

המחלקה להנדסת תוכנה  
קורס פרויקט גמר בהנדסת תוכנה – מספר 10051  
דו"ח בטא – סמסטר ב'

פרטי הפרויקט	
<b>סטודנט</b> - שם: מיכל גבאי מספר ת. זהות: 208824425 שם: שירה ירושלמי מספר ת. זהות: 318379765	<b>מנחה אקדמי</b> - שם: ד"ר יהודה חסין
<b>ארגון</b> - שם: מחקרי.	<b>אחראי תעשייתי</b> - שם: מחקרי.
<b>כותרת פרויקט הגמר בעברית: סימולציות של אטומים</b>	
<b>כותרת פרויקט הגמר באנגלית: Simulations of atoms</b>	
דו"ח	
<p><b>תיאור ההתקדמות בפרויקט:</b></p> <ol style="list-style-type: none"> <li>מציאת פרמטרים אופטימליים וניתוח תכונות: <ul style="list-style-type: none"> <li>סיום כתיבת הקוד המוצא פרמטרי fl אופטימליים לריצה, ע"פ אחוז צילוב.</li> <li>יצירת קובץ אקסל המנתח את מצב המולקולות בנקודות זמן שונות לקראת סוף הריצה.</li> <li>הוצאת ריצות npt (number of atoms, pressure, temperature) על נקודות זמן שונות לאורך ריצה בודדת, כדי לנתח את מצב הצפיפות במערכת כתלות באחוז הצילוב.</li> </ul> </li> <li>הרצה על gpu: <ul style="list-style-type: none"> <li>קימפול מערכת LAMMPS עם הספרייה KOKKOS המיועדת להרצה עם gpu.</li> <li>הצלחנו להריץ את LAMMPS, יחד עם המחלקה pair_reaxc_kokkos (שימושית בהוספת הפוטנציאל), על מעבד gpu מסוג NVIDIA.</li> </ul> </li> <li>מחשב מרובה מעבדים: <ul style="list-style-type: none"> <li>קיבלנו מהאוניברסיטה מחשב מרוחק, מרובה מעבדים, ע"מ שנוכל להוציא ריצות ארוכות בצורה יעילה ומהירה, עם multy threading.</li> <li>התקנת LAMMPS וקימפולו, כולל קימפול יחד עם הקוד לחיפוש הרביעיות והוספת הפוטנציאל.</li> <li>הוצאת ריצות בצורה מקבילית (omp).</li> </ul> </li> </ol>	

### **מצב תוצרי הפרויקט**

#### **פרויקט מחקרי – פרוט בקצרה (3 משפטים) של התוצאות המרכזיות**

- בהיתן סדר גודל של ריצה (מספר המולקולות של DETDA, EPON) נקבל ע"י התוכנית שכתבנו את הפרמטרים האופטימליים ביותר לכוחות שיתנו את התוצאות הטובות.
- מערכת LAMMPS מקומפלת ומורצת עם הספריות של KOKKOS תשתית חשובה להרצת הקוד עם כרטיס מסך שישפר את זמני הריצה.

#### **תוצאות המחקר וקבצי הריצות מתועדות בGIT:**

<https://github.com/shirayr/Simulation-Of-Atoms>

**יומן פעיל:**

<https://trello.com/b/MZtniPvh/atoms-simulation/calendar>

### **התכנית לסיום (לר"ז, משימות, אבני דרך):**

1. מציאת פרמטרים אופטימליים וניתוח תכונות:
  - נרצה להציג גרפים נוספים המתארים תכונות פיסיקאליות ומכאניות, ע"פ נוסחאות של סטודנטים מהנדסת חומרים.
2. הרצה על gpu:
  - נרצה להוסיף את הקוד האחראי על חיפוש הרביעיות והוספת הפוטנציאל שירץ גם הוא בצורה מקבילית עם gpu על LAMMPS\_KOKKOS שקימפלנו.
3. ניסיון שיפור הקוד והאצת הצילוב:
  - הוספת פוטנציאל על מספר רביעיות בו זמנית. יש לוודא שאטום מסוים לא "נלקח" ל2 רביעיות.



### **עדכון סיכונים בפרויקט (מה סיכויים?, מה השלכות?):**

1. הרצה על gpu:
  - הוספת הקוד האחראי על חיפוש הרביעיות והפוטנציאל למחלקות ב LAMMPS\_KOKKOS כרוכות בהבנה של מבנה המחלקות המורכבות והפונקציות השונות שב KOKKOS, הפונקציות שאליהן הוספנו את ה meta dynamic ב lammps ללא gpu שונו ולכן נצטרך למצוא את המקום המדויק אליו צריך להוסיף את הקוד בלי שיגרמו בעיות אחרות והקוד ירוץ כתיקנו מה שלא בהכרח יעבוד.. במידה ונצליח זמני הריצה אמורים להשתפר פלאים.
2. ניסיון שיפור הקוד והאצת הצילוב:
  - הוספת פוטנציאל על מספר רביעיות בו זמנית, מבחינה הגיונית אמור לשפר את תוצאות אחוז הצילוב אך אנו במחקר ולא ניתן לדעת האם זה ישפר את התוצאות - כרגע בתהליך כתיבה ובדיקה.

### **היבטים של הנדסת תוכנה (יישום והתנסות, ולקחים – מה והאם הייתי עושה אחרת):**

אין. פרויקט מחקרי – צורת העבודה ברורה. והדרך יחידנית.



ח ת י מ ו ת	
<p>חתימת המנחה האקדמי: מאושר ע"י ד:ר יהודה חסין. תאריך: 27.02.2020</p>	<p>חתימת הסטודנט:  תאריך: 27.02.2020</p> <p>חתימת הסטודנט:  תאריך: 27.02.2020</p>