

Masterpraktikum Scientific Computing (High Performance Computing) Projektaufgabe: Molekulardynamik

Zur Übung am 18.01.2011

Projektaufgabe „Molekulardynamik“

Das Molekulardynamik-Programm `molSim` berechnet Simulationen aus der Molekulardynamik auf Basis des `LinkedCell`-Algorithmus. Machen Sie sich mit dem gegebenen Programm vertraut und erweitern Sie dieses um eine Parallelisierung in MPI.

weitere Aufgabenstellungen:

- Führen Sie für die Parallelisierung eine Gebietszerlegung durch. Unterteilen Sie dafür das Simulationsgebiet in allen drei Raumrichtungen und weisen jedem MPI-Prozess ein Teilgebiet zu.
- Messen Sie Performance und Skalierungsverhalten für die zwei gegebenen Szenarien (`rayleigh-taylor`, `rayleigh-taylor-3d`) und stellen Sie die Ergebnisse grafisch dar. Messen Sie dabei die Ausführungszeit für die ersten 1000 Iterationen (mit deaktivierter Datei-Ausgabe). Verwenden Sie dafür die `UltraViolet` des LRZ-Linux-Cluster mit bis zu 64 cores.
- Experimentieren Sie bei den Performancemessungen mit unterschiedlichen Strategien für die Gebietszerlegung, indem Sie das Gebiet nicht gleichmäßig in allen drei Raumrichtungen zerteilen, sondern z.B. nur in einer oder nur in zwei Dimensionen.
- Visualisieren Sie die Ergebnisse des Experiments `rayleigh-taylor` mit `paraview`.

Hinweise zur Parallelisierung:

- ändern Sie den Konstruktor der Klasse `LinkedCells` so ab, dass nur noch Zellen des lokalen Gebiets angelegt und verwaltet werden. Ändern sie entsprechend auch die Methode `addParticle`, sodass nur Partikel aus dem eigenen Teilgebiet einsortiert werden.
- verwenden Sie “Halo-Zellen”, um den Randbereich zu den Nachbarprozessen zu speichern.
- ersetzen Sie die Klasse `PeriodicBoundary` durch eine neue Klasse `MPIBoundary`, welche sich um die Kommunikation zu den Nachbarprozessen kümmert und die empfangenen Partikel richtig einsortiert. Verwenden Sie nichtblockierende Kommunikation, um Deadlocks zu vermeiden.
- verwenden sie für die Kommunikation zu den Nachbarn einen eigenen MPI-Datentyp, welcher alle Daten eines Partikels enthält (`MPI_Type_create_struct`).
- verwenden Sie einen dreidimensionalen kartesischen Kommunikator (`MPI_Cart_create`).
- für die Anwendung des Thermostaten (Klasse `Thermostat`, Methode `applyThermostat`) muss die kinetische Energie aller Teilchen aufsummiert werden. Verwenden Sie dafür eine globale Summe (`MPI_All_reduce`).

sonstige Hinweise:

- Die Anwendung benötigt das Modul `xerces` (`module load xerces`).

Viel Spaß beim Bearbeiten!

Die Abgabe ist bis 08.02.2011, 9.00 Uhr möglich.