AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA

IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE



Wydział Inżynierii Metali i Informatyki Przemysłowej



Praca Magisterska

pt.

„Implementacja metody dynamiki molekularnej dla heterogenicznych platform sprzętowych”

Imię i nazwisko dyplomanta: **Tomasz Nowak**

Kierunek studiów: **Informatyka Stosowana**

Profil dyplomowania:  **Modelowanie i Technologie Informacyjne**

Nr albumu: **232187**

Promotor: **dr inż. Łukasz Rauch**

Podpis dyplomanta: Podpis promotora:

Kraków 2012

***Oświadczam, świadomy(-a) odpowiedzialności karnej za poświadczenie nieprawdy, że niniejszy projekt inżynierski wykonałem(-am) osobiście i samodzielnie i że nie korzystałem(-am) ze źródeł innych niż wymienione w pracy.***

Kraków, dnia ………….… Podpis dyplomanta…………….

**Spis treści**

[1. Wstęp 4](#_Toc384478545)

[2. Dynamika molekularna 5](#_Toc384478546)

[2.1. Przegląd artykułów 5](#_Toc384478547)

[2.1.1. … 5](#_Toc384478548)

[3. Realizacja oprogramowania 6](#_Toc384478549)

[3.1 CUDA 6](#_Toc384478550)

[3.2 Pthreads 6](#_Toc384478551)

[4. Testy wydajności 7](#_Toc384478552)

[4.1. … 7](#_Toc384478553)

[5. Model algorytm - urządzenie 8](#_Toc384478554)

[5.1. … 8](#_Toc384478555)

[6. Podsumowanie 9](#_Toc384478556)

[7. Bibliografia 10](#_Toc384478557)

# 1. Wstęp

# 2. Dynamika molekularna

## 2.1. Przegląd artykułów

### 2.1.

# 3. Realizacja oprogramowania

## 3.1. Nvidia CUDA

Nvidia CUDA jest platformą służącą do obliczeń równoległych oraz modelem programistycznym umożliwiającym uzyskać znacząco lepszą wydajność obliczeniowa wykorzystując moc układu graficznego GPU.

Framework daje programiście bezpośredni dostęp do zestawu wirtualnych instrukcji i pamięci na równoległych jednostkach procesorów. Można dzięki temu wykorzystywać GPU do ogólnych zastosowań nie tylko do przetwarzania grafiki. Biblioteki CUDA wspierają popularne języki programowania: C, C++, Fortran.

Aplikacje wspierające akceleratory graficzne GPU oraz biblioteki CUDA wykorzystywane są między innymi w:

* astronomii,
* biologii,
* chemii,
* fizyce,
* finansach,
* procesach przemysłowych.

## 3.2. Pthreads

POSIX Threads często nazywany również Pthreads jest standardem POSIX dla wątków. Standard ten definiuje API[[1]](#footnote-1) do tworzenia i manipulowania wątkami. Implementacja ta jest dostępna dla wielu systemów operacyjnych opartych na systemie UNIX takich jak: FreeBSD, NetBSD, OpenBSD, GNU/Linux, Mac OS X, Solaris. Istnieje również implementacja przeznaczona dla systemu Microsoft Windows zawarta w WinAPI[[2]](#footnote-2). [6]

Pthreads definiuje zestaw typy, funkcje, stałe dla języka C. Implementacja znajduje się w pliku *pthreads.h* biblioteki zarządzającej wątkami. Zawiera ponad 100 funkcji, które można podzielić na grupy: [6]

* zarządzanie wątkami,
* muteksy,
* zmienne warunkowe,
* synchronizacja

Podstawowym celem Pthreads jest przyspieszenie realizacji zadań. Porównując koszty tworzenia i zarządzania procesem, wątek może być utworzony przy minimalnym udziale zasobów systemu.

W powyższym projekcie technologia Pthreads została wykorzystana w celu zarządzania akceleratorami obliczeń, jakimi są karty graficzne. Bierze udział w procesie podziału danych i przygotowaniu ich do przesłania na zewnętrzne urządzenia. Pomaga również w końcowym procesie zarządzania wynikami obliczeń dostarczonymi do maszyny gospodarza (eng. host).

## 3.3. Implementacja

TODO

## 3.4. Optymalizacja

TODO

# 4. Testy wydajności

## 4.1. Testy sekwencyjne

TODO

## 4.2. Testy zrównoleglenia

TODO

## 4.3. Test optymalizacji

TODO

## 4.4. Test wielu GPU

TODO

# 5. Model algorytm - urządzenie

## 5.1. …

# 6. Podsumowanie

# 7. Bibliografia

[1] Tomasz Nowak, *Modelowanie defektów strukturalnych w skali nano z wykorzystaniem akceleratorów obliczeń GPGPU*

[2] Daniel Bachniak, *Modelowanie defektów strukturalnych w skali nano z wykorzystaniem metody statyki molekularnej w heterogenicznych architekturach sprzętowych*

[3] https://developer.nvidia.com (05.04.2014)

[4] http://www.nvidia.com/ (05.04.2014)

[5] https://computing.llnl.gov/ (05.04.2014)

[6] http://en.wikipedia.org/wiki/POSIX\_Threads (05.04.2014)

1. API – eng. application programming interface [↑](#footnote-ref-1)
2. Windows API – zestaw wbudowanych interfejsów programistycznych dostępnych dla systemów Microsoft Windows [↑](#footnote-ref-2)