

# 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)

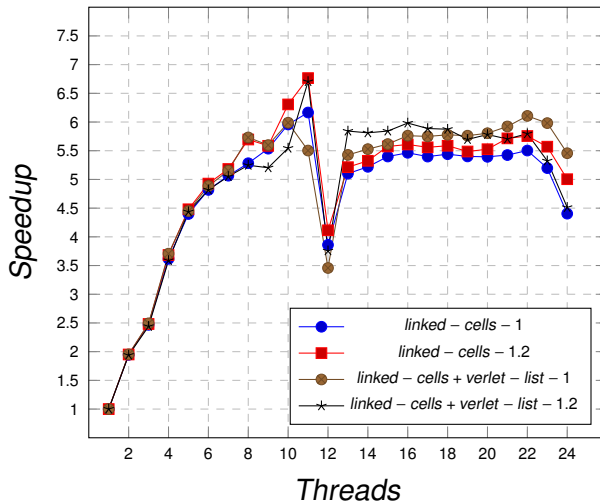
### ■ Open MP

## 2 Laufzeitverhalten

## 3 Autotuneing

## 4 Literatur

# Laufzeitmessungen



# Gliederung (Agenda)

## 1 Parallelisierung(Linked-Cells)

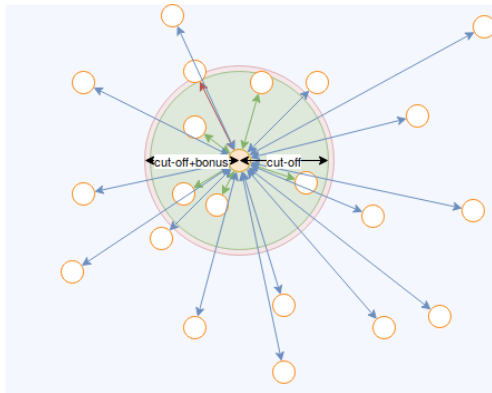
### ■ Open MP

## 2 Laufzeitverhalten

## 3 Autotuneing

## 4 Literatur

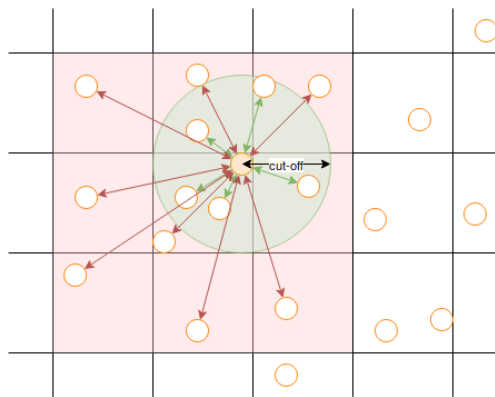
# Nachbar-Listen



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

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

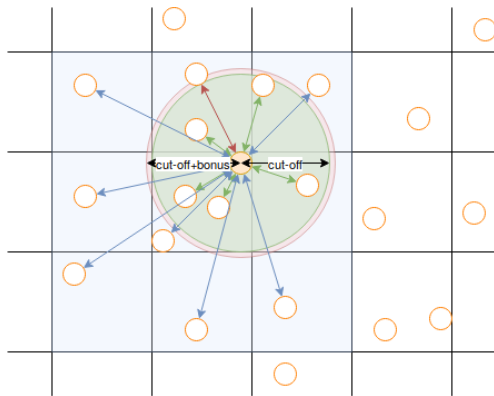
# Linked-Cells



- 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 Parallelisierung(Linked-Cells)

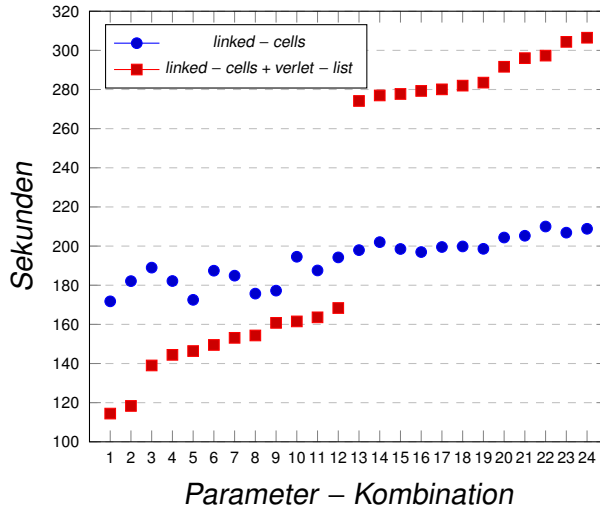
### ■ Open MP

## 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