

# 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

## 3 Autotuneing

## 4 Literatur

# Gliederung (Agenda)

## 1 Parallelisierung(Linked-Cells)

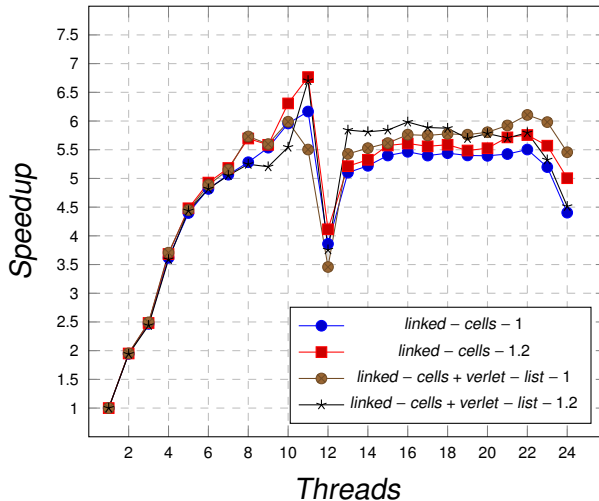
### ■ Open MP

## 2 Laufzeitverhalten

## 3 Autotuneing

## 4 Literatur

# Laufzeitmessungen



# Gliederung (Agenda)

## 1 Parallelisierung(Linked-Cells)

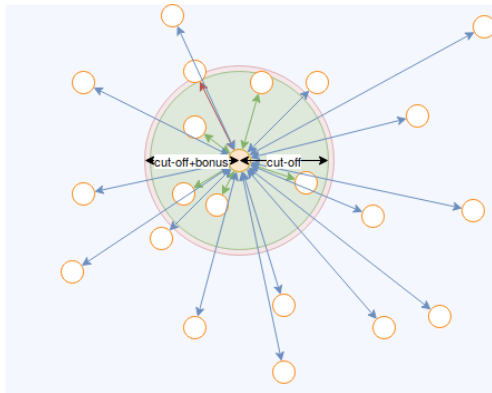
### ■ Open MP

## 2 Laufzeitverhalten

## 3 Autotuneing

## 4 Literatur

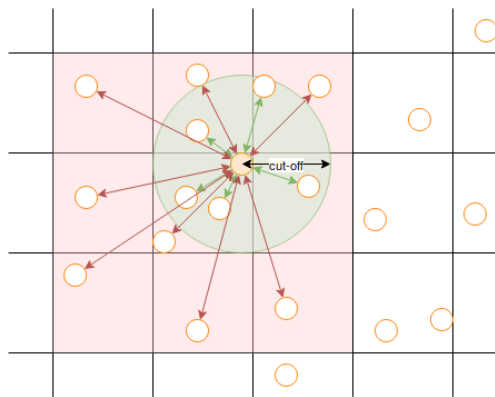
# Nachbar-Listen



- 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

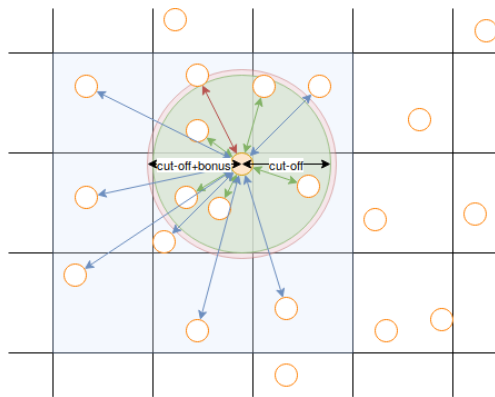
# Linked-Cells



- 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<br>(Linked-Cells)   | -  | $\Theta(p)$                                      | $\Theta(p)$  |
| Aufbau<br>(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<br>(Linked-Cells)   | -                                      | $\Theta(p)$     | $\Theta(p)$                            |
| Aufbau<br>(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 Parallelisierung(Linked-Cells)

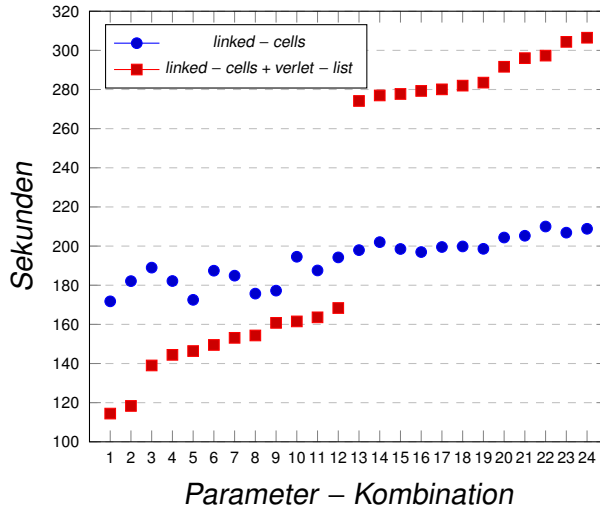
### ■ Open MP

## 2 Laufzeitverhalten

## 3 Autotuneing

## 4 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 Parallelisierung(Linked-Cells)

### ■ Open MP

## 2 Laufzeitverhalten

## 3 Autotuneing

## 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