

# DIRAC v prostredí Microsoft Windows: adaptácia a vysokovýkonné po ítanie

Témou a cie om diplomovej práce je adaptovanie relativistického kvantovo-chemického programu DIRAC pre prostredie opera ného systému Microsoft Windows. Adaptácia je vykonávaná prispôsobovaním a rozširovaním konfigura ných skriptov pre vykonanie kompilácie programu. Tieto zásahy sú urobené multiplatformovými nástrojmi CMake a Python. Sú as ou práce je i odskúšanie niektorých kompilátorov a matematických knižníc, ktoré by sa mohli s programom na systéme Windows využíva . Snahou je i zabezpe i paralelný beh programu pomocou využitia niektorého z paralelných programovacích modelov, ktoré sú v DIRAC-u alebo v použitých knižniciach implementované.

Text práce sa delí do piatich kapitol. Prvá kapitola sa teoreticky zameriava na vysokovýkonné po ítanie na paralelných architektúrach a paralelné programovacie modely. Druhá kapitola pojednáva o špecifikácii rozhrania pre zasielanie správ - MPI. Tu sú predstavené ciele, s ktorými špecifikácia vznikla, cie ové architektúry a aj niektoré z jej implementácií. Samostatná as je venovaná i organizácii práce so zdrojovými kódmi a softvérovým nástrojom, ktoré boli využívané pri práci na programe DIRAC. Vo štvrtej kapitole je zosumarizovaná práca, ktorá bola na programe vykonaná. Posledná kapitola sa venuje priebežnej integrácii. Táto dôležitá innos pre zvýšenie kvality vývoja kódu DIRAC-u je zabezpe ovaná pomocou služieb, ktoré ju automatizujú.

Výsledkom našej práce je vylepšenie použite nosti programu DIRAC v prostredí opera ných systémov Microsoft Windows v 64-bitových verziách a stále i v starších, 32-bitových verziách. Podarilo sa odskúša i paralelný beh programu s využitím paralelizmu založeného na modeli vlákien a sprevádzkova DIRAC aj v prostredí Cygwin, kde existuje potenciál na využitie modelu zasielania správ.

K ú ové slová:

vedecký softvér DIRAC, CMake, buildup, MS Windows  
vysokovýkonné po ítanie

Mgr. Ivan Hraško, 2015



Študijný program: Aplikovaná informatika

Študijný odbor: 9.2.9 Aplikovaná informatika

Vedúci práce: doc. RNDr. Miroslav Iliáš, PhD.

Pracovisko: KCH FPV - Katedra chémie

Univerzita Mateja Bela v Banskej Bystrici, Fakulta prírodných vied

