

Inhaltsverzeichnis

1	Ausgangspunkt und Motivation	3
1.1	Grundlagen und Ziele des Programmpaketes MP2C	3
2	Allgemeine Grundlagen	5
2.1	Molekulardynamik	5
2.2	Vorteile und Probleme der Parallelisierung	7
2.3	Lösungsmöglichkeiten	11
2.4	Parallelisierte Molekulardynamik	12
2.5	Weitere Loadbalancing-Ansätze	15
2.5.1	Verteilung der Wechselwirkungen	15
2.5.2	Mehrstufiges eindimensionales Verfahren	16
3	Verfahren zur Arbeitsverteilung und Domain Decomposition	19
3.1	Verfahren für zwei Dimensionen	19
3.1.1	Rücktransformation der „Reference Shape Transformation“	22
3.1.2	Vektorbasierter Test auf Gebietszugehörigkeit	28
3.2	Verallgemeinertes Verfahren	31
3.2.1	Transfer an benachbarte Gebiete	31

INHALTSVERZEICHNIS

3.2.2	Die orthogonale Projektion und periodische Randbedingungen	34
3.2.3	Verfahren für drei Dimensionen	36
3.3	Stabilität des Verfahrens	39
3.4	Das Hierarchische Modell	49
3.4.1	Der zweidimensionale Fall	50
3.4.2	Der dreidimensionale Fall	51
3.4.3	Hierarchisches Modell mit Reibung	52
3.5	Mathematisches Modell	56
3.5.1	Arbeitsausgleich durch Übertragung von lokalen Arbeitsdifferenzen	56
3.5.2	Bedingungen an die Verteilung der Arbeit und der Dichte	66
3.5.3	Einhalten einer gegebenen Fehlerschranke	72
4	Resultate	75
4.1	Zweidimensionale Lastbalance	76
4.2	Vergleich: Vektorbasierter Test und „Reference Shape Transformation“	80
4.3	Dreidimensionale Lastbalance	82
4.4	Das hierarchische Modell	84
5	Zusammenfassung und Ausblick	89
5.1	Bewertung	89
5.2	Ergänzungen und Erweiterungen	90
	Literaturverzeichnis	III