

CLUSTER KOMPUTER SEBAGAI PENGANTI SUPER KOMPUTER TUNGGAL UNTUK PEMODELAN KIMIA KOMPUTASI

Bayu Prianto

Peneliti Bidang Material Dirgantara, LAPAN

RINGKASAN

Pemodelan kimia komputasi adalah ilmu kimia yang menggunakan hasil matematis kimia teori yang diterjemahkan ke dalam program komputer untuk menghitung sifat-sifat molekul dan perubahannya. Dalam perhitungan sifat-sifat molekul dan perubahannya diperlukan teori mekanika kuantum dan komputer dengan kinerja yang tinggi seperti super komputer untuk menyelesaikan persamaan mekanika kuantum tersebut. Super komputer tunggal mulai dikenal luas pada tahun 1960-an hingga akhir tahun 1990-an. Setelah tahun 1990-an, banyak bermunculan cluster komputer yang mulai menggantikan super komputer tunggal. Cluster komputer adalah kumpulan dari beberapa komputer tunggal dengan kinerja rendah menjadi satu kesatuan dengan kinerja yang tinggi, dan cluster komputer juga biasa disebut sebagai super komputer. Kelebihan dari cluster komputer dibandingkan dengan super komputer tunggal adalah : 1) Tidak diperlukan sistem pendingin khusus, 2) mudah untuk ditingkatkan kinerjanya (dengan penambahan jumlah komputer tunggal).

1 PENDAHULUAN

Dalam ilmu kimia, super komputer digunakan sebagai alat untuk pemodelan molekul kimia. Model didefinisikan sebagai gambaran sederhana atau gambaran ideal dari suatu sistem atau proses, seringkali dalam bentuk persamaan matematika, atau perencanaan yang digunakan untuk memfasilitasi perhitungan dan prediksi. Oleh karena itu pemodelan molekul tersebut terkait dengan cara untuk meniru perilaku molekul dan sistem molekul.

Ilmu kimia adalah bidang keilmuan yang terkait erat dengan sistem mikroskopik atau bahkan atomik. Teori modern yang dapat menjelaskan sistem atomik dan molekul adalah teori mekanika kuantum. Akan tetapi, penyelesaian persamaan mekanika kuantum tidaklah mudah jika hanya menggunakan kalkulator tangan, dengan kata lain diperlukan suatu komputer dengan kinerja tinggi untuk menyelesaikan persamaan tersebut. Oleh karena itu, super komputer kini telah banyak digunakan oleh para kimiawan untuk pemodelan molekul (sebagai alat untuk menyelesaikan persamaan mekanika kuantum untuk menjelaskan sistem molekul tersebut).

2 KOMPUTER

2.1 Pengertian Komputer

Komputer adalah sebuah mesin yang berperan dalam memanipulasi data berdasarkan instruksi-instruksi yang diberikan. Kemampuan untuk menyimpan dan melaksanakan instruksi-instruksi yang disebut sebagai program, membuat komputer sangat bermanfaat dan sangat berbeda dari kalkulator. Kemampuan dari komputer tersebut sangat bergantung pada kemampuan dari CPU (*Central Processing Unit/ Unit Pusat Pemrosesan*). Pada awalnya CPU tersusun dari banyak komponen yang terpisah, tetapi sejak tahun 1970-an CPU mulai dikembangkan, sehingga kini CPU hanya tersusun dari sebuah komponen yang dikenal sebagai *microprocessor* (rangkaiannya yang terintegrasi menjadi satu). Dengan kata lain, kemampuan dari komputer sangat bergantung pada kapasitas dari *microprocessor*-nya. Semakin besar kapasitas *microprocessor*-nya, maka kinerja/kemampuan dari komputer pun semakin meningkat.

Tabel 2-1: SEJARAH PERKEMBANGAN PERANGKAT KERAS KOMPUTER

Generasi Pertama (Mekanik/Elektromekanik)	Kalkulator	Antikythera mechanism, Difference Engine, Norden bombsight
	Programmable Device	Jacquard loom, Analytical Engine, Harvard Mark I, Z3
Generasi Kedua (Tabung Vakum)	Kalkulator	Atanasoff–Berry Computer, IBM 604, UNIVAC 60, UNIVAC 120
	Programmable Device	ENIAC, EDSAC, EDVAC, UNIVAC I, IBM 701, IBM 702, IBM 650, Z22
Generasi Ketiga (Discrete transistors and SSI, MSI, LSI Integrated circuits)	Mainframes	IBM 7090, IBM 7080, System/360, BUNCH
	Minicomputer	PDP-8, PDP-11, System/32, System/36, VAX, AS/400
	4-bit Microcomputer	Intel 4004, Intel 4040
	8-bit Microcomputer	Intel 8008, Intel 8080, Motorola 6800, Motorola 6809, MOS Technology 6502, Zilog Z80
	16-bit Microcomputer	8088, Zilog Z8000, WDC 65816/65802
Generasi Keempat (VLSI integrated circuits)	32-bit Microcomputer	80386, Pentium, 68000, ARM architecture
	64-bit Microcomputer	x86-64, PowerPC, MIPS, SPARC
	Embedded computer	8048, 8051
	Personal Computer	Desktop computer, Home computer, Laptop computer, Personal digital assistant (PDA), Portable computer, Table computer, Wearable computer
Teoritis/Eksperimen	Quantum Computer	
	Chemical Computer	
	DNA Computing	
	Optical Computer	
	Spintronic based Computer	

Sumber : Wikipedia

Peran komputer secara global terbagi menjadi 4 bagian :

- Sebagai Unit Kontrol
Unit kontrol berperan dalam membaca dan menginterpretasi (*decode*) instruksi-instruksi dalam sebuah program secara bertahap (*one by one*),
- Sebagai Unit Aritmatika/Logika
Operasi aritmatika yang dapat dilakukan terbatas pada operasi penambahan, pengurangan, perkalian, pembagian, fungsi-fungsi trigonometri (sin, cosin, dll), dan akar kuadrat. Operasi logika yang dapat dilakukan meliputi logika Boolean, seperti : AND, OR, XOR, dan NOT.
- Sebagai Memori
Memori utama komputer pada prinsipnya terdiri dari 2 jenis: *random access memory* (RAM)

dan *read-only memory* (ROM). RAM dapat membaca dan menulis pada setiap waktu CPU memberikan perintah, tetapi ROM merupakan muatan awal berupa data dan *software* yang tidak berubah. ROM digunakan untuk menyimpan instruksi-instruksi *start-up* awal dari sebuah komputer biasa disebut BIOS.

- Sebagai Masukan dan Keluaran
Masukan dan keluaran berarti komputer menerima informasi dari dunia luar dan mengirimkan kembali hasilnya. Alat input yang digunakan pada komputer adalah *keyboard* dan *mouse*, sedangkan alat output yang digunakan adalah *display* dan *printer*.

Sejarah Komputer

Sejarah perkembangan perangkat keras dari suatu komputer dapat dilihat pada Tabel 2-1.

3 SUPER KOMPUTER

Super komputer adalah komputer dengan kinerja super/tinggi dibandingkan dengan komputer biasa. Kinerja dari super komputer dapat ditentukan dari kemampuan perhitungan dan kapasitas dari super komputer tersebut. Kemampuan perhitungan adalah kemampuan perhitungan maksimal untuk menyelesaikan permasalahan yang besar dalam waktu yang singkat. Sedangkan kapasitas perhitungan adalah kemampuan menggunakan perhitungan yang efektif dan biaya yang efisien untuk menyelesaikan masalah besar atau kecil.

Super komputer banyak digunakan oleh universitas, agen militer dan penelitian laboratorium sains.

Tantangan bagi super komputer meliputi :

- Super komputer menghasilkan panas yang tinggi dan perlu didinginkan. Proses pendinginan merupakan masalah utama bagi super computer,
- Informasi tidak dapat berpindah lebih cepat dari kecepatan cahaya di antara 2 bagian super komputer.

Super komputer mengkonsumsi dan menghasilkan data dalam jumlah yang besar dalam waktu yang singkat.

Terdapat 2 kelompok besar yang termasuk super komputer, di antaranya adalah super komputer tunggal dan cluster komputer.

3.1 Super Komputer Tunggal

Super komputer tunggal mulai dikenal pada tahun 1960-an, desain pertamanya oleh Seymour Cray dari "Control Data Corporation" (CDC). Pada tahun 1970-an Cray membentuk perusahaan sendiri yang diberi nama Cray Research, dan mulai memasarkan super komputer tunggal buatannya tersebut. Cray berhasil menguasai pasar super komputer dengan disain-disain terbarunya, dan mencapai titik puncaknya pada tahun 1985-1990.

Super komputer tunggal adalah komputer tunggal yang memiliki kinerja lebih tinggi

dibandingkan dengan komputer biasa/komputer pribadi.



Gambar 2-1: Gambar super komputer (cray-2) sebagai komputer tercepat di dunia pada tahun 1985 – 1989

Cluster Komputer

Saat ini, pasar super komputer tidak lagi didominasi oleh Cray, karena kini perusahaan seperti IBM dan HP juga telah memasuki pasar super komputer. Setelah tahun 1990-an, banyak bermunculan cluster komputer yang mulai menggantikan super komputer tunggal. Namun, cluster komputer tersebut terkadang biasa disebut juga sebagai super komputer, karena kemampuannya untuk melakukan perhitungan besar seperti super komputer tunggal. Kini cluster komputer berkembang lebih cepat dibandingkan dengan super komputer tunggal.

Cluster komputer adalah gabungan dari 2 buah komputer tunggal atau lebih menjadi satu kesatuan. Ketentuan untuk membentuk cluster komputer adalah sebagai berikut :

- Komputer tunggal yang digabungkan tersebut dapat berupa komputer pribadi, atau komputer server,
- Masing-masing komputer tunggal terkoneksi menjadi cluster komputer melalui jaringan Ethernet,
- Diperlukan software seperti MPI untuk komunikasi antar komputer tunggal dalam jaringan cluster komputer.

Contoh cluster komputer dapat dilihat pada Gambar 3-1 dan Gambar 3-2 berikut :



Gambar 3-1: Cluster komputer yang terdiri dari 10 komputer tunggal, dengan sistem operasi linux



Gambar 3-2: Cluster komputer yang digunakan oleh NASA

4 CLUSTER KOMPUTER PENGGANTI SUPER KOMPUTER TUNGGAL

Banyak kelebihan dari cluster komputer dibandingkan dengan super komputer tunggal, sehingga kini cluster komputer lebih berkembang pesat dibandingkan dengan super komputer tunggal. Perbandingan antara super

komputer tunggal dengan cluster komputer dapat dilihat pada Tabel 4-1.

Sampai akhir bulan November 2007 lalu, cluster komputer tercepat adalah Blue Gene/L. Cluster komputer ini terdiri dari 65.536 komputer, masing-masing komputer terdiri dari 2 prosesor, dan masing-masing prosesor memproses 2 aliran data secara bersamaan.

Tabel 4-1: PERBANDINGAN SUPER KOMPUTER TUNGGAL DENGAN CLUSTER KOMPUTER

Perbandingan	Super Komputer Tunggal	Cluster Komputer
Spesifikasi Hardware	Komputer tunggal, dengan kinerja komputer disesuaikan dengan kebutuhan. Misal super komputer tunggal dengan kecepatan 12,25 TeraFLOPS.	Misal untuk menghasilkan kecepatan cluster komputer 12,25 TeraFLOPS terdiri dari 1100 komputer, dengan masing-masing komputer memiliki spesifikasi : <ul style="list-style-type: none"> ➤ Dual prosesor 2,3 GHZ ➤ Memori 4 GB RAM ➤ Hard Disk SATA 80 GB
Harga	Lebih mahal	Lebih murah
Sistem Pendingin	Perlu pendingin khusus untuk menghilangkan panas yang dihasilkan	Tidak perlu sistem pendingin khusus (cukup dengan pendingin kipas pada masing-masing komputer)
Peningkatan Kinerja / Upgrade	Sulit untuk diupgrade (karena harus mengganti hardware lama dengan yang baru)	Sangat mudah untuk diupgrade (hanya dengan menambah jumlah komputer)
Dimensi / ruang	Sederhana (tidak perlu ruang yang luas)	Diperlukan ruang yang lebih luas
Sistem Operasi	UNIX, LINUX	UNIX, LINUX, dan Windows

5 APLIKASI CLUSTER KOMPUTER UNTUK PEMODELAN KIMIA KOMPUTASI

Aplikasi cluster komputer dalam bidang kimia adalah sebagai alat pemodelan molekul (perhitungan struktur dan sifat dari senyawa-senyawa kimia, makromolekul biologi, polimer, dan Kristal).

Pemodelan molekul kimia dapat membantu para kimiawan untuk :

- Mendesain awal proses reaksi sintesis yang diinginkan.
- Mempelajari dan menjelajahi mekanisme reaksi yang mungkin terjadi dari desain awal yang telah dibuat,
- Melakukan simulasi dinamika molekul dari reaksi yang diteliti, yang berlandaskan pada hukum-hukum interaksi yang ada dalam sistem,
- Menentukan sifat-sifat dari molekul pereaksi maupun produk yang dihasilkan. Sifat-sifat molekul tersebut adalah energi, struktur, momen dipole, keterpolaran, dan lain lain.

Sebagai contoh, cluster komputer digunakan untuk penelitian proses penuaan. Proses penuaan tersebut dikaji dengan mempelajari mekanisme reaksi kerusakan basa sitosin karena penyerangan radikal OH. Pada contoh ini cluster komputer berperan untuk menentukan sifat-sifat molekul (pereaksi maupun hasil reaksi) dan menjalankan *software* simulasi dinamika molekul. Penentuan sifat-sifat molekul dan simulasi dinamika molekul didasarkan pada perhitungan mekanika kuantum.

Untuk penelitian tersebut digunakan cluster komputer dengan spesifikasi sebagai berikut :

- Cluster terdiri dari sebuah komputer server dan 4 buah komputer pribadi, dengan masing-masing komputer memiliki spesifikasi :
 - Prosesor : komputer server 2,4 GHz dual prosesor, Komputer pribadi 1,8 GHz,
 - Memori : komputer server 1 GB, komputer pribadi 512 MB,

- Hard Disk : komputer server 80 GB SATA, komputer pribadi 20 GB.

- Koneksi jaringan cluster komputer menggunakan Ethernet Card 1 GB,
- Sistem Operasi Linux (Fedora Core 3),
- Software Cluster yang digunakan adalah OSCAR,
- Software pemodelan molekul yang digunakan adalah GAUSSIAN dan CPMD.

Dengan menggunakan spesifikasi cluster komputer tersebut, untuk mendapatkan hasil simulasi reaksi radikal yang berlangsung selama 576 femto detik (10^{-15} detik) diperlukan perhitungan cluster komputer selama ± 72 jam.

6 KESIMPULAN

Super komputer yang dahulu hanya merupakan suatu komputer tunggal dengan kinerja yang tinggi. Namun kini, kumpulan dari beberapa komputer tunggal dengan kinerja rendah menjadi satu kesatuan yang disebut cluster komputer dengan kinerja yang tinggi dapat pula dikatakan sebagai super komputer. Banyak kelebihan dari cluster komputer dibandingkan dengan super komputer tunggal, sehingga kini cluster komputer lebih berkembang pesat dibandingkan dengan super komputer tunggal. Cluster komputer dipergunakan untuk perhitungan yang memerlukan kinerja tinggi dan berulang-ulang, dalam bidang kimia dipergunakan untuk pemodelan kimia komputasi.

DAFTAR RUJUKAN

- Buyya, Rajkumar, 1999. *High Performance Cluster Computing: Programming and Applications*, Volume 1, Prentice Hall, New Jersey, USA.
- Prianto, B., 2007. *Pemodelan Kimia Komputasi*, Berita Dirgantara, Vol. 8, No.1, LAPAN.
- Rogers, D., 2003. *Computational Chemistry Using PC*, 3rd Edition, John Wiley & Sons.
- Wikipedia, *Computer Cluster*, http://www.en.wikipedia.org/wiki/Computer_cluster, 23 November 2007.