

Máquina Dedicada à Dinâmica Molecular

GONZALO TRAVIESO
JAN FRANS WILLEM SLAETS

Inst. de Física e Química de São Carlos, Univ. de São Paulo, Cx. Postal 369, 13560, São Carlos, SP

Sumário: Descrevemos brevemente as características computacionais da dinâmica molecular, que apontam para a necessidade de construção de uma máquina dedicada, e que indicam os pontos onde se encontram as possibilidades de construção de uma arquitetura paralela para realização de seus cálculos.

1. INTRODUÇÃO

Tem-se consumado cada vez mais, em física, a utilização de simulação de fenômenos por meio de computadores. Algumas das razões que levam à utilização de simulação computacional são a possibilidade de teste de diversas teorias concorrentes e sua comparação com resultados experimentais, e a inacessibilidade que alguns fenômenos apresentam à técnica experimental direta (por exemplo, a cromodinâmica quântica).

A utilização de sistemas tradicionais para essas simulações apresenta diversos inconvenientes, ligados à necessidade de trabalharmos o mais realisticamente possível, o que implica num grande esforço computacional, e torna inviável sua utilização.

As soluções possíveis são a utilização de supercomputadores, que são inacessíveis a muitos pesquisadores e que apresentam grandes custos, tanto para a implantação de um sistema como para sua utilização, ou a implementação de uma máquina dedicada ao problema a ser estudado.

Para problemas com elevadíssima demanda computacional, como a cromodinâmica quântica e simulações realistas de dinâmica molecular parece que apenas a construção de máquinas específicas os viabilizará, devido ao extremamente alto tempo de processamento necessário.

2. DEMANDAS COMPUTACIONAIS DA DINÂMICA MOLECULAR

Em dinâmica molecular, descrevemos a evolução temporal de um sistema de N partículas que interagem entre si de acordo com potenciais interpartícula específicos. Essas partículas estão localizadas em uma região do espaço sujeita a condições de contorno periódicas.

Para o cálculo da nova posição de uma partícula, devemos considerar a sua posição no instante atual, sua posição no instante imediatamente anterior e a força resultante da interação dessa partícula com todas as outras partículas. Um fator que diminui sensivelmente a complexidade computacional da simulação é o de que os potenciais envolvidos são de curto alcance, fazendo com que o cálculo das forças interpartículas seja realizado apenas para as que estão presentes dentro de um determinado raio de influência da partícula sob consideração. A utilização deste fato permite a im-

plementação de técnicas de "coarse-grain", bem como de tabelas de vizinhos com atualização infreqüente. Estas técnicas fazem com que se atinja quase uma linearidade no crescimento da demanda computacional com o número de partículas do sistema, e representam uma grande redução no esforço computacional dispendido para encontrar-se as partículas que precisam ser levadas em consideração nos cálculos de forças.

Entretanto, mesmo com a utilização dessas técnicas, a demanda computacional da dinâmica molecular é muito elevada para computadores tradicionais, pois procuram-se simulações com dezenas de milhares de partículas e por centenas de milhares de intervalos de tempo.

Se partimos do princípio de que a seleção das partículas que efetivamente interagem com uma dada partícula não envolve gasto significativo de tempo (mesmo a utilização das técnicas citadas acima não permite fazer com que esse cálculos sejam desprezíveis, o que agrava a situação descrita a seguir) vemos que, num sistema com 10.000 partículas, cada qual interagindo em média com 30 outras, deveríamos calcular 300.000 forças (ou 150.000 caso aproveitássemos a simetria das interações). Se trabalhamos em duas dimensões, o cálculo de cada força envolve o cálculo de uma distância (2 subtrações, duas multiplicações e uma soma) o acesso em tabela para encontrar o potencial (possivelmente com interpolação para evitar um crescimento excessivo da memória necessária à tabela), e finalmente o cálculo de cada uma das direções das forças (fundamentalmente duas multiplicações, desde que as tabelas sejam corretamente dimensionadas). Apenas esses cálculos mencionados envolvem, portanto, 450.000 somas ou subtrações e 600.000 multiplicações para cada intervalo de tempo (portanto será repetido milhares de vezes), sem levar em consideração a necessidade de interpolação e os acessos em tabela.

3. ESBOÇO DA PROPOSTA

Para a implementação de uma máquina dedicada a esses cálculos levamos em consideração as possibilidades de paralelismo devidas à:

- a. localidade das forças envolvidas, que permite que os cálculos sejam realizados em diversos "coarse-grains" de forma paralela;
- b. possibilidade de realização em série de diversas partes dos cálculos, como separação de partículas no raio de influência e cálculo das forças interpartículas.

A proposta envolve então a possibilidade de separação tanto algorítmica como geométrica dos cálculos.

Uma forma de implementação em estudo é a de uma rede de "transputers", sendo que o dimensionamento e estruturação da rede devem ser realizados de acordo com considerações de balanço de carga e de tempos de comunicação interprocessador, de forma a permitir que a comunicação seja o máximo possível realizada durante o tempo de cálculos, para impedir que os processadores estejam inativos durante períodos significativos de tempo.