

## :: STUDIA II STOPNIA ::

Zgłoszenie tematu pracy dyplomowej na rok akademicki 2019/2020

<b>Promotor:</b>	<b>dr Wojciech Gwizdała</b>
Temat pracy magisterskiej (j. polski, j.angielski):	Przystosowanie wybranego algorytmu do obliczeń równoległych przy pomocy bibliotek programistycznych  <i>Adapting selected algorithm for parallel computing using programming libraries</i>
Zakres pracy i oczekiwane rezultaty praktyczne:	Praca wymaga zaprogramowania algorytmu obliczającego indeks Lindemanna (ang. Lindemann index) w taki sposób, aby działał równoległe (na większej liczbie rdzeni) przy pomocy bibliotek OpenMP lub MPI. Głównym celem pracy jest przyspieszenie wykonujących się obliczeń numerycznych.
Aspekt naukowy, problemowy, innowacyjny pracy:	Indeks Lindemanna jest miarą zaburzenia napędzanego termicznie w atomach lub cząsteczkach. Kryterium Lindemanna jest najczęściej stosowane jako podstawa do analizy warunków topnienia (jedna z miar używanych w badaniu przejść fazowych materiałów). Należy przeprowadzić badania szybkości działania wybranego algorytmu przed oraz po jego zrównolegleniu w różnych środowiskach komputerowych, a także zbadać wpływ ilości rdzeni na wzrost szybkości wykonywania obliczeń. Dwie wersje algorytmu – zwykła i równoległa – będą testowane na rezultatach otrzymanych z symulacji komputerowych metodą dynamiki molekularnej.
*Oprogramowanie, język programowania, środowisko systemowe:	C lub C++
*Środowisko uruchomieniowe	Windows lub Linux
Dodatkowe wymagania i uwagi:	Język angielski na poziomie umożliwiającym czytanie dokumentacji technicznej
*Literatura:	

\*poła opcjonalne