**República Federativa do Brasil**
Ministério da Indústria, Comércio Exterior
e Serviços
Instituto Nacional da Propriedade Industrial

**(11) PI 0610329-4 B1**

**(22) Data do Depósito:** 20/01/2006

**(45) Data de Concessão:** 25/07/2017

**(54) Título:** BALANCEAMENTO DE CARGA POR PARTICIONAMENTO ESPACIAL DE CENTROS DE INTERAÇÃO.

**(51) Int.Cl.:** G06F 9/45

**(30) Prioridade Unionista:** 25/04/2005 US 11/113,939

**(73) Titular(es):** INTERNATIONAL BUSINESS MACHINES CORPORATION

**(72) Inventor(es):** BLAKE G. FITCH; ROBERT S. GERMAIN; MICHAEL C. PITMAN; ALEKSANDR RAYSHUBSKIY

Relatório Descritivo da Patente de Invenção para: **"BALANCEAMENTO DE CARGA POR PARTICIONAMENTO ESPACIAL DE CENTROS DE INTERAÇÃO"**.

Campo da Invenção

A invenção divulgada diz respeito, de modo amplo, ao campo dos sistemas de processamento da informação e métodos e mais particularmente refere-se a sistemas e métodos utilizados para simulações de n corpos incluindo simulações biomoleculares e processamento, tal como proteínas e dobramento do DNA.

Fundamentos da Invenção

A biotecnologia tem avançado significativamente com o uso de poderosos sistemas de processamento de informação. Um tal sistema é o *Blue Gene Project* anunciado em 1999. Naquele tempo, o *Blue Gene Project* tinha dois objetivos de alto nível: a construção do supercomputador mais rápido do mundo e usar este recurso computacional sem precedentes para resolver o grande desafio dos problemas de ciências da vida, tais como avançar nossa compreensão dos processos biológicos importantes, em especial, a mecanismos por detrás do dobramento da proteína.

Como uma etapa no caminho para alcançar o primeiro destes objetivos, o primeiro membro da família Blue Gene, Blue Gene / L, foi projetado e construído. Ver N. R. N. R.

Adiga et al. *An overview of the Blue Gene/L supercomputer.* Em Super computing 2002 Proceedings, novembro de 2002. http://www.sc-2002.org/paperpdfs/pap.pap207.pdf. Para endereçar o segundo destes objetivos, um projeto de pesquisa foi iniciado para criar um pacote de software da dinâmica molecular clássica orientada à arquitetura Blue Gene / L e utilizar o pacote para simulações biomolecualres de longo prazo e larga escala. Ver F. Allen et al. Blue Gene: *a vision for protein science using a petaflop supercomputer.* IBM Systems Journal, 40(2):310-327, 2001.

A dinâmica molecular clássica é predominantemente um problema de n corpos. A definição padrão de um problema de n corpos é o seguinte: O problema de n corpos é o problema de encontrar, dadas as posições iniciais, massas e velocidades dos n corpos, os seus movimentos subsequentes, conforme determinado pela mecânica clássica. Um problema de n corpos, por exemplo, dinâmica molecular (MD), continua como uma seqüência de etapas de tempo de simulação. A cada etapa de tempo, as forças sobre as partículas, em átomos de MD, são computadas, e em seguida, as equações do movimento são integradas para atualizar as velocidades e as posições das partículas. A fim de calcular as forças sobre as partículas, nominalmente, a força entre cada partícula e

todas as outras partículas é computada, uma carga computacional de O ($N^2$).

Falando em termos práticos, programas de dinâmica molecular reduzem a O ($N^2$) por meio de corte de interações pares a alguma distância. No entanto, para muitos sistemas moleculares cientificamente relevantes, a carga computacional devido à interação de pares de partículas permanece grande. Para alcançar tempos de simulação cientificamente relevantes, computadores paralelos são necessários para calcular interações de pares de partículas rapidamente. Ver B. G. Fitch, R.S. Germain, M. Mendell, J. Pitera, M. Pitman, A. Rayshubskiy, Y. Sham, F. Suits, W. Swope, TJ.C. Ward, Y. Zhestkov, e R. Zhou, "Blue Matter, an application framework for molecular simulation on Blue Gene" Journal of Parallel and Distributed Computing, 63:759-773, 2003.

Note que a plataforma computacional paralela Blue Gene / L faz comunicação interprocessador principalmente usando uma rede toro 3D. O espaço do processador é definido pela localização dos processadores sobre rede 3D tórus e os custos de comunicação entre os processadores aumentam com a distância. Existe uma necessidade de um sistema e método para habilitar o problema dos n corpos geométricos a ser eficientemente mapeado (por exemplo, para uma máquina com

um espaço processador fundamentalmente geométrico, como Blue Gene / L).

Sumário da Invenção

Resumidamente, de acordo com uma concretização da invenção, um método para criar um particionamento espacial balanceado de carga de um sistema de difusão estruturado de partículas com interações em pares, inclui as etapas de: atribuição de um peso, o que corresponde a um custo computacional para uma interação de pares, até um ponto no espaço de simulação entre as duas partículas (quando a implementação preferida é a de atribuir este custo para o ponto médio das duas posições de partículas); realizar um particionamento espacial do espaço de simulação, e atribuir a computação da interação em pares a qualquer nó que tem as posições das duas partículas.

O método também pode ser implementado como instruções executáveis por máquina executadas por um sistema de processamento de informação programável ou como lógica codificada física em aparelho de computação especializado, tais como um circuito integrado específico para aplicações (ASIC).

Breve Descrição dos Desenhos

A figura 1 é um fluxograma de um método de acordo com uma concretização da invenção.

A figura 2 é um diagrama de bloco de alto nível mostrando um sistema de processamento de informações, de acordo com outra concretização da invenção.

A figura 3 é uma vista de um sistema bidimensional com ambas as posições das partículas e centros interação mostrados.

A figura 4 mostra uma decomposição espacial mostrando as zonas de difusão para dois nós superpostos sobre a decomposição espacial do domínio em todos os nós (visão bidimensional por simplicidade).

Descrição Detalhada

Na discussão que se segue, vamos utilizar as seguintes definições / convenções:

Para algumas simulações de n corpos, é conveniente definir uma partição das partículas em grupos de uma ou mais partículas que são tratados como uma unidade para determinados fins.

Quando isso é pretendido, o termo "fragmento" será utilizado para indicar uma entidade desse tipo que consiste de uma ou mais partículas.

O termo "nó" refere-se aos elementos computacionais que formam nós no gráfico definido pela rede de interconexão. Qualquer "nó" pode incluir um ou mais

processadores. As operações internas de um nó não serão abordadas neste relatório descritivo.

O termo "espaço de simulação" refere-se ao domínio da simulação de n corpos.

O termo "nó espacial" refere-se à geometria das interconexões entre os nós da máquina. Tipicamente, iremos discutir uma máquina com uma geometria de interconexão de tórus / malha tridimensional, na qual cada nó está ligado a seus seis vizinhos mais próximos e é endereçado por um trio de inteiros que representam suas coordenadas dentro da rede. Em um toro, condições de contorno periódicas são implementadas fisicamente, pela conexão dos nós em faces opostas da máquina.

Referindo-se à figura 1, é mostrado um fluxograma ilustrando um método 100, de acordo com uma concretização da invenção, para a criação de uma particionamento espacial balanceado de carga de um sistema de difusão estruturado de partículas com interações em pares que é escalonável para um grande número de nós e tem características de comunicação favoráveis.

A etapa 102 define um espaço de simulação compreendendo uma pluralidade de partículas e uma pluralidade de nós de processadores. Esta etapa 102 pode ser realizada utilizando-se uma árvore kd no espaço de

simulação. Ver Volker Gaede and Oliver Günther, Multidimensional Access Methods, ACM Computing Surveys, 30(2): 170-231, junho 1998.

Para lidar com o desequilíbrio estrutural no espaço do nó, a etapa 104 determina um peso correspondente ao custo computacional para uma determinada interação de pares de partículas, ou grupos de partículas localmente agregados, ao espaço de simulação em um ponto entre estes fragmentos, tal como o ponto médio da distância entre os fragmentos. Cada um dos fragmentos pode incluir uma única partícula.

A etapa 106 atribui o peso determinado a um ponto no espaço de simulação entre os locais das duas partículas em interação. O ponto é, de preferência, o ponto médio entre os fragmentos em interação. A posição de cada partícula é transmitida aos pontos no espaço de simulação dentro de uma distância de metade do raio de corte.

A etapa 108 realiza um particionamento espacial do volume do espaço de simulação tal que todas as partições tenham substancialmente o mesmo peso.

A etapa 110 atribui um cálculo da interação dos pares de fragmentos para qualquer nó que tem as posições de ambos os fragmentos.

Para simplificar o processamento, as interações em par podem ser de corte, além de um raio definido $R_c$, pois pode-

se transmitir a posição de uma partícula ao grupo dos nós contendo uma parte da esfera do raio $R_b > R_c / 2$ em espaço de simulação, assegurando a existência de pelo menos um nó contendo as posições de ambas as partículas necessárias para computar qualquer interação. Quando mais de um nó contém as posições necessárias para computar uma interação, o cálculo pode ser atribuído a qualquer um desses nós, proporcionando uma oportunidade para eliminar os desequilíbrios causados por flutuações de curto prazo locais na carga de trabalho de interação. Porque estamos efetuando o balanceamento de carga utilizando centros de interação, existem muitos outros objetos de trabalhos geometricamente distintos que podem ser particionados usando uma estratégia ORB e essa decomposição permite o uso produtivo de mais nós do que existem partículas no sistema.

Embora nas concretizações aqui discutidas, o método é realizado com uma rede de nó de processador que inclui um formato toroidal, o método pode ser aplicado a outras topologias de rede com bons resultados.

Referindo-se à figura 2, é mostrado um diagrama de blocos de um sistema de tratamento de informação 200, de acordo com uma concretização da invenção. O sistema 200 representa qualquer nó de processamento na rede de nó de múltiplos processadores. O sistema 200 inclui um

processador 202, uma memória 204, e um subsistema de entrada / saída (E / S) 206.

A memória 204 pode ser uma memória de acesso aleatório (RAM) volátil ou não. O sistema 200 pode também incluir uma memória de leitura somente (ROM) 210 e um dispositivo de armazenamento de massa de mídia magnética, como uma unidade de disco rígido 212. Estes são ligados por um barramento de CPU 208.

O subsistema de E / S 206 pode ainda incluir diversas interfaces de usuário final, como um monitor, um teclado e um mouse. O subsistema de E/S 206 pode ainda incluir uma conexão a uma rede, tais como uma rede de área local (LAN) ou rede de área lateral (WAN), como a Internet. De acordo com outra concretização da invenção, uma mídia legível por computador, como um CD-ROM 214 pode incluir instruções de programa para o funcionamento do computador programável 200, de acordo com a invenção. O que foi demonstrado e discutido é uma representação altamente simplificada de um dispositivo computacional programável. Aqueles qualificados na técnica irão apreciar que outros componentes de baixo nível e as conexões são necessários em qualquer aplicação prática de um dispositivo computacional.

Uma concretização da invenção eficientemente resolve o problema de n corpos através de mapeamento geométrico do

espaço de simulação para um espaço de nó de computador paralelo de toro / malha, uma decomposição espacial. O mecanismo essencial para distribuir o trabalho é uma difusão elipsoidal das posições de partículas seguida eventualmente por uma redução elipsoidal das forças nos nós de origem dos fragmentos.

Primitiva Geométrica de Comunicação Elipsoidal

As primitivas geométricas de comunicação elipsoidal são um requisito básico para esta concretização. Estas podem ser construídas usando comunicação ponto a ponto, no entanto, o hardware pode oferecer recursos para melhorar o desempenho destas primitivas geométricas tais como múltiplos tons de cores. Para os efeitos da presente discussão, iremos descrever os requisitos funcionais da primitiva geométrica da comunicação elipsoidal, mas não a sua implementação.

No nosso mapeamento do espaço de simulação para o mapeamento de espaço de nó, nós dividimos espaço de simulação no mesmo número de sub-volumes, à medida que temos nós e, ainda, a espaço de simulação terá a mesma extensão (medida em voxels) em cada dimensão do espaço de nó (medida em nós). Os elementos de volume atribuídos a cada processador (ou voxels) podem ser de tamanho não uniforme.

Os padrões de comunicação elipsoidal no espaço de nó surgem quando padrões de comunicação esfericamente delimitados no espaço de simulação são realizados e quando os voxels no espaço de simulação não são não uniformes em tamanho ou não cúbicos. As duas operações de interesse são: (1) difusão elipsoidal: dada uma esfera no espaço de simulação, transmitir dados a partir do centro para cada nó que gerencia espaço naquela esfera, e (2) redução elipsoidal: dada uma esfera no espaço de simulação, teta - reduzir os dados de cada nó que gerencia espaço naquela esfera para a raiz no centro.

Decomposição Espacial dos n Corpos de Balanço de Carga

Problemas dos n corpos em um espaço de simulação periódico nominalmente tem uma carga computacional definida pela ordem O ($N^2$) de interações de partículas em pares possíveis. Em muitas aplicações, esta carga computacional é reduzida para O (N) pelo corte (ou seja, não computando) interações entre partículas separadas por mais do que uma determinada distância em espaço de simulação periódicos.

Uma forma natural para mapear um problema espacial em uma máquina conectada espacial é com um mapeamento direto onde o espaço de simulação é uniformemente alocado para os espaço de processadores. Para sistemas de n corpos (partindo do princípio de que todas as interações em pares

têm o mesmo custo computacional), com uma densidade uniforme de partículas ou onde nenhum corte é imposto, este simples mapeamento irá resultar em uma carga equilibrada em toda a máquina uma vez que cada nó ou região de nós terá aproximadamente a mesma carga de trabalho computacional de interação.

Se partículas não são uniformemente distribuídas no espaço de simulação e cortes de interação estão em vigor e / ou custos computacionais de interação não são os mesmos, um mapeamento direto resulta em desequilíbrio de carga. Existem técnicas para desequilíbrio de carga de localmente ponderada entre os nós. No entanto, se o desequilíbrio é grave o suficiente, estas técnicas de ponderação regional podem ser ineficazes.

Para qualquer distribuição de partículas fixas, as técnicas como biseção recursiva ótima (ORB) podem ser usadas para equilibrar a carga computacional em cada nó, atribuindo espaço de simulação de particionamento em sub-volumes não uniforme que serão atribuídos ao nós. Ver L. Nyland, J. Prins, RH Yun, J. Hermans, H.-C. Kum, e L. Wang. *Achieving scalable parallel molecular dynamics using dynamic spatial decompositions techniques. Journal of Parallel and Distributed Computing*, 47 (2): 125-138, 1997.

Uma ORB pode ser construida a partir de uma distribuição de pontos representando partículas ou centros de fragmentos, ou como discutido abaixo, pontos médios das interações em pares. Antes da construção da ORB, uma função que estima o trabalho associado a cada ponto é avaliada e armazenada com o ponto. No caso dos pontos medidos de interação em pares, isso corresponde ao trabalho necessário para avaliar as forças entre os pares de partículas ou fragmentos. A construção de ORB começa com os contornos periódicos da célula de simulação, como o volume inicial, bem como a distribuição de pontos com os seus valores de trabalho associados. A aplicação da técnica de ORB particiona uma células unitária em duas células menores 2N. Para os casos em que N é divisível por 3, o número de subvolumes será igual em cada dimensão (número de subvolumes = 8,64512,4096, ...).

O volume de célula de simulação é particionado recursivamente em ciclos. Cada ciclo corta um volume ao longo de cada dimensão em sucessão, dando oito subvolumes no final do ciclo. Cada biseção começa a partir da classificação da distribuição de pontos dentro do volume ao longo de uma das suas dimensões e localização do ponto mais próximo ao mediano da distribuição dos valores de trabalho associados a cada ponto. O volume é então dividido com um

plano ortogonal à dimensão ordenada passando pelo ponto selecionado. Os pontos no subvolumes de cada lado do plano são, então, classificados separadamente ao longo de outra dimensão, e particionados de acordo com os pontos próximos da mediano da distribuição de trabalho para suas respectivas distribuições de valor de trabalho. Cada um dos quatro subvolumes resultantes são, então, ordenadas na dimensão final e particionados, dando oito partições do volume original. Este ciclo repete-se recursivamente para cada um dos oito subvolumes até o número desejado de subvolumes seja alcançado, que é igual ao número de nós a ser usado na simulação. Para os casos em que N não é divisível por três, o primeiro ciclo particiona ao longo de uma ou de duas dimensões, em vez de três. Os demais ciclos, em seguida, particionaraão ao longo de cada uma das três dimensões.

O particionamento de ORB resultante do espaço de simulação reduz drasticamente a variância do trabalho necessário para calcular as forças representadas pelos pontos em um dado subvolume. A atribuição do trabalho representada pelos pontos em cada subvolume para um nó prevê, portanto, uma primeira etapa no balanceamento de carga. Um dado problema de n corpos pode exigir múltiplas técnicas de balanceamento de carga. Uma ORB pode ser

necessária para equilibrar o desequilíbrio global causado pela estrutura do sistema que está sendo simulado e um esquema de intercâmbio de trabalho local pode ser necessários para os desequilíbrios causados por difusão. Ver T.P. Straatsma e J. A. McCammon. Load balancing of molecular dynamics simulation with NWChem. IBM Systems Journal, 40 (2): 328-341, 2001.

Decomposição dinâmica molecular com base em primitivas geométricas de comunicação elipsoidal

Atribuição de interação ótima usando ORBs e balanceamento de interação dinâmico.

Dinâmica Molecular aplicada à simulação biomolecular de problemas de tamanho fixo sobre espaço de nós geométricos muito grandes exige um espaço de simulação para mapeamento de espaço de nó que mantém tanto quanto localmente possível, enquanto equilibra a carga de trabalho. Isso é de modo que os custos de comunicação e os custos de computação são minimizados em equilíbrio.

Uma vez que o nosso problema de n corpos tem desequilíbrio estrutural causado por não homegeneidades no sistema, nós criaamos uma partição de espaço de simulação com base em ORB que divide a carga de trabalho uniformemente assumindo um peso nominal para cada interação em pares e um corte especificado. No limite que a taxa

entre o número de partículas para contagem de nó é pequena, pode ser desejável iniciar dividindo o espaço de simulação usando biseção recursiva ótima e então mudar para uma biseção rigorosa volumétrica perto das folhas para melhorar o equilíbrio de nível micro da atribuição de partículas.

A figura 3 contém uma visão de um sistema bidimensional com ambas as posições das partículas e centros de interação mostrado. A figura 3 ilustra a relação das posições de partículas (cada uma mostrada como pontos maiores) e dos centros de interação (cada um mostrado como um ponto pequeno) no espaço de simulação. Os centros de interação são colocados em um ponto médio entre cada par de partículas que caem dentro do raio de corte. Um círculo tracejado com raio igual ao raio de corte ($R_C$) escolhido é desenhado em torno de uma das partículas. Balanceamento de carga estático ou "estrutural" é realizado através da utilização de biseção recursiva otimizada para particionar o volume de simulação em subvolumes que contêm cargas computacionais aproximadamente iguais. A carga computacional de um sub-volume é calculada pela soma da carga computacional de cada centro de interação contido dentro desse sub-volume.

A seguir, o conjunto mínimo de nós de comunicação para uma determinada partícula deve ser identificado. O conjunto

mínimo de nós de comunicação é definido como todos aqueles nós que contém qualquer do volume esférico de espaço (com raio maior do que a metade do raio de corte) centrado sobre a partícula. Isto define um volume mínimo no espaço de nó que assegura que existe pelo menos um nó para cada par de partículas dentro do corte que pode calcular a interação entre aquele par.

Durante a cada etapa de simulação, cada nó envia todas as suas posições de partícula a cada um dos seus parceiros de comunicação e recebe de cada um, um conjunto de posições de partículas. Um nó pode ser atribuído para avaliar a interação entre qualquer par de partículas no conjunto de posições que ele recebeu.

Embora os pares de posições de partículas no espaço de simulação separados por proximidade à distância de corte pode ser recebido apenas por um único nó criando uma atribuição definitiva, geralmente as posições de um determinado par de partículas serão recebidas por vários nós como mostrado na figura 4, qualquer um dos quais pode ser atribuído aquela interação de par.

A atribuição de interação pode ser efetuada por qualquer método que resulta em interação entre um par de partículas sendo feita uma vez em um nó. Um exemplo de um simples algoritmo é especificar que a interação será feita

sobre o nó que tem recebido tanto as posições de partícula e que tem o mínimo número de id. Esses algoritmos, no entanto, têm características de balanceamento de carga que refletem a técnica de mapeamento espacial utilizada.

A fim de reduzir o desequilíbrio de carga micro, atribuição de interação determinística dinâmica pode ser empregada. Estas técnicas permitem rápida sobreposição da média regional. Para permitir que essas técnicas, cada nó deve medir seu carga computacional atual e adicionar este valor a cada mensagem que envia aos seus parceiros de comunicação. Quando um nó recebe seu conjunto de [carga, conjunto de posição] mensagens de seus parceiros de comunicação, ele já tem informações suficientes para deterministicamente atribuir a si mesmo um conjunto de interações. O conjunto de interações que cada nó pode contribuir para ponderação de carga entre os seus parceiros de comunicação.

Um exemplo de um algoritmo que permite atribuição de interação ponderada determinista é o seguinte: (1) receber um conjunto completo de [carga, conjunto de posição] mensagens de parceiros de comunicação; (2) Para cada par de mensagens recebidas, criar uma lista de interação canônica, incluindo os efeitos de corte de intervalo; (3) Para cada par de mensagens recebidas, determinar o conjunto de nós

que também recebeu este par de mensagens; (4) Usar um algoritmo determinístico para atribuir cada interação (aparecendo na lista de interação canônica), que pode ser computada pelo referido conjunto de nós de um desses nós.

Exemplos de tais algoritmos determinísticos incluem: utilizar as cargas informadas sobre cada um desses nós, atribuir interações (que foram encomendadas em alguma forma canônica) para tentar equalizar as novas cargas em cada um dos nós. Randomização da atribuição de interações para o conjunto de nós utilizando um algoritmo *hash*. Atribuir cada interação com o nó que é proprietário do voxel que contém um ponto médio da linha que liga o par de partículas em interação. Fazer interações de pares de partículas atribuídos. Enviar cada força de interação computadorizada de volta para o par de nós que possui as partículas em interação.

Note que este algoritmo custa apenas computação de interação. O custo da devolução da força deve ser acrescentado para refletir menor custo de comunicação de computação de uma interação em um nó que possui uma das partículas.

Para os efeitos de escopo aumentado para balanceamento de carga ou em casos onde os custos de comunicação são elevados relativamente aos custos computacionais, pode ser

vantajoso aumentar o raio do espaço de simulação que determina o conjunto de parceiros de comunicação além Rd 2 para aumentar o número de nós disponíveis para balanceamento de carga.

Referindo-se à figura 4, é ilustrada uma decomposição espacial mostrando as zonas de difusão de dois nós (Nó A e Nó B) superpostos na decomposição espacial do domínio para todos os nós (uma vista bidimensional é demonstrada por simplicidade). Os nós que contêm áreas de espaço de simulação dentro de uma distância $R_b$ do voxel atribuído ao Nó B estão dentro de uma área mostrada com hachuração em volta da figura. Os nós que contêm áreas de espaço de simulação dentro de uma distância $R_b$ do voxel atribuído ao Nó A estão dentro de uma área com uma hachuração frontal. Uma área de sobreposição compreende nós que também contêm áreas de espaço de simulação dentro do $R_b$ dos voxels atribuído aos nós A e B. O raio $R_b$ é mostrado por elipses em torno dos nós A e B, respectivamente. O raio $R_b$ é maior ou igual a $R_c/2$, onde Rc é o raio de corte. A interação entre uma partícula armazenada no Nó A e uma partícula armazenada no Nó B pode ser computada em qualquer um dos nós dentro da área hachurada em cruz.

Assim, embora tenha sido descrito que é atualmente considerado como sendo a concretização preferida, será

entendido por aqueles qualificados na técnica que outras alterações podem ser feitas dentro do escopo da invenção.

## REIVINDICAÇÕES

1. Método para atribuir uma computação de interação de fragmentos em partes a uma rede de processamento, compreendendo uma pluralidade de nós de processador, o método **caracterizado pelo** fato de compreender:

definição de um espaço de simulação compreendendo uma pluralidade de fragmentos e a pluralidade de nós de processador;

determinação de um peso correspondendo ao custo computacional para uma dada computação de interação de fragmentos em pares;

atribuição do peso ao espaço de simulação em um ponto entre os dois fragmentos de interação;

realização de um particionamento espacial do volume do espaço de simulação, de modo que todas as partições tenham substancialmente o mesmo peso;

determinação de que nós têm as posições de ambos os fragmentos de interação; e

atribuição da computação de interação de fragmentos em pares a qualquer nó que tenha as posições de ambos os fragmentos.

2. Método, de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado pelo** fato de a etapa de realização de um

particionamento espacial compreender o uso de uma árvore k-d no espaço de simulação.

3. Método, de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado pelo** fato de a etapa de realização de um particionamento espacial compreender o uso de uma bissecção recursiva do espaço de simulação.

4. Método, de acordo com a reivindicação 3, **caracterizado pelo** fato de a etapa de atribuição de um peso compreender a atribuição de um peso ao ponto medido entre o par de fragmentos.

5. Método, de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado pelo** fato de cada um dos fragmentos compreender uma única partícula.

6. Método, de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado pelo** fato de cada um dos fragmentos compreender um agrupamento de partículas.

7. Método, de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado pelo** fato de ainda compreender o corte de cada interação em pares além de um raio definido.

8. Método, de acordo com a reivindicação 7, **caracterizado pelo** fato de ainda compreender a difusão da posição de uma partícula para um grupo de nós contendo uma porção de uma esfera tendo um raio $R_b$ que é maior do que $R_c/2$, onde $R_c$ é o raio definido para assegurar a existência

de pelo menos um nó contendo as posições de ambas as partículas requeridas para computar qualquer interação.

9. Método, de acordo com a reivindicação 8, **caracterizado pelo** fato de, quando mais de um nó contém as ~~posições requeridas para computar uma interação de~~ partículas, a computação ser atribuída a qualquer um daqueles nós, proporcionando uma oportunidade para a eliminação de desequilíbrios causados por flutuações locais a curto prazo em carga de trabalho de interação.

10. Sistema de processamento de informação, **caracterizado pelo** fato de compreender:

um processador configurado para:

definição de um espaço de simulação compreendendo uma pluralidade de fragmentos e uma pluralidade de nós de processador;

determinação de um peso correspondente ao custo computacional para uma dada interação em pares de fragmentos;

~~atribuição do peso ao espaço de simulação em um ponto~~ entre os dois fragmentos de interação;

realização de um particionamento espacial do volume do espaço de simulação de modo que todas as partições tenham, substancialmente, o mesmo peso; e

atribuição de uma computação da interação em pares de fragmentos a qualquer nó que tenha as posições de ambos os grupos de fragmentos.

11. Sistema, de acordo com a reivindicação 10, ~~caracterizado pelo~~ fato de o processador ainda ser configurado para realizar um particionamento espacial usando uma árvore de k-d no espaço de simulação.

12. Sistema, de acordo com a reivindicação 10, **caracterizado pelo** fato de o processador ainda ser configurado para realização de um particionamento espacial usando uma bissecção recursiva ótima do espaço de simulação.

13. Sistema, de acordo com a reivindicação 10, **caracterizado pelo** fato de o processador ainda ser configurado para atribuir um peso aos centros dos grupos de fragmentos.

14. Sistema, de acordo com a reivindicação 10, **caracterizado pelo** fato de cada um dos fragmentos ~~compreender uma única partícula.~~

15. Sistema, de acordo com a reivindicação 10, **caracterizado pelo** fato de cada um dos fragmentos compreender um agrupamento de partículas.

16. Sistema, de acordo com a reivindicação 10, **caracterizado pelo** fato de o processador ainda ser

configurado para cortar cada interação em pares além de um raio definido.

17. Sistema, de acordo com a reivindicação 10, **caracterizado pelo** fato de o processador ainda ser ~~configurado para difusão da posição de uma partícula para~~ um grupo de nós contendo uma porção de uma esfera tendo um raio Rb que é maior do que Rc/2, onde RC é o raio definido para assegurar a existência de pelo menos um nó contendo as posições de ambas as partículas requeridas para computar qualquer interação.

18. Sistema, de acordo com a reivindicação 10, **caracterizado pelo** fato de o processador ainda ser configurado para, quando mais de um nó contém as posições requeridas para computar uma interação de partículas, a computação ser atribuída a qualquer um daqueles nós, proporcionando uma oportunidade para a eliminação de desequilíbrios causados por flutuações locais em curto prazo em carga de trabalho de interação.

19. Meio legível em computador **caracterizado ~~pelo~~** ~~fato~~ de compreender instruções de programa para:

definição de um espaço de simulação compreendendo uma pluralidade de grupos de partículas e a pluralidade de nós de processador;

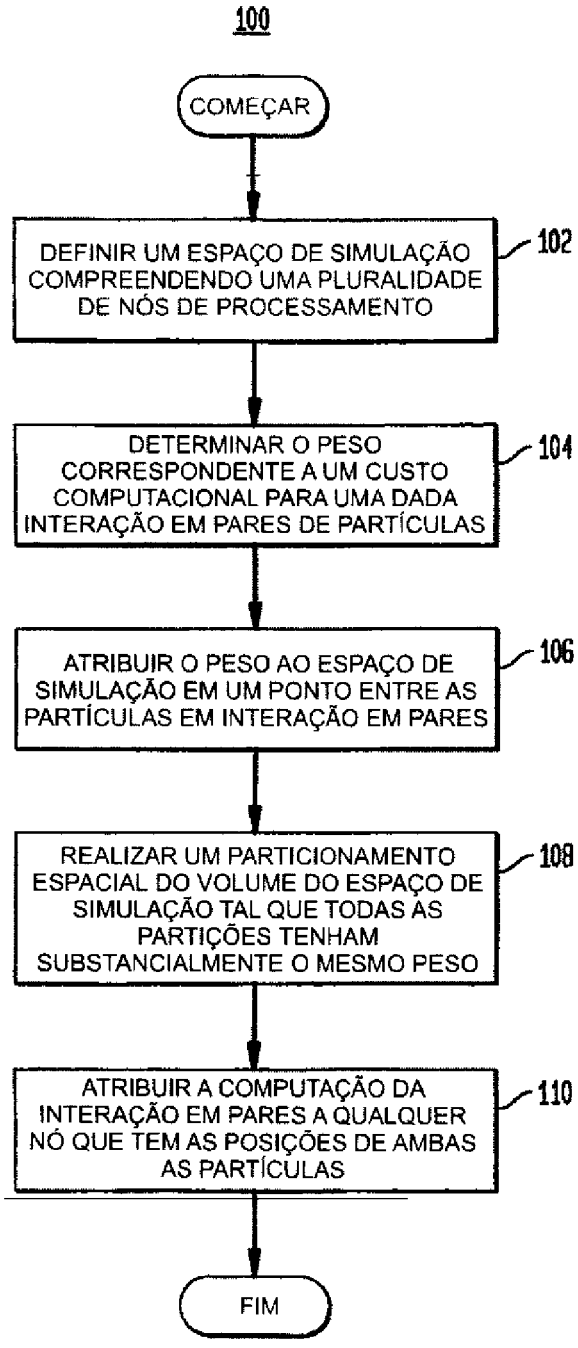

100
COMEÇAR
DEFINIR UM ESPAÇO DE SIMULAÇÃO COMPREENDENDO UMA PLURALIDADE DE NÓS DE PROCESSAMENTO
102
DETERMINAR O PESO CORRESPONDENTE A UM CUSTO COMPUTACIONAL PARA UMA DADA INTERAÇÃO EM PARES DE PARTÍCULAS
104
ATRIBUIR O PESO AO ESPAÇO DE SIMULAÇÃO EM UM PONTO ENTRE AS PARTÍCULAS EM INTERAÇÃO EM PARES
106
REALIZAR UM PARTICIONAMENTO ESPACIAL DO VOLUME DO ESPAÇO DE SIMULAÇÃO TAL QUE TODAS AS PARTIÇÕES TENHAM SUBSTANCIALMENTE O MESMO PESO
108
ATRIBUIR A COMPUTAÇÃO DA INTERAÇÃO EM PARES A QUALQUER NÓ QUE TEM AS POSIÇÕES DE AMBAS AS PARTÍCULAS
110
FIM

*FIGURA 1*

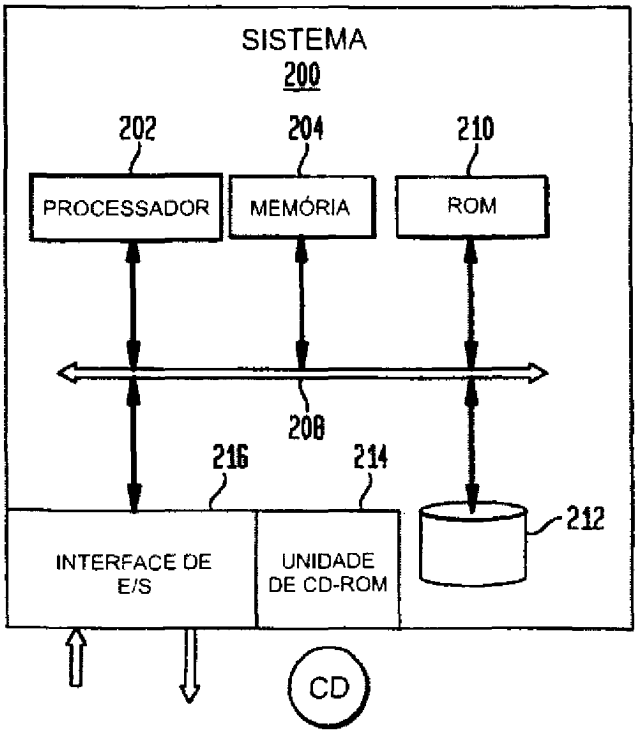

SISTEMA
200
202
204
210
PROCESSADOR
MEMÓRIA
ROM
208
216
214
212
INTERFACE DE E/S
UNIDADE DE CD-ROM
CD

*FIGURA 2*




*FIGURA 3*

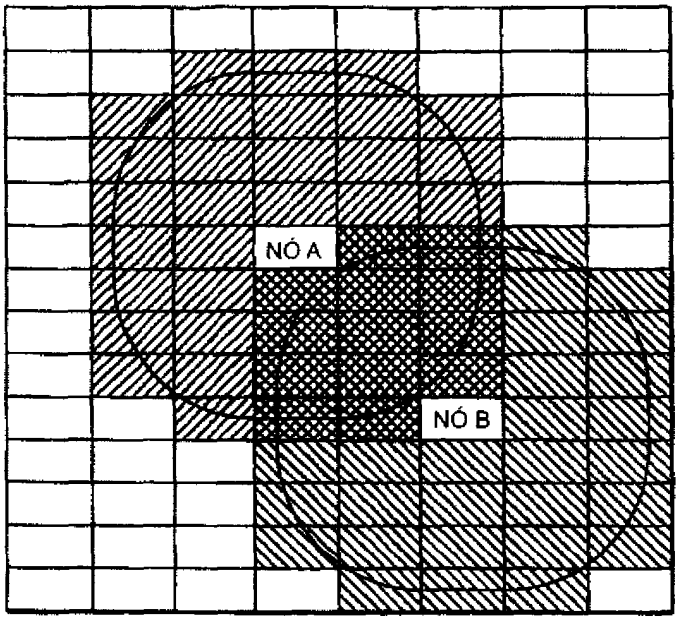



*FIGURA 4*