

Tabla de contenido

Resumen	I
Agradecimientos	III
1. Introducción	1
1.1. Contexto	1
1.2. Resumen	2
1.3. Objetivos	3
1.4. Contenidos	4
2. Marco teórico	5
2.1. Conceptos	5
2.1.1. Simulación de n-body	5
2.1.2. Corrección de traslapes	6
2.2. Algoritmos existentes	7
2.2.1. N-body paralelo	7
2.2.2. Simulación de Barnes-Hut	7
2.2.3. Lista de Verlet	8

2.2.4.	Dinámica guiada por eventos	8
2.2.5.	Corrección de traslapes	9
2.3.	Tecnologías	9
2.3.1.	CUDA	9
3.	Especificación del problema	13
3.1.	Descripción	13
3.1.1.	Interacción entre partículas	13
3.1.2.	Volúmen excluido	14
3.1.3.	Condiciones de borde periódicas	15
3.1.4.	Ruido aleatorio	15
3.2.	Relevancia de la solución	17
3.3.	Requisitos de la solución	17
3.4.	Características deseadas	18
3.5.	Trabajo relacionado	18
4.	Especificación de la solución	20
4.1.	Elección de la solución	20
4.1.1.	Triangulación de Delaunay	22
4.2.	Diseño de clases	23
4.3.	Estructuras de datos	25
4.3.1.	Estructuras para ejecución paralela	25

4.3.2.	Constantes de simulación	26
4.4.	Algoritmos	26
4.4.1.	Generación de la configuración inicial	27
4.4.2.	Integración para fuerza de largo alcance	27
4.4.3.	Actualización de la triangulación	29
4.4.4.	Corrección de triángulos invertidos	30
4.4.5.	Corrección de traslapes	33
4.4.6.	Integración para fuerza de corto alcance	35
4.5.	Interfaz de usuario	36
5.	Validación de la solución	37
5.1.	Experimento	37
5.2.	Resultados	39
5.2.1.	Simulación de sistemas de partículas	39
5.2.2.	Localidad de corrección de traslapes	41
5.2.3.	Gráficos	41
5.3.	Análisis	48
6.	Conclusiones	50
6.1.	Resumen	50
6.2.	Recuento de objetivos	51
6.3.	Aprendizaje	52

6.4. Trabajo futuro	52
Apéndices	54
A . Tablas	54
Bibliografía	57

Índice de tablas

5.1. Configuraciones usadas en las pruebas, en donde cada configuración está identificada por un dígito y tiene dos tipos de partículas. ϕ_i corresponde a la fracción de partículas del tipo i , α_i, μ_i son valores utilizados en el cálculo de fuerzas y ρ es la fracción de volumen del sistema ocupado por partículas.	38
6.1. Tiempos de ejecución promedio en milisegundos de un paso de tiempo para fuerza de largo alcance. N es la cantidad de partículas simuladas y $C_0 - C_4$ corresponden a las configuraciones de cada sistema, descritas en la tabla 5.1.	54
6.2. Cantidad de traslapes promedio por paso de tiempo para fuerza de largo alcance, con los mismos parámetros que en la tabla 6.1.	55
6.3. Cantidad de <i>edge-flips</i> promedio por paso de tiempo para fuerza de largo alcance, con los mismos parámetros que en la tabla 6.1.	55
6.4. Tiempos de ejecución promedio en milisegundos por paso de tiempo para fuerza de corto alcance, con los mismos parámetros que en la tabla 6.1.	55
6.5. Cantidad de traslapes promedio por paso de tiempo para fuerza de corto alcance, con los mismos parámetros que en la tabla 6.1.	56
6.6. Comparación de los tiempos de ejecución promedio en milisegundos entre los distintos métodos de n-body cuadrático. Los tiempos del algoritmo secuencial no se midieron para todos los valores de N para no detener por un tiempo prolongado el servidor remoto en el que se realizaron las pruebas.	56

Índice de ilustraciones

2.1. Esquema de memoria en CUDA.	11
2.2. Ejecución divergente de un <i>warp</i> . Los <i>threads</i> en azul que satisfacen una misma condición se ejecutan en paralelo, mientras que los <i>threads</i> en rojo que no la cumplen permanecen detenidos hasta terminar esa rama de la condición (las barras negras). Al final de la divergencia, el <i>warp</i> continúa la ejecución en paralelo.	12
3.1. Influencia de la distancia en el cálculo para la fuerza de corto alcance entre partículas. A partir del radio de corte r_{cutoff} marcado en magenta, la expresión para la fuerza no se evalúa y el valor de f_{ij} se considera 0.	14
3.2. Distribución normal. Las bandas indican las probabilidades respectivas de que un valor generado con la distribución normal esté comprendido en ese rango.	16
3.3. Formas de eliminar valores extremos generados aleatoriamente.	16
3.4. Lista de celdas, en donde cada celda tiene una lista de partículas que residen en ella. La circunferencia de radio r_s que rodea a p_3 corresponde a la piel de esa partícula. Luego, p_4 y p_8 forman parte de la lista de vecinos de p_3	18
4.1. Distintas configuraciones de partículas distribuidas en el área de simulación, para $N = 896$ y $dt = 0.01$. Los números de cada configuración denotan a las descritas en la tabla 5.1. Los colores denotan distintos tipos de partículas.	21
4.2. Movimiento aleatorio de una partícula durante un paso de tiempo.	22

4.3.	Triangulación de Delaunay en 2 dimensiones bajo condiciones de borde periódicas. Las líneas corresponden a arcos de la triangulación.	24
4.4.	Posiciones iniciales de las partículas del sistema en $t = 0$ para $N = 896$. Ambas configuraciones corresponden a las descritas en la tabla 5.1. Los colores de las partículas indican su tipo.	27
4.5.	Detección de movimiento inválido. El vector azul r_{bc}^0 corresponde a la distancia entre partículas. Después del desplazamiento, el vector en rojo r_{bc}^1 cambia su sentido general con respecto a la situación inicial, indicando que hubo un traslape más fuerte entre ambas partículas.	29
4.6.	Resolución de triángulo invertido. El polígono que se invirtió producto del desplazamiento de la partícula d está sombreado en color cian.	31
4.7.	Resolución de triángulo invertido con corrección de dos arcos.	31
4.8.	Detección de triángulo invertido utilizando coordenadas baricéntricas.	32
4.9.	Corrección de traslapes. Al aplicar el desplazamiento neto sobre B producto de A y C , puede ocurrir que los traslapes no queden resueltos.	34
4.10.	Corrección de traslapes en paralelo. El desplazamiento sobre C producto de los traslapes con A y B es mayor que el necesario, por lo que se trunca su magnitud.	35
5.1.	Sistemas de partículas tras 10000 iteraciones con $N = 4096$ y $dt = 0.01$. Los colores de las partículas denotan el tipo al que pertenecen. Las configuraciones de cada sistema y los valores respectivos para cada tipo de partículas corresponden a los descritos en la tabla 5.1.	40
5.2.	Gráficos de localidad para corrección de traslapes tras 10000 iteraciones con $dt = 0.01$. Las partículas verdes participaron en al menos una corrección de traslapes en un mismo paso de tiempo, mientras que las rojas no lo hicieron. Las configuraciones de cada sistema corresponden a las descritas en la tabla 5.1.	42

5.3. Gráficos de localidad de corrección de traslapes para $dt = 0.001$, en donde los demás parámetros son los mismos que en la figura 5.2.	43
5.4. Gráficos de localidad de corrección de traslapes para $dt = 0.0001$, en donde los demás parámetros son los mismos que en la figura 5.2.	44
5.5. Tiempos de ejecución en milisegundos para los algoritmos de largo y corto alcance. Las configuraciones de cada sistema y los valores respectivos para cada tipo de partículas corresponden a los descritos en la tabla 5.1.	44
5.6. Influencia de las distintas configuraciones sobre el tiempo de ejecución para simular un paso de tiempo físico, con los mismos parámetros que los utilizados en la figura 5.5.	45
5.7. Promedio de iteraciones por paso de tiempo para fuerzas de largo y corto alcance, con los mismos parámetros que en la figura 5.5.	45
5.8. Promedio de iteraciones de <i>edge-flips</i> por paso de tiempo para algoritmo de fuerza de largo alcance, con los mismos parámetros que en la figura 5.5.	46
5.9. Triangulación de Delaunay con $N = 4096$ para la configuración 4 descrita en la tabla 5.1.	47
5.10. Comparación entre los tiempos de ejecución en milisegundos para las implementaciones del método <i>n-body</i> de $O(N^2)$, utilizando la configuración C_0 descrita en la tabla 5.1.	47