

# 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
  - Open MP
- 2 Autotuneing
  - Gleichverteilte Eingabe
  - Nicht Gleichverteilte Eingabe
- 3 Literatur

# Gliederung (Agenda)

## 1 Parallelisierung

### ■ Open MP

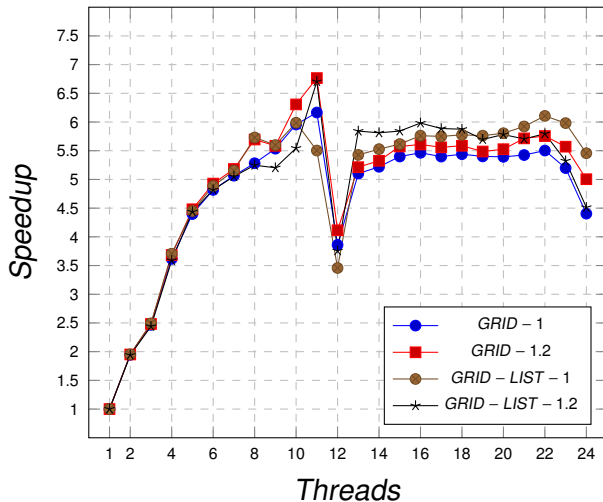
## 2 Autotuneing

### ■ Gleichverteilte Eingabe

### ■ Nicht Gleichverteilte Eingabe

## 3 Literatur

# Laufzeitmessungen



# Gliederung (Agenda)

## 1 Parallelisierung

- Open MP

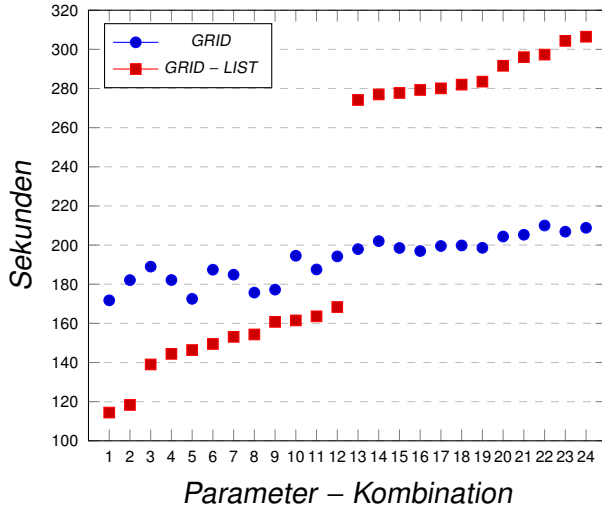
## 2 Autotuneing

- Gleichverteilte Eingabe
- Nicht Gleichverteilte Eingabe

## 3 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 Parallelisierung

- Open MP

## 2 Autotuneing

- Gleichverteilte Eingabe
- Nicht Gleichverteilte Eingabe

## 3 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