

Seminar Parallelrechnerevaluation

Michael Kuhn, Julian Kunkel, Philipp Neumann

Arbeitsbereich Wissenschaftliches Rechnen
Fachbereich Informatik
Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften
Universität Hamburg

11. Oktober 2017

1 Projekte

Performanzabschätzung via Dünne Gitter

- Problemstellung:
 - Abhängigkeit der Performanz einer Simulation von vielen Parametern
 - Beispiel Partikelsimulation
 - Partikeldichte, Interaktions-Radius
 - Outputrate
 - Partikelortierung im Speicher
 - Gebietszerlegung
 - ...
- Herausforderungen:
 - Vorhersage der Performanz?
 - Hochdimensionaler Parameterraum
- Idee: Trainieren eines dünnen Gitters im Parameterraum
 - Maschinelles Lernen
- Dünne Gitter: Diskretisierung von hochdimensionalen Räumen mit akzeptablem Aufwand: d -dimensionaler Raum $\Rightarrow O(N \log N^{d-1})$

Performanzabschätzung via Dünne Gitter: Ziele

- Erstellung eines Programms zum “Performanz lernen” via dünne Gitter
 - Eingabe von Parametern, entsprechender Wertebereiche und Performanzmessungen an ausgewählten Punkten
 - Generierung und Trainieren eines dünnen Gitters auf diese Performanzmessungen
- Automatische Auswertung des dünnen Gitters für beliebige Parametereingaben
- Bereitgestellte Software
 - SG++: Dünngitter-Lib (open-source; C++/python)
 - SimpleMD: Partikelsimulation
- Literatur:
 - M. Griebel, S. Knapek, G. Zumbusch, A. Caglar: Numerische Simulation in der Moleküldynamik. Springer, 2003
 - J. Garcke: Sparse Grids in a Nutshell. Sparse Grids and Applications, LNCSE 88, Springer, 2012
- Betreuer: Philipp Neumann, philipp.neumann@uni-hamburg.de