

Simulação Molecular Eficiente: Integração de Computação de Alto Desempenho e Sustentabilidade Energética

A simulação molecular é uma das ferramentas mais utilizadas na bioinformática, mas requer o uso de hardware de alto desempenho. Seus algoritmos são custosos, computacional e energeticamente. Atualmente a abordagem mais utilizada nesse campo é a utilização de computação heterogênea que envolve uso de GPU's e CPU's. No entanto, a utilização destes recursos de processamento deve ser eficiente de modo a equalizar o menor tempo do experimento e o consumo de energia.

Neste cenário, avaliamos a eficiência do software de simulação molecular Gromacs ao simular diferentes grupos de "proteínas" contendo 25 mil, 65 mil, 120 mil e 230 mil átomos em "diferentes" configurações de arquiteturas heterogêneas (benchmark). Foi observado que dependendo da configuração de hardware, uma maior quantidade de threads de CPU utilizada não impacta positivamente no tempo de execução da simulação. Sendo que esta quantidade threads está relacionada à quantidade de átomos do sistema. Deste modo, propomos um algoritmo que utiliza como parâmetro a quantidade de átomos do sistema e a configuração de hardware de modo a obter o melhor balanço de eficiência. A utilização do algoritmo torna a simulação molecular mais eficiente em termos energéticos e temporais, explicitando técnicas de computação verde e de computação de alto desempenho. Este impacto positivo pode levar a uma melhoria em experimentos que utilizam como base a simulação molecular como o ensemble docking que é utilizado pelo software HTP SurflexDock, desenvolvido pelo LQFPP-CBB-UENF. A integração de algoritmos otimizados não apenas eleva a eficiência das simulações moleculares, mas também avança a bioinformática rumo a um futuro mais sustentável e energeticamente consciente.