

UNIVERSIDADE DE CAXIAS DO SUL
ÁREA DO CONHECIMENTO DE CIÊNCIAS EXATAS E ENGENHARIAS
CIENCIA DA COMPUTAÇÃO

DESENVOLVIMENTO DE UMA VERSÃO PARALELIZADA DO
SOFTWARE MCMAILLE

LEONARDO MACHADO INVERNIZZI

lminvernizzi@ucs.br

ORIENTADOR: ANDRÉ LUIS MARTINOTTO

almartin@ucs.br

CAXIAS DO SUL

2017

1 Introdução e Justificativa

Estrutura cristalina se refere a forma como os átomos estão agrupados, formando um padrão que se repete ao longo de um sólido. As estruturas podem assumir diferentes formas, que podem ser subdivididas em unidades menores, que são chamadas de células unitárias. De acordo, com o formato dessas unidades as estruturas cristalinas são classificadas em sete tipos de sistemas, que são: Cúbico, Hexagonal, Tetragonal, Romboédrico, Ortorrômico, Monoclínico e Triclínico, sendo esses sistemas diferenciados pela relação entre seus eixos e a relação entre seus ângulos. (CAALLISTER, 2002). Na Figura 1a tem-se um exemplo da estrutura cristalina do grafite, que possui uma estrutura Hexagonal, onde tem-se dois eixos de mesmo comprimento e dois ângulos de 90° e um de 120° . (OLIVEIRA et al., 2000). Já na Figura 1b tem-se a estrutura cristalina do cloreto de sódio, que possui uma estrutura cúbica, onde tem-se três eixos iguais e três ângulos de 90° (BLEICHER; SASAKI, 2000).

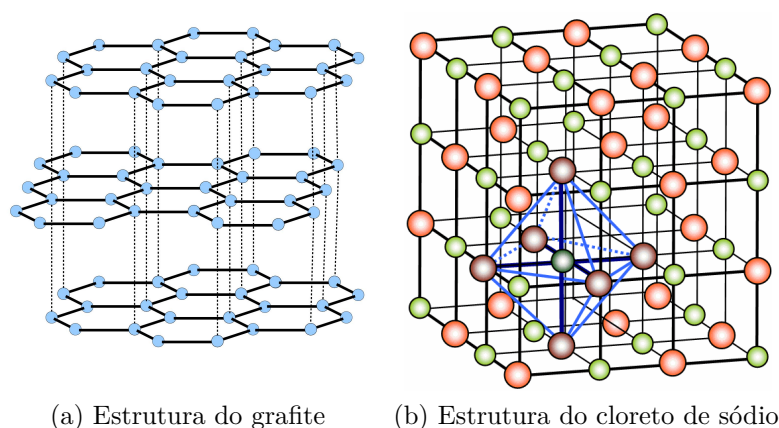


Figura 1 – Exemplos de estruturas cristalinas.

A difração de raio X é uma forma de identificar as posições e a estrutura dos átomos em um sólido. Esse fenômeno ocorre quando os raios X são enviados na direção do cristal, sendo que os átomos causam um espelhamento dos raios X em outras direções. A partir desse espelhamento pode-se medir o ângulo de difração dos raios e identificar como os átomos que compõem o cristal estão organizados (CULLITY; STOCK, 2001).

A difração fornece a intensidade dos raios X refletidos em cada um dos ângulos. Na Figura 2 tem-se um exemplo de um gráfico mostrando a intensidade da difração em relação a todos os ângulos. A partir dos pontos de maior intensidade pode ser calculado a estrutura cristalina de um sólido (CULLITY; STOCK, 2001). Para tanto, são utilizadas técnicas baseadas em estratégias de simulação e tentativa e erro (DAVID, 2002).

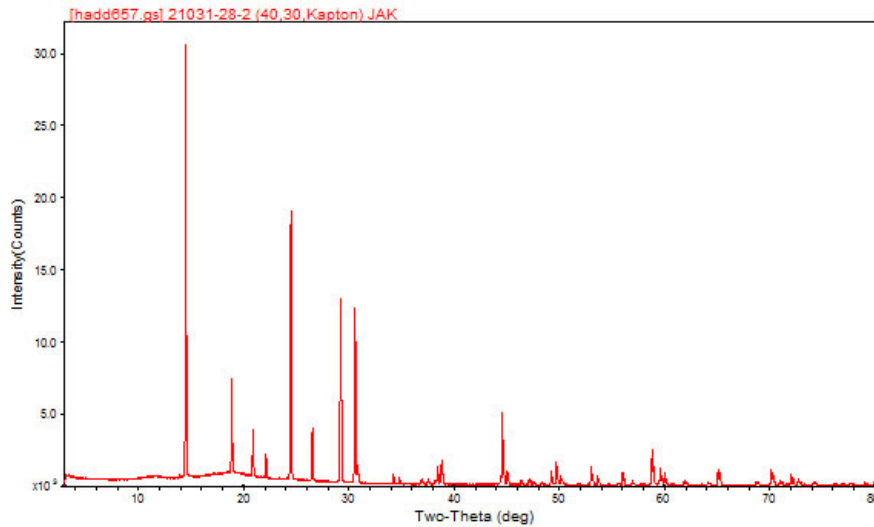


Figura 2 – Exemplo de resultado da difração

O McMaille é um programa de código aberto, que foi criado por Armed Le Bail, e que utiliza métodos de Monte Carlo e *grid search* para identificar a estrutura cristalina de um sólido. Ele foi escrito na linguagem de programação FORTRAN e sua última atualização foi realizada em 2006. Esse software apresenta um alto custo computacional, principalmente na identificação de estruturas cristalinas mais complexas, uma vez que nestes casos são necessárias efetuar simulações com um grande conjunto de combinações de forma a obter-se o resultado final (BAIL, 2004).

Uma das técnicas que pode ser utilizada para diminuir esse tempo de execução é a programação paralela, que consiste em dividir uma tarefa em partes menores, que podem ser executadas de forma simultânea em diferentes processadores (PACHECO, 1997). Esse tipo de abordagem tornou-se atrativa uma vez que os processadores atuais possuem múltiplos *cores* (DEITEL; DEITEL; CHOFFINES, 2005), permitindo a execução de diferentes processos ou *threads* de forma simultânea (NEGRI et al., 2001).

Dentro deste contexto, neste trabalho será desenvolvida uma versão paralela do software McMaille. Essa versão será desenvolvida para ser executada em ambientes de memória compartilhada (computadores com processadores *multicore*) e utilizando múltiplas *threads*. Mais especificamente será utilizada a biblioteca de *threads* OpenMP (CHAPMAN; JOST; PAS, 2008).

1.1 Questão de Pesquisa

É possível melhorar o desempenho do programa McMaille utilizando técnicas de programação paralela?

2 Objetivos

O objetivo deste trabalho consiste em desenvolver uma versão paralela do programa McMaille, que é um software para a identificação da estrutura cristalina de um sólido.

2.1 Objetivos Específicos

Com base no objetivo geral, foram elaborados os seguintes objetivos específicos:

1. Conversão do programa McMaille da linguagem de programação FORTRAN para a linguagem C.
2. Perfilação do programa McMaille de forma a identificar os gargalos de execução.
3. Paralelização das funções que apresentam um alto custo computacional.
4. Realização de testes de desempenho da versão paralelizada do programa McMaille.

3 Metodologia

Inicialmente será feito um levantamento bibliográfico sobre difração de raios X e estruturas cristalinas. Após, será realizado um estudo sobre o software McMaille, mais especificamente sobre os métodos de Monte Carlo e *grid search*.

Após será realizada a conversão do programa McMaille, para a linguagem de programação C. Esse foi originalmente escrito em FORTRAN, sendo que para essa conversão será utilizado o software *f2c* (FELDMAN et al., 1995). Nesta etapa, provavelmente, será necessário reimplementar algumas funções, que são utilizadas pelo software McMaille, e que só se encontram disponíveis em bibliotecas desenvolvidas para a linguagem de programação FORTRAN.

Posteriormente, será utilizado o perfilador de código *gprof* (FENLASON; STALLMAN, 2009) para a identificação das funções que apresentam um maior custo computacional, e que serão as funções a serem paralelizadas. Para a paralelização destas funções será utilizada a biblioteca de *threads* OpenMP.

Por fim, serão executados testes sobre a versão paralelizada. Inicialmente, serão efetuados testes comparando as saídas da versão sequencial e da versão paralela, de modo a identificar se a paralelização (e conversão) não introduziu erros no programa. Posteriormente, serão realizados testes de desempenho, onde serão comparados o tempo de execução da versão sequencial e da versão paralela.

3.1 Atividade e Cronograma

1. Estudo sobre difração de raio x e estruturas cristalinas.
2. Estudo sobre o software McMaille e dos métodos de Monte Carlo e *grid search*.
3. Conversão do código para C
4. Escrita do TCC I
5. Apresentação do TCC I
6. Perfilação do código
7. Paralelização das pontos de gargalo do programa
8. Testes de desempenho comparando as versões sequencial e paralela
9. Escrita do TCC II

10. Apresentação do TCC II

Tabela 1 – Cronograma das Atividades do TCC I

Atividades	2017									
	Agosto		Setembro		Outubro		Novembro		Dezembro	
	1ª	2ª	1ª	2ª	1ª	2ª	1ª	2ª	1ª	2ª
1										
2										
3										
4										
5										

Tabela 2 – Cronograma das Atividades do TCC II

Atividades	2018									
	Março		Abril		Maio		Junho		Julho	
	1ª	2ª	1ª	2ª	1ª	2ª	1ª	2ª	1ª	2ª
6										
7										
8										
9										
10										

Referências

- BAIL, A. L. Monte carlo indexing with mcmaille. 4 2004. Citado na página 2.
- BLEICHER, L.; SASAKI, J. M. Introdução à difração de raios-xem cristais. *Universidade Federal do Ceará*, p. 1–20, 2000. Citado na página 1.
- CAALLISTER, J. W. D. *Ciência e Engenharia de Materiais: Uma Introdução*. 5th. ed. [S.l.]: LTC, 2002. Citado na página 1.
- CHAPMAN, B.; JOST, G.; PAS, R. V. D. *Using OpenMP: portable shared memory parallel programming*. [S.l.]: MIT press, 2008. Citado na página 2.
- CULLITY, B. D.; STOCK, S. R. *Elements of X-Ray Diffraction*. 3rd. ed. [S.l.]: Prentice Hall, 2001. Citado na página 1.
- DAVID, W. I. *Structure determination from powder diffraction data*. [S.l.]: Oxford University Press on Demand, 2002. Citado na página 1.
- DEITEL, H. M.; DEITEL, P. J.; CHOFFINES, D. R. *Sistemas Operacionais: terceira edição*. 3rd. ed. [S.l.]: Pearson Prentice Hall, 2005. Citado na página 2.
- FELDMAN, S. I. et al. A fortran-to-c converter. 1995. Disponível em: <<http://www.netlib.org/f2c/f2c.ps>>. Citado na página 4.
- FENLASON, J.; STALLMAN, R. *GNU gprof: The gnu profiler*. [S.l.], 2009. Disponível em: <<http://www.ecoscentric.com/ecospro/doc/html/gnutools/share/doc/gprof.pdf>>. Citado na página 4.
- NEGRI, A. et al. *Multi thread programming*. 2001. Citado na página 2.
- OLIVEIRA, I. de et al. stabilization of graphite-containing aqueous suspensions. *Ceramica, SciELO Brasil*, v. 46, n. 300, p. 186–195, 2000. Citado na página 1.
- PACHECO, P. S. *Parallel programming with MPI*. [S.l.]: Morgan Kaufmann, 1997. Citado na página 2.