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

### 2.1.1. …

# 3. Realizacja oprogramowania

## 3.1 CUDA

## 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).

# 4. Testy wydajności

## 4.1. …

# 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)