

Inhaltsverzeichnis

1	Motivation dieser Arbeit	5
1.1	Molekulardynamik und das Programmpaket MP2C	5
1.2	Allgemeine Probleme der Parallelisierung	6
1.3	Lösungsansätze	8
2	Grundlagen	11
2.1	Wechselwirkungen	11
2.2	Molekulardynamik	13
2.3	Parallelisierte Molekulardynamik	16
2.4	Alternative Loadbalancing-Strategien	17
2.4.1	“Hashed-Oct-Tree“-Methode	18
2.4.2	Strategie der Wechselwirkungsverteilung	20
3	Verfahren zur Gebietsanpassung	21
3.1	Definition der Arbeit	21
3.2	Bestimmung der neuen Grenzen	23
3.2.1	Beschreibung der Vorgehensweise	24
3.2.2	Kommunikation der lokalen Arbeiten	25
3.2.3	Idee zur Verschiebung der Grenzen	27

3.2.4	Globaler Arbeitsausgleich durch anteilige Übertragung von lokalen Arbeitsdifferenzen	28
3.2.5	Gitterpunktverschiebung anhand der Übertragung von anteiligen Arbeitsdifferenzen	30
3.2.6	Stabilität des Verfahrens	33
3.2.7	Überlegungen zur Konvergenz des Verfahrens	38
3.3	Kommunikationsschemata	42
3.3.1	Nachbarschaftsbestimmung	43
3.3.2	Kommunikation beim Teilchentransfer	44
3.3.3	Kommunikation bei der Kraftberechnung	46
4	Implementierung des Loadbalancingverfahrens	49
4.1	Beschreibung von MP2C	49
4.1.1	Wichtige Module	50
4.1.2	Geänderte Module	51
5	Untersuchung der Verfahrensparameter	55
5.1	Untersuchungen zur Anpassungsqualität des Verfahrens unabhängig von MP2C	55
5.2	Performanceuntersuchungen mit MP2C	56
6	Fazit und Ausblick	75
6.1	Bewertung des Verfahrens	75
6.2	Mögliche Ergänzungen und Erweiterungen	76
	Abbildungsverzeichnis	I
	Tabellenverzeichnis	III

INHALTSVERZEICHNIS

Literaturverzeichnis

V