



Untersuchungen zur Hardwarerealisierung des Bindungsfluktuationsmodells auf FPGAs

Zwischenpräsentation von Jan Frenzel

Dresden,
22. Mai 2014

Gliederung

1. Aufgabenstellung
2. Vorstellung Bindungsfluktuationsmodell
3. Entwurf
 1. Pipeline
 2. Zelluläre Struktur
 3. Verbindungen
4. TODO:
 1. Generieren von Zufallszahlen
 2. Kommunikationsschnittstelle
 3. Abschätzung Ressourcenbedarf und max. Größe
 4. Bewertung

AUFGABENSTELLUNG

Aufgaben

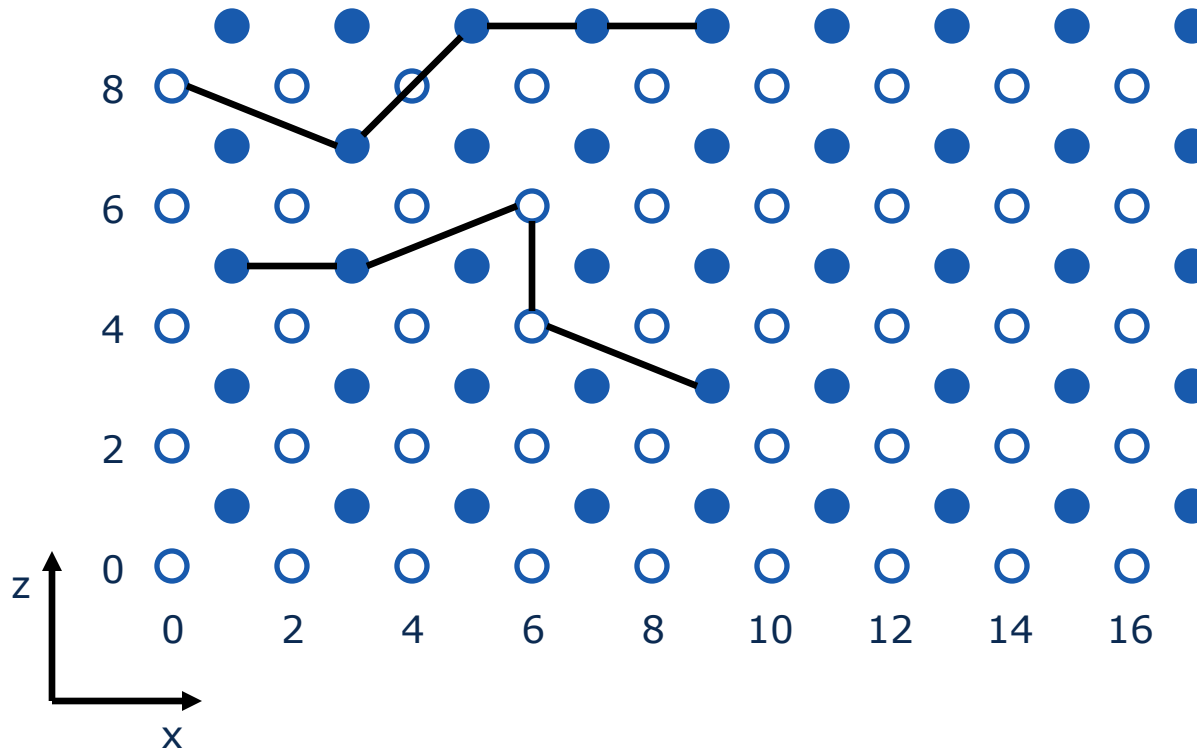
- Simulation des Bindungsfluktuationsmodells auf Basis einer zellulären Struktur
- Integration einer Kommunikationsschnittstelle
- Bestimmung des Ressourcenbedarfs und der Geschwindigkeit in Abhängigkeit der Gittergröße
- Bewertung gegenüber CPU und GPU

BINDUNGSFLUKTUATIONS- MODELL

Bindungsfluktuationsmodell

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

Bindungsfluktuationsmodell



Bindungsfluktuationsmodell

Pseudo-Code [1][2]:

- Wiederhole:

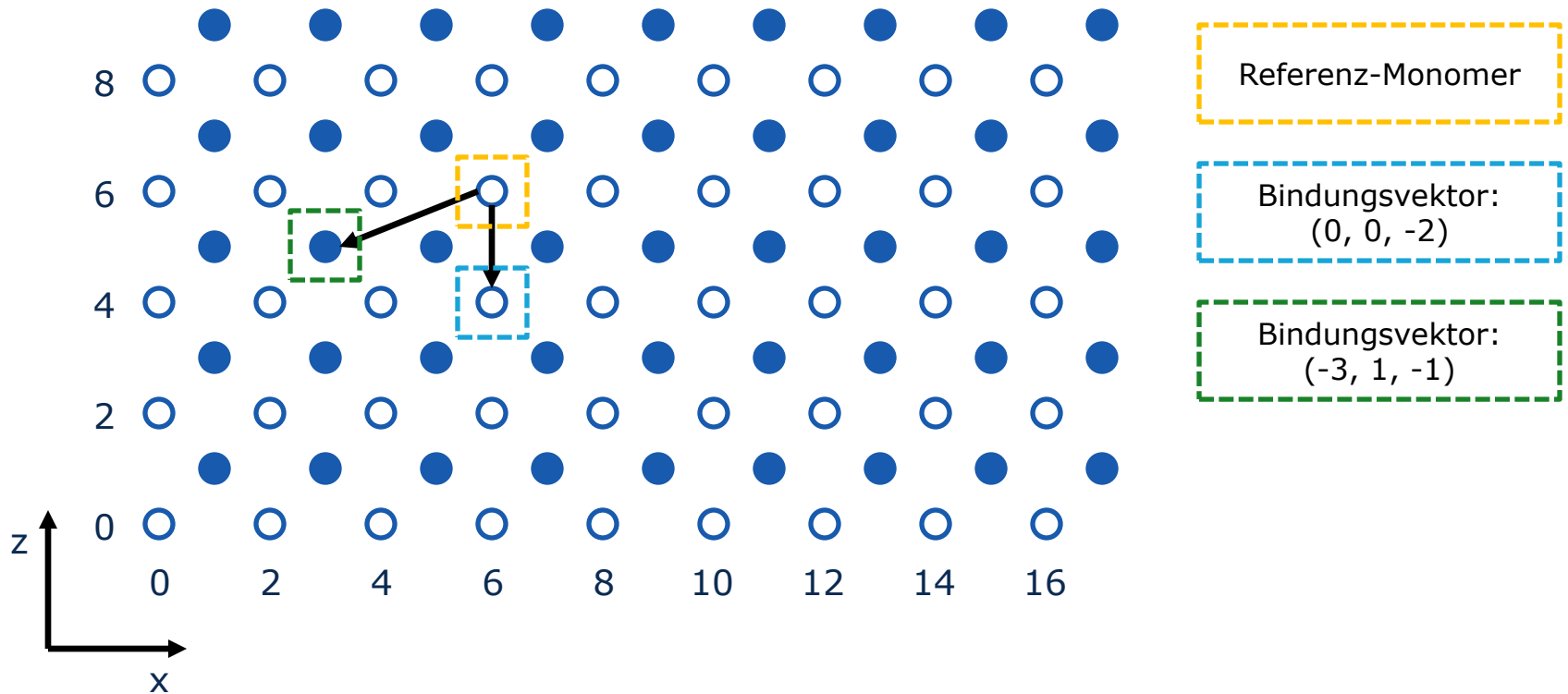
- Wähle zufällig eine Richtung
- Wähle zufällig ein Monomer
- Wenn das gewählte Monomer in diese Richtung bewegt werden kann
 - Bewege Monomer in diese Richtung
 - Informiere verbundene Monomere über Bewegung

Bindungsfluktuationsmodell

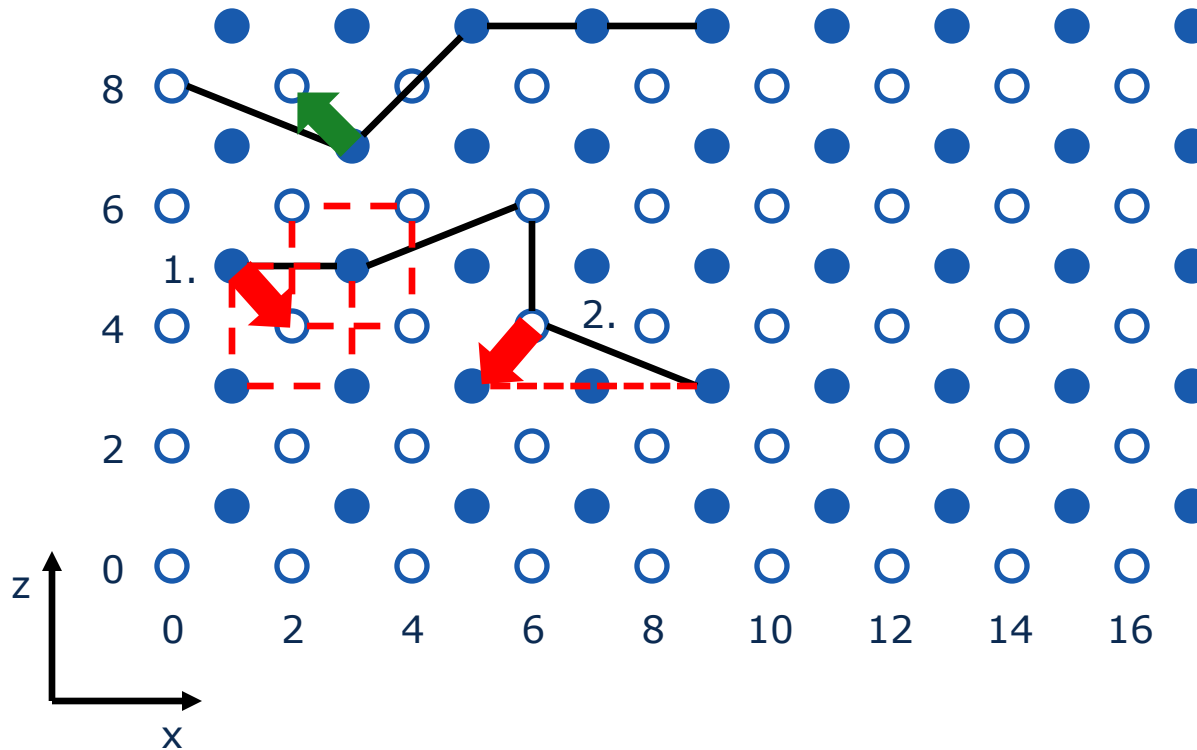
- Bewegung möglich, wenn:
 - Neue Bindungsvektoren in $P(2,0,0) \cup P(2,2,0) \cup P(2,2,2) \cup P(3,1,1)$ enthalten und
 - Nachbar-Positionen der neuen Position frei

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

Bindungsvektoren



Bedingungen für eine Bewegung



1. Nachbar-Position nicht frei
2. Entfernung zu groß

Bindungsfluktuationsmodell

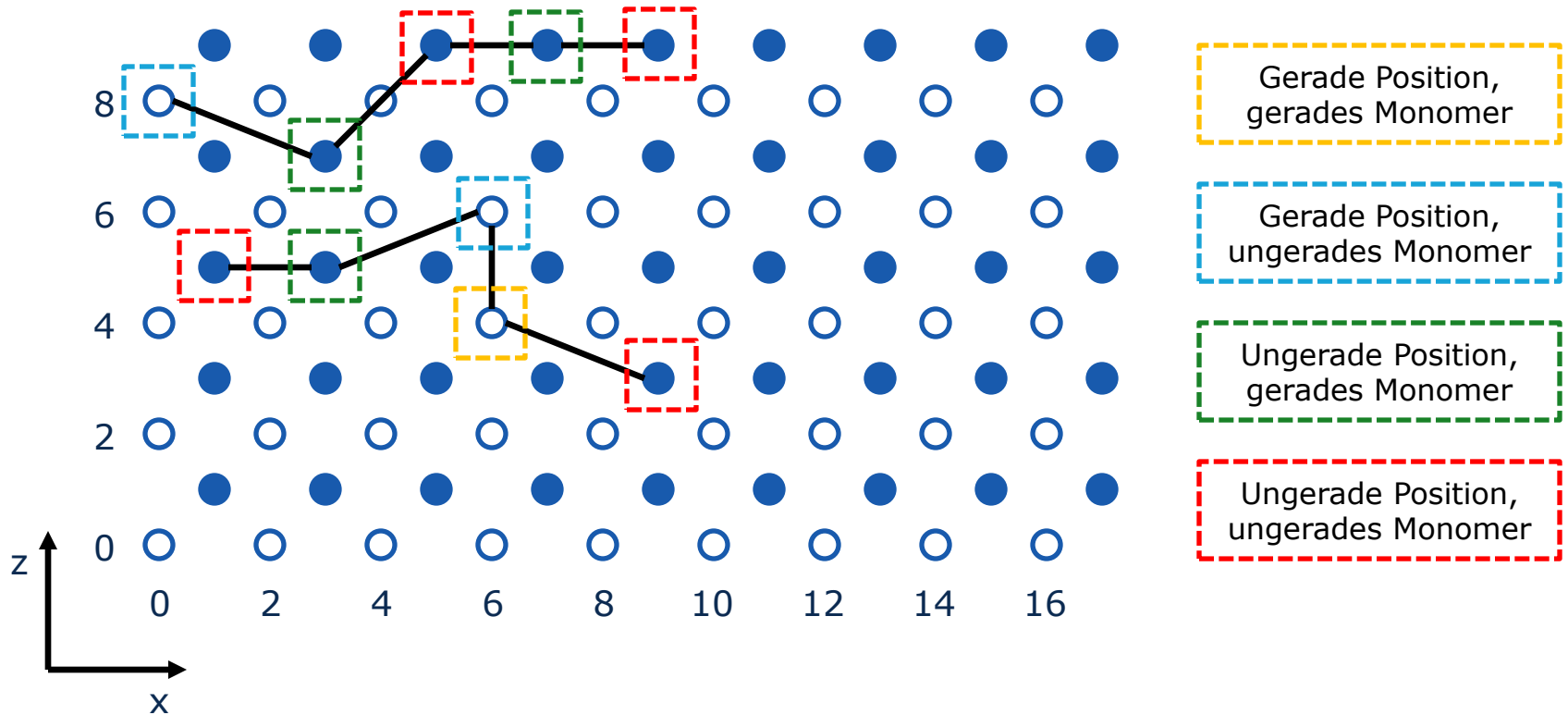
Pseudo-Code [3]:

- Zerlege Gitter in 4 Teilmengen von Positionen
- 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

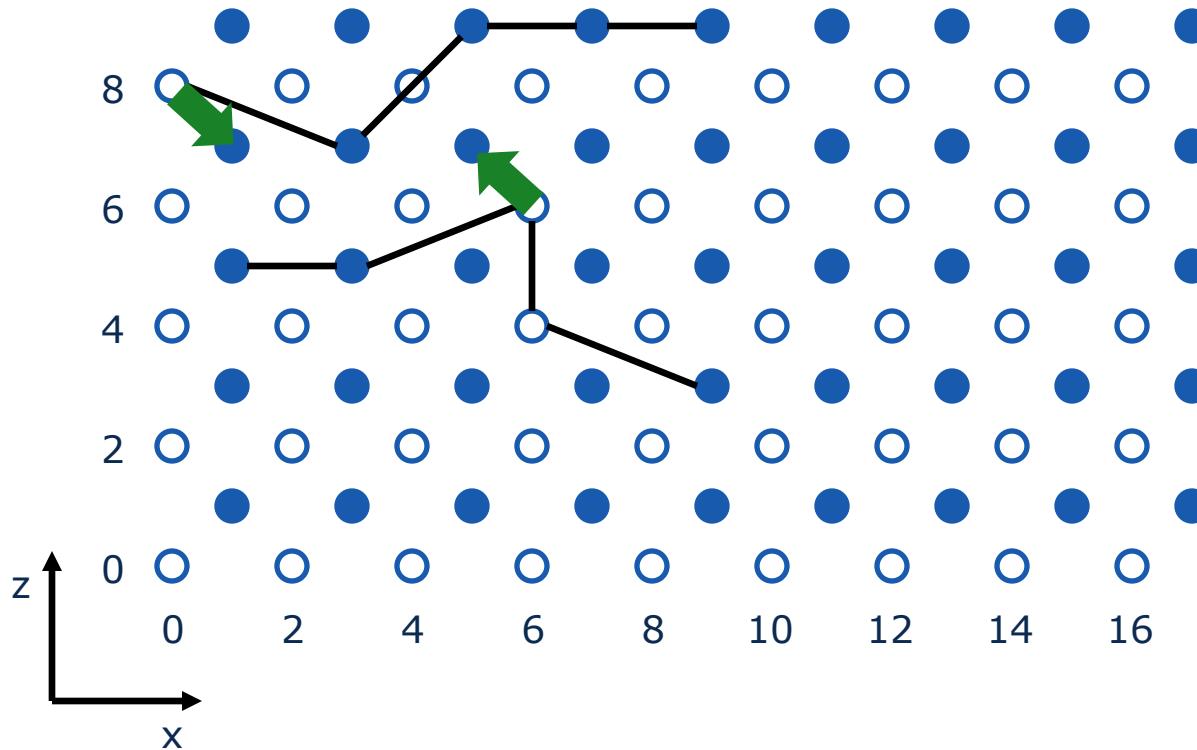
Bindungsfluktuationsmodell

- Zerlege Gitter in 4 Teilmengen von Positionen:
 - 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

Bindungsfluktuationsmodell

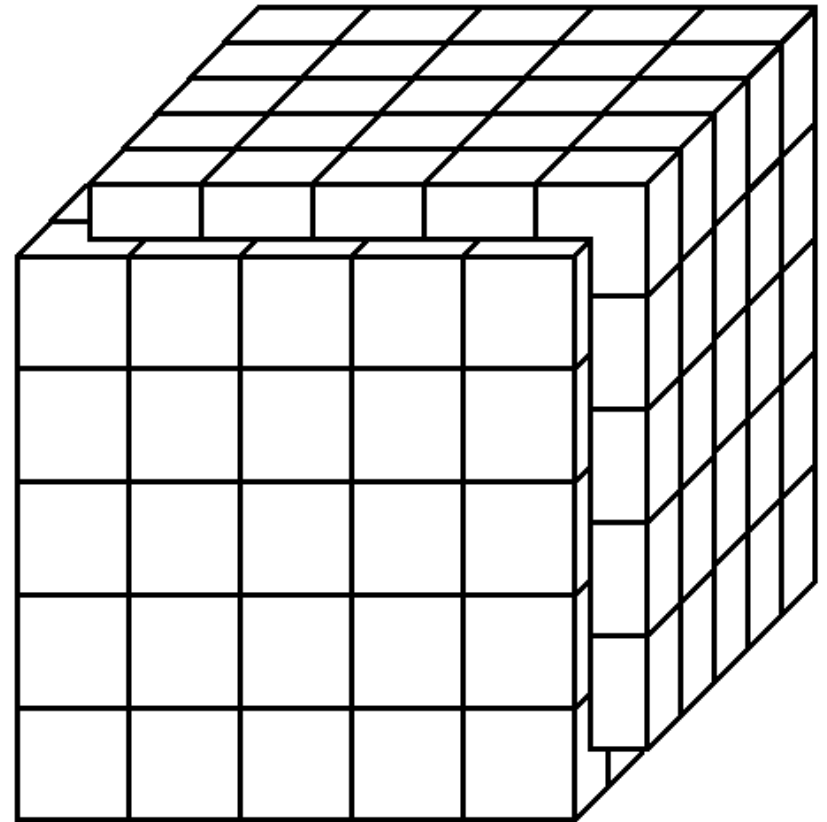
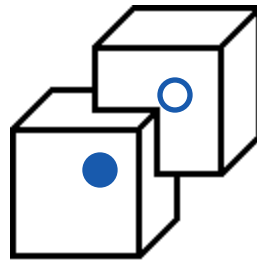
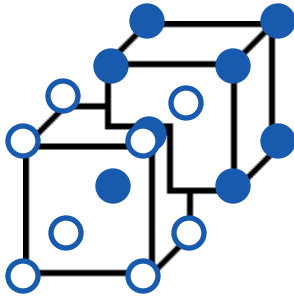


Bindungsfluktuationsmodell



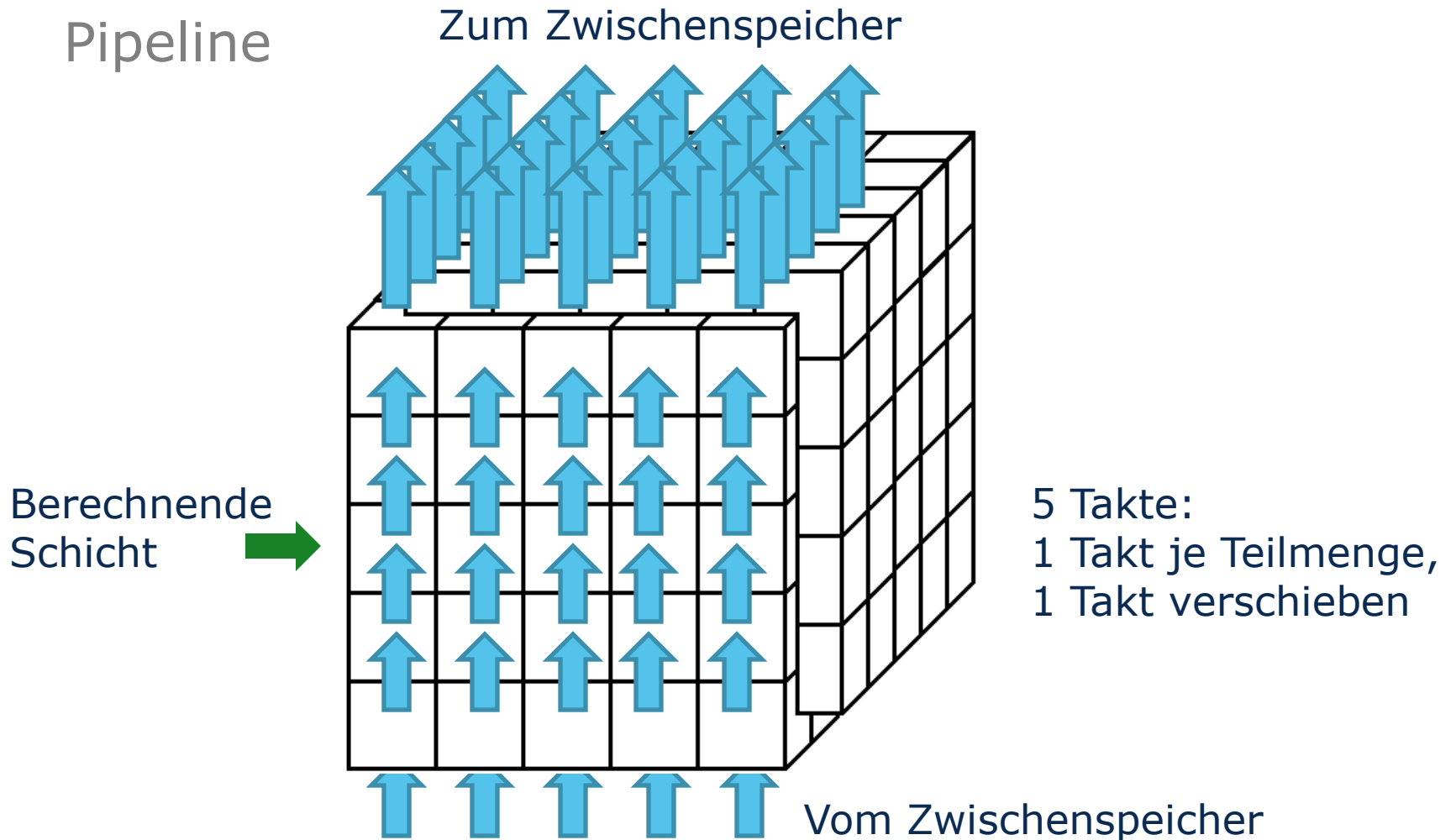
Bindungsfluktuationsmodell

2D → 3D

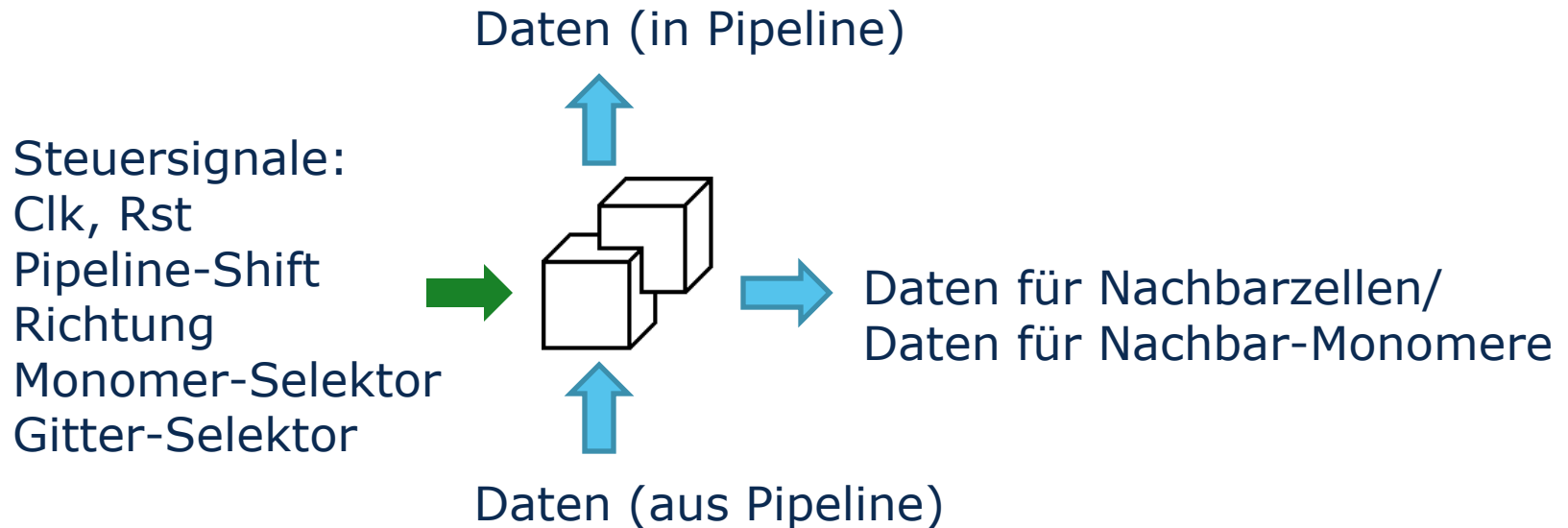


ENTWURF

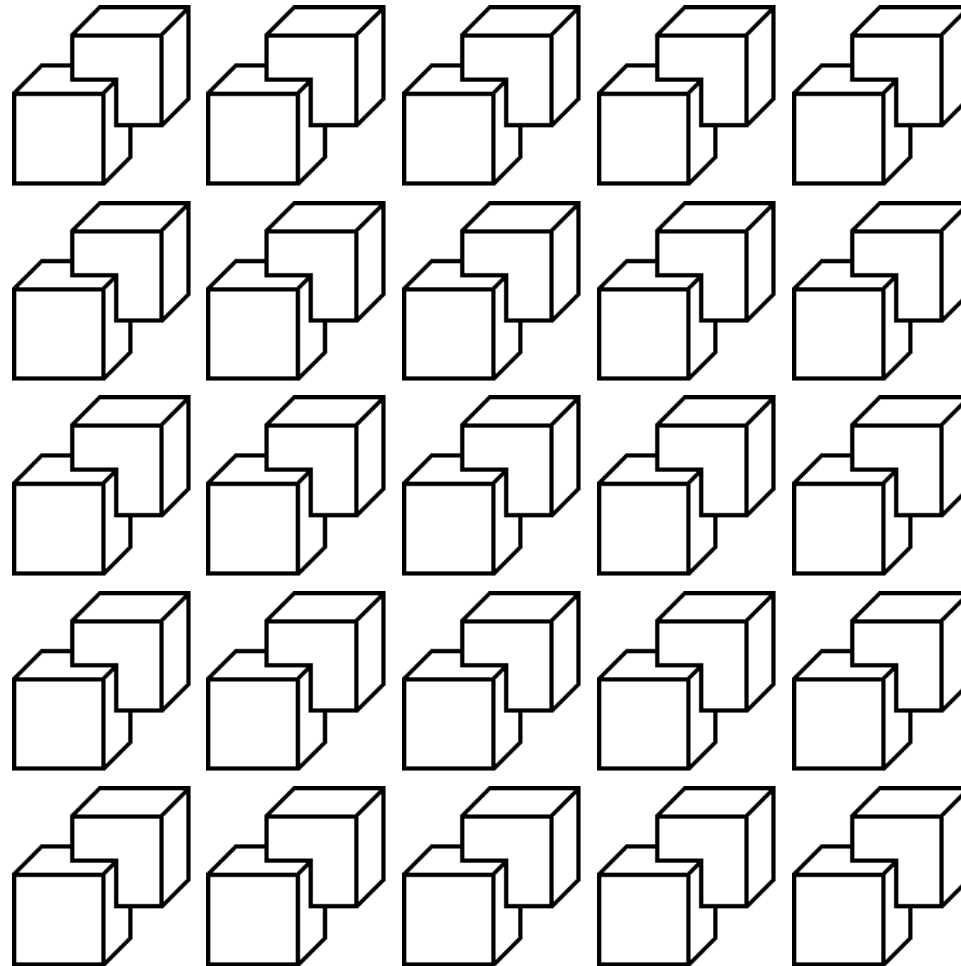
Pipeline



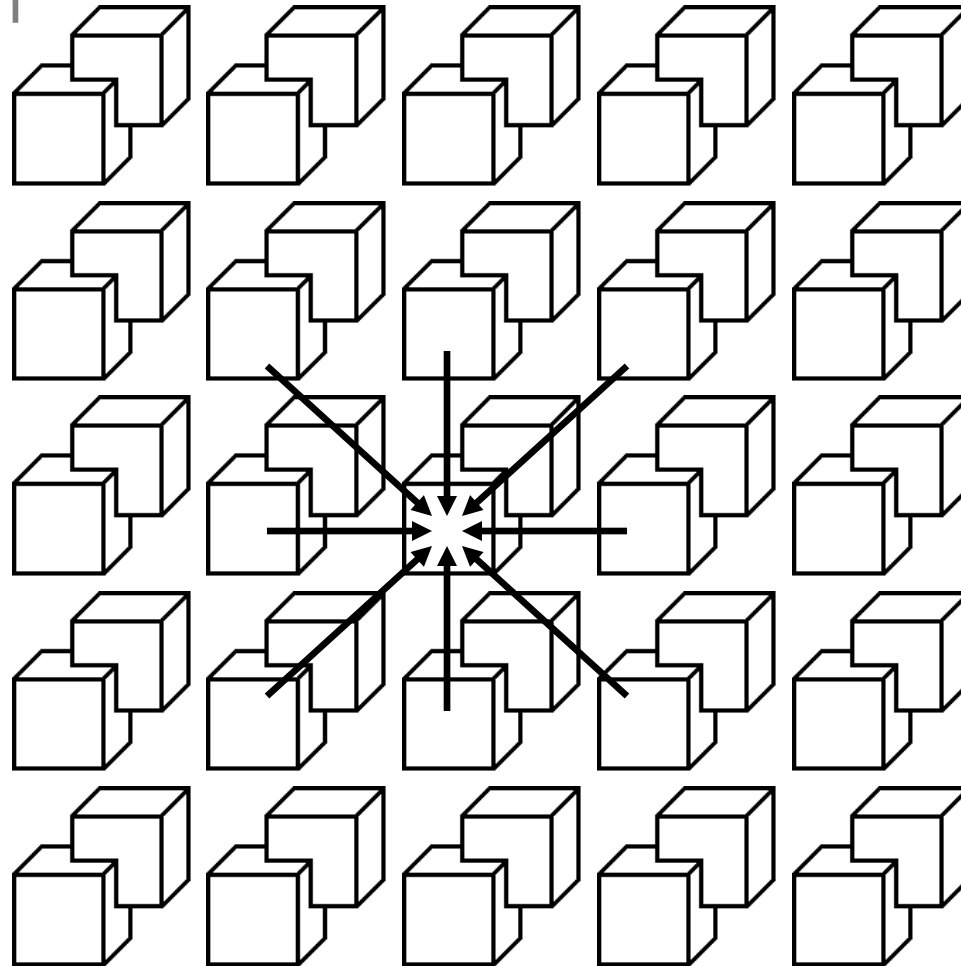
Zelluläre Struktur



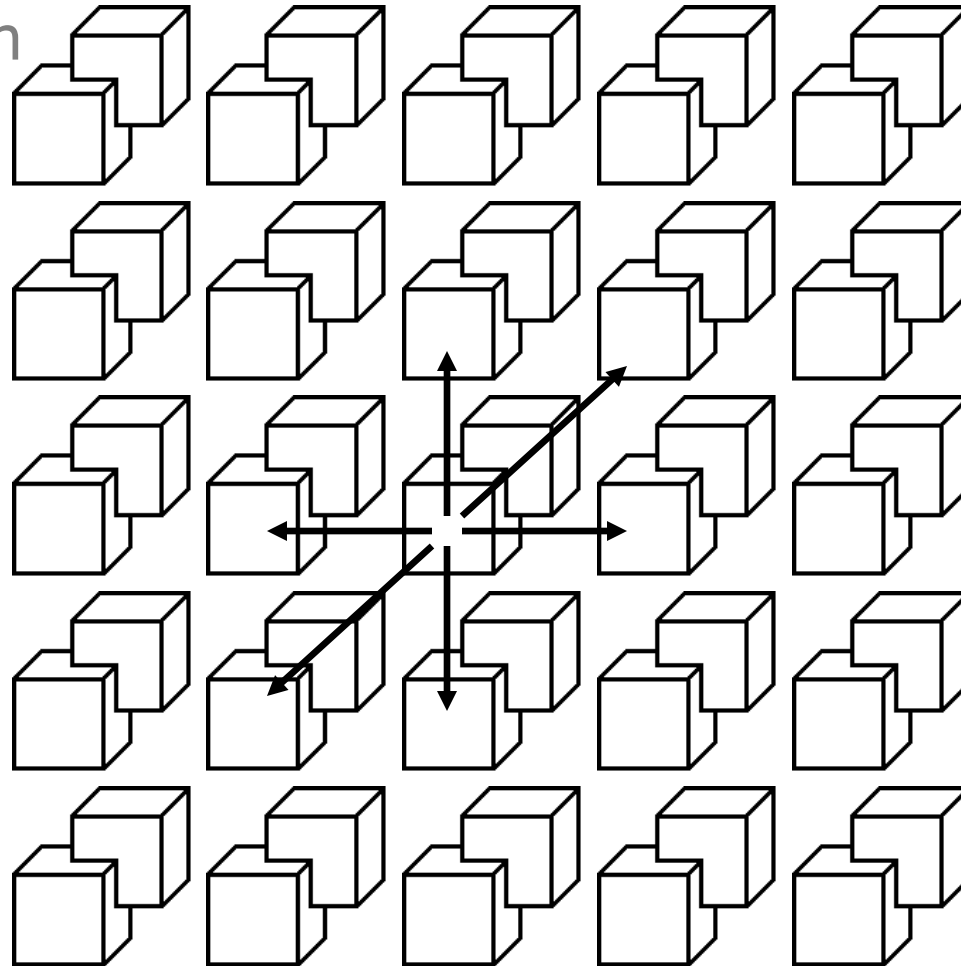
Verbindungen



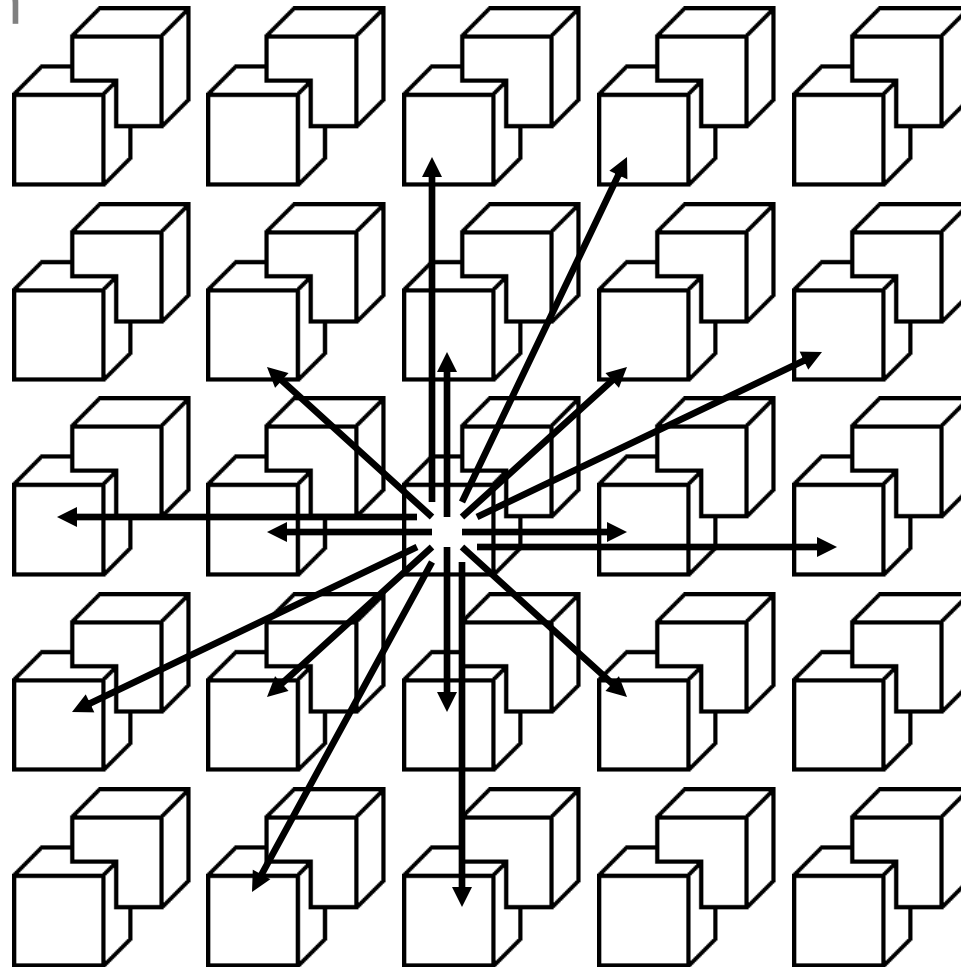
Verbindungen zum Überprüfen der Belegung



Verbindungen zum Verschieben



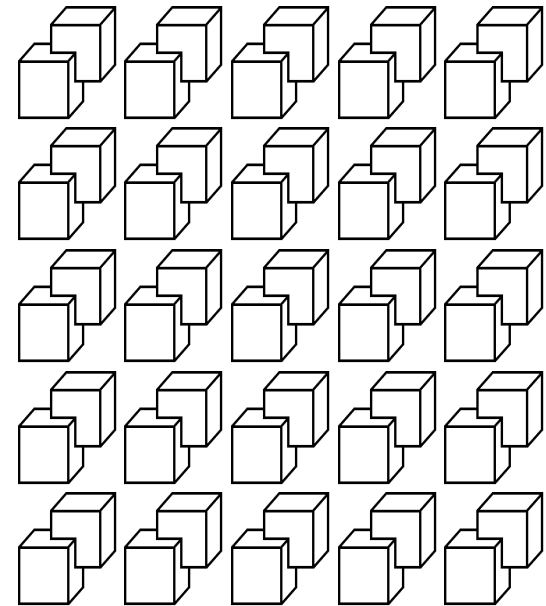
Verbindungen zum Update der Bindungsvektoren



TODO

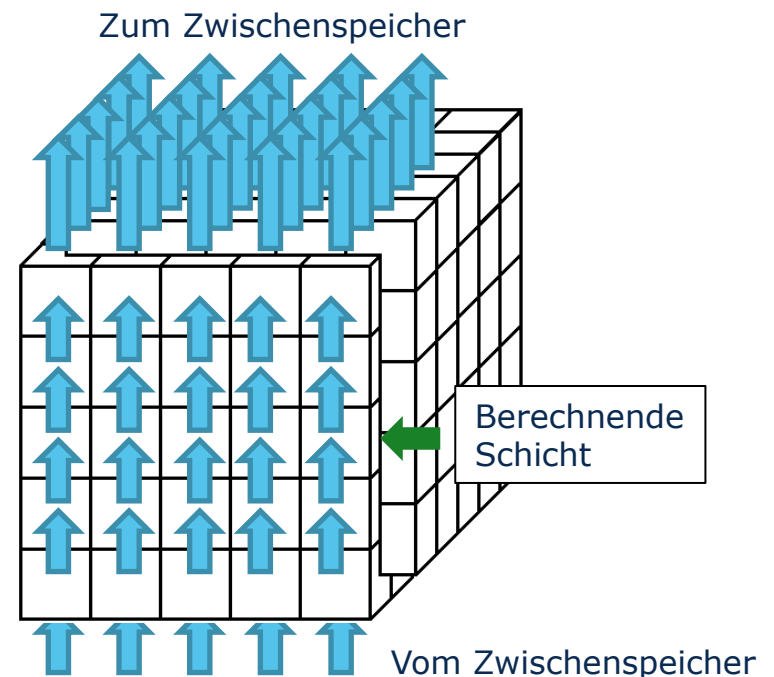
Zufallszahlen

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



Kommunikationsschnittstelle

- Kommunikation langsam
- Puffern des gesamten Gitters?
- Anhalten der Pipeline?



Ressourcenbedarf und Größe

- Momentan 8x8x8-Gitter

 - 7 % der LUT verbraucht
(Referenz: XC7VX1140T)

 - Verbesserung um Faktor 3 pro Dimension
möglich

- Geschwindigkeit momentan: ~ 150 MHz

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