



Projeto HPC

Modelo Simples de Átomos de Argônio Interagindo

Amanda Rodrigues de Souza

9 de julho de 2017

Introdução

O que é Dinâmica Molecular?



- ▶ Problema de N-corpos
- ▶ Método que simula o movimento de átomos e moléculas.
- ▶ Utilizada para estudar Propriedades Termodinâmicas Macroscópicas
- ▶ Dinâmica Molecular Clássica: Despreza efeitos quânticos



Modelo Físico-Matemático-Computacional que utiliza simulação de dinâmica molecular, usando o potencial de Lennard-Jones, para a realização de cálculos de interações intermoleculares de Argônio.

Dados de Entrada

- ▶ Número de Partículas = N_{Cell}^3
- ▶ Densidade = 0.8
- ▶ Número de passos = 15000
- ▶ Raio de Corte = 3



```
!$omp parallel do private(iatm,jatm,dx,dy,dz,r2,fr2,fr6,fpr), &
!$omp & shared(natm,x,y,z,rcut2,dcell),reduction(+:epot,virial,fx,fy,fz) &
!$omp & schedule(runtime)
  do iatm = 1,natm-1
    do jatm = iatm+1,natm
      dx = x(iatm) - x(jatm)
      dy = y(iatm) - y(jatm)
      dz = z(iatm) - z(jatm)
      ! sign(x,y) == fornece valor positivo de x se y >= 0 e negativo se y < 0
      if (abs(dx) > 0.5d0*dcell) dx = dx - sign(dcell,dx)
      if (abs(dy) > 0.5d0*dcell) dy = dy - sign(dcell,dy)
      if (abs(dz) > 0.5d0*dcell) dz = dz - sign(dcell,dz)

      r2 = dx*dx + dy*dy + dz*dz

      if (r2 < Rcut2) then
        fr2 = sigma2 / r2
        fr6 = fr2 * fr2 * fr2
        fpr = 48.d0 * eps * fr6 * (fr6 - 0.5d0) / r2      ! f/r

        fx(iatm) = fx(iatm) + fpr * dx; fx(jatm) = fx(jatm) - fpr * dx
        fy(iatm) = fy(iatm) + fpr * dy; fy(jatm) = fy(jatm) - fpr * dy
        fz(iatm) = fz(iatm) + fpr * dz; fz(jatm) = fz(jatm) - fpr * dz

        Epot = Epot + 4.d0 * eps * fr6 * (fr6 - 1.d0)
        virial = virial + fpr * r2

      end if
    end do
  end do
!$omp end parallel do
```



```
#!/bin/bash
#PBS -S /bin/bash
#
## nodes = qtde de nos requisitada
## ppn = qtde de cores por no
#PBS -l nodes=1:ppn=4

#
## walltime = qtde de horas necessaria
#PBS -l walltime=300:00:00
#
## Nome do job . Aparece na saida do comando 'qstat' .
## E recomendado, mas nao necesssario, que o nome do job
## o mesmo que o nome do arquivo de input
#PBS -N parncell22

## informacoes do job no arquivo de saida
qstat -an -u $USER
cat $PBS_NODEFILE

#####
#----- Inicio do trabalho ----- #
#####

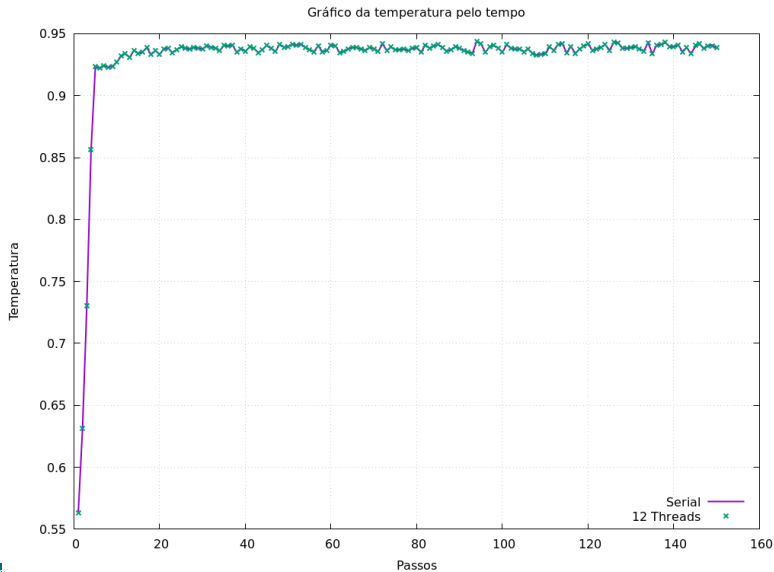
cd $PBS_O_WORKDIR

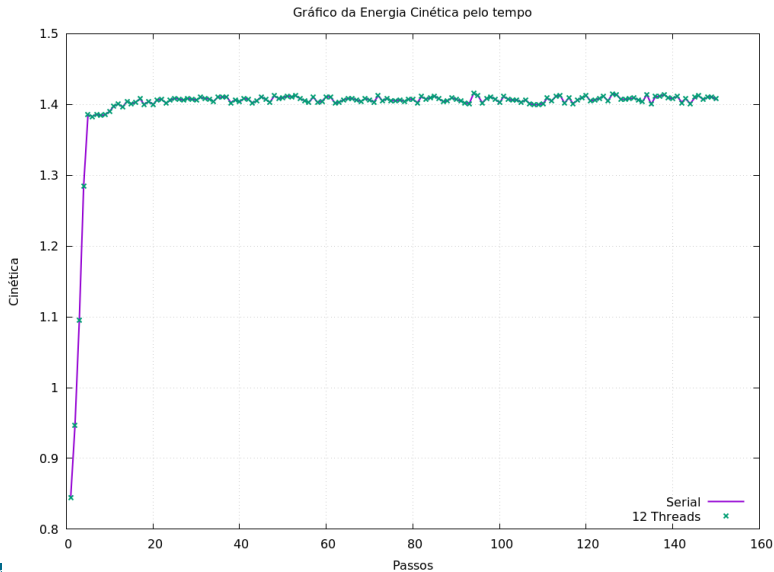
export OMP_NUM_THREADS=$PBS_NP
export OMP_SCHEDULE="guided"
export GFORTRAN_UNBUFFERED_ALL=1

time ./paralelo.x > saida.out
```

Resultados

Temperatura







Fixando a quantidade de partículas em 8000 (Ncell = 20) Variando a quantidade de Threads

► Tempo Serial : 12399.980 s

Threads	Tempo (s)	Speed Up	Eficiência
2	10768.084	1.151	0.57
4	6667.5508	1.86	0.46
6	4500.7158	2.75	0.46
8	3747.9751	3.30	0.41
10	3004.6240	4.12	0.41
12	2669.3921	4.64	0.39



Fixando a quantidade de partículas em 10648 (Ncell = 22) Variando a quantidade de Threads

- Tempo Serial : 21427.531 s

Threads	Tempo (s)	Speed Up	Eficiência
2	20406.447	1.050	0.52
4	12807.204	1.67	0.42
6	8914.4863	2.40	0.40
8	6951.1240	3.08	0.38
10	5715.6191	3.74	0.37
12	4882.2021	4.38	0.36



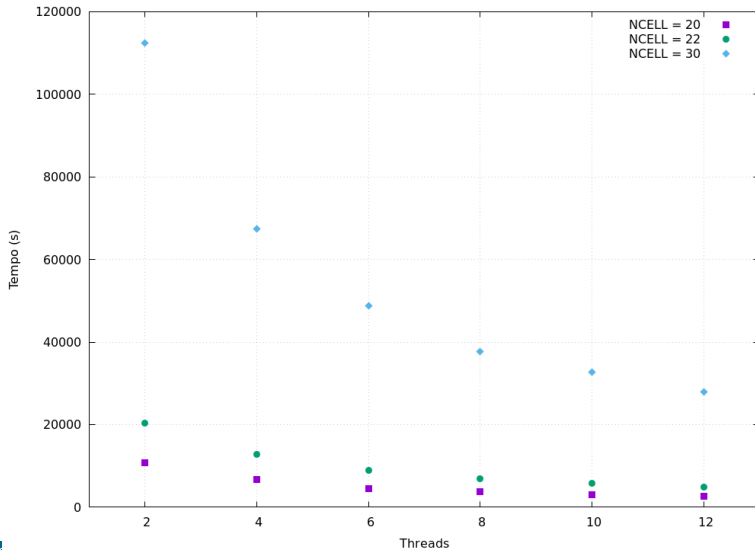
Fixando a quantidade de partículas em 27000 (Ncell = 30) Variando a quantidade de Threads

► Tempo Serial : 132265.39 s

Threads	Tempo (s)	Speed Up	Eficiência
2	112341.51	1.18	0.59
4	67432.813	1.96	0.49
6	48707.168	2.71	0.45
8	37718.859	3.50	0.44
10	32733.824	4.04	0.40
12	27977.684	4.73	0.39



Gráfico do Tempo pelo Número de Threads

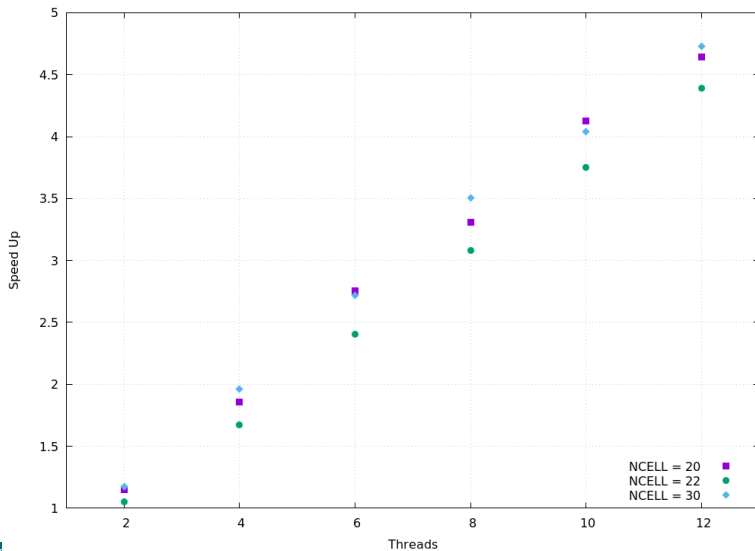


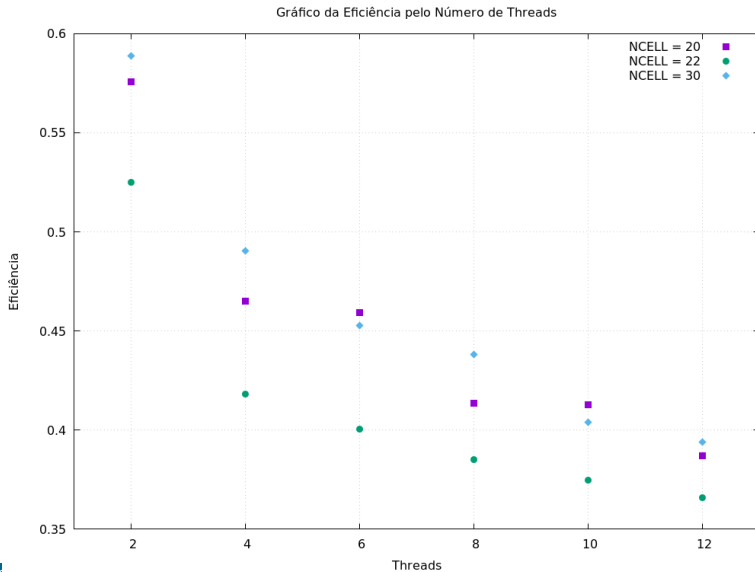
Resultados

Speed Up



Gráfico do Speed Up pelo Número de Threads

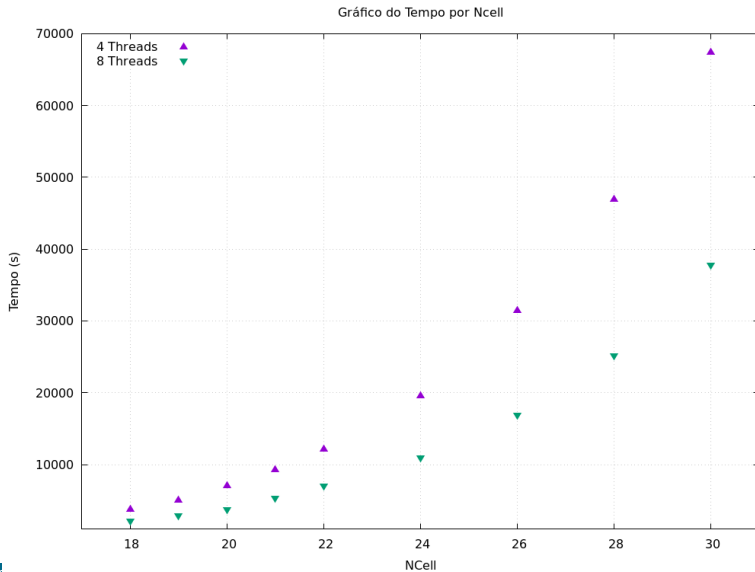






Fixando o Número de Threads e Variando a quantidade de Partículas

Tempo Total		
Ncell	4 Threads	8 Threads
18	3808.6370	2074.9089
19	5106.2930	2840.9121
20	7076.8130	3747.9751
21	9299.8525	5259.4458
22	12165.881	6951.1240
24	19627.355	10875.045
26	31445.627	16844.027
28	46942.113	25119.445
30	67432.813	37718.859





- ▶ MARTINI: *Short Course On Molecular Dynamics Simulation: Lecture 6: Neighbor Lists*
- ▶ RAPAPORT, D.C: *The Art of Molecular Dynamics Simulation*
- ▶ FRENKEL, D., SMIT, B.: *Understanding Molecular Simulation*

