



Untersuchungen zur Hardwarerealisierung des Bindungsfluktuationsmodells auf FPGAs

Verteidigung der Masterarbeit von Jan Frenzel

Betreuer: Prof. Dr. Rainer G. Spallek
Dr. Thomas B. Preußner
Dipl.-Inf. Oliver Knodel

Dresden,
30. September 2014

Gliederung

1. Aufgabenstellung
2. Vorstellung Bindungsfluktuationsmodell
3. Umsetzung
 1. Pipeline
 2. Zelluläre Struktur
 3. Verbindungen
 4. Generieren von Zufallszahlen
 5. Kommunikationsschnittstelle
4. Ressourcenbedarf und max. Größe
5. Bewertung und Zusammenfassung
6. Ausblick

AUFGABENSTELLUNG

Aufgaben

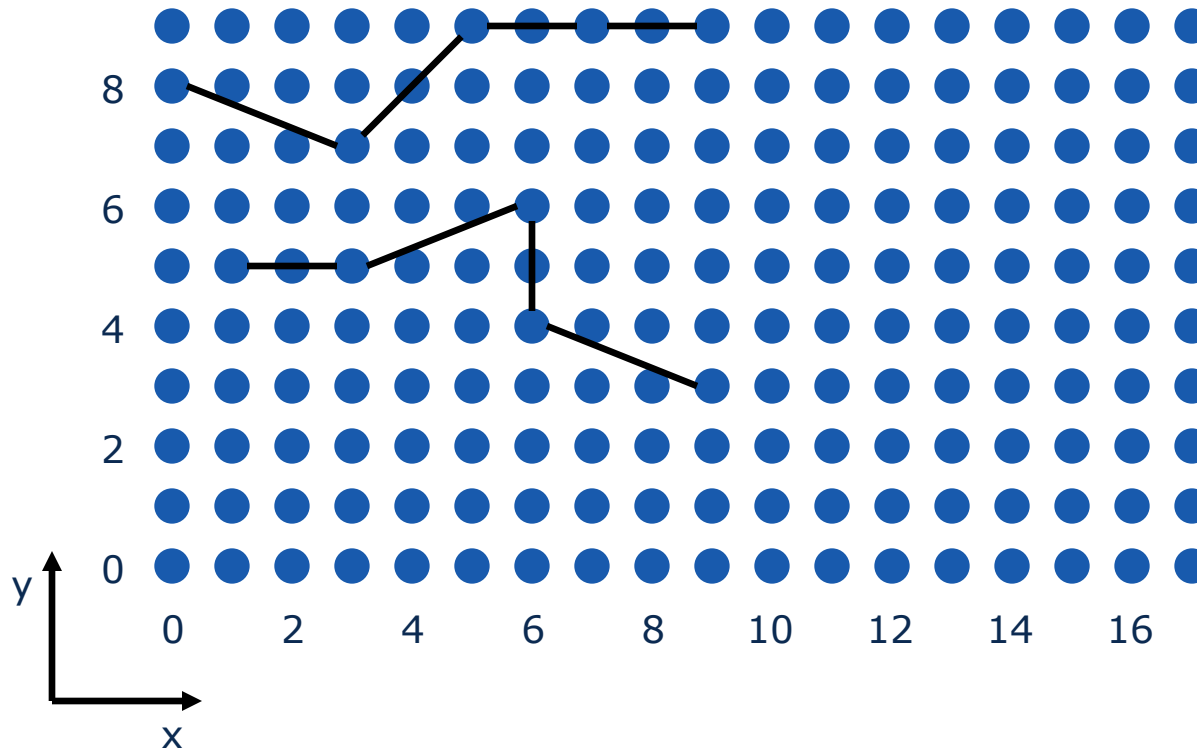
- Simulation des Bindungsfluktuationsmodells auf Basis einer zellulären Struktur
- Integration einer Kommunikationsschnittstelle
- Bestimmung des Ressourcenbedarfs und der Geschwindigkeit in Abhängigkeit der Gittergröße
- Bewertung gegenüber CPU und GPU

BINDUNGSFLUKTUATIONS- MODELL

Bindungsfluktuationsmodell

- Modell für Polymerschmelzen
- Bewegliche Monomere in Polymeren
- Ganzzahlige Gitterpositionen für Monomere
- Bewegung der Monomere beschränkt:
 - Nur Bewegung auf Nachbarpositionen,
 - Nachbarposition frei und
 - Entfernung zu verbundenen Monomeren nicht zu groß
- Kettenförmige Polymere

Bindungsfluktuationsmodell



2D-Darstellung von
zwei kettenförmigen
Polymeren

Bindungsfluktuationsmodell

Pseudo-Code [1][2]:

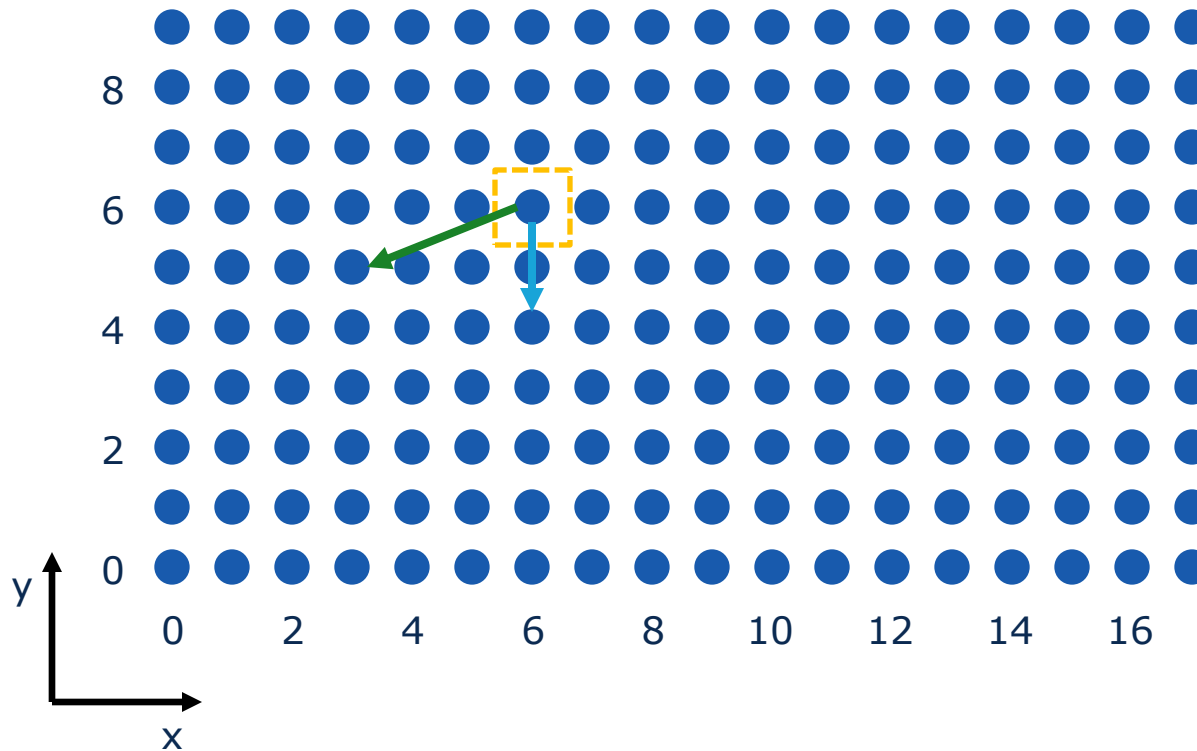
- Wiederhole:

- Wähle zufällig ein Monomer
- Wähle zufällig eine Richtung
- Wenn das gewählte Monomer in diese Richtung bewegt werden kann
 - Bewege Monomer in diese Richtung
 - Informiere verbundene Monomere über Bewegung

Bindungsfluktuationsmodell

- Bewegungen definiert über Bedingungen
- Unterschiedliche Modelle möglich
- Bewegung möglich, wenn:
 - Neue Bindungsvektoren in Menge aller möglichen Bindungsvektoren enthalten und
 - Neue Position frei

Bindungsvektoren



Referenz-Monomer

Bindungsvektor zum
Vorgänger:
 $(0, -2)$

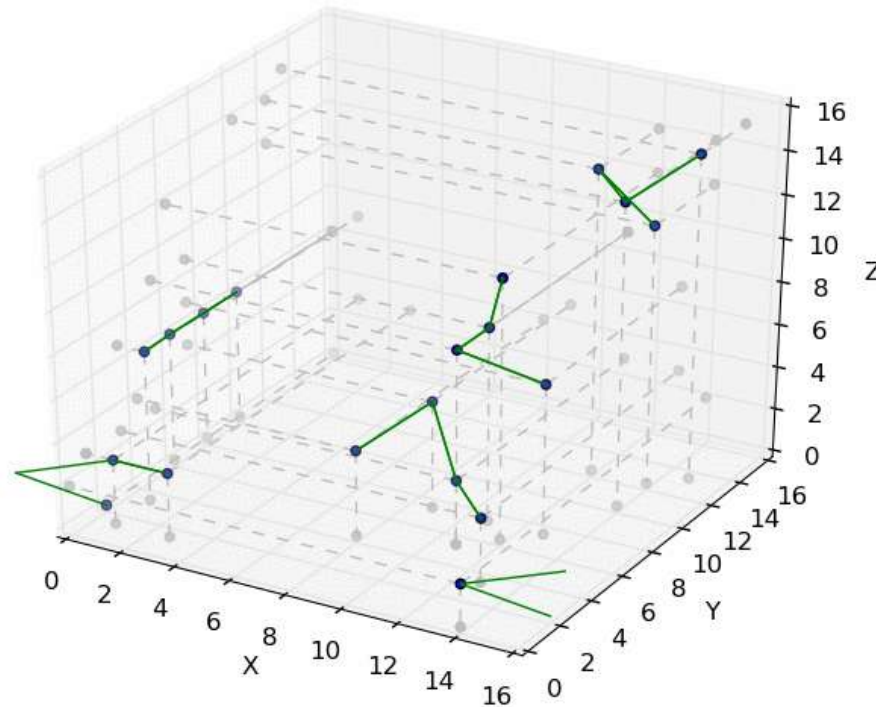
Bindungsvektor zum
Nachfolger:
 $(-3, -1)$

Parallelisiertes Bindungsfluktuationsmodell

Pseudo-Code [3]:

- Zerlege Menge der Monomere in Teilmengen
- Wiederhole:
 - Für jede Teilmenge (sequentiell):
 - Wähle zufällig eine Richtung für jede Position in der Teilmenge
 - Wenn an einer Position ein Monomer ist
 - Wenn das gewählte Monomer in die Richtung bewegt werden kann
 - Bewege Monomer in diese Richtung
 - Informiere verbundene Monomere über Bewegung

Parallelisiertes Bindungsfluktuationsmodell

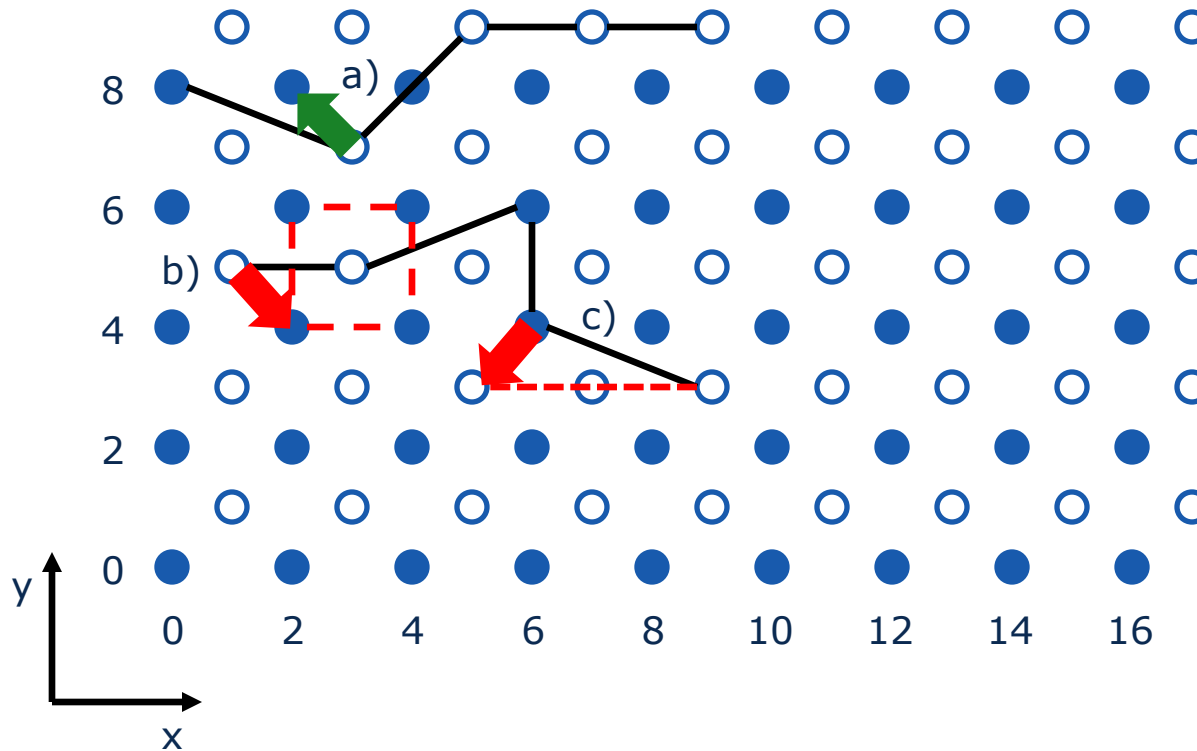


Parallelisiertes Bindungsfluktuationsmodell

- Unterschied: gerade und ungerade Positionen
- Bewegung möglich, wenn:
 - Neue Bindungsvektoren in Menge aller möglichen Bindungsvektoren
 $B = P(2,0,0) \cup P(2,2,0) \cup P(2,2,2) \cup P(3,1,1)$
enthalten und
 - Nachbar-Positionen der neuen Position frei

Menge $P(x,y,z)$ ist Menge aller Permutationen und Vorzeichenkombinationen von x, y, z

Bedingungen für eine Bewegung



a) Bewegung möglich

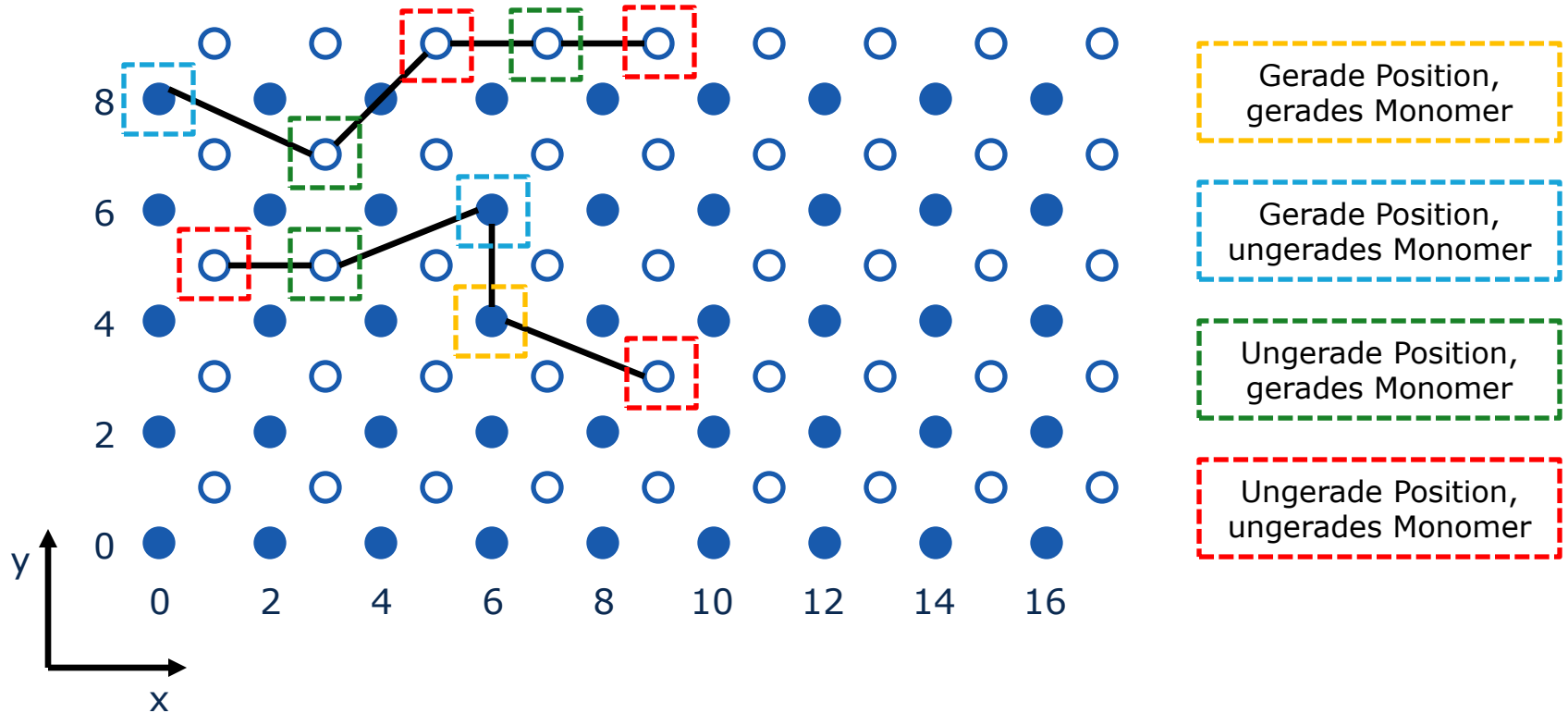
b) Nachbar-Position nicht frei

c) Entfernung zu groß

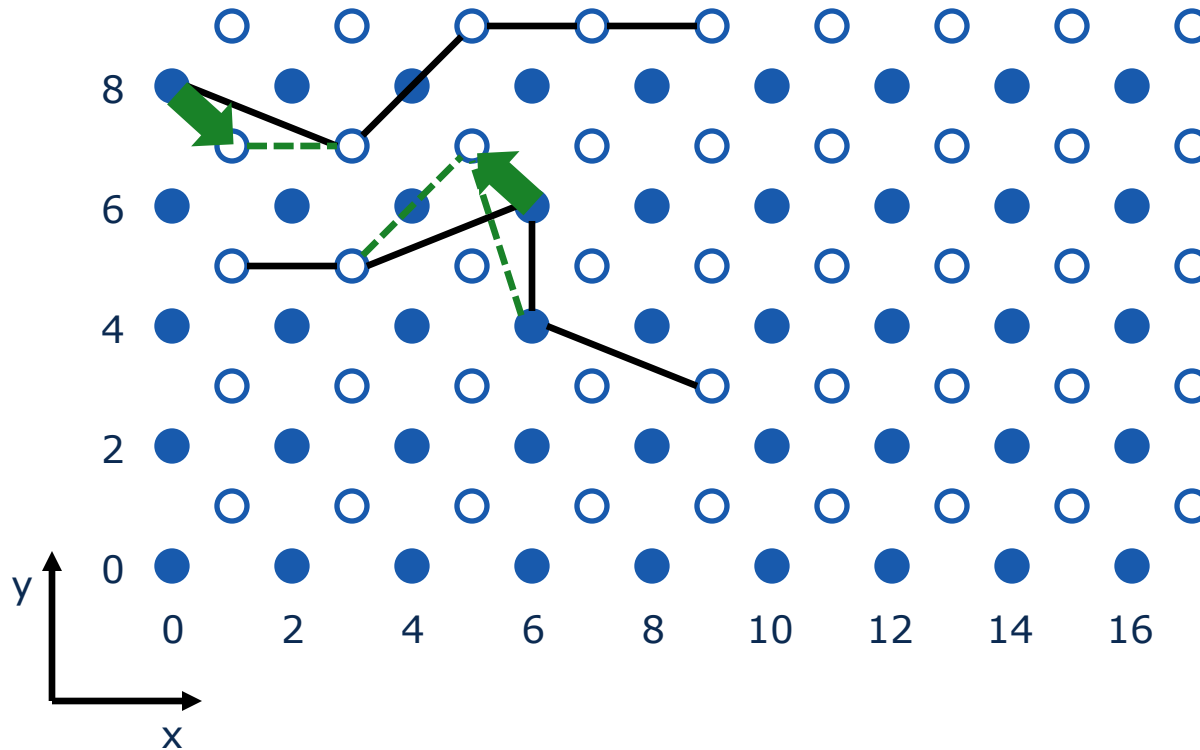
Parallelisiertes Bindungsfluktuationsmodell

- Zerlege Menge der Monomere in 4 Teilmengen:
 - Ungerade Gitter-Positionen und ungerade Monomere
 - Ungerade Gitter-Positionen und gerade Monomere
 - Gerade Gitter-Positionen und ungerade Monomere
 - Gerade Gitter-Positionen und gerade Monomere
- Bei der Berechnung einer Teilmenge treten keine Synchronisierungsprobleme beim Update der Bindungsvektoren auf

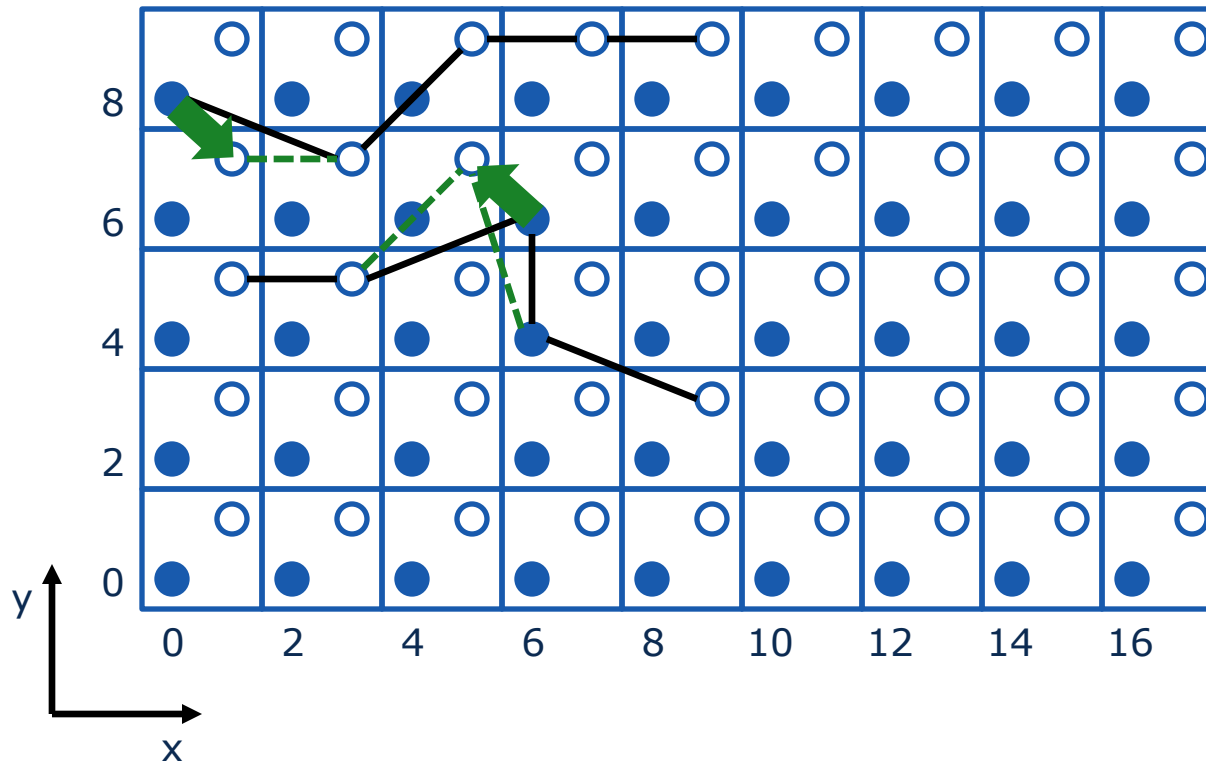
Parallelisiertes Bindungsfluktuationsmodell



Parallelisiertes Bindungsfluktuationsmodell

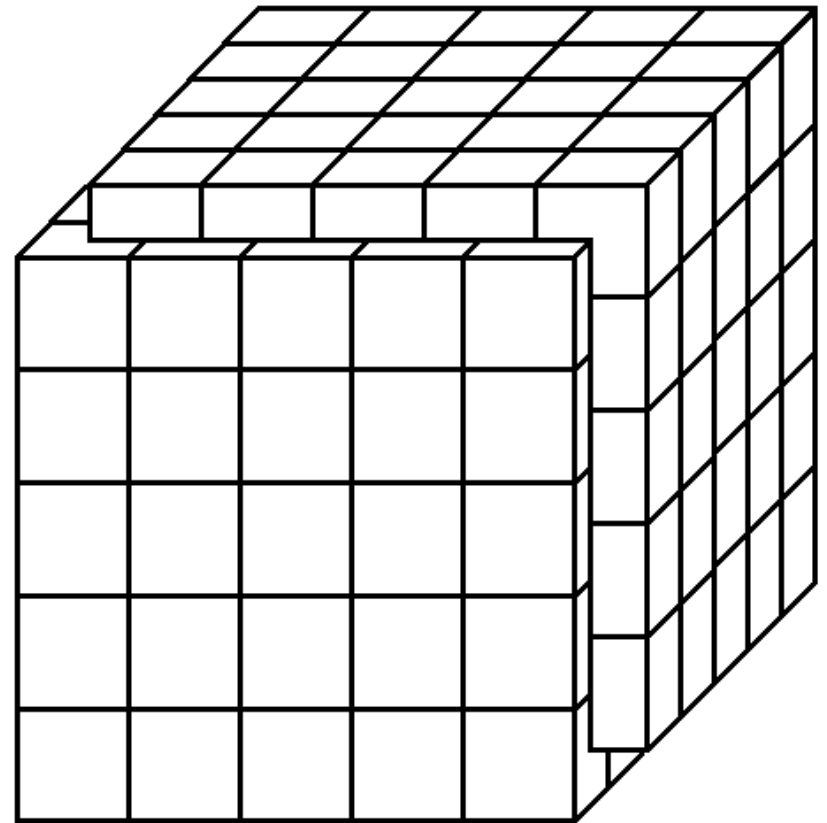
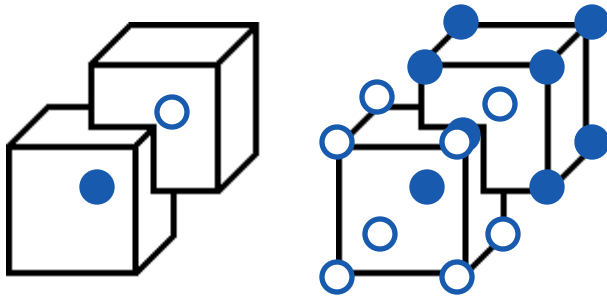


Parallelisiertes Bindungsfluktuationsmodell



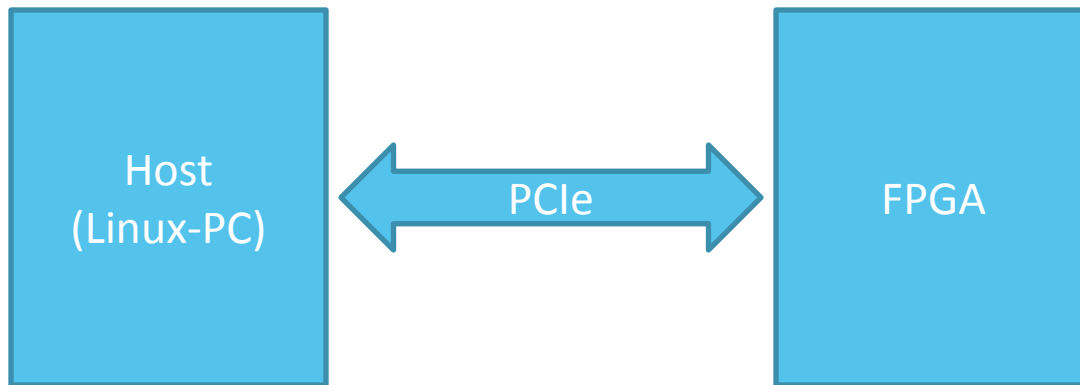
Bindungsfluktuationsmodell

2D → 3D

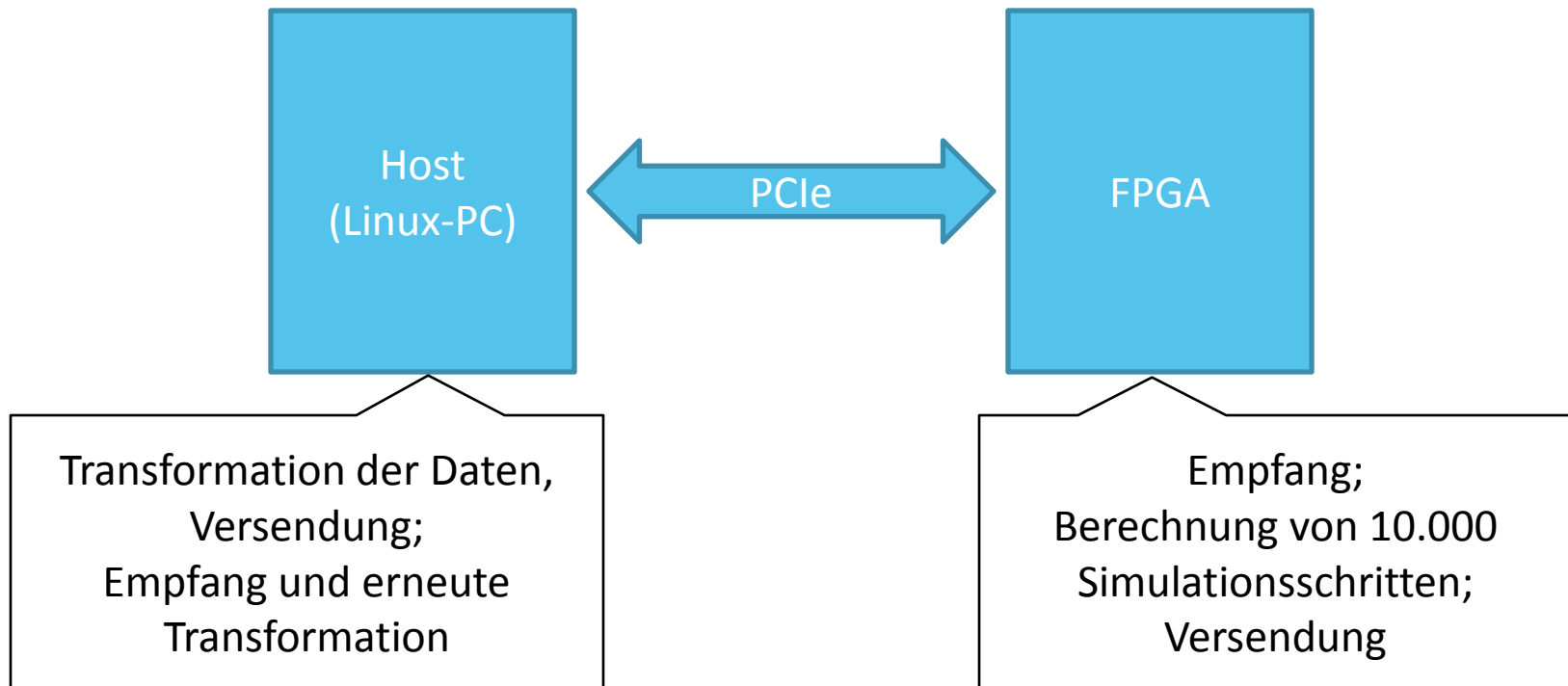


UMSETZUNG

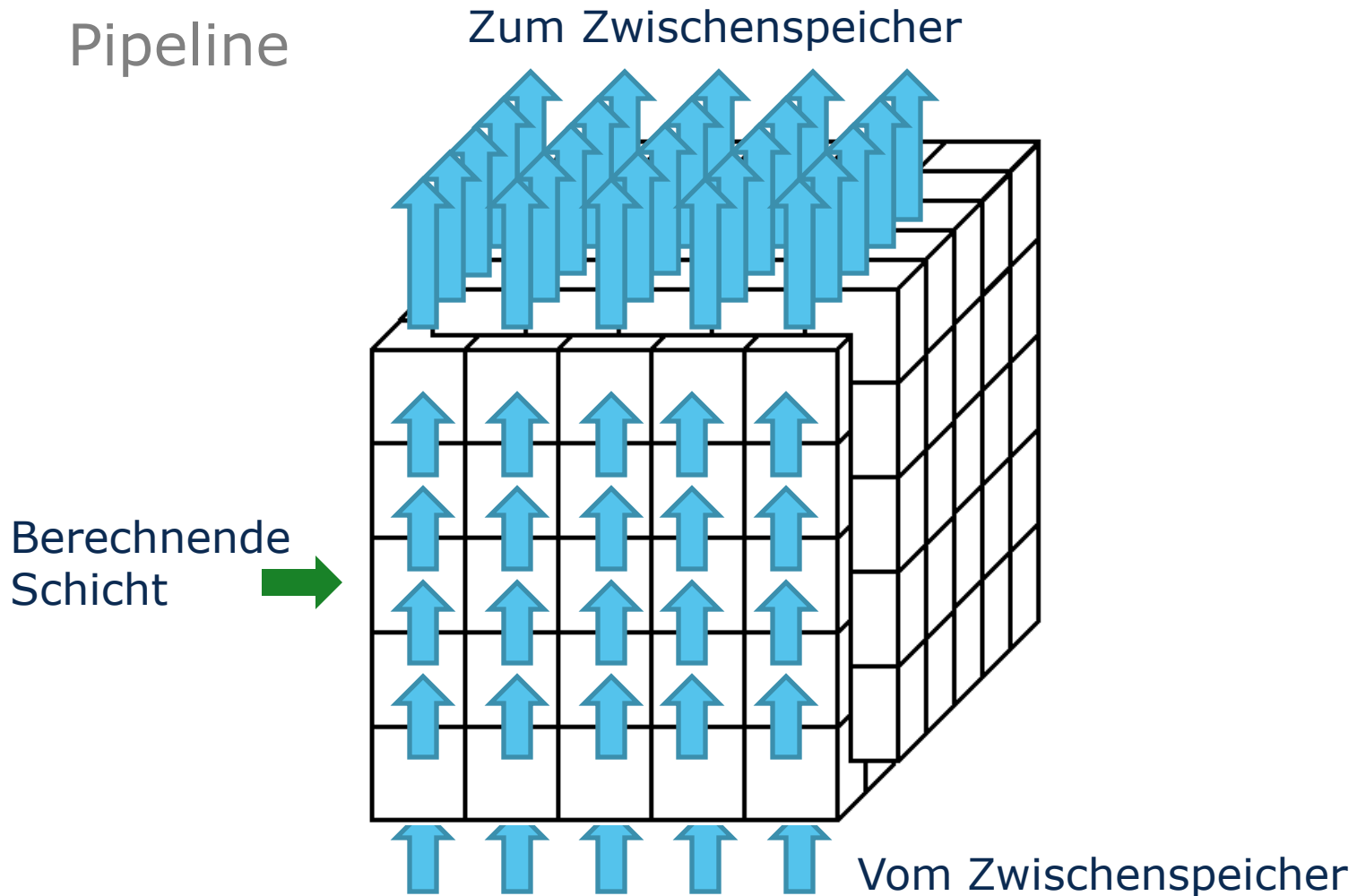
Systemüberblick



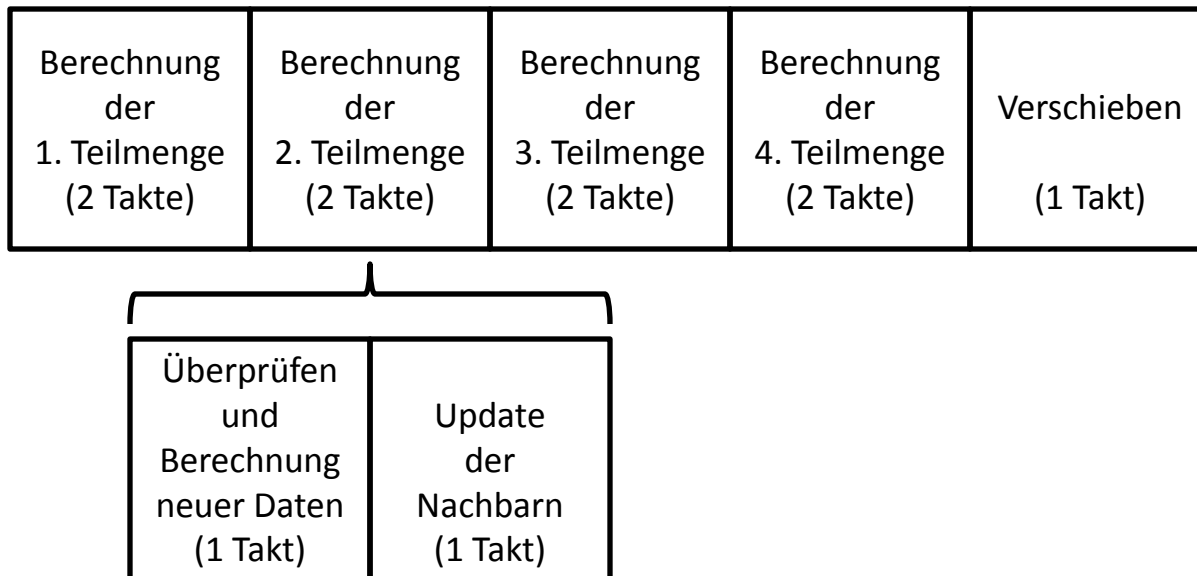
Systemüberblick



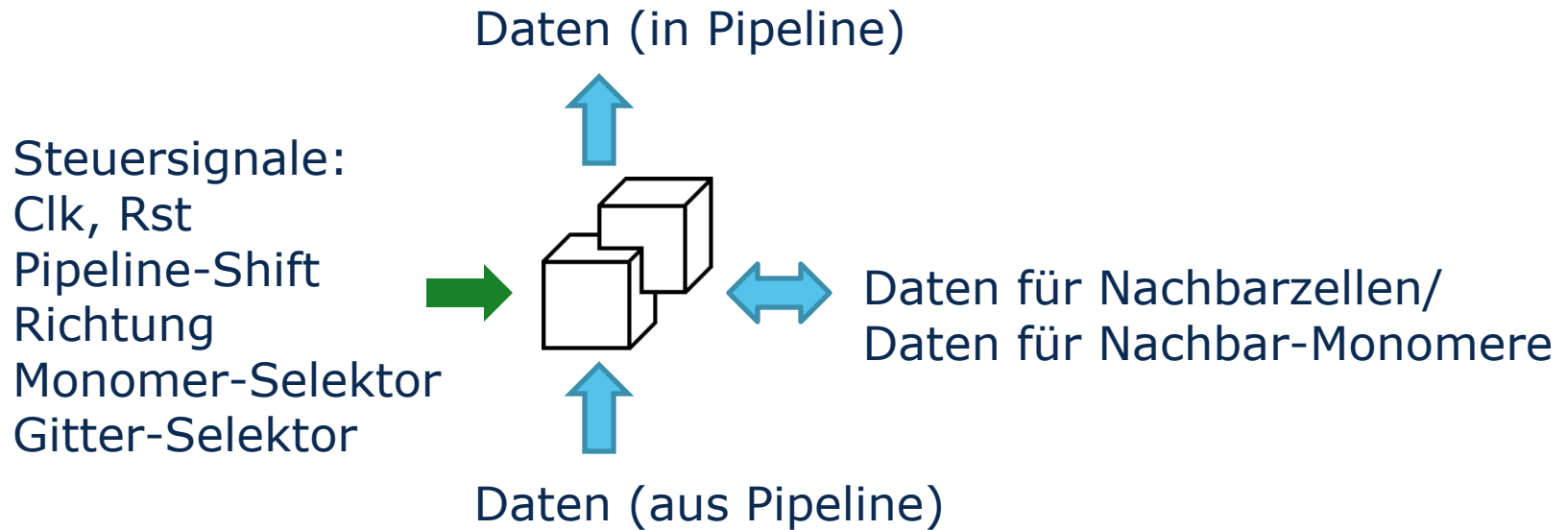
Pipeline



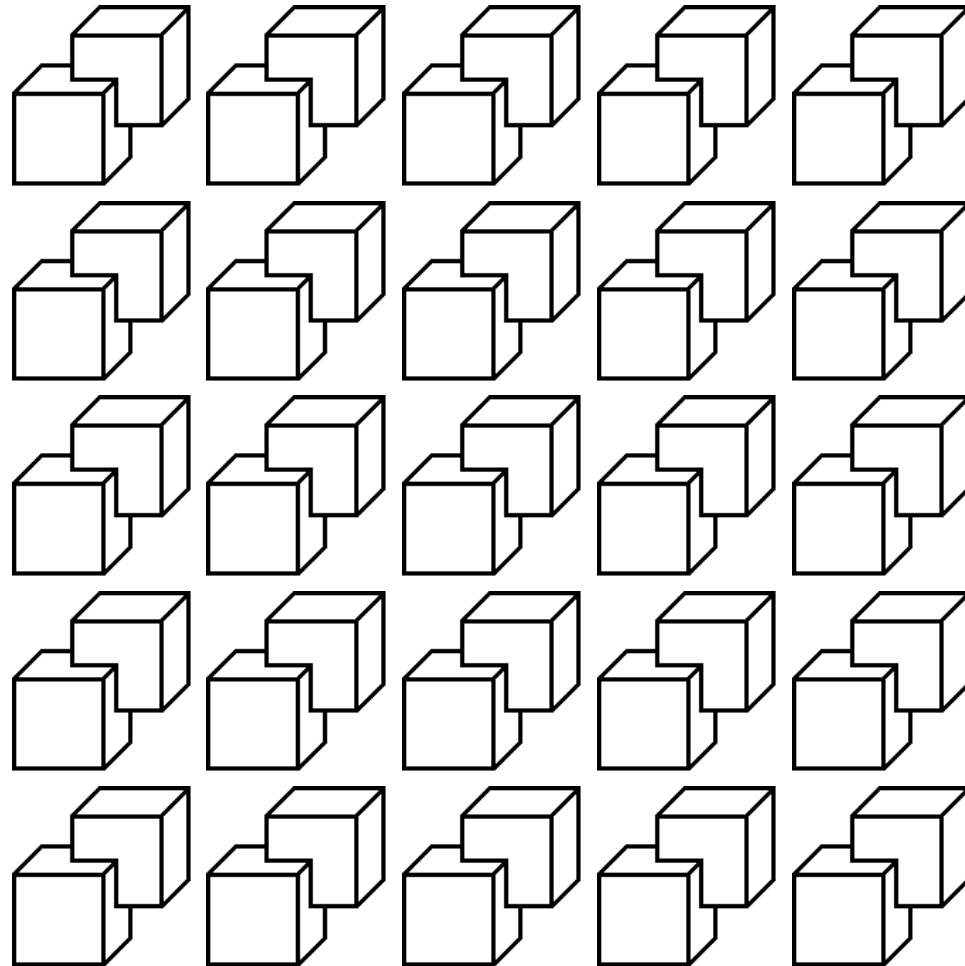
Berechnungsablauf



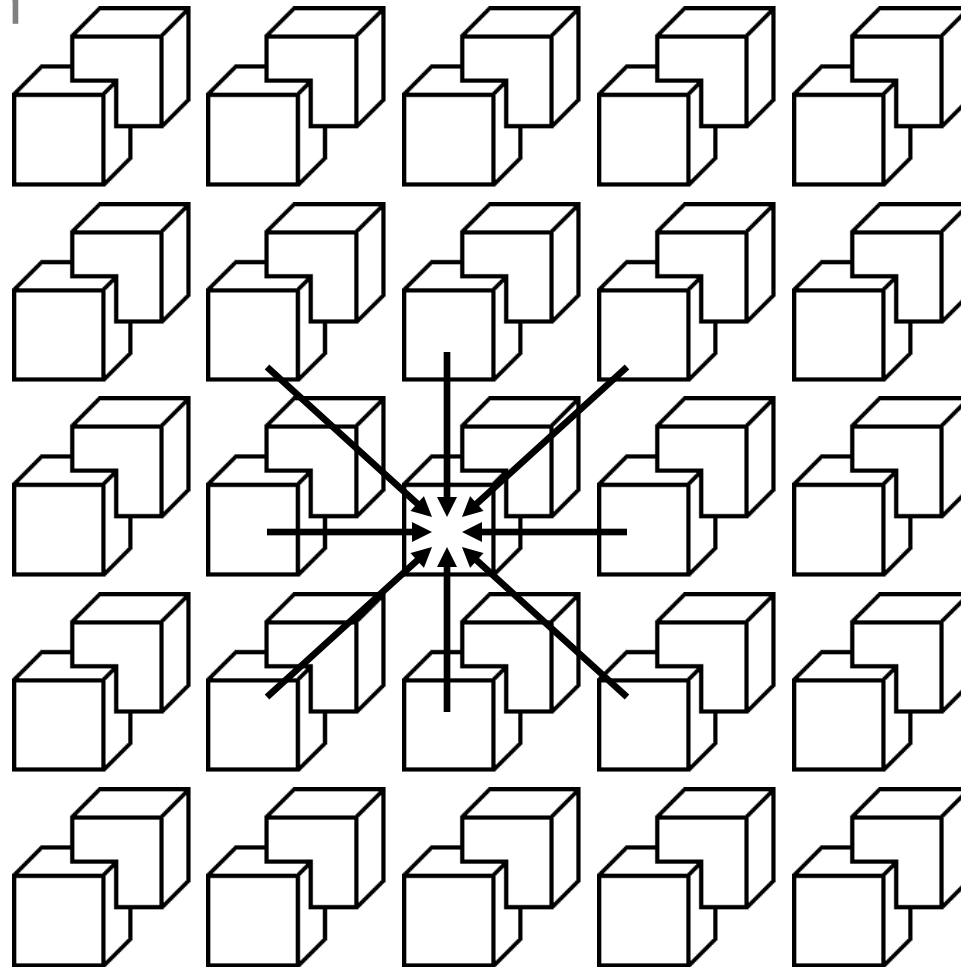
Zelluläre Struktur



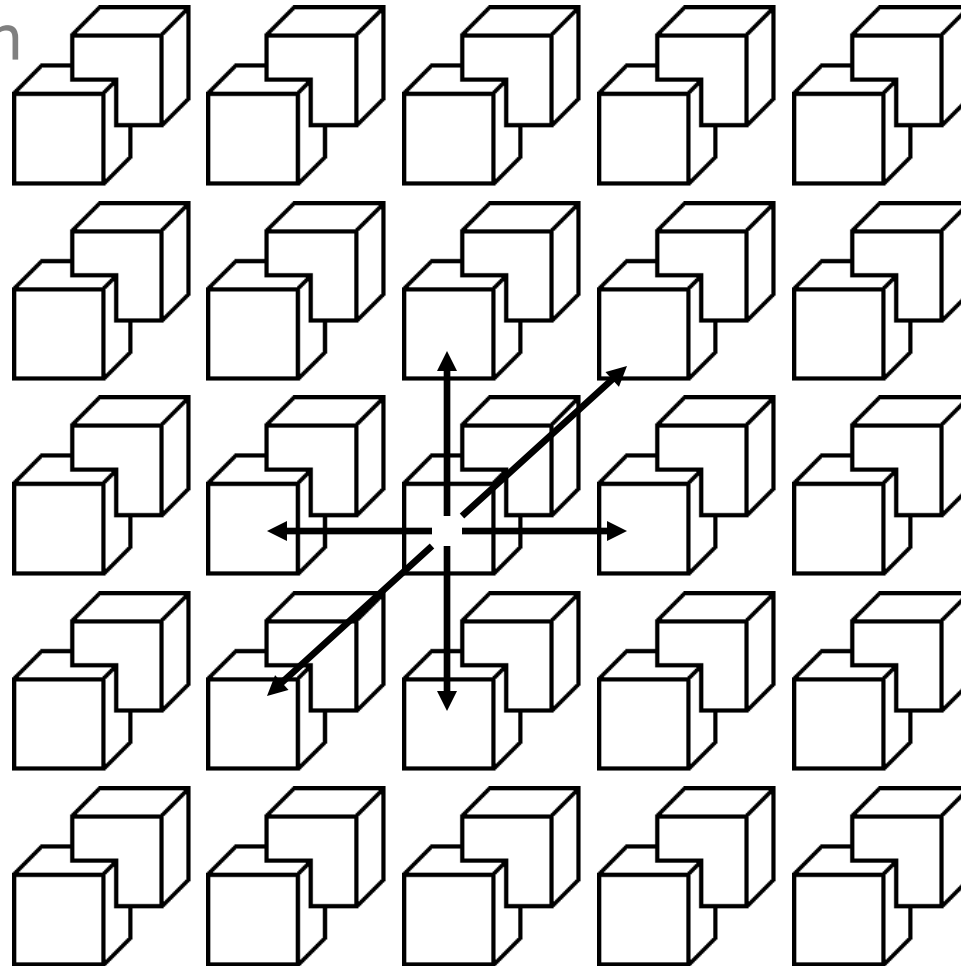
Verbindungen



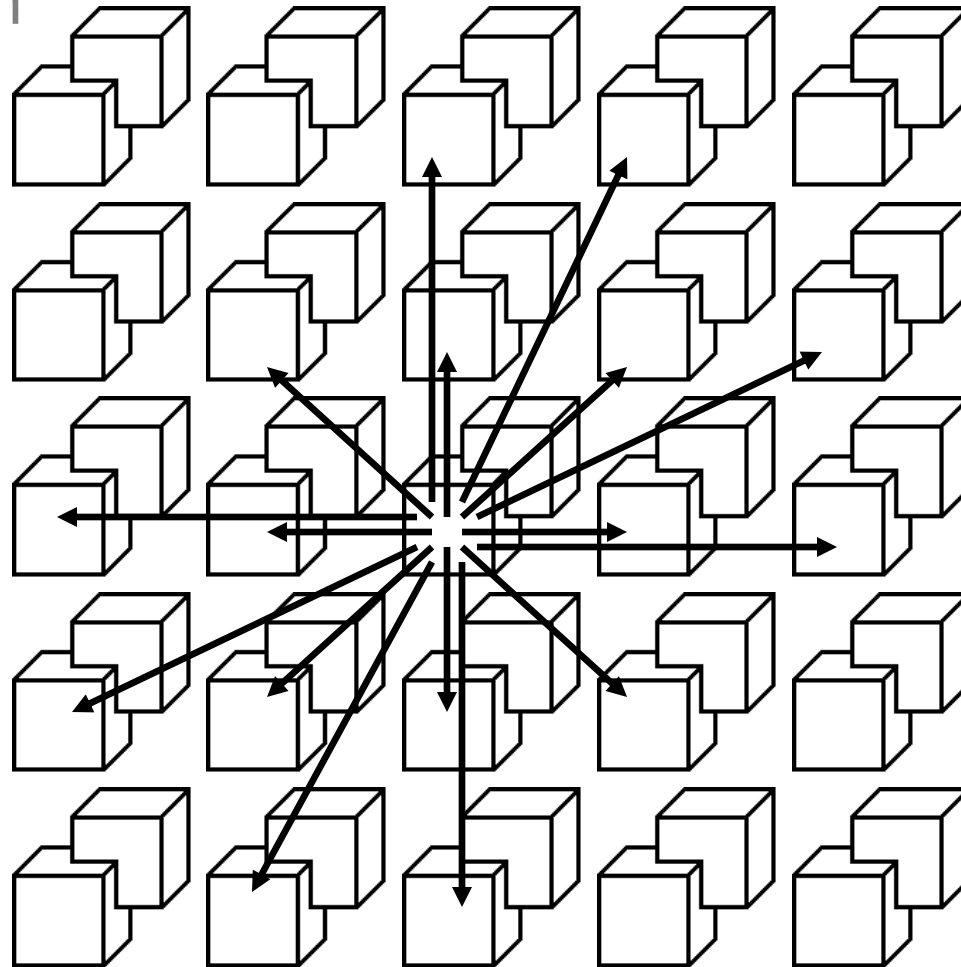
Verbindungen zum Überprüfen der Belegung



Verbindungen zum Bewegen

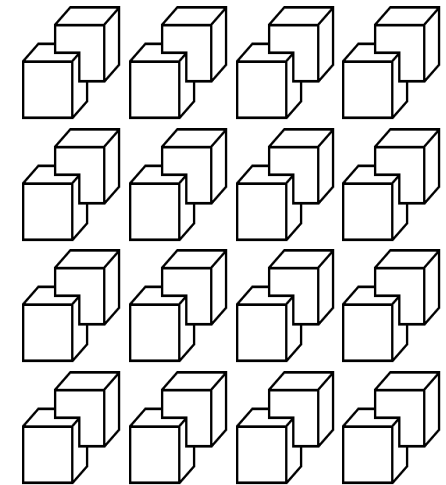


Verbindungen zum Update der Bindungsvektoren



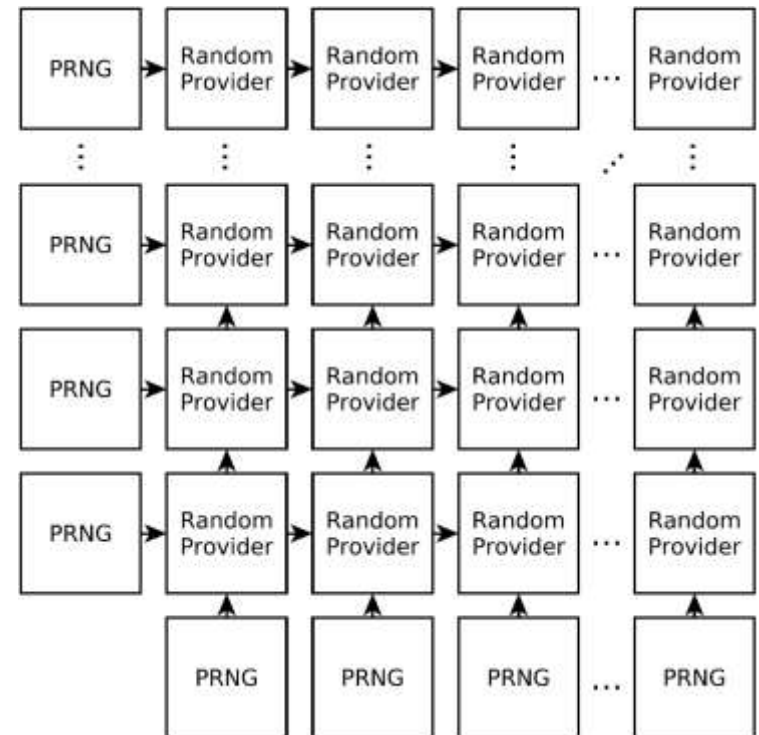
Generieren von Zufallszahlen

- (Pseudo-) Zufallszahlen erzeugen für jede Zelle der Berechnungsebene:
 - Geringe Ressourcen
 - Keine Synchronität zwischen Zellen



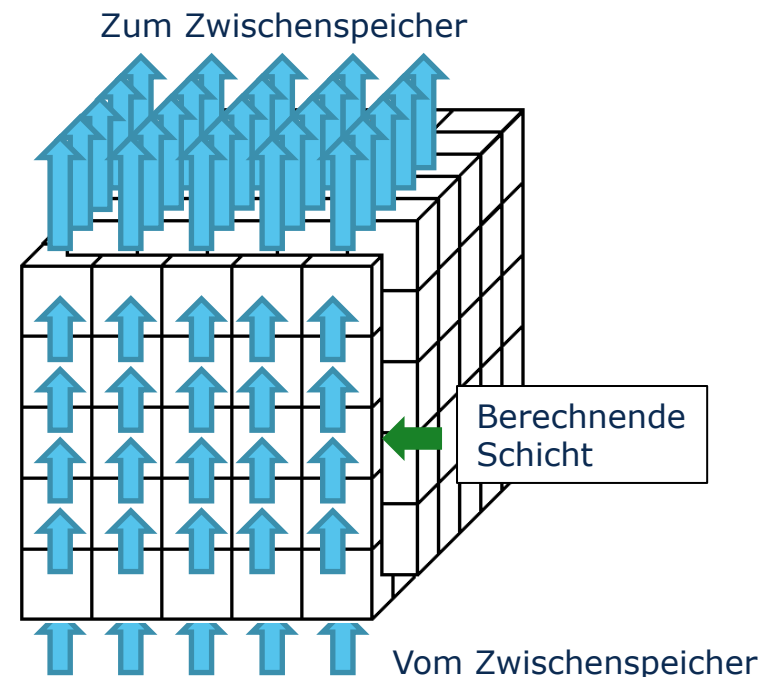
Generieren von Zufallszahlen

- PRNG für Zeile und Spalte mit unterschiedlichen Periodenlängen
- Zelle erhält Wert von links und vorn
- XOR zum Verknüpfen
- Register zum Verzögern von links nach rechts



Kommunikationsschnittstelle

- PCIe mit Hilfe von Xillybus
- 32 bit Busbreite (PCIe),
daher (De-)Serialisierung
 1. Mitzählen der Schritte
bis zur Übertragung,
 2. Anhalten der Pipeline,
 3. Serialisieren und
Versenden einer Ebene,
 4. Verschieben,
 5. nächste Ebene



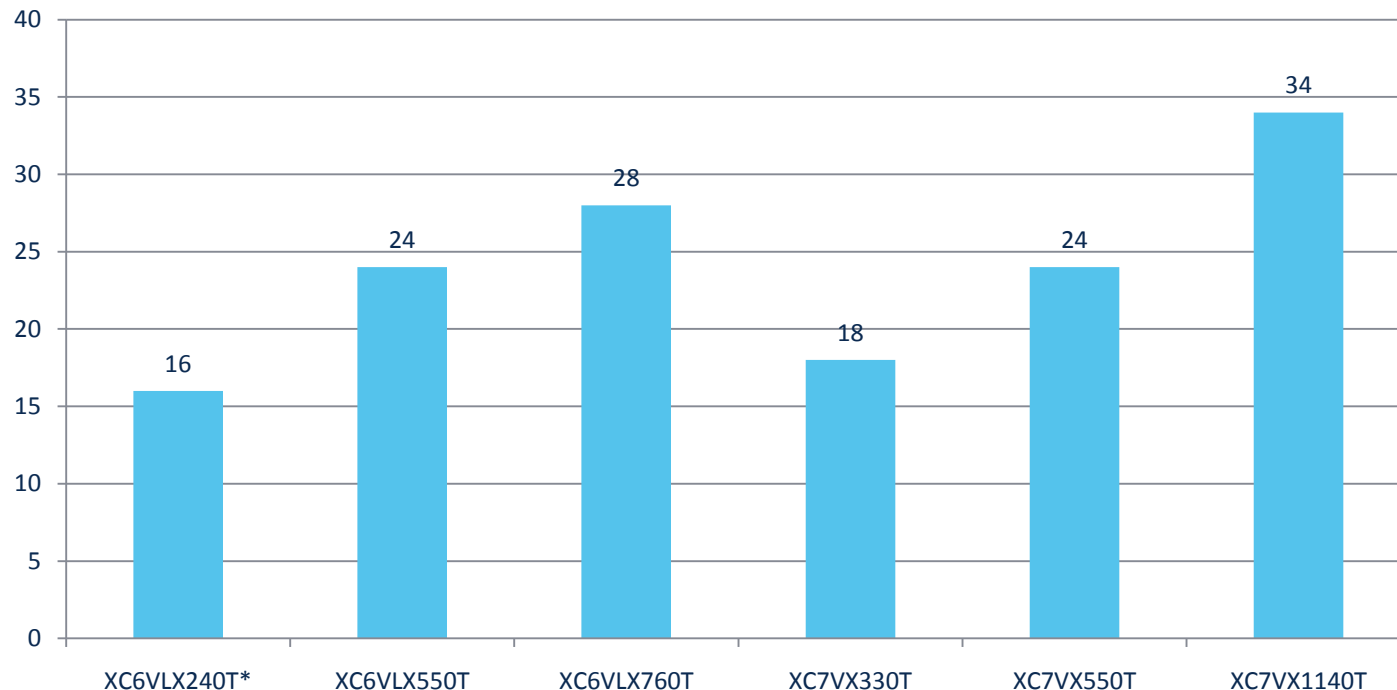
RESSOURCENBEDARF

Ressourcenbedarf und Größe

- 8x8x8 Zellen (16x16x16 Positionen)
 - 50% der LUT verbraucht
(Referenz: Virtex 6 XC6VLX240T)
- Geschwindigkeit: 80 MHz

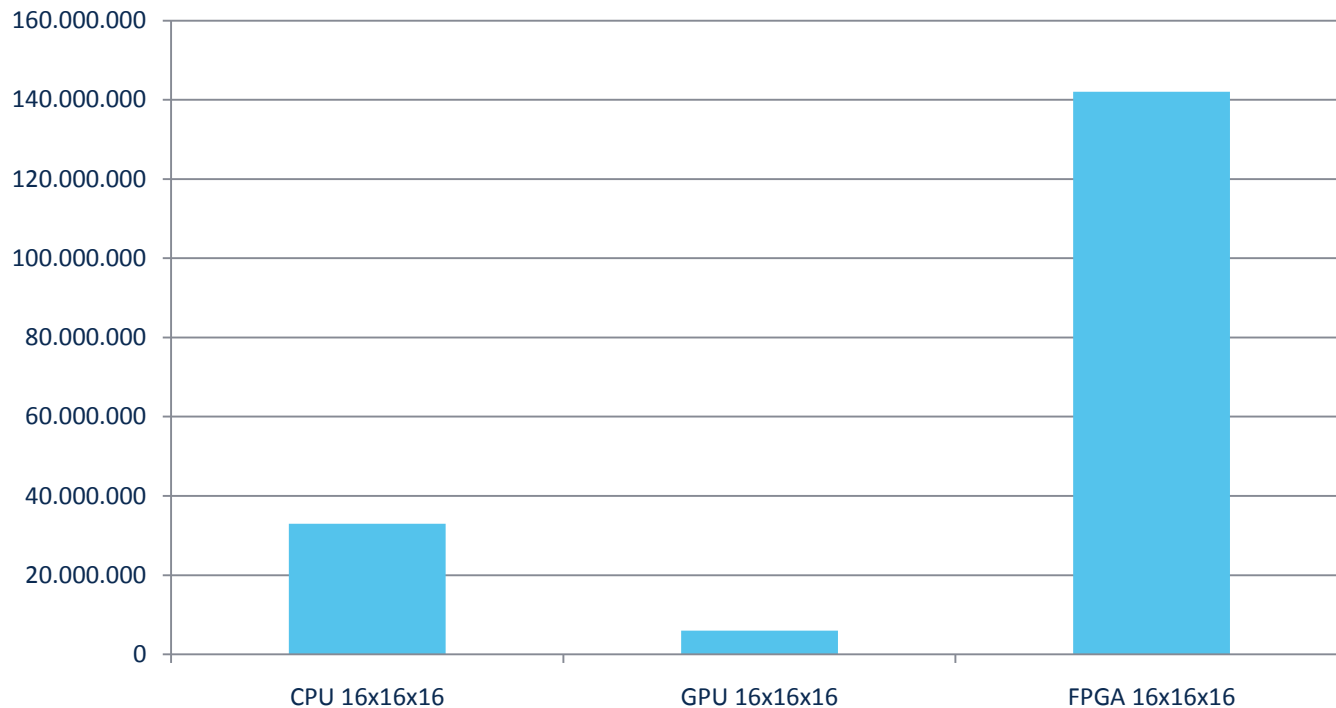
Größe	LUTs	LUTs in %	Slices	Slices in %	BRAM36	BRAM18
12x12x12	44.555	29,6	19.357	51,4	18	3
16x16x16	76.315	50,6	29.431	78,1	24	4
20x20x20	116.784	77,5	36.021	95,6	32	4

Maximale Kantenlänge eines würfelförmigen Gitters je Xilinx-FPGA

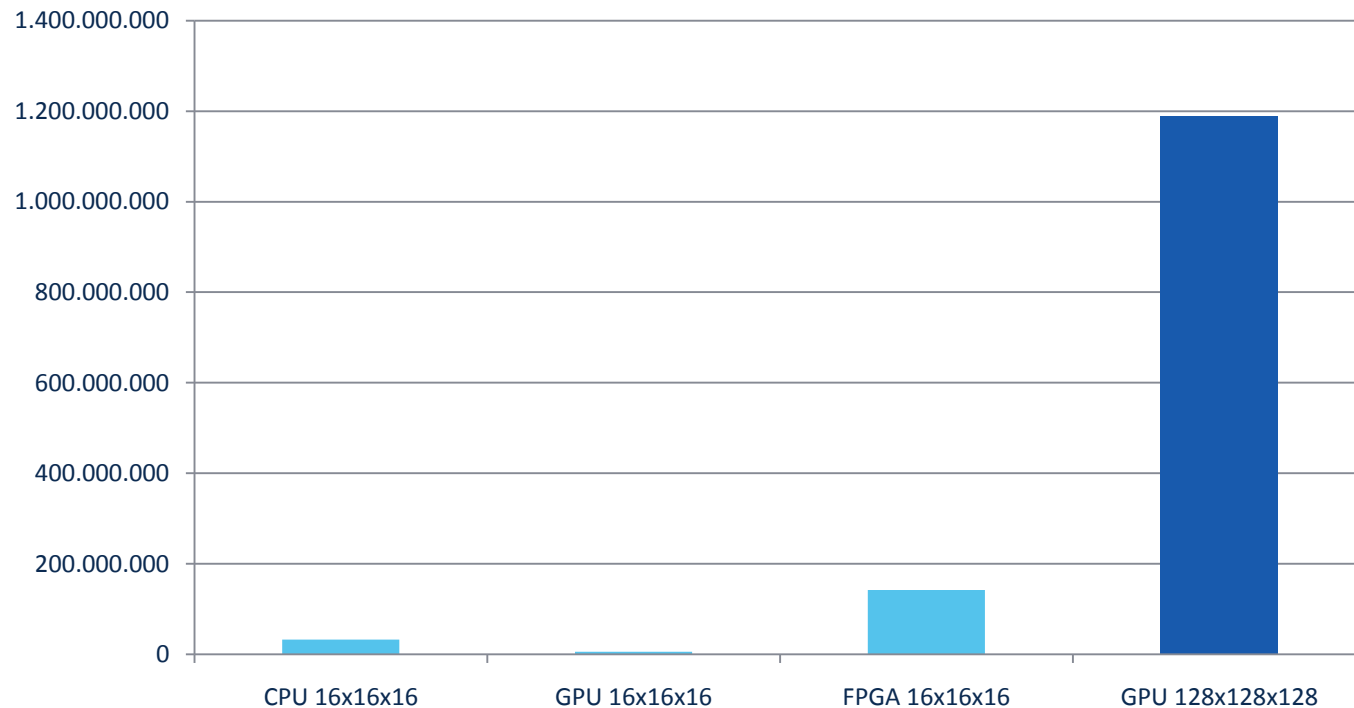


* - Referenz für Abschätzung

Geschwindigkeit: Anzahl der Monomerverschiebungen je Sekunde



Geschwindigkeit: Anzahl der Monomerverschiebungen je Sekunde



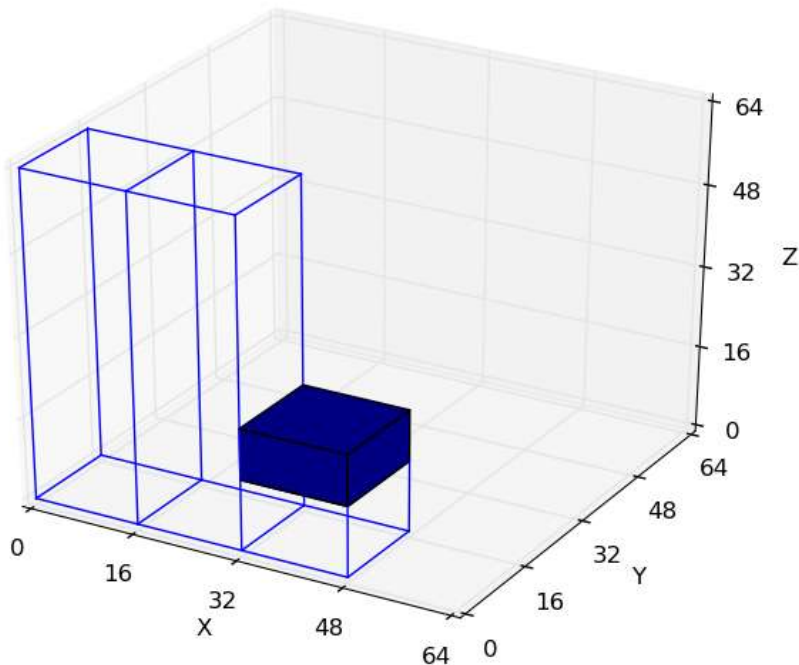
ZUSAMMENFASSUNG

Zusammenfassung

- Neu: Bindungsfluktuationsmodell auf FPGA
 - Umfangreiche Monte-Carlo-Simulation
 - Generierung von Zufallszahlen integriert
 - Host-Programm zur Kommunikation mit FPGA
- Gesamtsystem zur Simulation

AUSBLICK

Ausblick



- Keine periodische Randbedingung während Berechnung
- Logik zum Laden des Randes der Nachbarblöcke
- Verringerung des Datendurchsatzes

Quellen

- [1] I. Carmesin and K. Kremer. The Bond Fluctuation Method: A New Effective Algorithm for the Dynamics of Polymers in All Spatial Dimensions. *Macromolecules*, 21(9):2819–2823, 1988.
- [2] H. P. Deutsch and K. Binder. Interdiffusion and self-diffusion in polymer mixtures: A Monte Carlo study. *J. Chem. Phys.*, 94 (September 1990):2294–2304, 1990.
- [3] C. Jentsch, R. Dockhorn, M. Werner, and J.-U. Sommer: A highly parallelizable Bond Fluctuation Model, in preparation

Vielen Dank für die
Aufmerksamkeit!

Fragen / Diskussion