

1. Pendahuluan

Dinamika molekuler merupakan metode simulasi yang menggambarkan interaksi antar molekul atom berdasarkan waktu tertentu. Seperti contohnya kelereng dalam kotak, asumsikan kelereng adalah molekul-molekul yang saling berinteraksi ketika kotak digerakkan. Metode yang biasa digunakan pada simulasi dinamika molekuler diantaranya yaitu Velocity Verlet, Runge-Kutta, Predictor-Corrector, Leapfrog, dan Ljapunov-Characteristics[4]. Untuk penelitian ini akan digunakan metode Velocity Verlet dan Predictor-Corrector. Metode Velocity Verlet digunakan untuk mendapatkan perkiraan dari pergerakan molekul menggunakan kecepatan molekul tersebut sebagai variabel. Metode Predictor-Corrector menggunakan bagian Predictor yang akan melakukan prediksi pergerakan molekul menggunakan variabel yang telah ditentukan, lalu bagian Corrector akan melakukan koreksi terhadap nilai dari metode Predictor menggunakan variabel yang telah ditentukan. Metode yang digunakan pada simulasi dinamika molekuler memiliki algoritma perhitungan yang rumit dengan waktu eksekusi yang lama. Tujuan utama dari simulasi dinamika molekuler adalah, mengetahui posisi stabil dari interaksi antar molekul yang sangat banyak dan memungkinkan untuk melakukan simulasi yang tidak bisa dilakukan dalam laboratorium.

Karena banyaknya jumlah molekul yang disimulasikan dan besarnya beban komputasi yang dikerjakan, penelitian tugas akhir ini menggunakan CUDA (*Compute Unified Device Architecture*) yang merupakan platform komputasi paralel dan model antarmuka pemrograman aplikasi yang dibuat oleh NVIDIA. Platform CUDA dirancang untuk bekerja dengan bahasa pemrograman seperti C, C ++, dan Fortran. CUDA memudahkan pemrograman paralel untuk menggunakan sumber daya GPU yang dapat mempercepat proses komputasi. CUDA dapat berjalan di sistem operasi yang umum digunakan seperti Windows, Linux, dan MacOS.

1.1 Topik dan Batasannya

Pada penelitian tugas akhir ini, simulasi dinamika molekuler akan dijalankan sebanyak 1000 iterasi. Jumlah partikel yang disimulasikan berjumlah 1024 hingga 8096 partikel. Metode yang digunakan yaitu Velocity Verlet dan Predictor Corrector. Simulasi dijalankan secara serial pada CPU dan paralel dengan CUDA pada GPU.

1.2 Tujuan

Merujuk pada perumusan masalah yang diangkat pada penelitian ini, maka tujuan pada tugas akhir ini adalah sebagai berikut:

1. Melakukan simulasi dinamika molekuler menggunakan metode Velocity Verlet dan Predictor-Corrector.
2. Melakukan analisis waktu eksekusi algoritma antara metode Velocity Verlet dan Predictor-Corrector yang dijalankan secara serial dan paralel pada GPU.
3. Membandingkan kecepatan waktu eksekusi program yang dijalankan secara serial pada CPU dan paralel pada GPU.