

# Partikelsimulation

Oliver Heidmann & Benjamin Warnke

Arbeitsbereich Wissenschaftliches Rechnen  
Fachbereich Informatik  
Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften  
Universität Hamburg

2017-01-12



Universität Hamburg

DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG

**informatik**  
**die zukunft**

# Gliederung (Agenda)

- 1 Autotuneing
  - Gleichverteilte Eingabe
  - Nicht gleichverteilte Eingabe

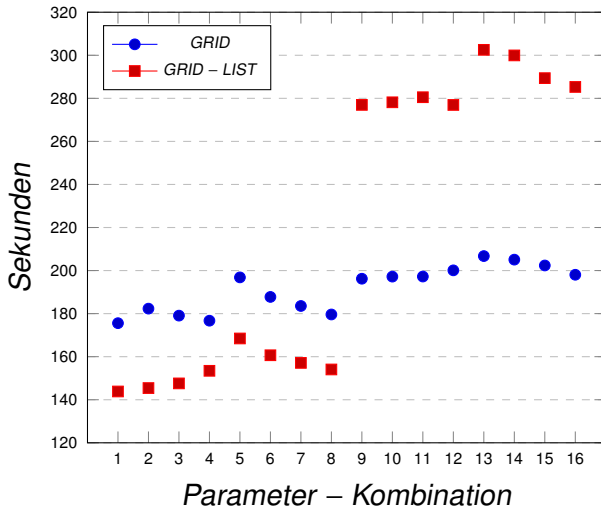
- 2 Literatur

# Gliederung (Agenda)

- 1 Autotuneing
  - Gleichverteilte Eingabe
  - Nicht gleichverteilte Eingabe

- 2 Literatur

# Laufzeitmessungen



# Resultierende Entscheidung

- **c** → cut-off-radius
- **f** → cut-off-radius-factor
- **s** → start-speed

$$2 \cdot s < c \cdot (f - 1) - 1$$

- **true** → GRID-LIST
- **false** → GRID

# TODO

# Gliederung (Agenda)

- 1 Autotuneing
  - Gleichverteilte Eingabe
  - Nicht gleichverteilte Eingabe

- 2 Literatur

# Literatur

- M-Griebel, S. Knapek, G. Zumbuschm, A. Caglar:  
Numerische Simulation in der Moleküldynamic. Springer,  
2003
- D.C Rapaport: The Art of Molecular Dynamics Simulation -  
2nd edition, Cambridge University Press, 2004