

---

## **Kurzfassung**

Ein Ansatz für die Simulation von Polymersystemen ist das Bindungs-Fluktuations-Modell (BFM), in dem Polymere als miteinander verbundene Monomere modelliert werden. Diese Monomere werden zufällig auf einem Gitter bewegt. Das Gitter vereinfacht Kollisionstests zwischen Monomeren auf eine Abfrage der Nachbarzellen. Eine schon existierende Implementierung des BFM auf Grafikkarten konnte auf einer NVIDIA Tesla K80 GPU um einen Faktor 3,8 beschleunigt werden. In dieser Arbeit werden die dafür durchgeführten Optimierungsschritte und weitere implementierte Funktionalitäten dargelegt. Die Korrektheit der modifizierten Implementierung wird anhand von Vergleichen zwischen simulierten und theoretischen Diffusionsgesetzen belegt. Weiterhin werden Unterschiede zwischen dem parallelen und dem seriellen BFM durch Variation des Parallelisierungsgrades untersucht.

## **Abstract**

One approach for simulating polymer systems is the bond fluctuation model (BFM), in which polymers are represented as monomers connected by bonds. The monomers are moved randomly on a lattice simplifying collision checks between monomers to a lookup method. An existing implementation for a parallelized BFM, which already was accelerated by using graphics cards, has been optimized making it faster by a factor 3.8 for the NVIDIA Tesla K80 GPU accelerator. In this work, the applied optimization steps and additionally implemented features will be discussed. The correctness of the modified implementation will be verified by showing the consistency between the simulated and the theoretical diffusion laws for polymers. Furthermore, differences between the parallelized and the serial BFM algorithms will be analyzed by varying the degree of parallelism.