

Тема: **Побољшање перформанси алгоритама дисипативне честичне динамике методама паралелизације**

Наставник: **Милош Ивановић**

Дисипативна честична динамика (*Dissipative Particle Dynamics*, DPD) је стохастичка симулациона техника за моделирање динамичких особина једноставних и комплексних флуида. Оригинално предложена од стране Хогербруга и Коелмана, за циљ има да опонаша функционалност молекуларне динамике, али са далеко мањим бројем степени слободе, што је чини много погоднијом за моделирање макро система. Методе са овом особином спадају у тзв. методе мезоскале. Током последње деценије, метода је реформулисана и донекле модификована од стране Еспањола, како би се осигурало одговарајуће равнотежно стање.

ДПД је безмрежна метода која описује кретање дискретних честица које се крећу у континуалним просторним димензијама, али је време дискретизовано. Честице овде репрезентују целокупне групе молекула флуида, а не појединачне молекуле, тако да се атомистички детаљи не сматрају релевантним. Честице међусобно делују по паровима, и то преко три врсте сила: конзервативних, дисипативних и случајних.

Главни проблем ДПД технике је што је, упркос предностима над МД, и даље потребан огроман број честица како би се реално моделирала било каква макро појава из механике флуида. Циљ мастер рада било би побољшање перформанси већ постојећег секвенцијалног ДПД симулатора који је развијен коришћењем OpenMP (*Open Multi-Processing*) технологије дељене меморије додавањем додатног слоја паралелизације техником дистрибуиране меморије (MPI – *Message Passing Interface*). Овим би се постигла далеко већа скалабилност апликације која би онда са пар десетина процесора порасла на неколико стотина процесора. Самим тим, било би могуће како убрзано моделирати мање системе, тако и моделирати системе флуида далеко већег обима него што је то сада могуће.

Уколико би се постављени задатак извео раније од предвиђеног рока, предлог је да се испита понашање апликације у мешаној MPI/OpenMP формулацији, као и да се неки од алгоритама претраге честица изведе на платформи новој платформи CUDA (*Compute Unified Device Architecture*), како би се истражили још неки могући извори побољшања перформанси.

Литература

1. P. Español and P. B. Warren. Statistical-mechanics of dissipative particle dynamics. *Europhysics Letters*, 30(4):191–196, MAY 1 1995.
2. D. C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation-2nd edn*, Cambridge University Press, 2004.
3. M.J. Quinn, *Parallel programming in C with MPI and OpenMP*, Mc graw. Hill, 2003.
4. Jason Sanders, Edward Kandrot, *CUDA by Example: An Introduction to General-Purpose GPU Programming*, Addison-Wesley Professional, 2010.