

1. Pendahuluan

Simulasi merupakan suatu teknik yang berfungsi untuk merepresentasikan sebuah masalah atau keadaan yang ingin dianalisis. Salah satu teknik simulasi yang umum digunakan adalah Molecular Dynamics (MD). MD merupakan simulasi yang digunakan untuk menentukan setiap pergerakan posisi partikel yang digerakkan dalam satuan waktu [5]. Dalam proses Bergeraknya posisi partikel, MD membutuhkan metode integrasi yang digunakan untuk melakukan update posisi setiap saat.

MD memiliki beberapa metode integrasi yaitu, *Verlet*, *Velocity Verlet*, *Runge-Kutta*, *Predictor-Corrector*, *Leapfrog*, dan *Ljapunov-Characteristics* [3,4,5,6,7,8]. Akan tetapi metode integrasi yang paling sering digunakan dalam MD adalah *Velocity Verlet* [2]. Hal ini dikarenakan *Velocity Verlet* sangat mirip dengan *Verlet* secara matematis, akan tetapi secara eksplisit menggunakan kecepatan untuk menghitung lintasan partikel selanjutnya [2]. Sedangkan metode integrasi *Runge-Kutta* sangat jarang sekali digunakan karena sebelum melakukan update posisi dilakukan beberapa percobaan interval waktu untuk meningkatkan akurasi posisi. Pada umumnya simulasi dilakukan dengan jumlah partikel dan iterasi yang besar sehingga membutuhkan beban komputasi yang besar dan mempengaruhi lamanya waktu komputasi.

Karena besarnya beban komputasi pada simulasi MD, pada penelitian ini diterapkan pemrograman paralel dengan menggunakan *Compute Unified Device Architecture* (CUDA). CUDA adalah arsitektur pemrograman paralel yang dikembangkan oleh NVIDIA[10]. Dengan menggunakan CUDA yang berbasis pada *Graphics Processing Unit* (GPU) yang memungkinkan pengguna untuk mengakses seluruh CUDA core yang ada [10]. Hal ini dapat menyebabkan waktu komputasi yang dihasilkan akan menjadi lebih cepat. Selanjutnya dari masing masing MD yang menggunakan metode integrasi *Velocity Verlet* dan *Runge-Kutta* akan dibandingkan waktu komputasi dan speedup yang didapatkan selama proses simulasi berlangsung.

1.1 Topik dan Batasannya

Pada penelitian ini *Molecular Dynamics* (MD) yang disimulasikan dengan 1.000 iterasi dengan jumlah partikel divariasikan dari 1.024 partikel sampai 8.192 partikel. Metode integrasi yang digunakan yaitu *Velocity Verlet* dan *Runge-Kutta*. MD di implementasikan ke dalam pemrograman serial C dan pemrograman paralel CUDA.

1.2 Tujuan

Tujuan dari penelitian ini adalah membandingkan waktu komputasi dan speedup dari *Molecular Dynamics* (MD) yang menggunakan metode integrasi *Velocity Verlet* dan *Runge-Kutta* yang telah diimplementasikan pada pemrograman paralel CUDA.