

Partikelsimulation

Oliver Heidmann & Benjamin Warnke

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

2017-02-09



Universität Hamburg

DER FORSCHUNG | DER LEHRE | DER BILDUNG

informatik
die zukunft

Gliederung (Agenda)

- 1 Einleitung
- 2 Laufzeitverhalten
- 3 Auto-Tuning
- 4 Parallelisierung(Linked-Cells)
 - Open MP
- 5 Literatur

Gliederung (Agenda)

- 1 Einleitung
- 2 Laufzeitverhalten
- 3 Auto-Tuning
- 4 Parallelisierung(Linked-Cells)
 - Open MP
- 5 Literatur

Ziele

- Partikel-Simulation für kurzreichweitige Interaktionen
- optimiert & parallelisiert
- erweiterbar
- Cpp
- Auto-Tuning
- periodische Ränder

TODOS der letzten Präsentation vom 12.1.2017

- Partikel sollen im Feld bleiben
- Kombination von Verlet-Listen & Linked-Cell
- Auto-Tuning
- Datenausgabe (verbreitete Formate & binär)
- prüfen der Energieerhaltung
- Parallelisierung

Gliederung (Agenda)

1 Einleitung

2 Laufzeitverhalten

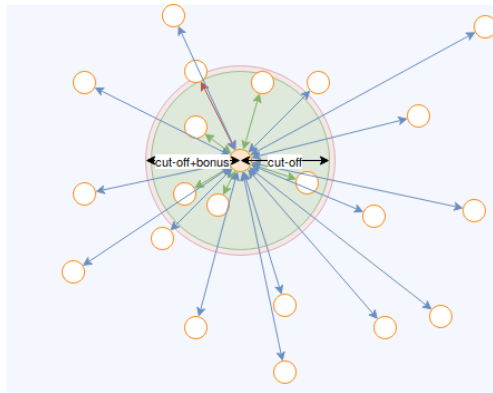
3 Auto-Tuning

4 Parallelisierung(Linked-Cells)

■ Open MP

5 Literatur

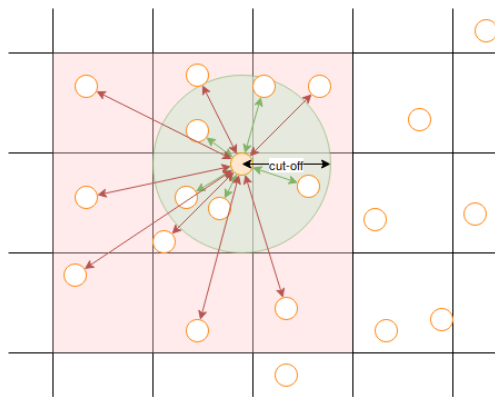
Nachbar-Listen



- Aufbau
 $\Theta(p^2)$
- Iteration
 $O\left(p^2 \cdot \frac{4\pi \cdot r^3}{V}\right)$

$p \rightarrow$ alle Partikel
 $r \rightarrow$ cut-off-radius
 $V \rightarrow$ gesamt Volumen

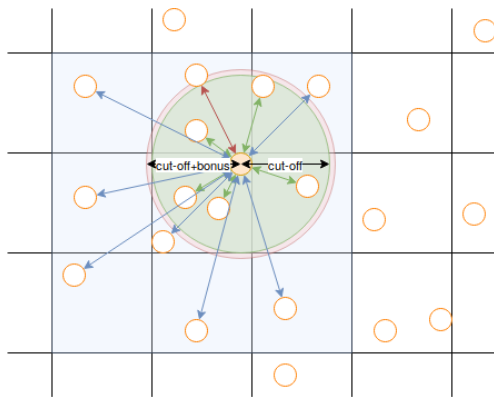
Linked-Cells



- Aufbau
 $\Theta(p)$
- Iteration
 $O\left(p^2 \cdot \frac{27 \cdot r^3}{V}\right)$

$p \rightarrow$ alle Partikel
 $r \rightarrow$ cut-off-radius
 $V \rightarrow$ gesamt Volumen

Linked-Cells + Nachbar-Listen



- 1.Aufbau
(Linked-Cells)
 $\Theta(p)$
- 2.Aufbau
(Nachbar-Listen)
 $O\left(p^2 \cdot \frac{27 \cdot r^3}{V}\right)$
- Iteration
 $O\left(p^2 \cdot \frac{\frac{4}{3}\pi \cdot r^3}{V}\right)$

$p \rightarrow$ alle Partikel
 $r \rightarrow$ cut-off-radius
 $V \rightarrow$ gesamt Volumen

Gegenüberstellung(1)

- Simulation für **langreichweitige** Interaktionen

$$\rightarrow p \cdot \frac{r^3}{V} \sim p$$

	Nachbar-Listen	Linked-Cells	Kombination
Aufbau (Linked-Cells)	-	$\Theta(p)$	$\Theta(p)$
Aufbau (Nachbar-Listen)	$\Theta(p^2)$	-	$O\left(p^2 \cdot \frac{27 \cdot r^3}{V}\right)$
Iteration	$O\left(p^2 \cdot \frac{\frac{4}{3}\pi \cdot r^3}{V}\right)$	$O\left(p^2 \cdot \frac{27 \cdot r^3}{V}\right)$	$O\left(p^2 \cdot \frac{\frac{4}{3}\pi \cdot r^3}{V}\right)$

Gegenüberstellung(2)

- Simulation für **kurzreichweitige** Interaktionen

$$\rightarrow p \cdot \frac{r^3}{V} \sim 1$$

	Nachbar-Listen	Linked-Cells	Kombination
Aufbau (Linked-Cells)	-	$\Theta(p)$	$\Theta(p)$
Aufbau (Nachbar-Listen)	$\Theta(p^2)$	-	$O(p \cdot 27)$
Iteration	$O\left(p \cdot \frac{4}{3}\pi\right)$	$O(p \cdot 27)$	$O\left(p \cdot \frac{4}{3}\pi\right)$

Gliederung (Agenda)

1 Einleitung

2 Laufzeitverhalten

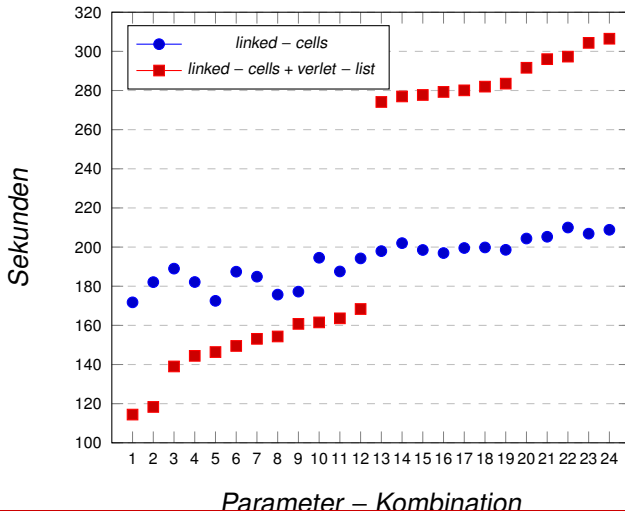
3 Auto-Tuning

4 Parallelisierung(Linked-Cells)

■ Open MP

5 Literatur

Laufzeitmessungen



Resultierende Entscheidung

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

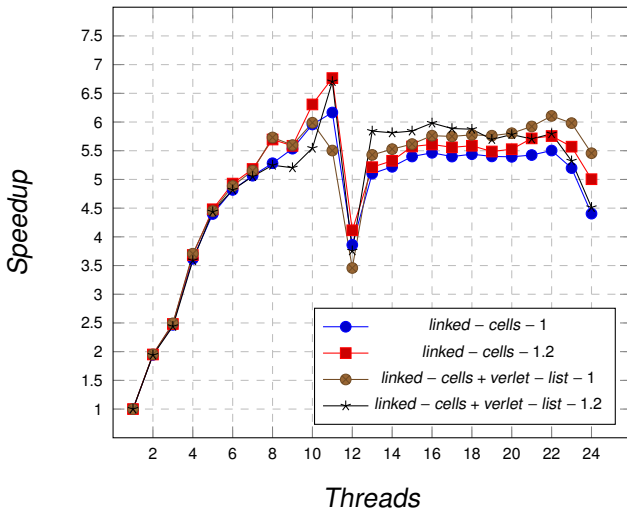
$$2 \cdot s < c \cdot (f - 1) - 1$$

- **true** → linked-cells+verlet-list
- **false** → linked-cells

Gliederung (Agenda)

- 1 Einleitung
- 2 Laufzeitverhalten
- 3 Auto-Tuning
- 4 Parallelisierung(Linked-Cells)**
 - Open MP
- 5 Literatur

Laufzeitmessungen



Gliederung (Agenda)

- 1 Einleitung
- 2 Laufzeitverhalten
- 3 Auto-Tuning
- 4 Parallelisierung(Linked-Cells)
 - Open MP
- 5 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