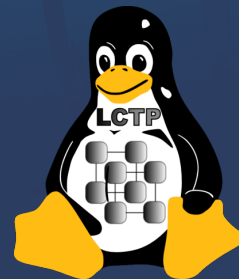


Linux Cluster in Theorie und Praxis

MD Simulation

Axel Hübl

10. Februar 2012



E-Mail: axel.huebl@mailbox.tu-dresden.de

0 Gliederung

- 1 Modell
- 2 Implementierung
- 3 Benchmarks
- 4 Anwendung:
Kollision zweier Sternhaufen

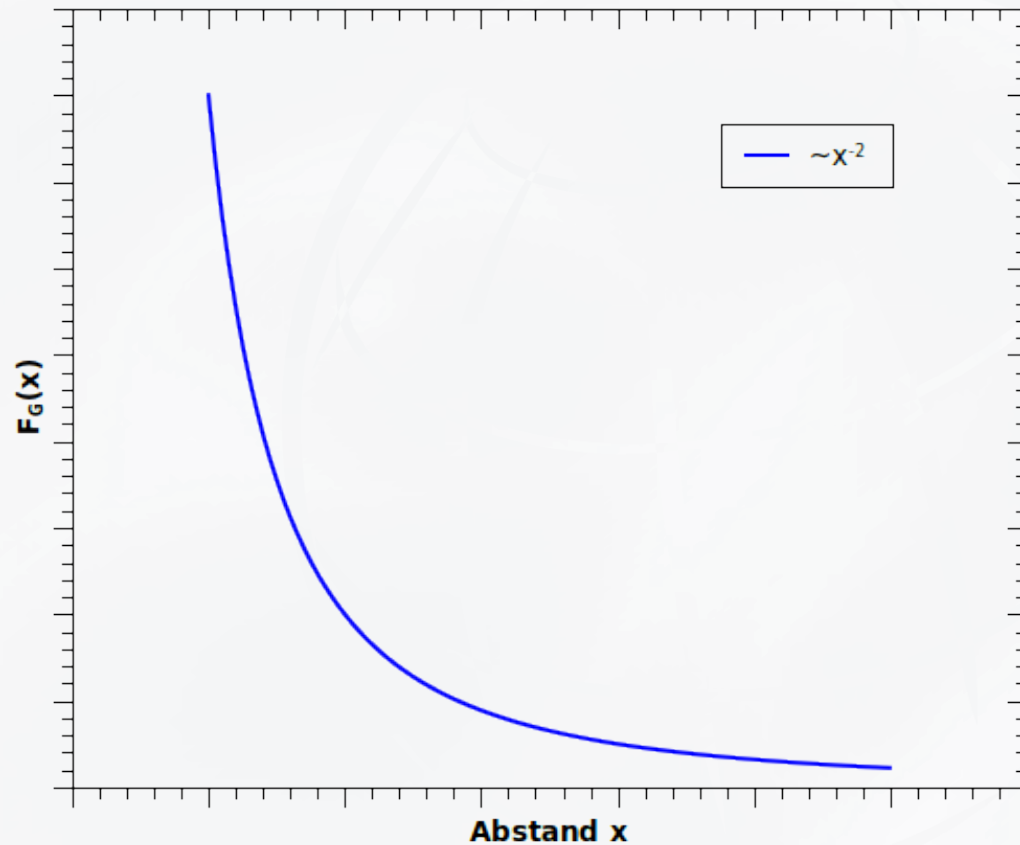
1 Modell

Simulation kurzreichweitiger Kräfte

Wechselwirkungen mit Cut-Off z.B. Gravitationskraft

$$F \sim x^{-2}$$

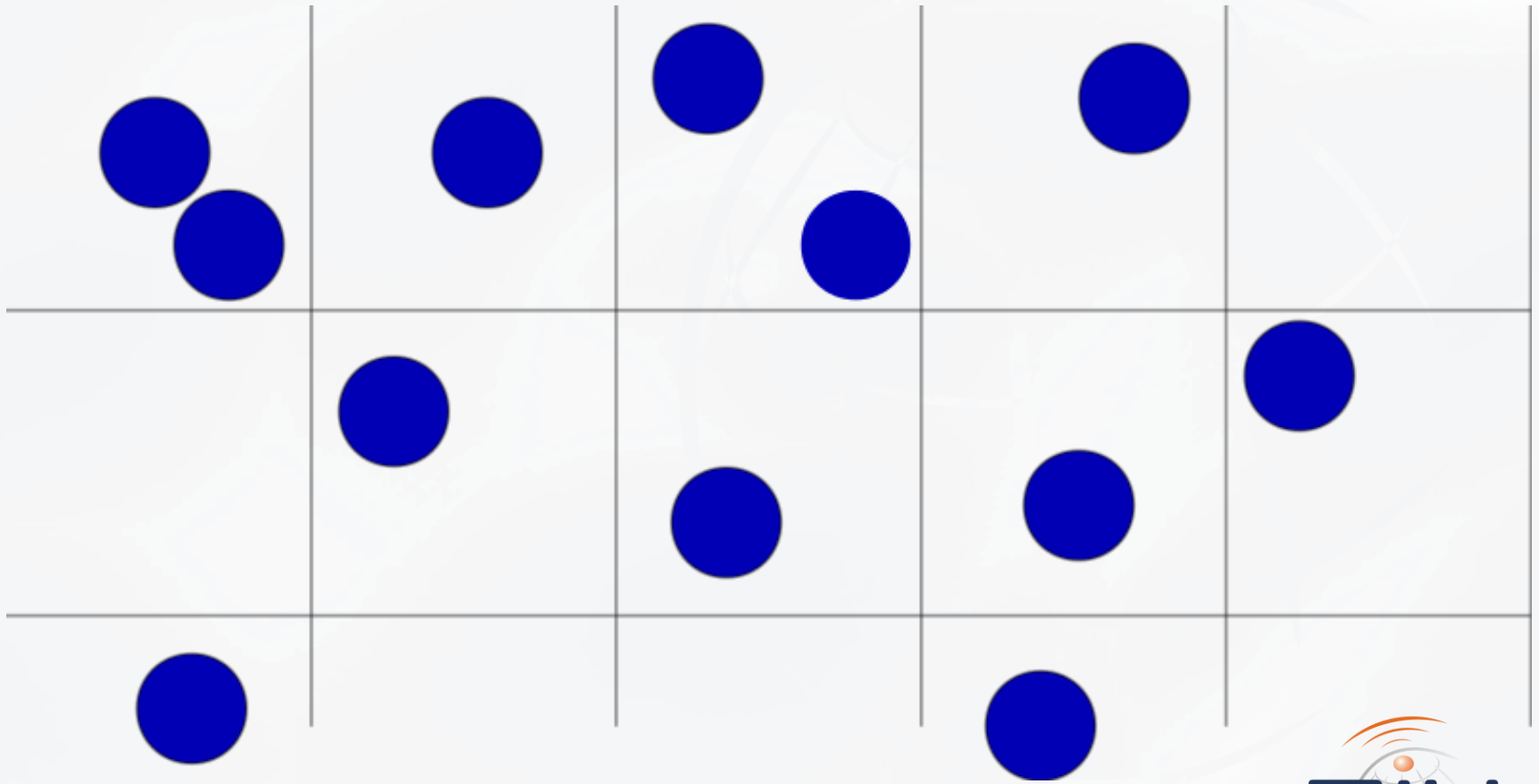
(Ann.: N Teilchen
gleicher Massen)



1 Modell

Simulation kurzreichweitiger Kräfte

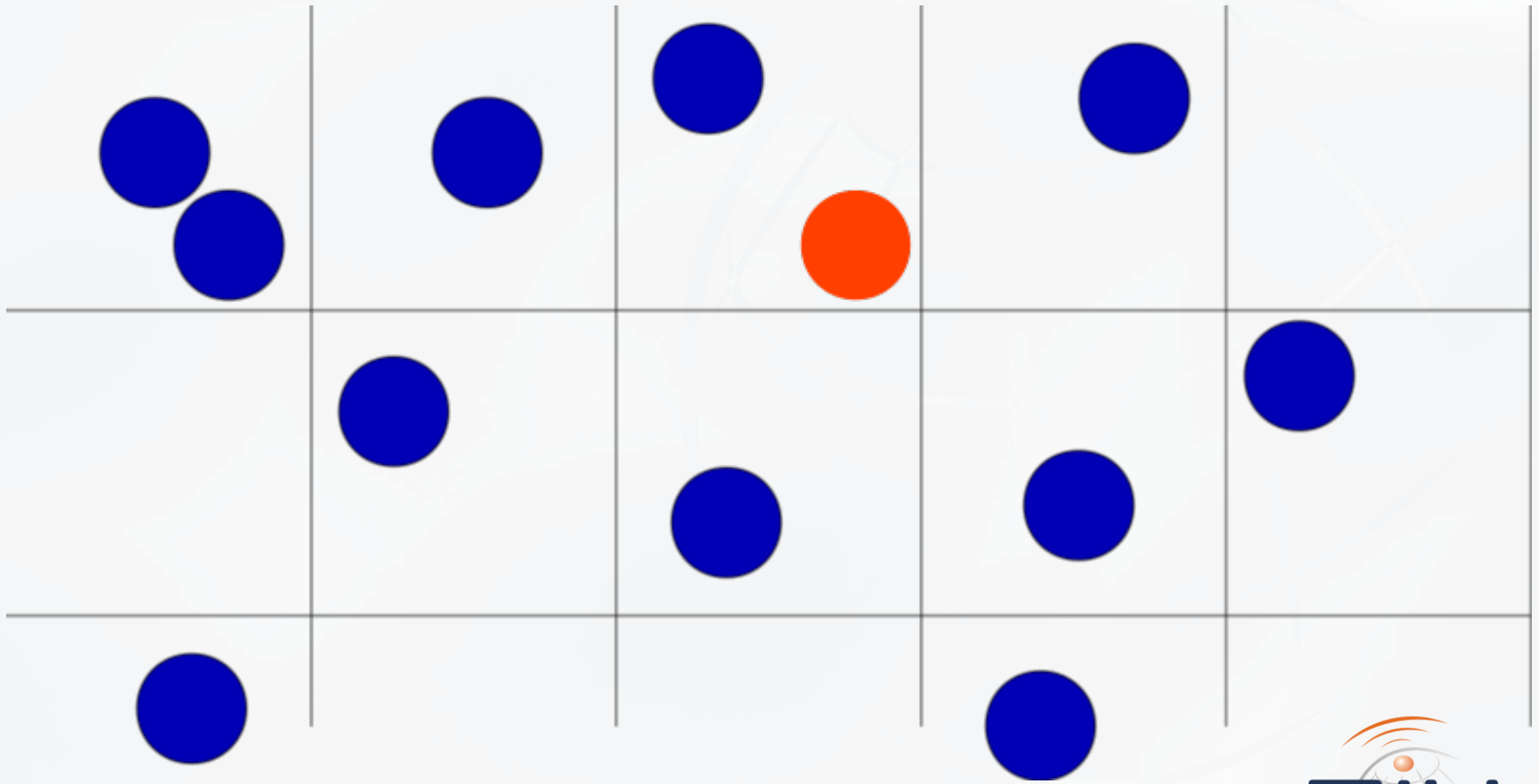
Zellbasierte räumliche Aufteilung



1 Modell

Simulation kurzreichweitiger Kräfte

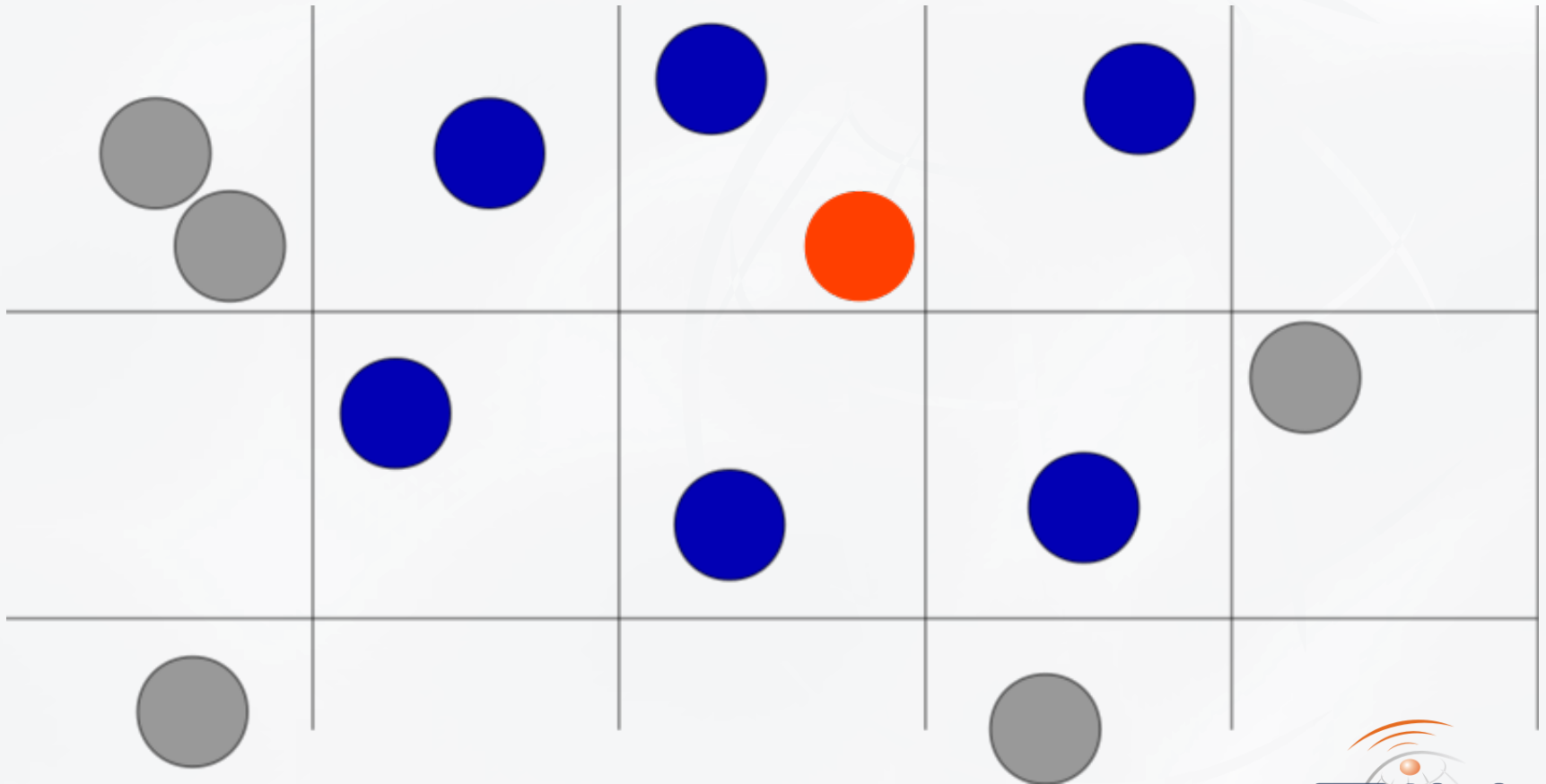
Zellbasierte räumliche Aufteilung



1 Modell

Simulation kurzreichweitiger Kräfte

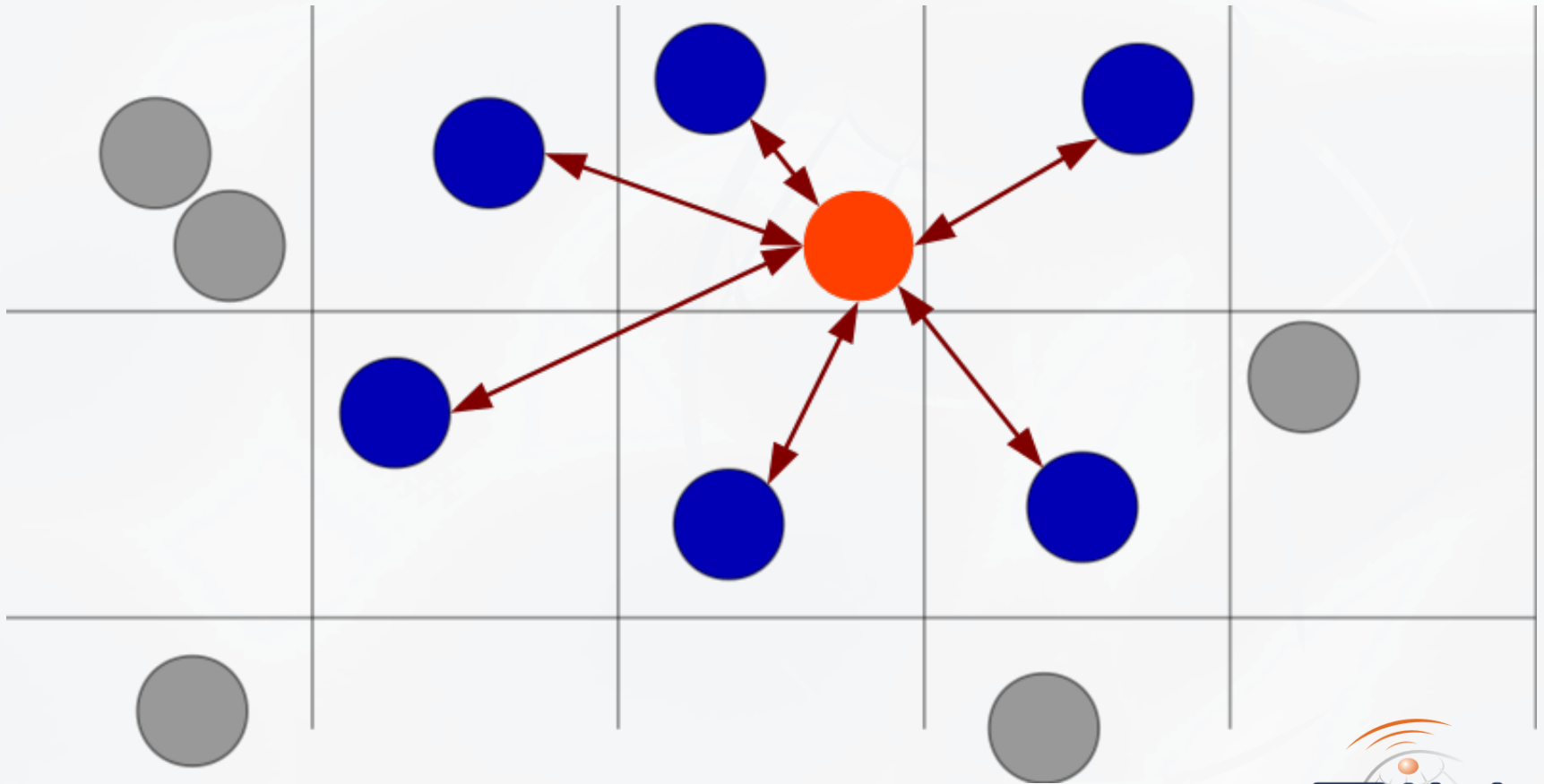
Zellbasierte räumliche Aufteilung



1 Modell

Simulation kurzreichweitiger Kräfte

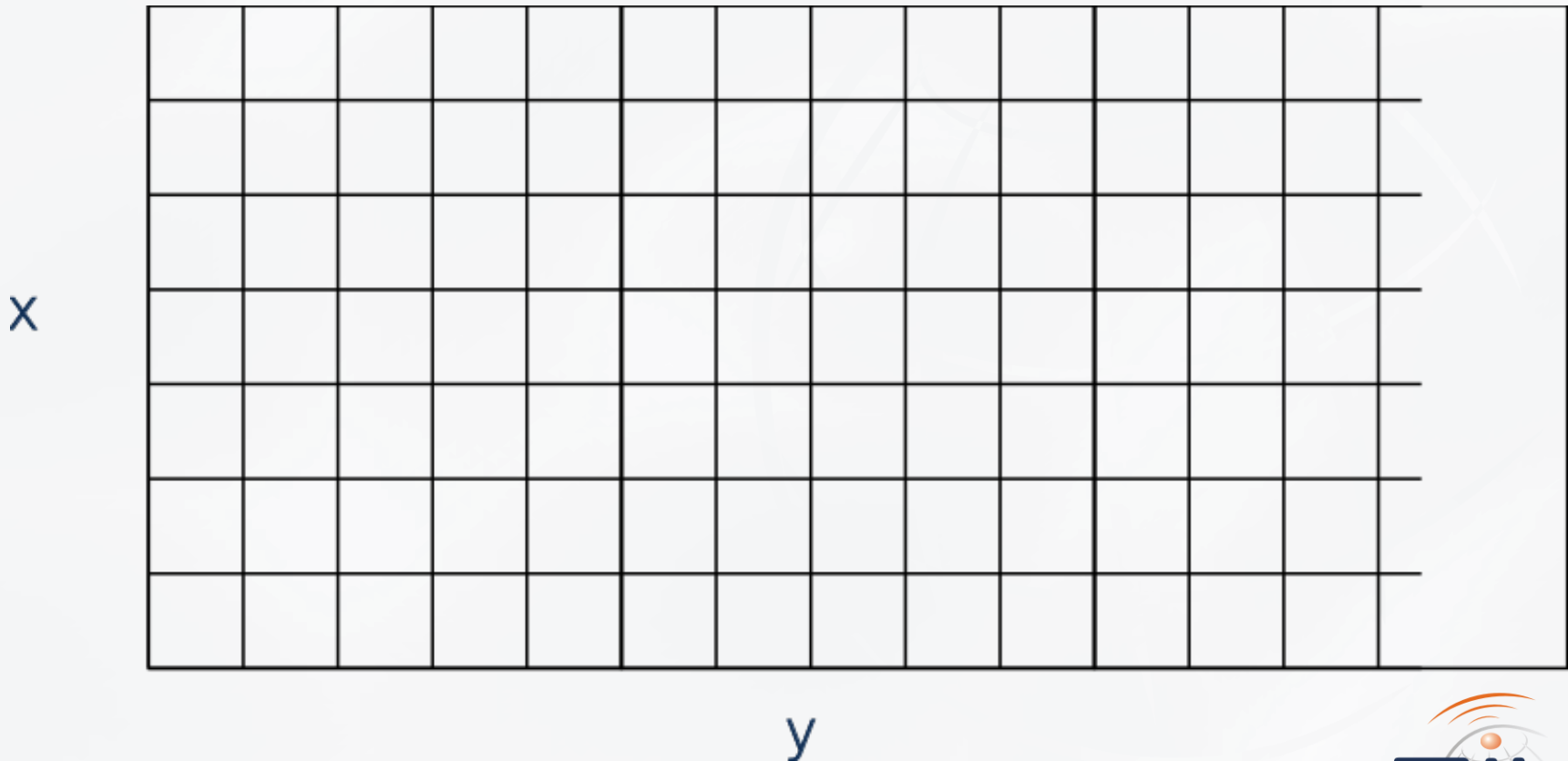
Zellbasierte räumliche Aufteilung



2 Implementierung

Parallelisiert mit MPI

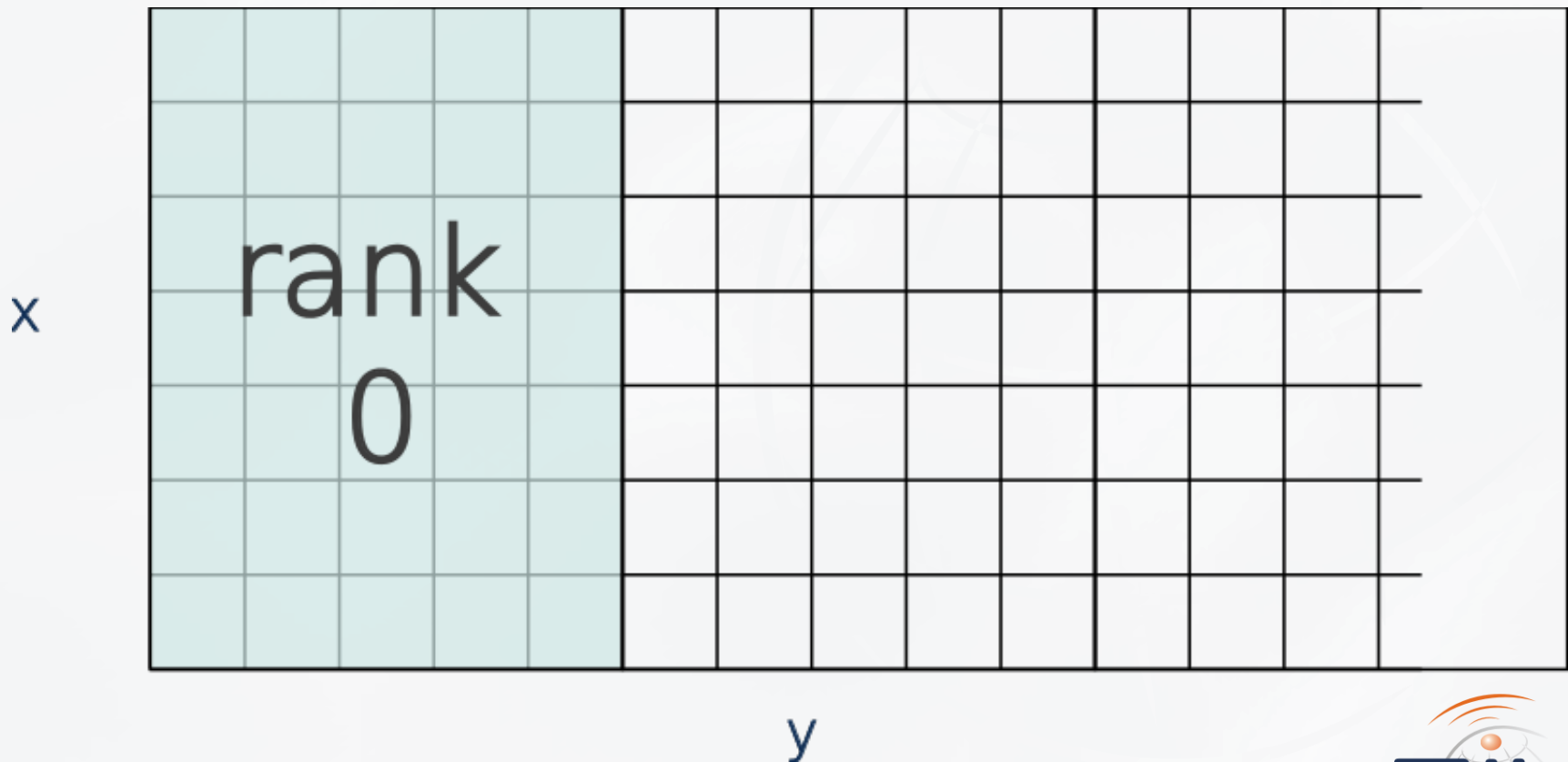
1D Domain Decomposition



2 Implementierung

Parallelisiert mit MPI

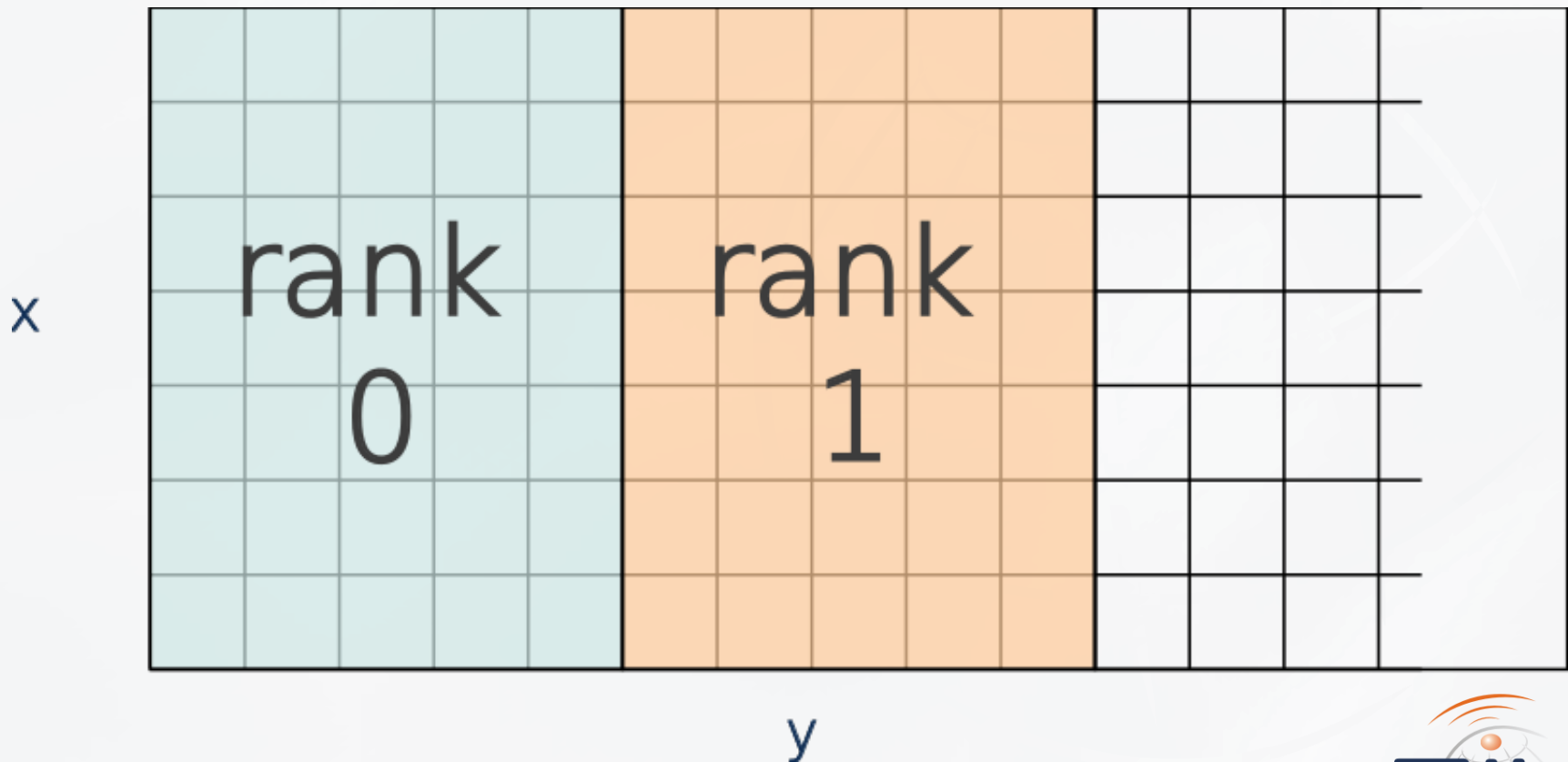
1D Domain Decomposition



2 Implementierung

Parallelisiert mit MPI

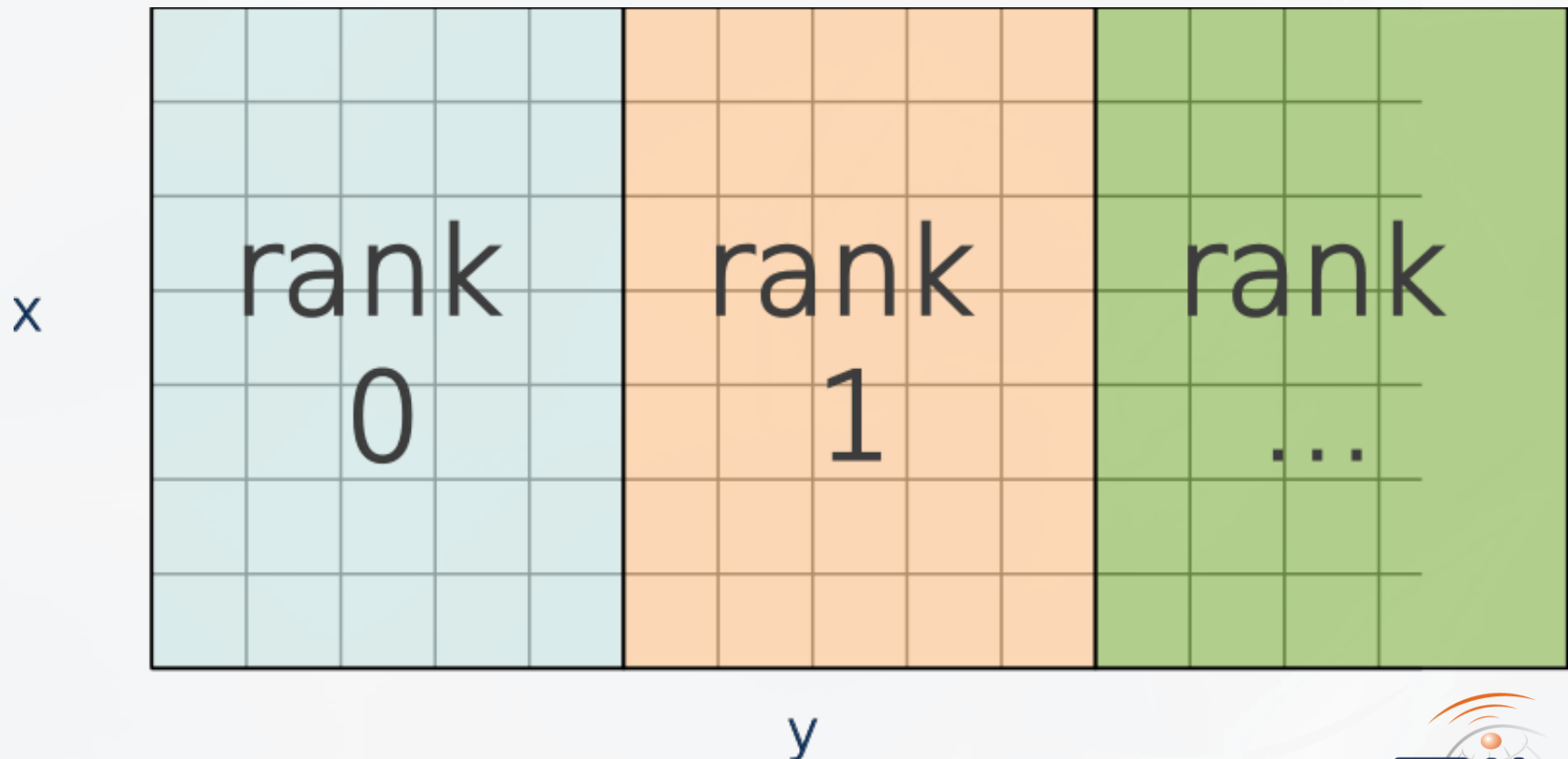
1D Domain Decomposition



2 Implementierung

Parallelisiert mit MPI

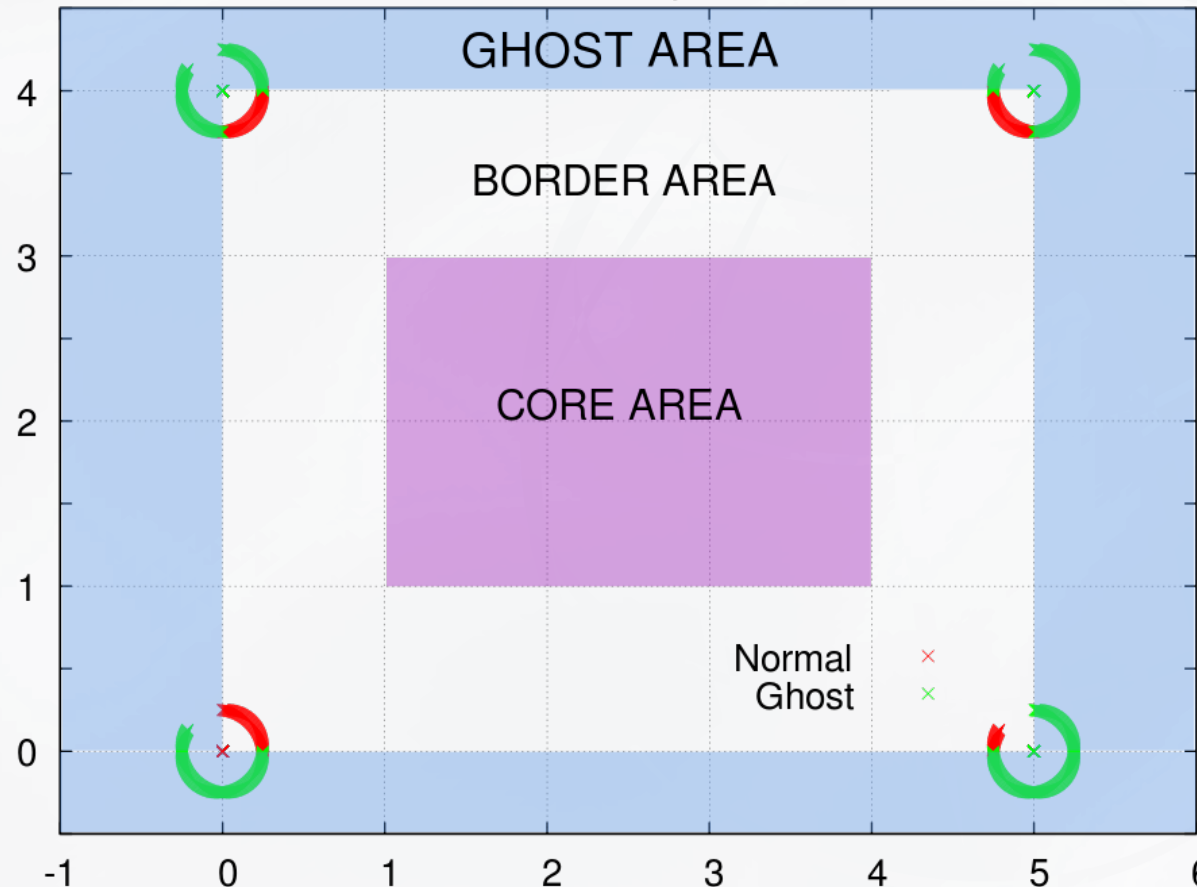
1D Domain Decomposition



2 Implementierung

Parallelisiert mit MPI

Gebiete in einer lokalen Domain (je Rank)



3 Benchmarks

LCTP Cluster:

4 Nodes mit Atom 330 CPUs 1,6 GHz (Core/HT 2/4)

L1: 24 KiB, L2: 512 KiB

2 GiB RAM / Node

HZDR: Hypnos

4 Nodes mit je 2 AMD Dual-Core Opteron 2,6 GHz

L1: 64 KiB, L2: 512 KiB, L3: 6 MiB

16 GiB RAM / Node

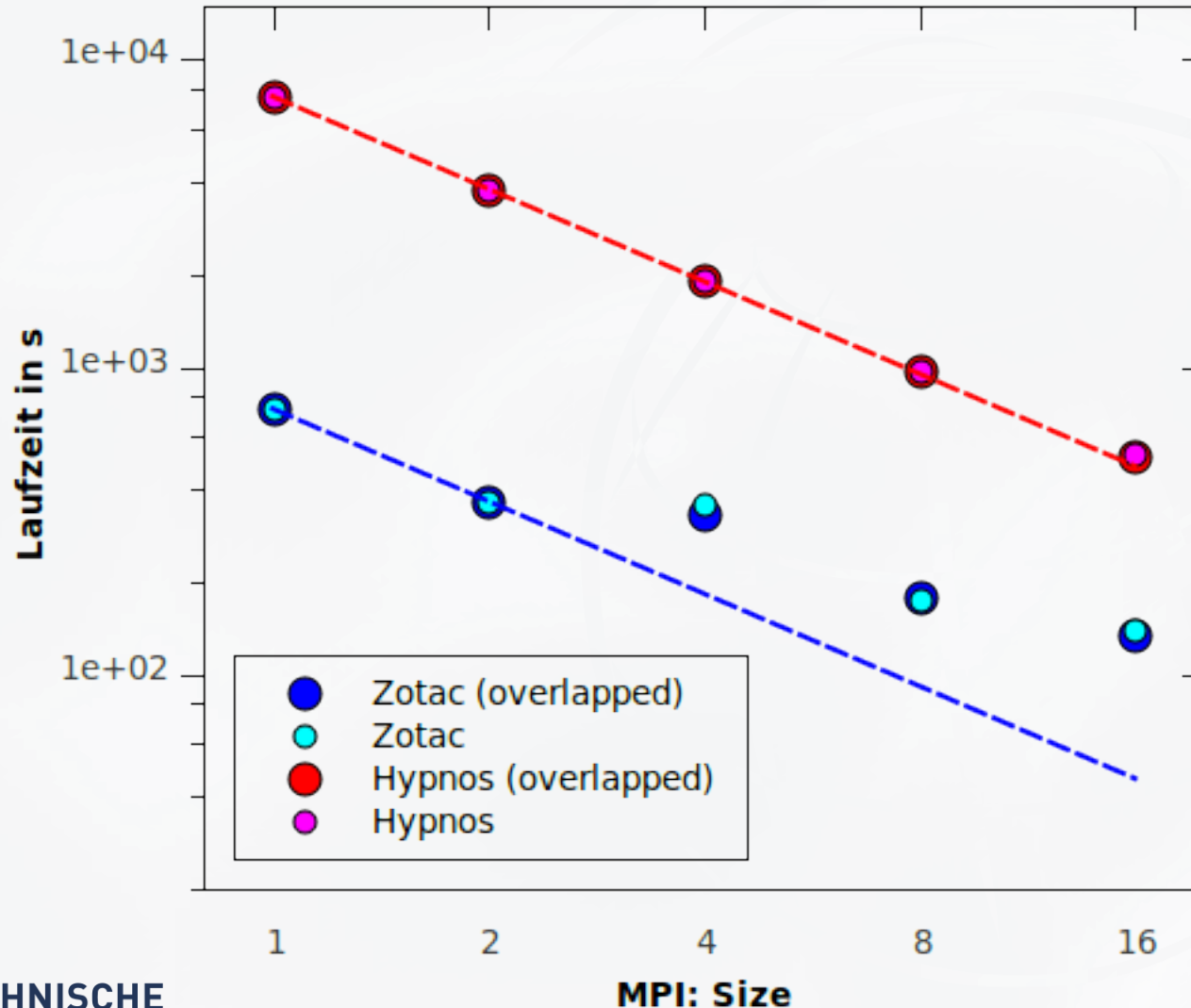
Strong- & Weak-Scaling

Domaininformationen siehe Appendix

3 Benchmarks

Strong-Scaling

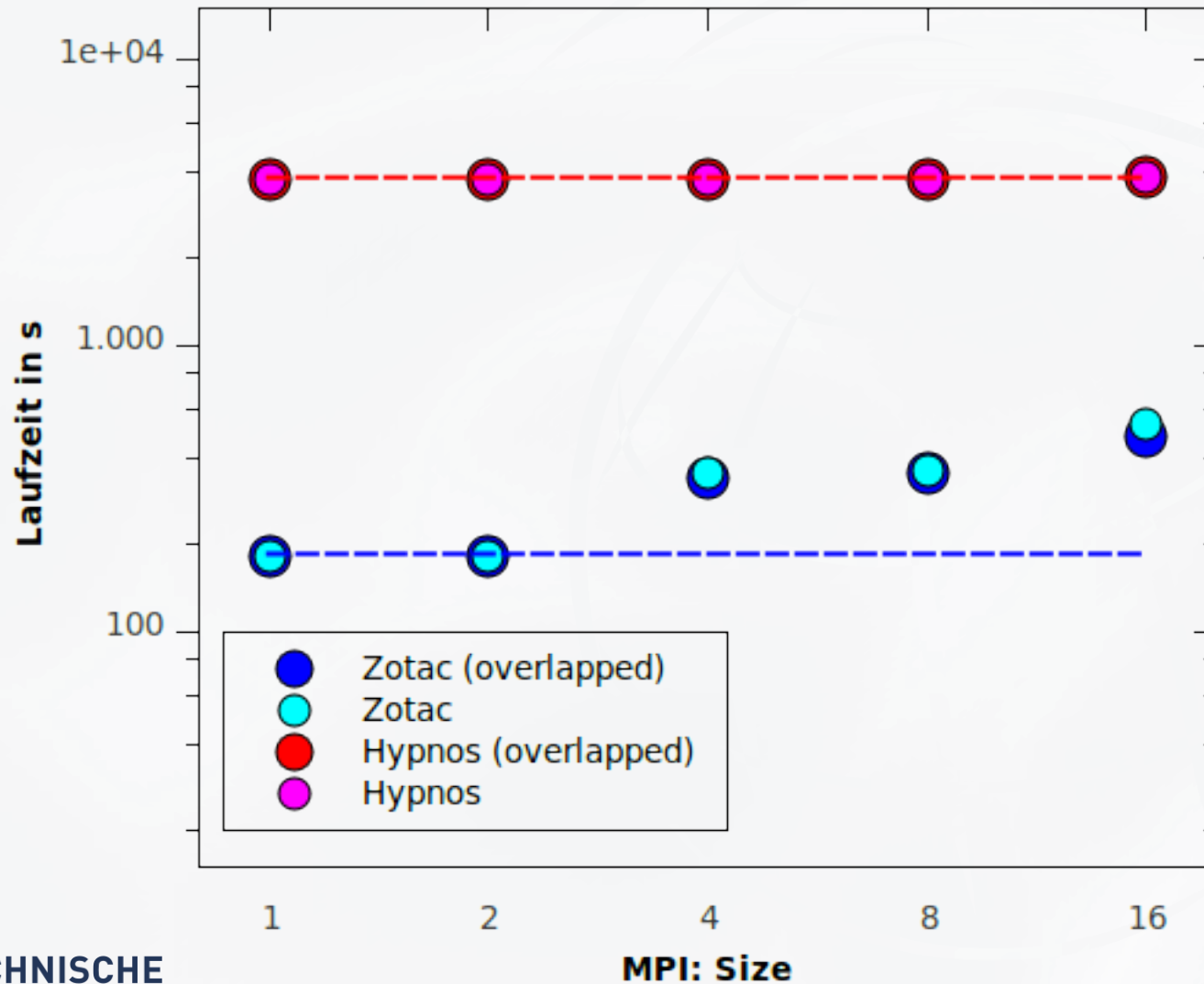
Größen: s. Appendix



3 Benchmarks

Weak-Scaling

Größen: s. Appendix



4 Kollision von zwei Sternhaufen

Simulation: Video

- 1 Million Zeitschritte, repräsentieren 12,7 Millionen Jahre
- Simulationszeit ca. 15min mit Phenom II X4
(3,6 GHz; L1: 64 KiB, L2: 512 KiB, L3: 6 MiB; 8GiB RAM)
- ca. 1000 Teilchen, zufällig verteilt nach Dichtefunktion
- Angelehnt an Sternhaufen Hyaden (Stier),
ca. 15 LJ Durchmesser und je 350 Sterne

Konfigurationen Benchmarks

Strong Scaling Zotac

- 384x384 globale Zellen
- 30 Timesteps, 10 Partikel / Zelle
- ICC 12.1 mit -O2, OpenMPI 1.4.4, Ethernet

Strong Scaling Hypnos

- 5760x192 globale Zellen
- 200 Timesteps, 10 Partikel / Zelle
- ICC 12.0 mit -O2, OpenMPI 1.4.4, IB

Konfigurationen Benchmarks

Weak Scaling Zotac

- 384x96 lokale Zellen
- 30 Timesteps, 10 Partikel / Zelle
- ICC 12.1 mit -O2, OpenMPI 1.4.4, Ethernet

Weak Scaling Hypnos

- 5760x96 lokale Zellen
- 200 Timesteps, 10 Partikel / Zelle
- ICC 12.0 mit -O2, OpenMPI 1.4.4, IB

Rapaport. The Art of Molecular Dynamics Simulation

Cambridge University Press, 2. Auflage, 2004

Perryman. The Hyades: distance, structure, dynamics,
and age

Astronomy & Astrophysics 331: 81–120, 1998

MPI Forum. MPI: A Message-Passing Interface Standard

University of Tennessee, Version 2.2, 2009