

Abstrak

Molecular Dynamics (MD) merupakan simulasi numerik untuk menentukan evolusi dari partikel yang saling berinteraksi sepanjang waktu tertentu. Dalam menentukan pergerakan posisi partikel, MD menggunakan percepatan dan kecepatan dari time step sebelumnya. Model ini merupakan permasalahan PDB orde 1, oleh karena itu MD membutuhkan metode integrasi numerik untuk menentukan posisi pada waktu saat ini dari informasi posisi kecepatan dan percepatan saat sebelumnya. Dalam beberapa penelitian terakhir, sebagian besar dari simulasi MD dilakukan dengan menerapkan integrasi *Velocity Verlet* yang dijalankan secara serial. Bila kita menggunakan jumlah partikel yang sangat banyak, beban komputasi menjadi sangat besar sehingga menyebabkan waktu komputasi yang lama. Dalam mengatasi hal ini, penulis mencoba menerapkan metode integrasi *Runge-Kutta* pada simulasi MD. Simulasi dilakukan dengan menerapkan metode integrasi *Velocity Verlet* sebagai acuan, dan metode integrasi *Runge-Kutta 4* sebagai bahan uji. Untuk mengakselerasi simulasi proses perhitungan percepatan dari gaya yang dimiliki setiap partikel dilakukan secara parallel, menggunakan *Compute Unified Device Architecture (CUDA)*. Hal ini terbukti mereduksi waktu komputasi yang dibutuhkan secara signifikan. Dengan diterapkannya CUDA pada perhitungan percepatan, *speedup* yang di dapatkan dari simulasi dengan metode integrasi *Velocity Verlet* sebesar 3 kali lebih cepat. Kemudian pada implementasi metode *Runge-Kutta* diperoleh *speedup* sebesar 2.9 kali, semua benchmark ini dilakukan pada skenario perhitungan akselerasi secara parallel dibandingkan terhadap perhitungan secara serial.