

# Dinâmica Molecular em Ambiente de Grade Computacional

**Marcelo P. de Albuquerque, Márcio P. de Albuquerque, Nilton Alves,  
Deyse Peixoto Ribeiro, Luis Gregório Moyano e Constantino Tsallis**

{marcelo, mpa, naj, dpeixoto, moyano, tsallis}@cbpf.br

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF/MCT)

Rua Dr. Xavier Sigaud, 150, 22290-180 - Rio de Janeiro – RJ – Brasil

**Fulvio Baldovin**

{fulvio.baldovin@pd.infn.it}

Università di Padova - Dipartimento di Fisica

Via Marzolo 8 - 35131 - Padova – Italy

**Giovanni Giupponi**

{g.giupponi@ucl.ac.uk}

University College London - Centre for Computational Science

20 Gordon St., London WC1H 0AJ, UK

**Constantino Tsallis**

{tsallis@santafe.edu}

Santa Fe Institute

1399 Hyde Park Road, Santa Fe, New Mexico 87501, USA

**Resumo** – Este trabalho apresenta a simulação numérica que vem sendo desenvolvida no CBPF para o estudo da dinâmica molecular baseada na mecânica estatística não-extensiva generalizada em ambiente de grade computacional. Foram desenvolvidos e testados programas utilizando a biblioteca MPI e os resultados mostraram que a grade nos permite um significativo ganho de performance no tempo de execução.

## 1. Introdução

Os grupos de Computação e Física Estatística do CBPF, da Universidade de Padova e do Centro de Computação da *University College London* vêm trabalhando em conjunto no desenvolvimento de simulações numéricas para ambiente de grade computacional. O grupo de Física Estatística estuda por meio da mecânica estatística não-extensiva generalizada, a dinâmica molecular em interações de longo alcance.

## 2. Física da Dinâmica Molecular

A Física Estatística descreve sistemas formados por um grande número de elementos similares. A teoria para tais sistemas foi desenvolvida por Boltzmann e Gibbs (BG) no século XIX sendo uma das áreas importantes da Física atual. A Dinâmica Hamiltoniana é utilizada para descrever o movimento dos corpos, contendo no seu núcleo a informação necessária para a evolução do sistema devido as suas interações. As interações podem ser de curto ou longo alcance, sendo esta última, considerada independentemente da distância entre os elementos. A teoria de BG não é capaz de produzir predições corretas para certos estados estacionários em sistemas de longo alcance. A mecânica estatística não-extensiva generalizada, proposta por um dos autores (C.T.) visa, entre outras, generalizar esta teoria incluindo este tipo de interação.

O problema físico abordado neste trabalho foi descrito por um modelo matemático simplificado, que leva em consideração as características essenciais da interação de longo alcance. O programa desenvolvido explora sistemas por meio de interações de longo

alcance com o objetivo de determinar a aplicabilidade da teoria não-extensiva generalizada.

### 3. O Problema da Física Computacional

O programa simula numericamente a evolução de um sistema de  $N$  rotores acoplados (interação de longa distância), que podem girar livremente. Cada rotor é definido pelo ângulo que forma com a horizontal e por sua velocidade angular. A simulação é feita por meio da integração numérica de  $2N$  equações de movimento de Hamilton, derivadas da função Hamiltoniana do sistema, cujo resultado é o conjunto completo de coordenadas e velocidades. Toda a informação relevante do sistema está contida neste conjunto e por meio dele, podemos calcular os parâmetros físicos desejados, e.g. a energia do sistema, temperatura e magnetização.

O cálculo do novo valor das variáveis do sistema depende de todas as coordenadas e velocidades calculadas na iteração precedente. Este cálculo implica em um tempo de execução de  $O(N^2)$ .  $N$  precisa ser muito grande para uma correta descrição estatística do problema. Este procedimento é realizado  $S$  vezes para que os parâmetros de medidas tenham uma grande confiança estatística.

### 4. Estratégia de Paralelização e Resultados

Nossa abordagem inicial para a escalabilidade do estudo em ambiente de grade foi a paralelização do cálculo dos parâmetros medidos. Para isso, identificamos os módulos paralelizáveis no programa seqüencial e utilizamos a técnica de passagem de mensagens (MPI) em um ambiente com  $P$  processadores. Cada processador da grade calcula  $S/P$  evoluções do sistema. Ao final um processador mestre coleta os resultados das medidas realizadas e calcula a confiança estatística dos parâmetros medidos.

Um sistema com  $N=1000$  rotores foi testado experimentalmente em um ambiente paralelo (seis processadores) e os resultados comparados àqueles obtidos no programa na forma seqüencial. O teste utilizou  $T=2,5 \times 10^5$  iterações, e mediu a energia de um subgrupo arbitrário de  $M=100$  rotores. Os resultados para o caso seqüencial e paralelo foram praticamente os mesmos e o ganho foi aproximadamente igual ao número de processadores utilizados (5,98).

### 5. Conclusão

Uma nova abordagem para o estudo da aplicabilidade da teoria não-extensiva generalizada em ambiente de grade, com milhares de processadores está sendo construída. Algumas modificações no código seqüencial para a execução em ambiente paralelo nos deram ganhos significativos de desempenho. Atualmente estamos trabalhando na decomposição do problema em objetos, para que possamos determinar sua granularidade e controlar o grau de paralelismo. A criação de um ambiente de grade funcionando em regime de produção é essencial para a concretização de seu uso por parte da comunidade acadêmica.

### 6. Agradecimentos

Aos departamentos de computação da UCL, UFF, LNCC e PUC-Rio onde os testes foram realizados.

### 7. Referências

Albuquerque, M. P., Albuquerque, M. P., Alves, N., Peixoto, D. & Maia, A. (2004). “*Computação Científica no CBPF*”, Anais do II Workshop de Grade Computacional e Aplicações.

Uma bibliografia completa sobre a mecânica estatística não-extensiva generalizada pode ser encontrada em <http://tsallis.cat.cbpf.br/biblio.htm>.

Albuquerque, M. P., Albuquerque, M. P., Alves, N. & Peixoto, D., (2003). “*Ambiente de Computação de alto desempenho do CBPF: Projeto SSolar*”, Anais do I Workshop de Grade Computacional e Aplicações, pg.13-18.

“*MPICH-G2*”, <http://www.globus.org/mpi/>

“*The Message Passing Interface (MPI) standard*”, <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/>

Karonis N., Toonen B., & Foster I., (2003) “*MPICH-G2: A Grid-Enabled Implementation of the Message Passing Interface*”, Journal of Parallel and Distributed Computing (JPDC), Vol. 63, No. 5, pp. 551-563.