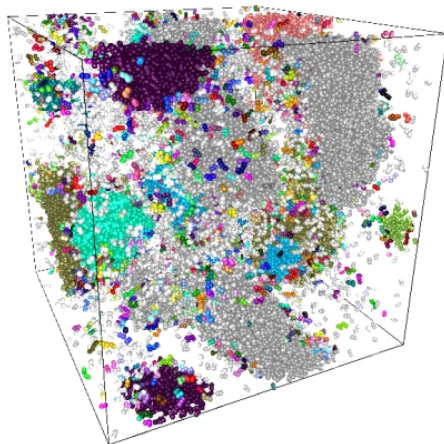


Projektbeschreibung zum IDP “Effiziente Implementierung von mehrzentrigen molekulardynamischen Potentialmodellen mit Cuda”

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 vorangehenden Studienarbeiten wurden prototypische Implementierungen der Molekulardynamiksimulation auf Graphikkarten erstellt, mit vielversprechenden Ergebnissen bezüglich der Performance.

Im Rahmen des IDPs soll, auf den Vorarbeiten aufbauend, nun eine effiziente Implementierung mit größerem Funktionsumfang auf Graphikkarten-Systemen stattfinden. Ein Hauptaugenmerk liegt hierbei auf der vollen Integration in das bestehende Programm `ls1/Mardyn`. Auch sollen algorithmische Alternativen aus der Computergraphik evaluiert werden, wobei unbedingt die numerischen Aspekte der zugrundeliegenden Algorithmik beachtet werden müssen.

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 von Molekulardynamik-Simulationen
- Programmierung von Graphikkarten mit Nvidia Cuda
- bestehende Implementierung in OpenCL

Portierung des bestehenden prototypischen OpenCL-Codes auf NVidia Cuda

Performance-Optimierung der Cuda-Implementierung

Portierung weiterer Modelle auf GPUs . In `ls1` stehen verschiedene Potentialmodelle zur Verfügung, um die Interaktion zwischen Molekülen zu beschreiben. Die bestehende Implementierung für Graphikkarten unterstützt allerdings lediglich das 1-Center-Lennard-Jones Potential. In diesem Arbeitsschritt soll die GPU-Implementierung um die Unterstützung für weitere Potentialmodelle erweitert werden.

Hier stellt insbesondere die Simulation von Stoffgemischen mit unterschiedlichen Potentialmodellen eine Herausforderung für die Implementierung auf GPUs dar, da derartige Szenarien eine größere Anzahl von Fallunterscheidungen bedingen. Diese erschweren es, eine hohe Rechenleistung auf Graphikkarten zu erreichen.

In der Computergraphik existieren effiziente Algorithmen zur Simulation von mehrzentrigen Partikeln. Diese Algorithmen sollen auf ihre Eignung für die molekulare Simulation hin untersucht werden.

Für diese Beurteilung werden zum einen ein tiefgehendes Verständnis der simulierten physikalischen Phänomene, zum anderen fundierte Kenntnisse über die numerische Behandlung von Differentialgleichungen benötigt.

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 Vorlesung zum IDP wird die Vorlesung "Numerik" (9 ETCS) ausgewählt. Auch vor dem Hintergrund, dass Herr Kirsch diese Vorlesung auch für sein Mathematik-Studium einbringt, schlagen wir vor, die Vorlesung nur mit 5 ETCS zu werten, um so eine stärkere Gewichtung der praktischen Arbeit zu ermöglichen.