Dinámica Molecular

Una pequeña introducción a la computación de alto desempeño

Pablo N. Alcain

WTPC 2018 - UNQ

¿Qué es la dinámica molecular?

Uno de los *benchmarks* informales en HPC

Física simple: partículas que interactúan entre sí con Newton

Mucha versatilidad

Núcleo de ejecución crítico en tiempo de fácil identificación

¿Qué es la dinámica molecular?

Uno de los *benchmarks* informales en HPC

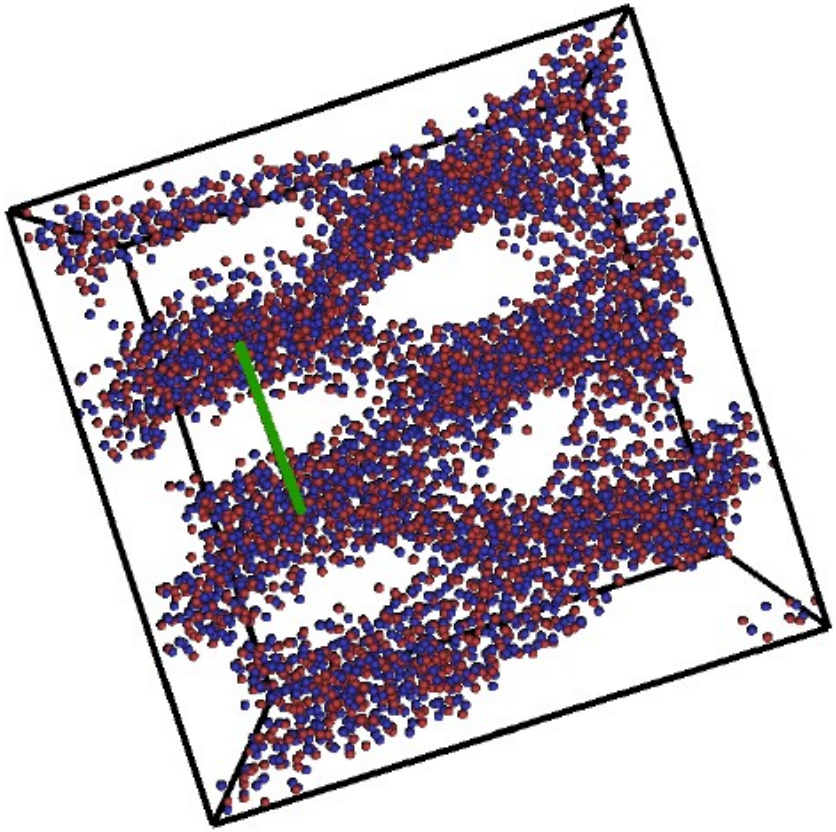
Física simple: partículas que interactúan entre sí con Newton

Mucha versatilidad

Núcleo de ejecución crítico en tiempo de fácil identificación

Ideal para hacer una **interfaz de C/Python**

¿Qué es la dinámica molecular?



Give atoms initial positions $\boldsymbol{r}^{(t=0)}$, choose short Δt

↓

Get forces $\boldsymbol{F} = -\nabla V(\boldsymbol{r}^{(i)})$ and $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{F}/m$

↓

Move atoms: $\boldsymbol{r}^{(i+1)} = \boldsymbol{r}^{(i)} + \boldsymbol{v}^{(i)} \Delta t + \frac{1}{2} \boldsymbol{a} \Delta t^2 + \ldots$

↓

Move time forward: $t = t + \Delta t$

↓

Repeat as long as you need

Con qué arrancamos

Primera opción

Núcleo crítico escrito en C

Separado en estructuras

~340 líneas de código

Buena performance en rt

Con qué arrancamos

Segunda opción

Interfaz con el usuario en Python

Separado en clases

~400 líneas de código
~300 líneas de test

Interfaz versátil

Con qué arrancamos

Segunda opción

Interfaz con el usuario en Python

Separado en clases

~400 líneas de código
~300 líneas de test

Interfaz versátil

Qué pueden hacer

Generar la interfaz de C con Python

Graficar (¿en tiempo real?) energías [magnitudes colectivas]

Hacer una linda interfaz Python/usuario (¿gráfica?)

Agregar otros tipos de interacciones entre partículas

Medir otras mangitudes colectivas

Dinámica Molecular

Una pequeña introducción a la computación de alto desempeño

Pablo N. Alcain

WTPC 2018 - UNQ