

Universität Hamburg Projekt 2016 Particle Simulation

Olliver Heidmann Benjamin Warnke

February 10, 2017

1 Projektplan

1. startparameter (Oliver)

- verbose
- algorithmus
- autotuneing on/off
- timestep gröÙe
- abstand der datei speicherung
- optimierungsmethode festlegen (nur ohne autotuneing)
- seed für random

2. prototypen/interface für Optimierte Datenstrukturen(Oliver)

- insert(Particle):void
- next():Particle
- neighbours(Particle):Particlelist
- zusätzliche? weniger?
- dies würde die austauschbarkeit enorm vereinfachen ... autotuneing müsste nur noch eine variable ändern
- gemeinsam treffen, nachdem die vorherigen aufgaben abgeschlossen sind.

3. Debug+Benchmark funktionen (Benjamin)

4. importieren/generieren der Startdaten (Benjamin)

- aus Datei (Optional)
- generieren nach bestimmten verteilungen für tests, welches verfahren wann am besten ist
 - kugel in der mitte
 - verteilte kugeln jeweils gleichmäßig gefüllt
 - gleichmäßig
 - pseudorandom
 - wenige partikel
 - viele partikel
 - weit auseinander
 - eng zusammen
 - generieren nach mustern

5. implementierung der Lennard-Jones-Simulation (Oliver)

- lesen im kapitel des buches?!?
- was für daten werden benötigt?
 - distanz zum anderen

6. ausgabe der Daten (Benjamin)

- (a)
 - eigenes txt format für tests
 - exportieren in bekannte Dateiformate (mindestens 1)
 - LAMMPS
 - ESPRESSO
 - GROMACS
 - VMD
 - ParaView/vtk
- (b)
 - OpenGL (optioal)

7. autotuneing + analyse

- als Grid (Benjamin)
- mit Listen der Nachbarn (Oliver)
- gruppen zusammenfassen und nur den Schwerpunkt berechnen
- welches verfahren sollte "gelöscht" werden -> wiso?
- welches verfahren ist am besten -> wiso? abhängig von der eingabe??
- kriterien für analyse?
- eingaben kategorisieren um analysieren zu können

8. optimierung

- funtions Verfahren
- openmp
- Intel TBB (optioal)
- cuda (optional)
- opencl (optional)
- mpi (optional)

9. andere Simulationsverfahren

- Smoothed Particle Hydrodynamics
- Dissipative Particle Dynamics