

Spis treści

Wstęp	5
1. Przegląd symulacji komputerowych	7
1.1 Symulacje w naukach społecznych	7
1.2 Symulacje w naukach przyrodniczych	11
2. Metody Monte Carlo	18
2.1 Geneza metody	18
2.2 Całki wielowymiarowe	18
2.3 Metoda numeryczna Monte Carlo	22
2.4 Obliczanie liczby PI	24
2.5 Układ N oddziałujących cząstek	26
2.6 Model sieciowy Isinga	39
2.7 Problem obliczeń równoległych w metodzie MC	45
2.8 Zalety i wady metody MC	49
3. Metoda dynamiki molekularnej	49
3.1 Klasyczne równania ruchu	49
3.2 Algorytmy rozwiązywania równań ruchu	54
3.3 Własności dynamiczne układu N-cząstek	63
3.4 Periodyczne warunki brzegowe	76
3.5 Optymalizacja szybkości symulacji MD	82
3.6 Obliczenia współbieżne w metodzie MD	89
3.7 Zalety i wady metody MD	90
4. Obliczenia współbieżne w systemach komputerowych	90
4.1 Procesor główny CPU	91
4.2 Procesor graficzny GPU	115
5. Architektura CUDA	125
5.1 Rozwiązania sprzętowe	125
5.2 Model programowania	127
6. Symulacja MC sieciowego modelu Isinga	137
6.1 Podział problemu na pod-problemy	137

6.2 Klasa IsingModel	138
6.3 Algorytm szeregowy symulacji spinów	141
6.4 Algorytm współbieżny	143
6.5 Badanie wydajności algorytmu współbieżnego	146
7. Symulacja MD cieczy atomowej z potencjałem Lennarda-Jonesa	147
7.1 Dopasowanie problemu do modelu wielowątkowego GPU	148
7.2 Rezerwacja zasobów w GPU	148
7.3 Jądro obliczeniowe operacji współbieżnych	150
7.4 Zapis wyniku w CPU	155
7.5 Obliczenia pojedynczej i podwójnej precyzji	156
8. Podsumowanie	159
9. Spis rysunków	160
10. Bibliografia	161
11. Repozytorium	164