

Wstęp

Człowiek od wieków interesował się mechanizmami stojącymi za zjawiskami naturalnymi. Pierwszym sposobem badania otaczającej człowieka rzeczywistości był eksperyment. Przykładem niech będzie tutaj badanie materiałów na oddziaływanie ognia, wody lub powietrza. Eksperyment dostarczał wiedzy o tym na przykład, że kamień tonie i nie pali się, zaś drzewo pali się i nie tonie. Ten jakościowy opis rzeczywistości nie wystarczał jednak człowiekowi do tworzenia nowych rozwiązań i wynalazków. Potrzebny był jeszcze opis ilościowy zachodzących zjawisk. Takiego opisu mogła dostarczyć tylko nauka o liczbach, czyli matematyka. Najstarszym działem matematyki była arytmetyka. Pierwsze działania takie jak dodawanie i odejmowanie były już znane u ludów neolitycznych około 9000 lat przed naszą erą. W starożytnej Babilonii już dwa tysiące lat przed naszą erą były znane wszystkie działania na liczbach oraz na ułamkach. Systemy liczbowe używane przez starożytnych były jednak trudne w zapisie. Przełomem w matematyce było wprowadzenie systemu dziesiętnego i zapisu arabskiego liczb. Dzięki obliczeniom matematycznym można było już lepiej wykorzystać wiedzę zdobytą podczas eksperymentów. Dużym skokiem jakościowym w poznaniu otaczającej człowieka rzeczywistości było wynalezienie maszyn liczących. Pierwsze maszyny obliczeniowe służyły do obliczeń z zakresu nawigacji morskiej na podstawie położenia ciał niebieskich (słońce, księżyc, gwiazdy). Były to zazwyczaj urządzenia napędzane mechanicznie. Rewolucja naukowo-techniczna początku XX wieku pozwoliła na skonstruowanie maszyn obliczeniowych napędzanych energią elektryczną. Wtedy też po raz pierwszy pojawiło się słowo komputer pochodzące od angielskiego czasownika obliczać (*to compute*). Zwiększona szybkość obliczeń pozwalała już na przeprowadzanie eksperymentów obliczeniowych, zwanych symulacjami. Symulacja komputerowa to tak naprawdę odtworzenie fragmentu naszej rzeczywistości we wnętrzu systemu komputerowego z wykorzystaniem równań matematycznych opisujących prawa natury. Zakres takich symulacji może się rozciągać od praw fizyki rządzących materią i energią po prawa społeczne rządzące relacjami międzyludzkimi. Cel wykonywania symulacji komputerowych jest dwojaki, z jednej strony jest to sprawdzenie teorii z eksperymentem, a z drugiej obniżenie kosztów samego eksperymentu. Dobrym przykładem są tu symulatory lotnicze. Błędy pilotów w symulatorze nie są tak kosztowne jak błędy za sterami prawdziwego samolotu. Symulacja komputerowa jest tak naprawdę tylko przybliżeniem rzeczywistości. Niech ilustracją tego będzie pewna sytuacja. Swego czasu student po wykładzie spytał się czy da się za pomocą symulacji komputerowej przewidzieć zachowanie każdego atomu w sali wykładowej pełnej studentów? Jeżeli układ rozpatrywany byłby tylko w kategoriach fizycznych to i tak ilość atomów większa od 10^{23} byłaby tu zaporą nie do przejścia w dzisiejszych czasach. Ale fizyka subatomowa to nie wszystko bo coraz to większymi grupami materii zaczynają rządzić inne prawa nie odczuwalne na poziomie atomowym. Wystarczy tutaj przykład określenia położenia studenta po godzinie wykładu. Tego same prawa fizyki nie są w stanie przewidzieć, potrzebna jest tu wiedza medyczna (np. student zasnął, wyszedł za potrzebą fizjologiczną), wiedza z dziedziny relacji międzyludzkich i psychologii (student rozgniewał się i wyszedł). Jest tyle nieprzewidzianych czynników, że trudno mówić o 100% przewidywaniach symulacji komputerowych w odniesieniu do rzeczywistego świata. Dlatego symulacje obecnie koncentrują się jedynie na pojedynczych aspektach natury dobrze opisanych równaniami matematycznymi.

Niniejsze opracowanie koncentruje się na aspektach technicznych związanych z programowaniem symulacji komputerowych układów molekularnych na komputerach trzeciej generacji. W pierwszym rozdziale przedstawione są ogólne przykłady zastosowania symulacji komputerowych wraz z ich historią. W drugim rozdziale tego opracowania jest mowa o algorytmach opisujących statystycznie własności fizyczne układów molekularnych. Do przykładów prezentowanych w tym rozdziale dołączony jest kod źródłowy w języku C++

oprogramowania opisującego te symulacje. W następnym rozdziale opisane są algorytmy rozwiązywania równań ruchu. Rozdział zawiera podstawy teoretyczne jak i rozwiązania w postaci algorytmów wraz z ich implementacją. Istotną sprawą w przypadku odwzorowania kawałka naszej rzeczywistości jest ilość atomów wziętych do symulacji. Aby symulować rzeczywisty materiał ta ilość powinna być w przybliżeniu równa 10^{23} cząsteczek. Takiej ilości atomów nie jest w stanie symulować żaden komputer na świecie, dlatego stosuje się różne techniki przybliżające tą ilość. O tym też można się dowiedzieć z rozdziału trzeciego. Same symulacje mikroskopowe to jednak nie wszystko. Potrzebne są jeszcze wielkości makroskopowe, które można porównać z eksperymentem. W większości przypadków aby je otrzymać trzeba dużej mocy obliczeniowej komputera. Następne rozdziały tej monografii koncentrują się na zrównolegleniu obliczeń związanych z symulacją układów molekularnych. W rozdziale czwartym tego opracowania jest opisana typowa architektura procesora głównego i graficznego. W następnym rozdziale czytelnik ma możliwość zapoznania się z biblioteką programistyczną CUDA oraz ich filozofią obsługi wielowątkowości na procesorach o dużej ilości rdzeni obliczeniowych. W rozdziale szóstym autor omawia swoje własne rozwiązania współbieżności kod symulacji dla modelu sieciowego z wykorzystaniem architektury CUDA i procesora graficznego firmy NVIDIA. Pod sam koniec tego rozdziału przedstawione są wyniki związane z czasem wykonania symulacji na liczbach stałoprzecinkowych. W rozdziale siódmym przedstawione są rozwiązania autorskie dotyczące kodu współbieżnego dla algorytmów rozwiązywania równań ruch. W rozdziale tym przedstawione są wyniki symulacji dla liczb zmiennoprzecinkowych zarówno pojedynczej jak i podwójnej precyzji.