

Aktív anyag szimulációjának párhuzamosítása grafikus kártyán

Sándor Csanád

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár

Irányító tanár: dr. Libál András

scsanad@gmail.com, alibal@cs.ubbcluj.ro

A molekuláris dinamika (vagy hasonló típusú) szimulációkban egyik nagy kihívás a hatékony párhuzamosítás. Az állandóan mozgó rendszerben újra és újra meg kell határozni a molekulák vagy részecskék szomszédait, beolvasni azok adatait, és kiszámolni a rájuk ható páronkénti erőket. Párhuzamos programozás esetén azonban ez nehézségeket von maga után: részben a szomszédokat tároló adatszerkezet hatékony felépítésénél, részben a random olvasás csökkentésénél.

Az általunk készített szimuláció – mely működése hasonló a molekuláris dinamika szimulációkhoz – az Aktív anyag rendszereket modellezi. Ezt a szimulációt CUDA programozási nyelven írtuk és teljes mértékben NVIDIA grafikus kártyán fut. A szimulációhoz felhasználtunk olyan algoritmusokat és adatszerkezeteket, mellyel nagy mértékben csökkentettük a random memória olvasást, ezáltal a szimuláció futási idejét. Az felhasznált módszereket és az ezekkel elért eredményeket bemutatjuk, összehasonlítva a CPU-n és GPU-n futó kód futási idejét.