

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 Parallelisierung(Linked-Cells)
 - Open MP
- 2 Laufzeitverhalten
 - Nachbarschafts-Listen
 - Linked-Cells
 - Linked-Cells + Nachbarschafts-Listen
- 3 Autotuning
 - Gleichverteilte Eingabe
 - Nicht Gleichverteilte Eingabe
- 4 Literatur

Gliederung (Agenda)

1 Parallelisierung(Linked-Cells)

■ Open MP

2 Laufzeitverhalten

■ Nachbarschafts-Listen

■ Linked-Cells

■ Linked-Cells + Nachbarschafts-Listen

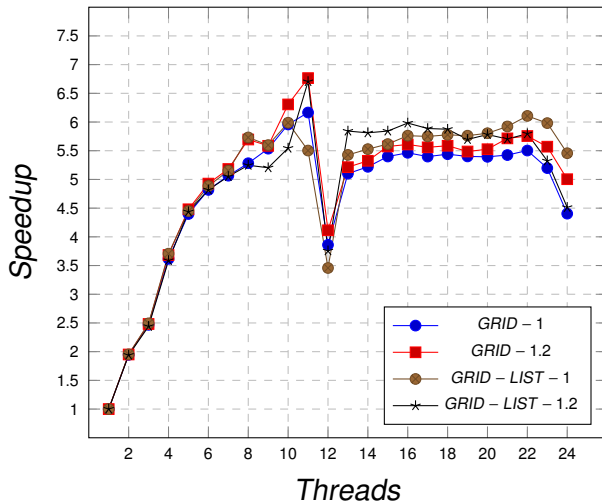
3 Autotuning

■ Gleichverteilte Eingabe

■ Nicht Gleichverteilte Eingabe

4 Literatur

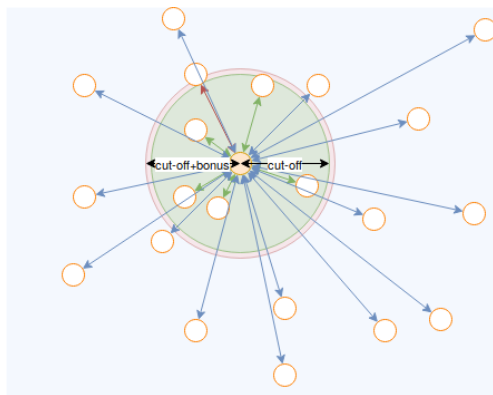
Laufzeitmessungen



Gliederung (Agenda)

- 1 Parallelisierung(Linked-Cells)
 - Open MP
- 2 Laufzeitverhalten
 - Nachbarschafts-Listen
 - Linked-Cells
 - Linked-Cells + Nachbarschafts-Listen
- 3 Autotuning
 - Gleichverteilte Eingabe
 - Nicht Gleichverteilte Eingabe
- 4 Literatur

Nachbarschafts-Listen

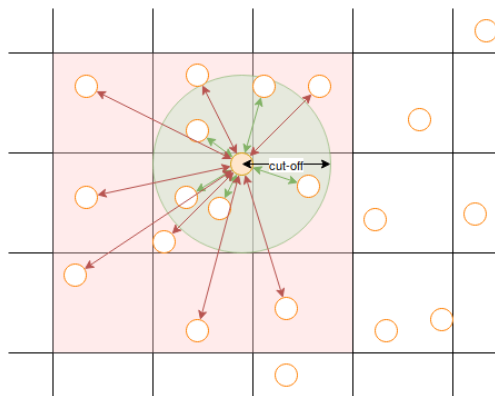


- Aufbau $O(p^2)$
- Iteration $O(p \cdot n)$

$p \rightarrow$ Partikel

$n \rightarrow$ nahe Partikel

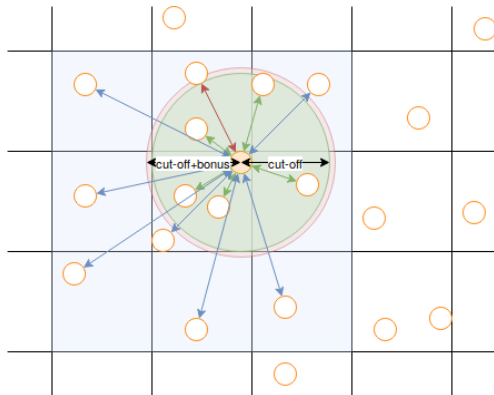
Linked-Cells



- Aufbau
 $O(p)$
- Iteration
 $O(\frac{p^2}{z})$

$p \rightarrow$ Partikel
 $z \rightarrow$ Zellen

Linked-Cells + Nachbarschafts-Listen



- Aufbau (global)
 $O(p)$
- Aufbau (lokal)
 $O(\frac{p^2}{z})$
- Iteration
 $O(p \cdot n)$

$p \rightarrow$ Partikel

$n \rightarrow$ nahe Partikel

$z \rightarrow$ Zellen

Gliederung (Agenda)

1 Parallelisierung(Linked-Cells)

- Open MP

2 Laufzeitverhalten

- Nachbarschafts-Listen
- Linked-Cells
- Linked-Cells + Nachbarschafts-Listen

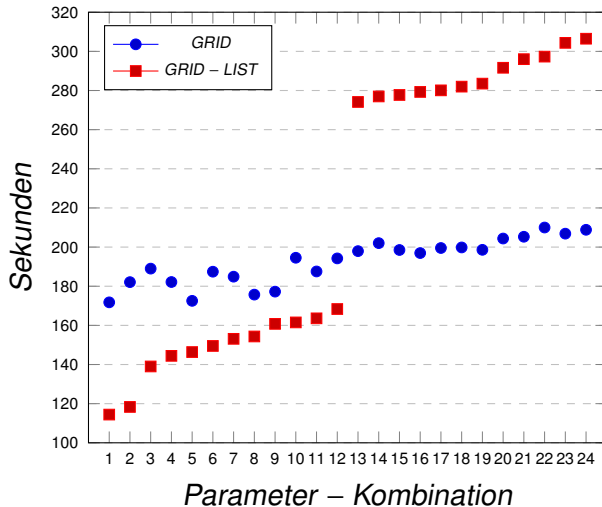
3 Autotuning

- Gleichverteilte Eingabe
- Nicht Gleichverteilte Eingabe

4 Literatur

Gleichverteilte Eingabe

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 Parallelisierung(Linked-Cells)
 - Open MP
- 2 Laufzeitverhalten
 - Nachbarschafts-Listen
 - Linked-Cells
 - Linked-Cells + Nachbarschafts-Listen
- 3 Autotuning
 - Gleichverteilte Eingabe
 - Nicht Gleichverteilte Eingabe
- 4 Literatur

Literatur

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