanto, a partir de um certo número de ondas planas este algoritmo deixa de ser viável, pois é necessário construir a matriz inteira na memória. Sendo assim, outro método de diagonalização desenvolvido no laboratório foi implementado, baseado no LOBPCG. Com a implementação deste algoritmo, foram feitos diversos testes para encontrar e corrigir os problemas que surgiram, até conseguir resultados idênticos aos usando o LAPACK. Atualmente, testes estão sendo feitos para verificar a escalabilidade de ambos os métodos com a entrada e com o número de autovalores. Resultados preliminares indicam que para sistemas grandes, nosso método escala com a entrada em  $N_2$  sendo mais rápido, a partir de um certo  $N_0$ , do que o método usual que escala com  $N_3$ . Porém é necessário investigar a estabilidade do algoritmo em função da entrada e do número de autovalores procurados, já que para determinadas combinações de fatores o nosso método falha em convergir.

**Palavras-chave:** Simulações numéricas. Método KP. Algebra linear computacional.

## Referências:

- 1 GOLUB, G. H.; VAN LOAN, C. F. **Matrix computations.** 4th ed. Baltimore: Johns Hopkins University Press, 2013.
- 2 MEYER, C. **Matrix analysis and applied linear algebra.** Philadelphia: SIAM, 2000.