

Perbandingan Metode Integrasi Velocity Verlet dan Predictor-Corrector pada Dinamika Molekuler Secara Serial dan Paralel

Perdana Aditya Natayuda¹, Nurul Ikhsan², Reza Rendian S³

^{1,2}Fakultas Informatika, Universitas Telkom, Bandung

³Fakultas Teknik Elektro, Universitas Telkom, Bandung

[¹natayuda@students.telkomuniversity.ac.id](mailto:natayuda@students.telkomuniversity.ac.id)

[²ikhsan@telkomuniversity.ac.id](mailto:ikhsan@telkomuniversity.ac.id)

[³zaseptiawan@telkomuniversity.ac.id](mailto:zaseptiawan@telkomuniversity.ac.id)

Abstrak

Dinamika molekuler adalah suatu metode simulasi komputer yang mempresentasikan interaksi antara atom dan molekul selama periode waktu tertentu. Simulasi dinamika molekuler menggunakan besaran percepatan dan kecepatan partikel untuk menentukan posisi pergerakan partikel. Pada penelitian sebelumnya, simulasi dinamika molekuler biasa dilakukan dengan menggunakan metode *Velocity Verlet* dan *Predictor-Corrector*. Simulasi dinamika molekuler memerlukan waktu komputasi yang lama karena jumlah partikel yang sangat banyak. Oleh karena itu pada penelitian tugas akhir ini, digunakan metode *Velocity Verlet* dan *Predictor-Corrector* yang dijalankan secara paralel menggunakan *Compute Unified Device Architecture* (CUDA) yang bertujuan untuk mengurangi waktu komputasi. Dengan menjalankan simulasi paralel dengan CUDA, simulasi dinamika molekuler menggunakan metode *Velocity Verlet* dan *Predictor-Corrector* berjalan lebih cepat dibandingkan dengan dijalankan secara serial di CPU dengan total *speedup* mencapai 2.9 kali lebih cepat.

Kata Kunci: CUDA, Dinamika Molekuler, Predictor-Corrector, Velocity Verlet.

Abstract

Molecular dynamics is a computer simulation method that presents interactions between atoms and molecules over a certain period of time. Molecular dynamics simulations use the amount of acceleration and particle velocity to determine the position of the particle's movement. In previous studies, molecular dynamics simulations are usually done using the Velocity Verlet and Predictor-Corrector methods. Molecular dynamics simulation requires a long computational time because of the large number of particles. Therefore, in this final project, Velocity Verlet and Predictor-Corrector methods are run in parallel using Compute Unified Device Architecture (CUDA) which aims to reduce computing time. By running parallel simulations with CUDA, molecular dynamics simulations using the Velocity Verlet and Predictor-Corrector methods run faster than those run serially on the CPU with a total speedup reaching 2.9 times faster.

Keywords: CUDA, Molecular Dynamics, Predictor-Corrector, Velocity Verlet.
