A detailed molecular simulation visualization. A large, green, textured surface represents a protein or membrane. Inside and around it are numerous small spheres (purple, yellow, blue) and a complex network of red and blue lines, likely representing a polymer or a specific molecular structure. The background is a light gray, textured surface.

HPC em Simulações Moleculares

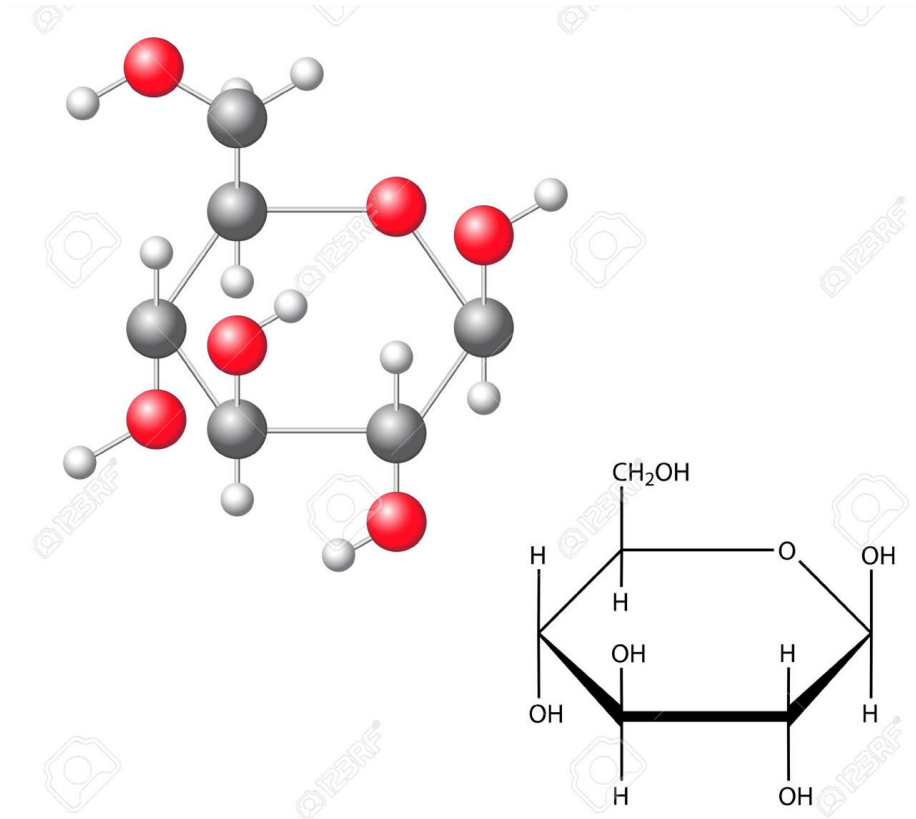
Paulo Burke
Tárcius Ramos

Introdução à Programação Concorrente, Paralela e Distribuída

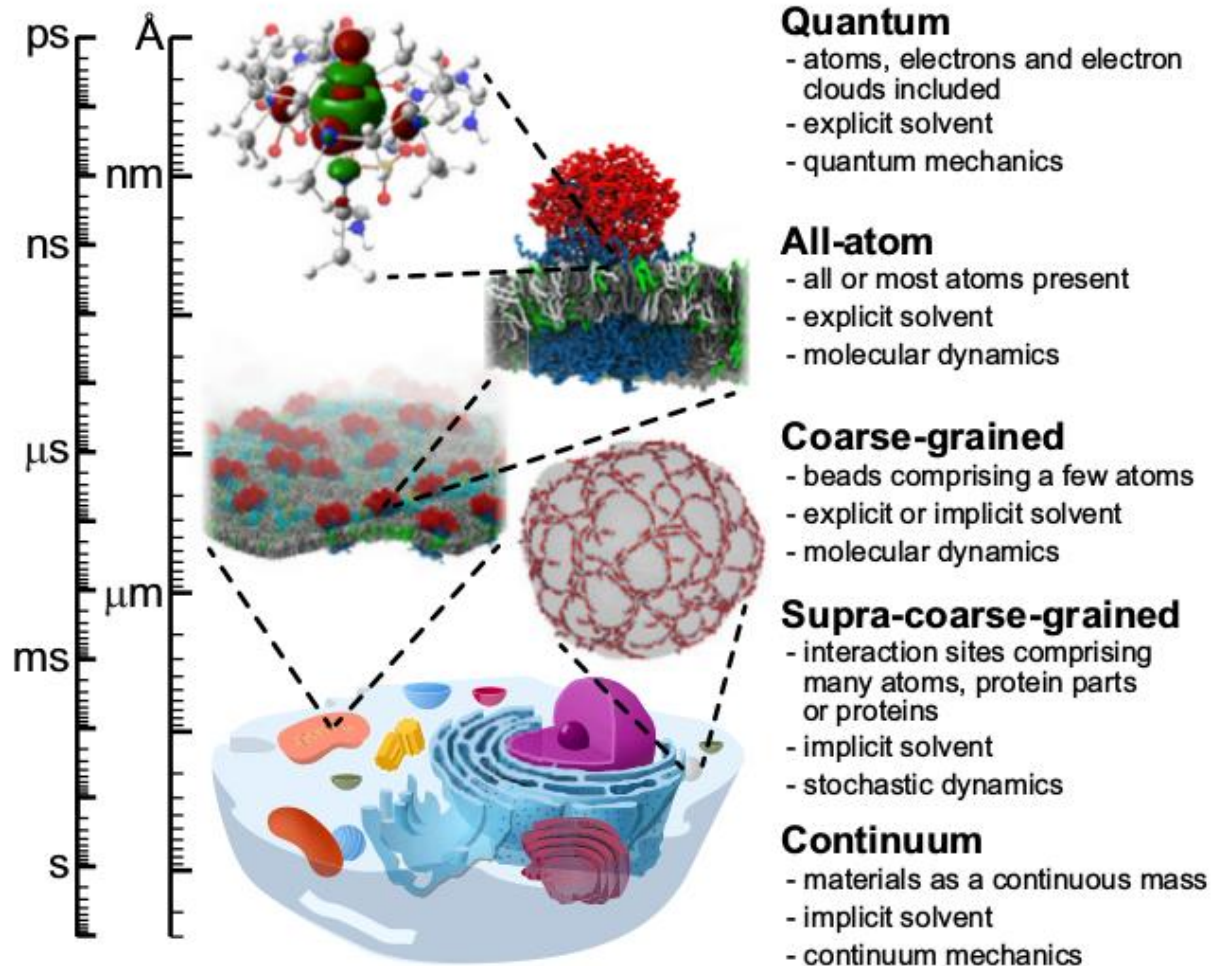
08/06/2017

Introdução ao Problema

- Dinâmica Molecular

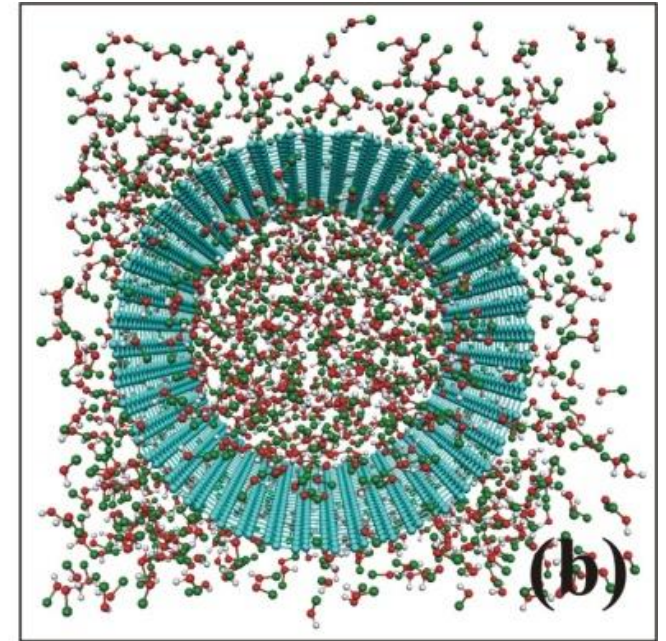
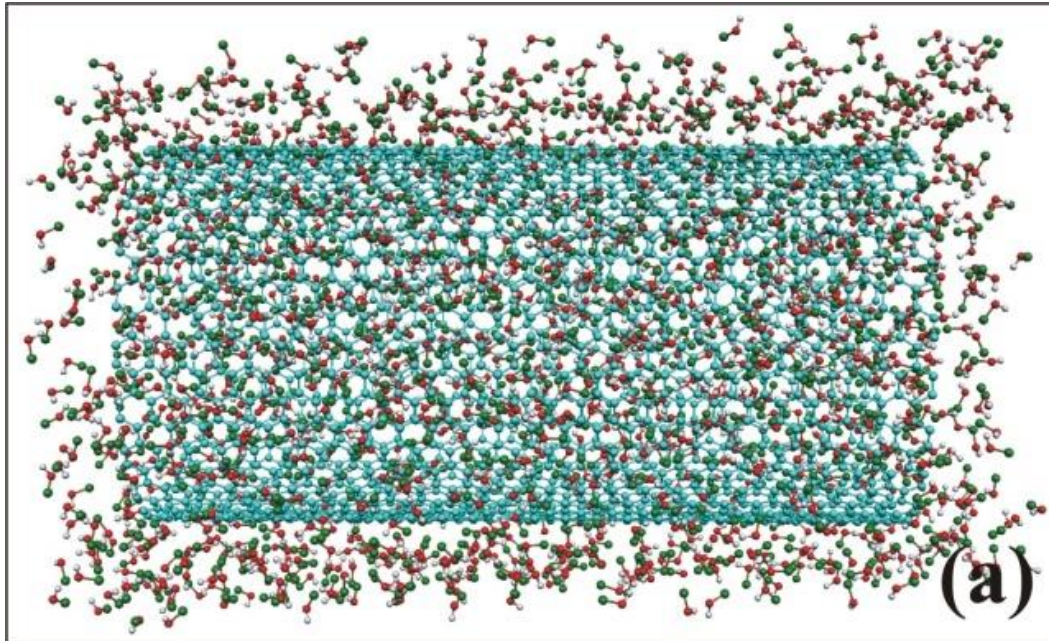


Introdução ao Problema



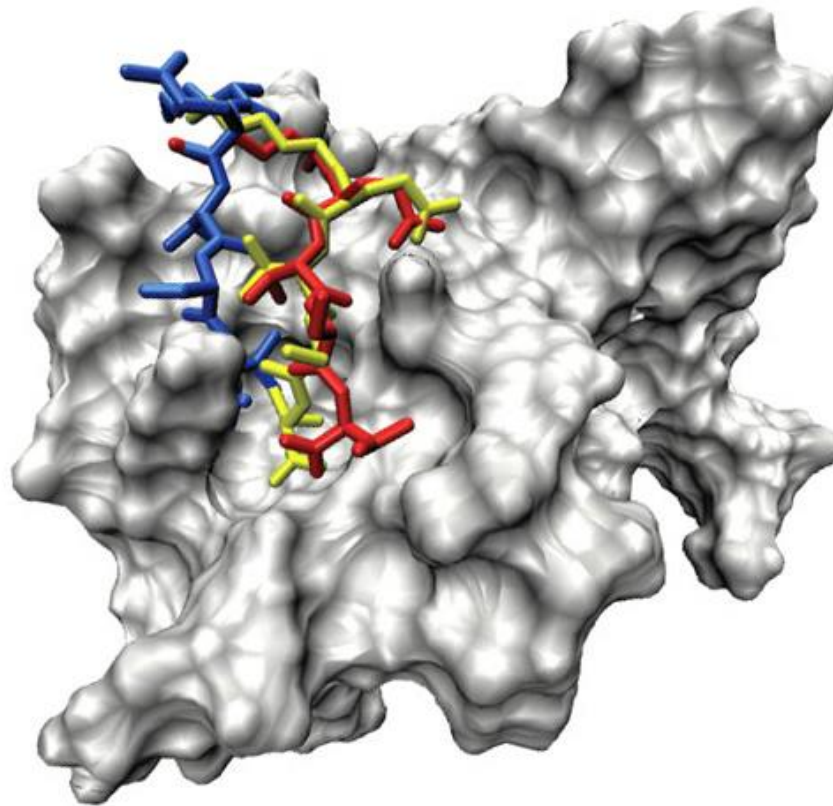
Aplicações

Engenharia de materiais: Nanotubo de carbono



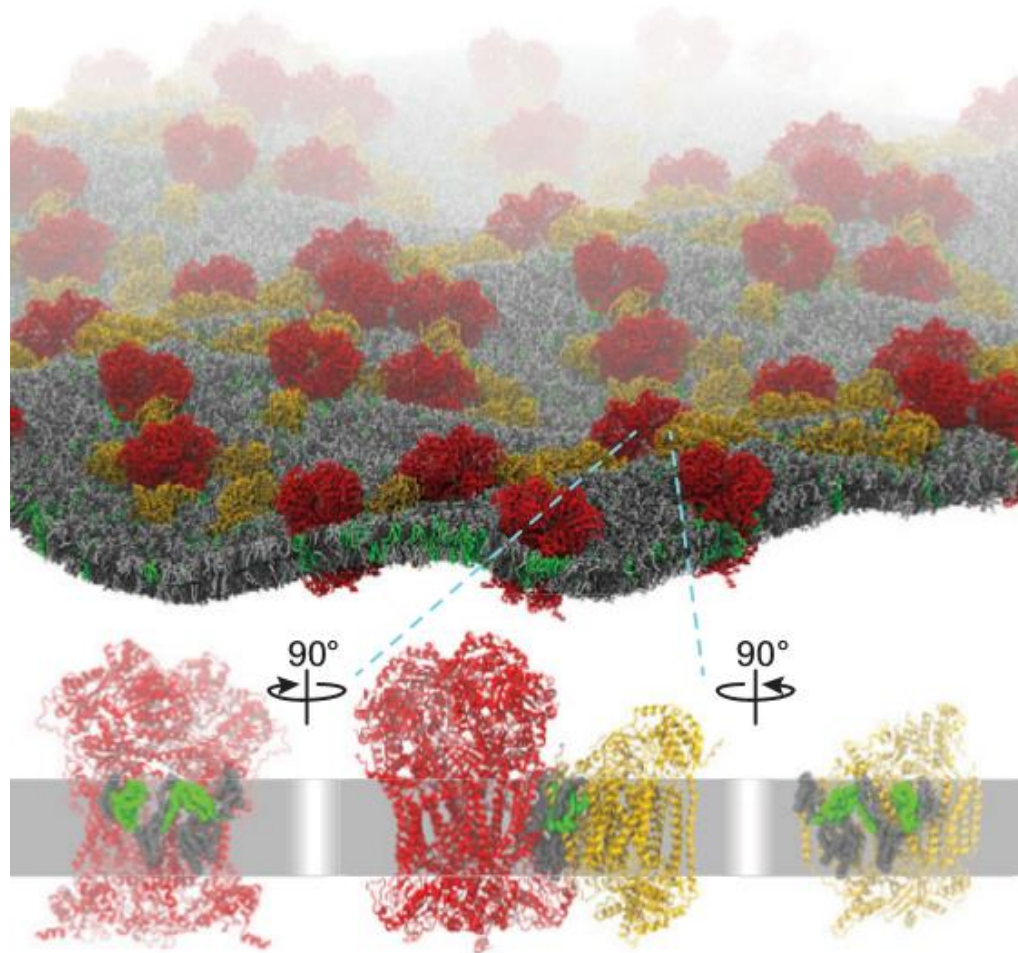
Aplicações

Biologia: Interação Proteína-Ligante

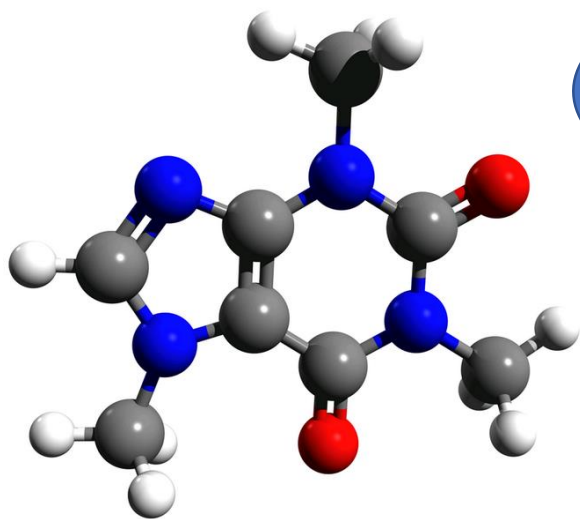


Aplicações

Biologia: Interação Proteína-Membrana

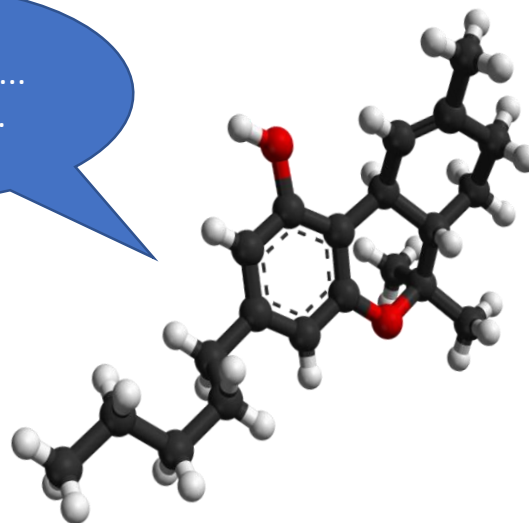


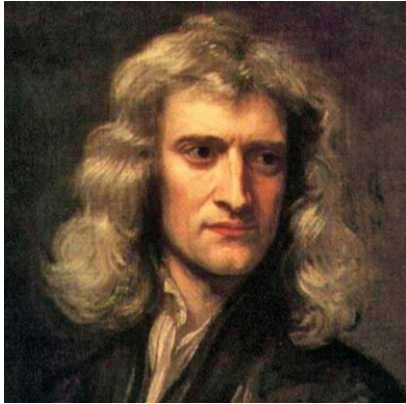
Modelagem Molecular



Oi, eu sou a
caféina. Quem é
você?

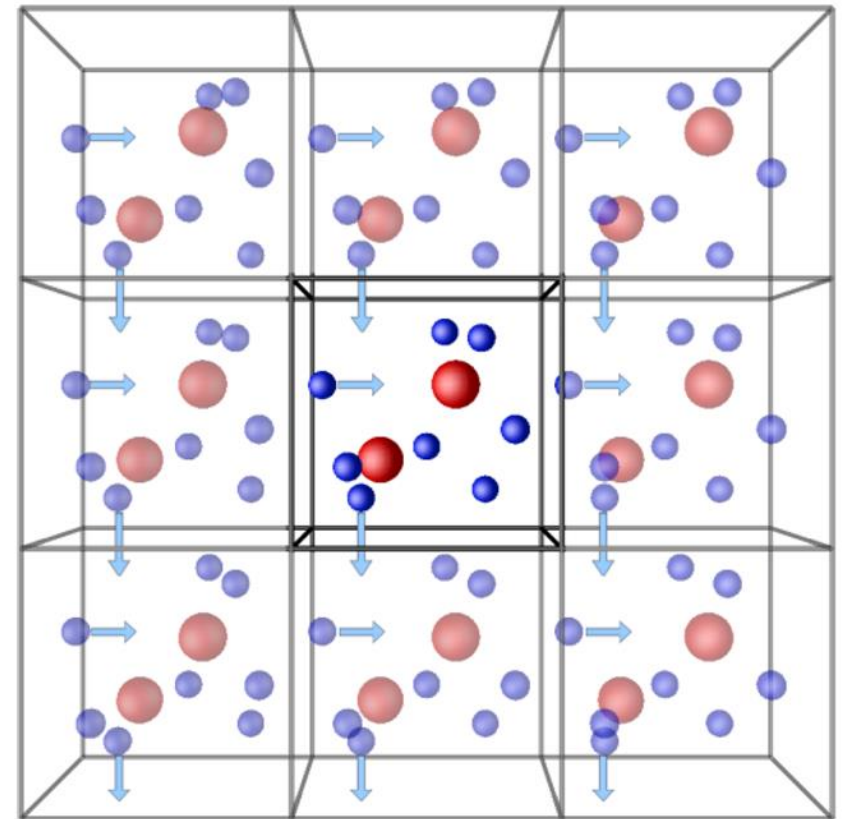
Bacana... Eu...
Maconha...



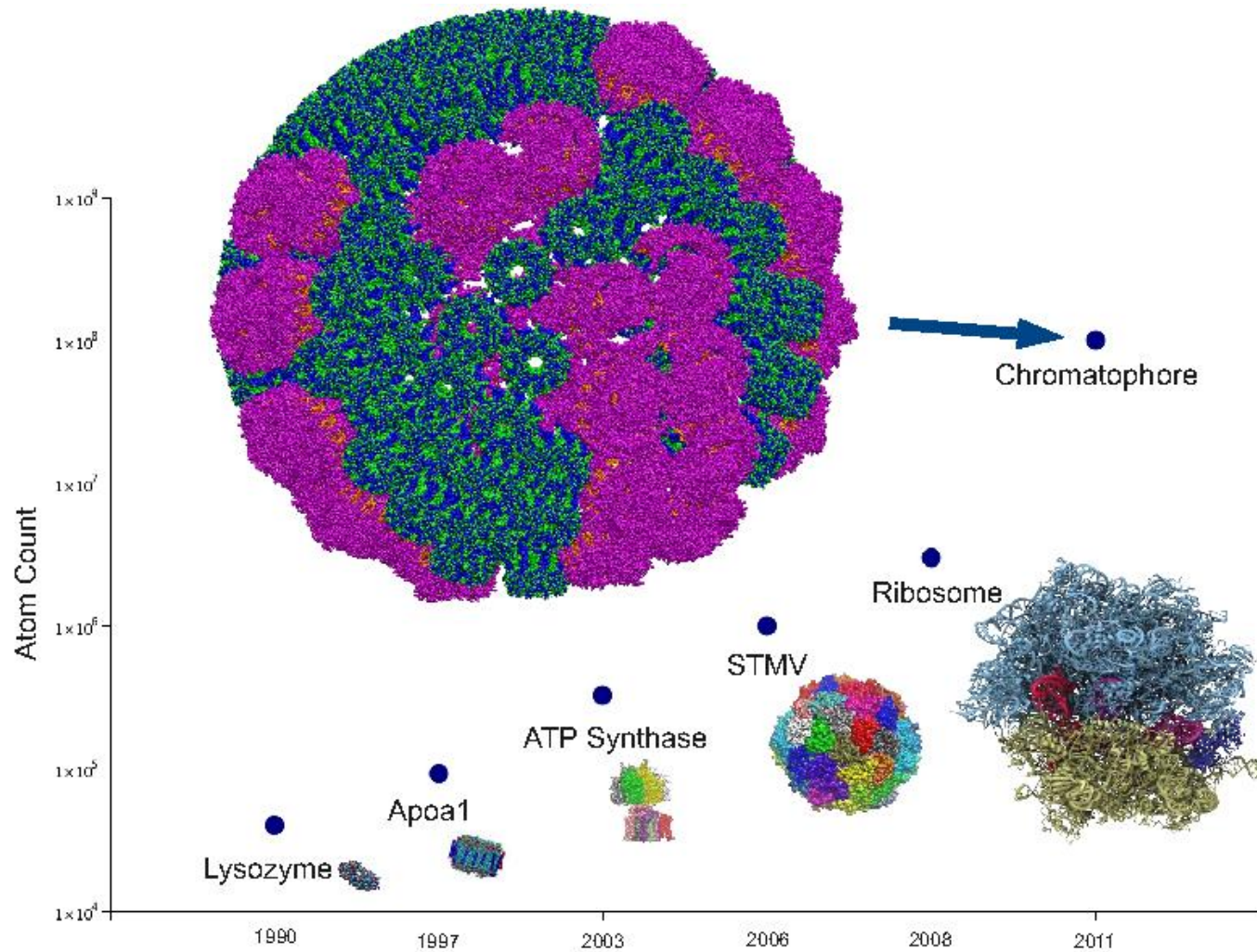


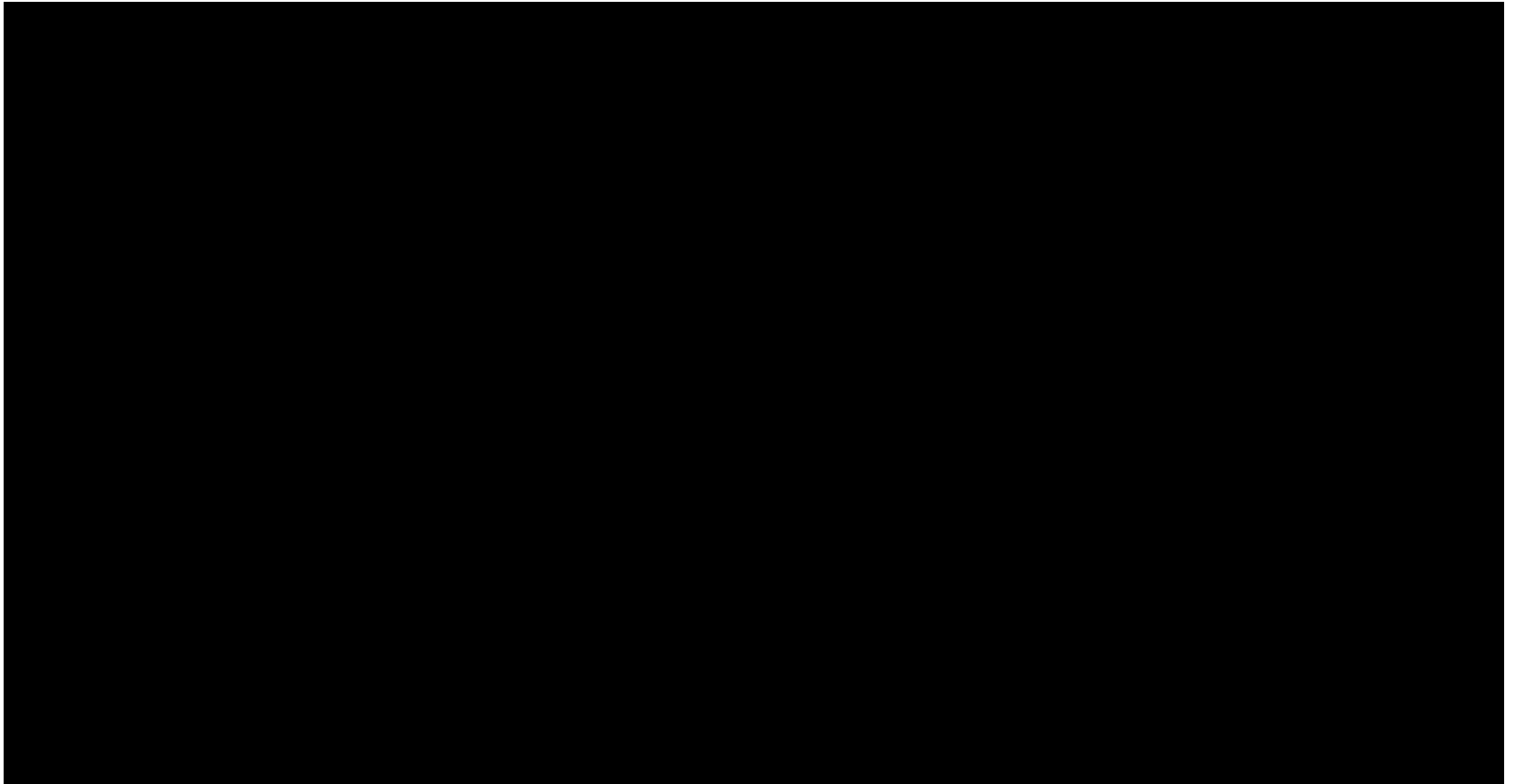
Podemos utilizar equações!

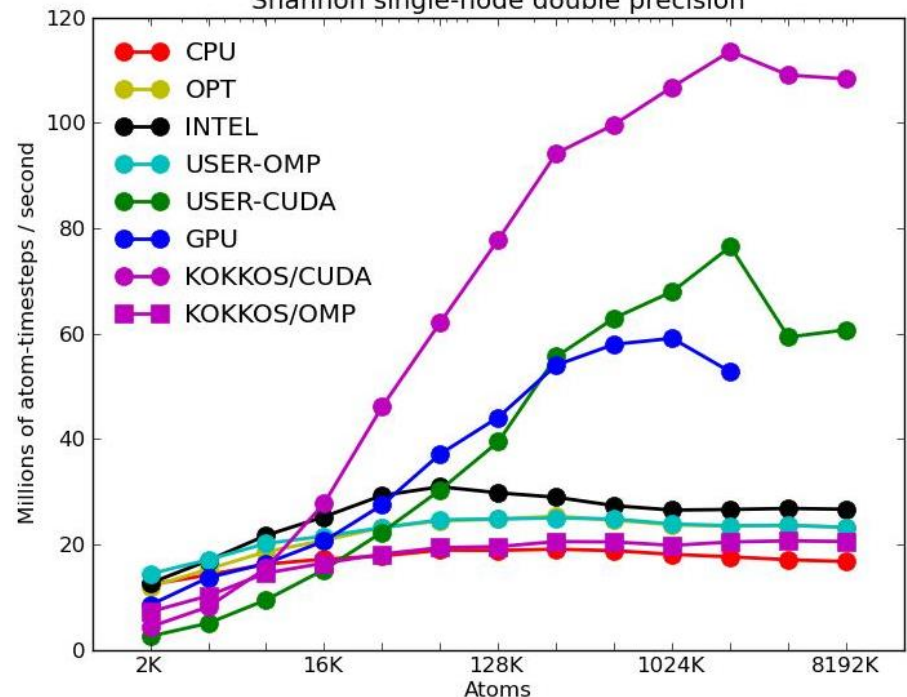
- O que tem que ter nas equações?
- Quanto custa uma simulação?
 - Essencialmente com N^2 .
- Como melhorar a performance?



Capacidade de Simulação

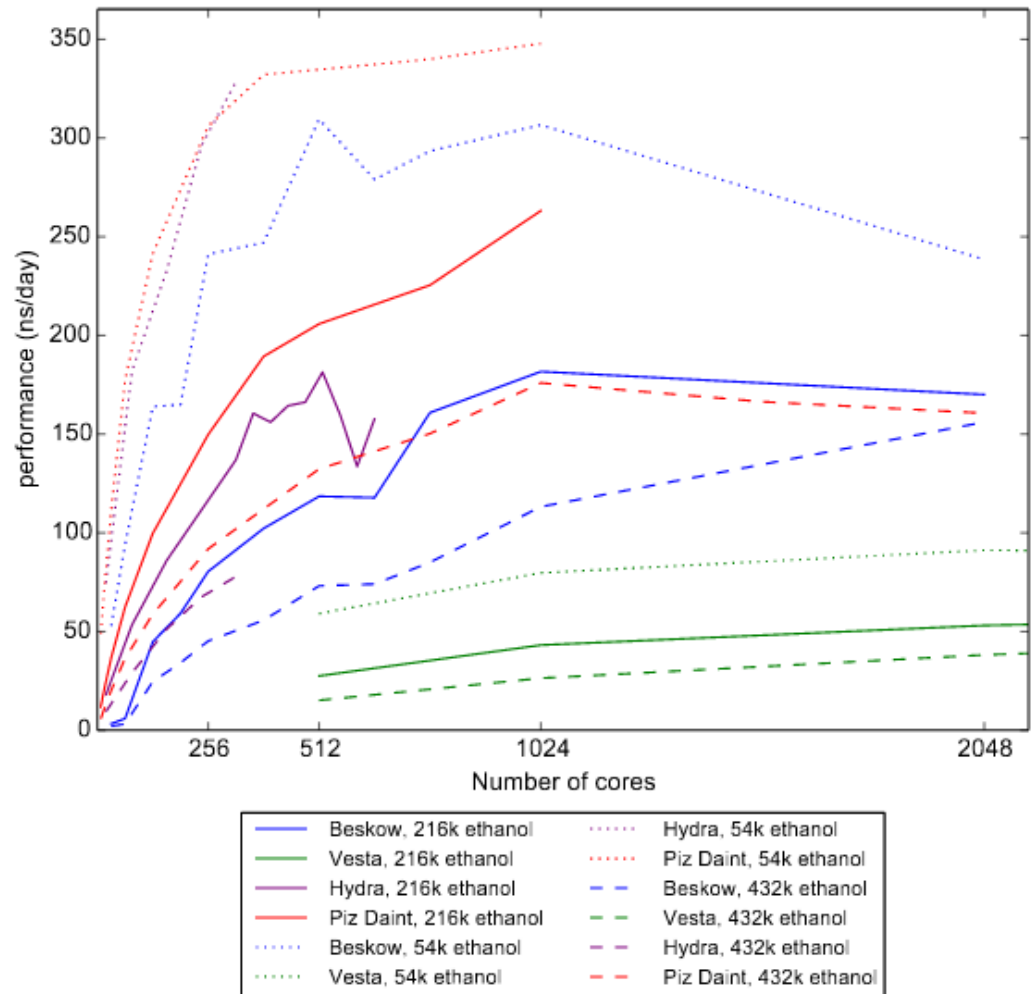






Gromacs

- ❖ Baseado no software Fortran 77 GROMOS
- ❖ Implementado em 91 na linguagem C
- ❖ Suporta MPI, OpenMP e GPU



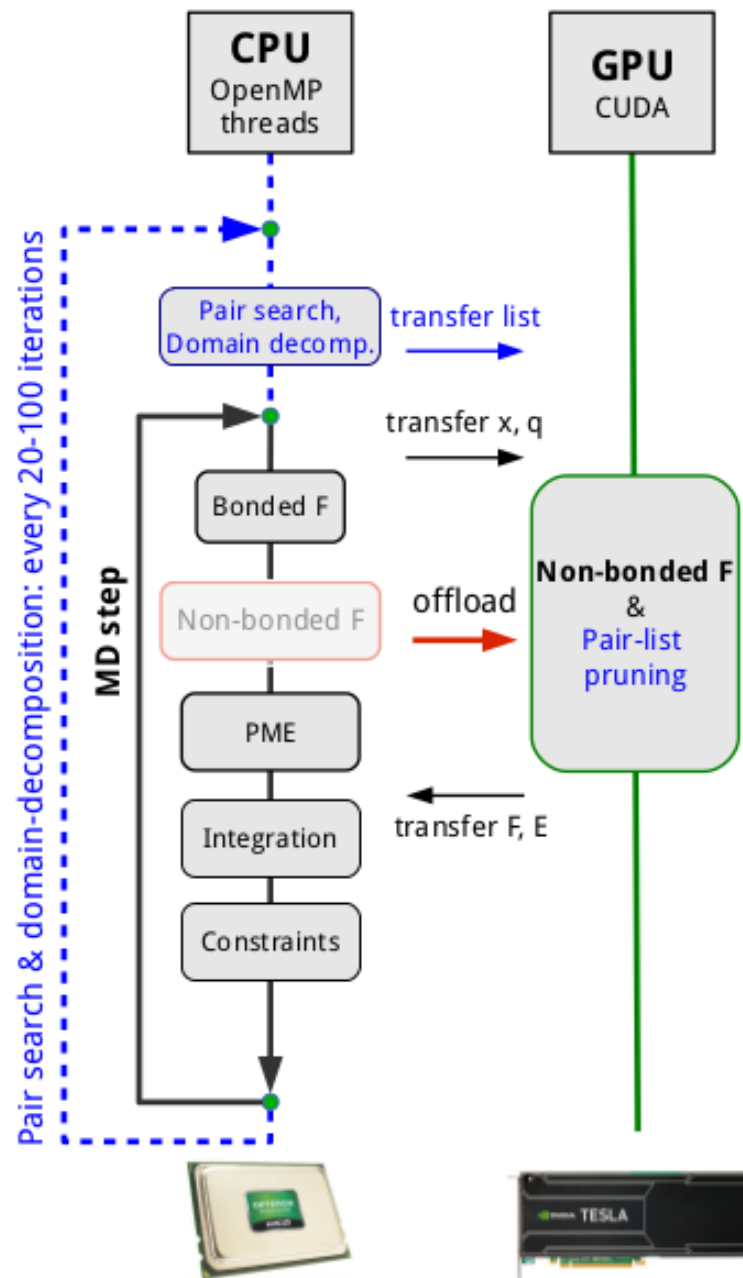
Beskow: 16 cores por nó - Xeon E5-2698v3

Piz Daint: 8 cores por nó - Intel Xeon E5-2670 + 1 NVIDIA Tesla K20X GPU

Hydra: 10 cores por nó - Intel Xeon E5-2680 + 2 NVIDIA K20X GPUs

Vesta: 6 cores por nó - PowerPC A2

Gromacs



Supercomputadores

USP CLOUD

- AGUIA
 - 64 servidores
 - 1280 cores (Intel Xeon 2.40 GHZ)
 - 32768 GB de memória RAM (25 GB por core)
- LINCE
 - 32 servidores
 - 512 cores (Intel Xeon 2.40 GHZ)
 - 4128 GB de memória RAM (8 GB por core)
 - 2 placas Tesla K20m
- Blue Gene / Q
 - 1024 servidores
 - 16384 cores
 - 16384 de memória RAM (16 GB por core)

GRID UNESP

- 256 servidores SUN X4150
- 2048 cores (Intel Xeon 2.83 GHZ)
- 4096 GB de memória RAM (2 GB por core)
- Inteconexão Infiniband 4X DDR (20 Gbps)





SINAPAD

- Santos Dumont – LNCC
 - 756 servidores
 - 18144 cores (Intel Xeon 2.40 GHZ)
 - 48384 GB de memória RAM (2.7 GB por core)
 - 198 servidores com 2 placas Nvidia K40
 - 54 servidores com 2 placas Xeon PHI 7120
 - 1 servidor com 240 cores e 6 TB de RAM.
- CENAPAD - Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho
 - 9 Unidades em todo o Brasil.

Perspectivas para Hexascale

