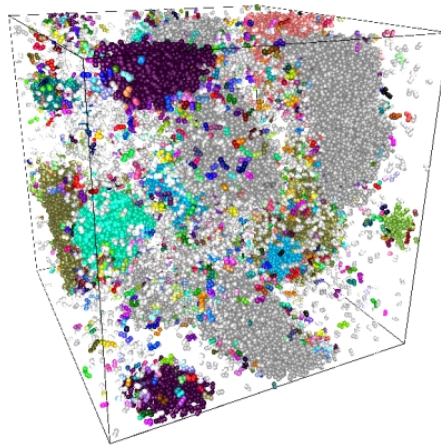


Projektbeschreibung zum IDP “Effiziente Implementierung eines Zeitintegrationsalgorithmus mit Cuda”

Zur Analyse bzw. Vorhersage thermodynamischer Stoffdaten, wie Druck oder potentielle Energie eines Stoffes, gewinnen Molekulardynamik-Simulationen in der Verfahrenstechnik immer größere Bedeutung. Dabei wird beispielsweise ein Gasgemisch mit Millionen von einzelnen Teilchen auf molekularer Ebene simuliert.



Zu Beginn eines Zeitschritts der Simulation sind die Positionen und Geschwindigkeiten der Moleküle gegeben. Aus den Positionen können Kräfte zwischen den Molekülen berechnet werden, gemäß diesen werden die Moleküle dann bewegt. Das Herzstück des Algorithmus ist dabei das numerische Lösen der Bewegungsgleichung

$$F = m \cdot \ddot{x}.$$

Ein solches Simulationsprogramm wurde mit dem Programm `ls1/Mardyn` realisiert. Um den Berechnungsaufwand bei kurzreichweitigen Paar-Wechselwirkungen gering zu halten, wurde der Linked-Cell-Algorithmus implementiert. Dabei wird das Simulationsgebiet in Zellen unterteilt, sodass zum Finden von wechselwirkenden Teilchen nur noch jeweils benachbarte Zellen durchsucht werden müssen.

In vorhergegangenen Studienarbeiten wurden prototypische Implementierungen der Molekulardynamiksimulation auf Graphikkarten erstellt, mit vielversprechenden Ergebnissen bezüglich der Performance, insbesondere bei der intermolekularen Kraftberechnung.

Im Rahmen des IDPs soll, auf den Vorarbeiten aufbauend, nun der komplette Ablauf der Simulation, einschließlich Kraftberechnung und Zeitintegration, auf Graphikkarten-Systemen effizient implementiert werden. Ein Hauptaugenmerk liegt hierbei auf der vollen Integration in das bestehende Programm `ls1/Mardyn`.

Dabei ist das IDP in weitere Arbeiten bezüglich der Nutzung moderner Multicore-Architekturen im HPC sowie der Weiterentwicklung der numerischen Algorithmen eingebettet, sodass hier über die einzelnen Arbeitsgebiete hinaus ein konkreter Bezug zur Mathematik als Anwendungsfach hergestellt wird.

1 Arbeitspakete

Insgesamt gliedert sich das Projekt in folgende Teile:

Einarbeitung in die

- Grundlagen der Molekulardynamik-Simulation
- Programmierung von Graphikkarten mit NVidia Cuda
- zu verwendenden Zeitintegrationsalgorithmen unter Verwendung von Quaternionen

Implementierung der Zeitintegration mittels Quaternionen . In diesem Arbeitsschritt soll der in `ls1/Mardyn` verwendete Zeitintegrationsalgorithmus, der Rotational Leapfrog Algorithmus, auf der GPU implementiert werden. Zur Darstellung der Rotation und Orientierung von nicht-sphärischen Molekülen sollen Quaternionen verwendet werden.

Integration der GPU-parallelen Implementierung in das Framework , so dass die GPU-basierte Parallelisierung mit der bestehenden MPI-basierten zusammenarbeitet. Es soll möglich sein, ein homogenes Cluster, in dem jeder Knoten über eine GPU verfügt, effizient zu nutzen. Um `Mardyn/ls1` in vollem Umfang nutzen zu können, ist es nötig, das letzte bislang nicht portierte Potentialmodell, das Tersoff-Potential, auf der GPU zu implementieren.

Portierung des Linked-Cell-Algorithmus auf GPU . Bislang müssen sämtliche Daten in jedem Zeitschritt von der GPU auf die CPU zurückkopiert werden, um die Zuordnung von Molekülen zur Zellstruktur des Linked-Cell-Algorithmus zu aktualisieren. Diese Sortierung soll auf der GPU implementiert werden, um das Volumen der zu kopierenden Daten bedeutend zu verringern.

2 Dokumentation

Zur Dokumentation ist zum einen dokumentierter Sourcecode abzugeben. Weiter ist eine kurze Ausarbeitung, die die wichtigsten theoretischen Erkenntnisse enthält, gefordert. Darüber hinaus muss die Ausarbeitung die Ergebnisse geeigneter Leistungsmessungen beinhalten, welche die theoretischen Erkenntnisse fundieren.

3 Vorlesung

Als begleitende Vorlesungen zum IDP werden die Vorlesungen “Introduction to Scientific Computing I” (3 ETCS) und “Introduction to Scientific Computing II” (4 ETCS) ausgewählt. Um eine stärkere Gewichtung der praktischen Arbeit zu ermöglichen, schlagen wir vor, aus “Scientific Computing I” nur einen Teil des Stoffes (Gewöhnliche Differentialgleichungen) für prüfungsrelevant zu erklären und diesen mit lediglich 1 ETCS-Punkt zu gewichten. Damit zählt der gesamte Vorlesungsteil mit genau 5 ETCS.