

# 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**

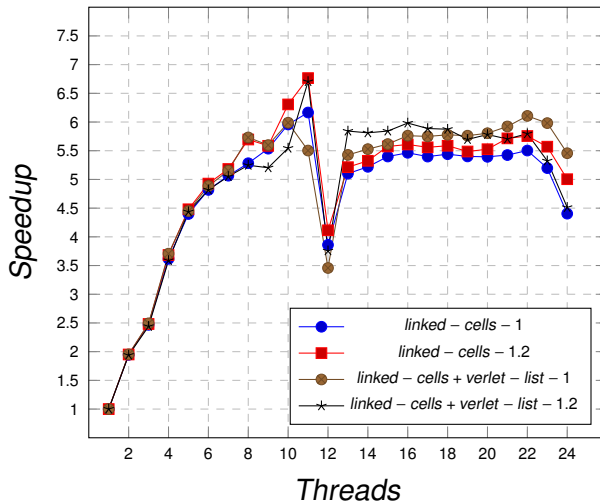
# Gliederung (Agenda)

- 1 Parallelisierung(Linked-Cells)
  - Open MP
- 2 Laufzeitverhalten
- 3 Autotuneing
  - Gleichverteilte Eingabe
  - Nicht Gleichverteilte Eingabe
- 4 Literatur

# Gliederung (Agenda)

- 1 Parallelisierung(Linked-Cells)
  - Open MP
- 2 Laufzeitverhalten
- 3 Autotuneing
  - Gleichverteilte Eingabe
  - Nicht Gleichverteilte Eingabe
- 4 Literatur

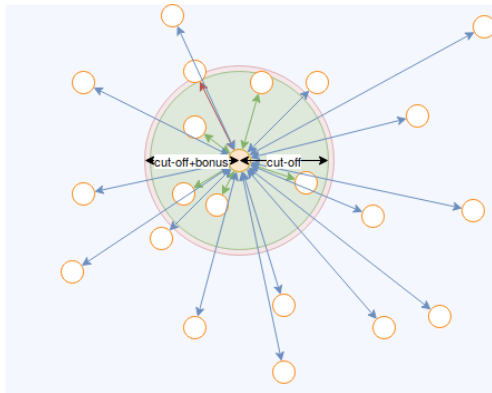
# Laufzeitmessungen



# Gliederung (Agenda)

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

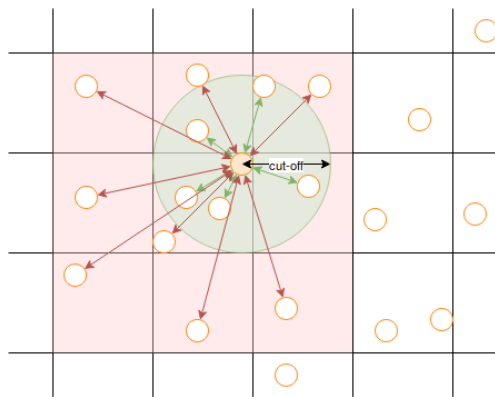
# Nachbar-Listen



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

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

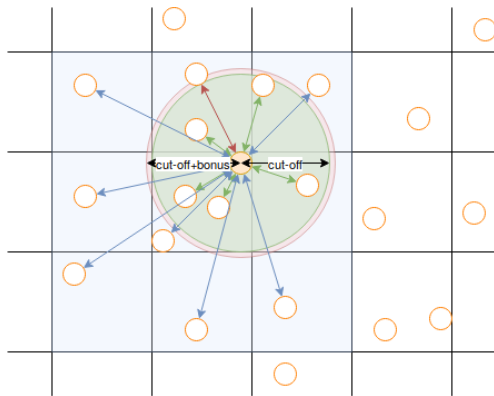
# Linked-Cells



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

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

# Linked-Cells + Nachbar-Listen



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

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



# Gegenüberstellung

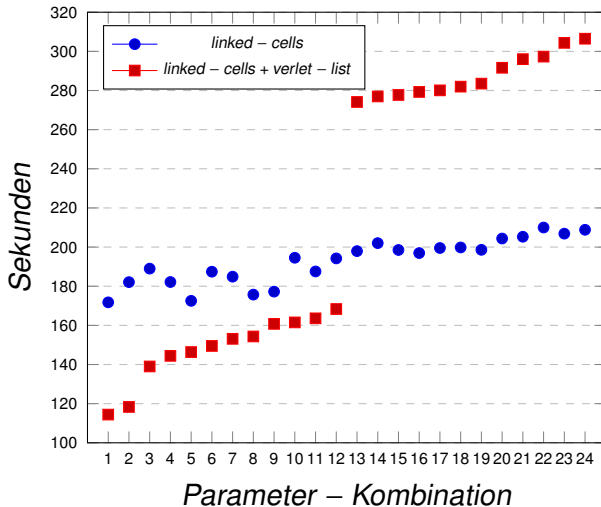
#	Nachbar-Listen	Linked-Cells	Kombination
Aufbau (Linked-Cells)	$\Theta(1)$	$\Theta(p)$	$\Theta(p)$
Aufbau (Nachbar-Listen)	$\Theta(p^2)$	$\Theta(1)$	$O(p^2 \cdot \frac{27 \cdot r^3}{v})$
Iteration	$O(p^2 \cdot \frac{\frac{4}{3}\pi \cdot r^3}{v})$	$O(p^2 \cdot \frac{27 \cdot r^3}{v})$	$O(p^2 \cdot \frac{\frac{4}{3}\pi \cdot r^3}{v})$

# Gliederung (Agenda)

- 1 Parallelisierung(Linked-Cells)
  - Open MP
- 2 Laufzeitverhalten
- 3 Autotuneing
  - 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** → linked-cells+verlet-list
- **false** → linked-cells

TODO

# Gliederung (Agenda)

- 1 Parallelisierung(Linked-Cells)
  - Open MP
- 2 Laufzeitverhalten
- 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