

Dissipative Particle Dynamics

**Simulation of Microfluidic Systems  
With Fluid Particle Methods on High  
Performance Computers**

Thomas Steiner

Dissertation  
zur Erlangung des Doktorgrades der Technischen Fakultät  
der Albert-Ludwigs Universität Freiburg im Breisgau



Microfluidics & Nanofluidics

Band 5

**Thomas Steiner**

## **Dissipative Particle Dynamics**

Simulation of Microfluidic Systems With Fluid  
Particle Methods on High Performance Computers

Shaker Verlag  
Aachen 2009

**Bibliographic information published by the Deutsche Nationalbibliothek**

The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at <http://dnb.d-nb.de>.

Zugl.: Freiburg, Univ., Diss., 2009

Copyright Shaker Verlag 2009

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publishers.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8322-8305-6

ISSN 1866-5411

Shaker Verlag GmbH • P.O. BOX 101818 • D-52018 Aachen

Phone: 0049/2407/9596-0 • Telefax: 0049/2407/9596-9

Internet: [www.shaker.de](http://www.shaker.de) • e-mail: [info@shaker.de](mailto:info@shaker.de)

---

**Dekan**

Prof. Dr. Hans Zappe (Freiburg)

**Referenten**

Prof. Dr. Roland Zengerle (Freiburg)

Prof. Dr. Jan G. Korvink (Freiburg)

**Tag der Prüfung**

25. März 2009

Institut für Mikrosystemtechnik (IMTEK)

Lehrstuhl für Anwendungsentwicklung

Technische Fakultät

Albert-Ludwigs-Universität Freiburg



# Summary

One of the main objectives in simulating complex microfluidic phenomena in life science is the attempt to transfer fundamental research results to commercial applications and products. This thesis proves that realistic problems in microfluidics can be solved with *Dissipative Particle Dynamics (DPD)* and in fact that this method can be used as a supplementary tool in an engineering design process of constructing microfluidic devices. This work is presented in two parts. *Part I* deals with the simulation approach of fluid particle methods, the setting of appropriate pressure boundary conditions and their application to a microfluidic problem with aggregating microspheres. In *Part II* the parallelization approach and its performance is presented, including new algorithms to handle large numbers of different species efficiently, or to optimize the load balancing in heterogeneous simulation problems. As *DPD* and its extensions leave room for interpretations, and many authors have adapted it in different contexts, first a literature review is given in the introduction Chapter 1.

*Part I* presents in Chapter 2 the theory behind *DPD* and introduces the basic equations that describe the dynamics of the *fluid particles*. Extensions to the original approach are explained that implement additional degrees of freedom to further improve the hydrodynamic description of fluids and colloidal suspensions. As a central part of this work, the *Quaternion* approach is introduced to describe the dynamics of arbitrarily shaped objects in an elegant and numerically efficient manner. Finally, the applied *Velocity-Verlet* based integration schemes for fluid particles and rigid objects are presented.

In Chapter 3, fluid properties and hydrodynamic behavior is discussed together with the application of appropriate pressure boundary conditions that are typically used in *Molecular Dynamics (MD)*. The viscosity of the fluids is measured with *Lees-Edwards boundary conditions* for different model parameter such as repulsion, density or the random force. For pressure boundary conditions the *Reflecting Boundary* and the *Gravitational* methods are validated in detail. The *Gravitational* method is a good choice for simulations of arbitrarily-shaped geometries as the pressure gradient can be adjusted easily with sufficient accuracy via a simple body force. Although the *Reflecting Boundary* method is a very attractive possibility to create a pressure directly,

it has the drawback that there is no unique way to map the required pressure to its setup parameter, which prohibits this method from being used in systematic optimization processes.

In Chapter 4 it is shown that *DPD* can represent adequately the aggregation of 335 suspended polystyrene beads of diameter  $d = 150\mu\text{m}$  at a measured maximum *Reynolds number* of  $\text{Re} = 5.4$ . Experiment and simulation are matched by a set of dimensionless numbers such as *Reynolds number*, *Peclet number*, *Mach number* as well as the drag coefficient for spherical objects with all length scales related by a factor of  $1r_c = 30\mu\text{m}$ . The *Peclet number* could be determined to  $\text{Pe} \approx 2300$ , which is sufficiently large to neglect thermal motion of the spherical objects. The hydrodynamic flow field is validated against *CFD* simulation as well as analytical solutions and corresponds well within the relevant  $\text{Re}$  range of 0.0 to 7.5. The hydrodynamic drag of a *DPD* bead ( $d = 5r_c$ ) could resolve the analytical expression within a range of  $0.1 < \text{Re} < 10.0$ .

*Part II* presents in Chapter 5 the applied *Distributed Memory* parallelization strategy with *Domain Decomposition*, new simulation concepts and the structure of the parallelized program. The two new concepts of a *Multi-Species Identification* and *Master Object scheme* allow simplification of a general code design, especially if rigid objects are used. The *Multi-Species Identification scheme* encodes material definition parameters and indices of different moving objects into one single value and allows for an efficient realization of managing material properties in multi-processor environments, independent of the complexity of the simulated system. The *Master Object* concept for *Quaternions* can handle any number of differently shaped objects just by defining so-called *Master Objects* and calculating only changes in orientation with respect to the initial configuration.

Finally, Chapter 6 shows the versatility of the developed code with tests on different platforms ranging from a low cost Opteron cluster with 12 CPUs up to a NEC Xeon cluster with 400 CPUs in comparison to a shared memory system. The developed code reaches a linear *Scale-up* of almost 70% on 64 CPUs, with approximately 100 million particles and of 74% with 1.5 million particles on 16 CPUs. A super linear *Speed-up* of 185% could be observed on 64 CPUs with 1.5 million particles. The performance has been kept at an optimum level with a new *Time Dependent Load Balancing* suitable for fluid particle and rigid object simulations. As it is independent of a local density distribution it increases the performance in the considered test case (density gradients of  $\rho = 1$  to 29) by a factor of 15 compared to the case where no load balancing is applied.

# Zusammenfassung

Wichtig bei der Simulation komplexer mikrofluidischer Systeme im Bereich der Life-Science ist schon frühzeitig fundamentale Forschungsresultate auf kommerzielle Applikationen zu übertragen. Diese Arbeit zeigt, dass *Dissipative Partikel Dynamik (DPD)* solch einen Entwicklungsprozess unterstützen und realistische Problemstellungen der Mikrofluidik lösen kann. Im *Teil I* dieser Arbeit werden die Besonderheiten des gewählten partikelbasierten Simulationsansatzes, die Definition adäquater Randbedingungen und die Simulation aggregierender Partikel behandelt. *Teil II* beschreibt neben dem Parallelisierungsansatz und der Performanz des entwickelten Simulationscodes auch die Vorteile neu entwickelter Algorithmen zur effizienten Behandlung heterogener Systeme, bestehend aus unterschiedlichen Objektarten und Flüssigkeiten. Da *DPD* Raum für Interpretationen lässt und viele Autoren diese Methode zur Lösung unterschiedlichster Problemstellungen eingesetzt haben, wird zunächst in Kapitel 1 ein Überblick über grundlegende Literatur gegeben.

*Teil I* behandelt in Kapitel 2 die theoretischen Grundlagen der *DPD* zur Beschreibung der Dynamik *dissipativer Partikel*. Anschließend werden Erweiterungen des ursprünglichen Ansatzes gezeigt, welche das hydrodynamische Verhalten von Fluiden und Kolloidsystemen verbessern. Als zentraler Bestandteil dieser Arbeit wird die Dynamik beliebig geformter Objekte numerisch sehr effizient mittels des *Quaternionen* Ansatzes behandelt. Die Bewegungsgleichungen für die *dissipativen Partikel* und *Quaternionen* werden durch ein *Velocity-Verlet* basierendes Integrationsschemata gelöst.

In Kapitel 3 wird das hydrodynamische Verhalten in Abhängigkeit unterschiedlicher Simulationsparameter und die adäquate Anwendung aus der *Molekular Dynamik (MD)* bekannter Druckrandbedingungen diskutiert. Beziiglich numerischer Effizienz und Kontrollierbarkeit wurden sowohl die *Reflexionsdruckrandbedingung* als auch die *Gravitationsmethode* untersucht. Die *Gravitationsmethode* ist eine gute Wahl für Simulationen in beliebig geformten Geometrien, da der Druckgradient nur durch eine Volumenkraft eingestellt werden kann. Ein Vorteil der *Reflexionsrandbedingung* ist zwar ihr geringer numerische Aufwand, der jedoch durch den Nachteil aufgehoben wird, dass sich ihre Parameter

nicht direkt auf einen Druck in beliebigen Geometrien abbilden lassen und lässt einen Einsatz in systematischen Optimierungsprozessen nicht zu.

In Kapitel 4 wird die bei einer maximalen *Reynolds Zahl* von  $\text{Re} = 5.4$  experimentell beobachtete Aggregation 335 suspendierter  $150\mu\text{m}$  großen Polystyrol Kugelchen mit *DPD* simuliert. Experiment und Simulation werden durch die dimensionslosen Zahlen *Reynolds Zahl*, *Peclet Zahl*, *Mach Zahl* und dem Widerstandsbeiwert für sphärische Objekte verglichen. Die Längenskalen sind durch einen Faktor  $1r_c = 30\mu\text{m}$  gekoppelt. Die *Peclet Zahl* lässt sich zu  $\text{Pe} \approx 2300$  bestimmen und ist ausreichend groß, dass thermische Bewegungen der Kugelchen vernachlässigt werden können. In einem Bereich der *Reynolds Zahl* zwischen 0.0 bis 7.5 stimmt das hydrodynamische Flussprofil mit numerischen *CFD* Simulationen und analytische Berechnungen überein. Ebenso stimmt der hydrodynamische Widerstand der simulierten *DPD* Kugelchen ( $d = 5r_c$ ) in einem Bereich von  $0.1 < \text{Re} < 10.0$  mit der analytischen Beschreibung überein.

*Teil II* dieser Arbeit zeigt in Kapitel 5 den auf *Gebietszerlegung* basierenden Parallelisierungsansatz, neue Simulationskonzepte und die Struktur des Simulationscodes. Die neuen Konzepte der *Multi-Species Identification* und *Master-Objekte* erlauben für komplexe Vielkörper Simulationen eine Vereinfachung des Programmcodes. Das *Multi-Species Identification* Konzept kodiert Materialparameter und Indizierungen von Objekten in einen Wert und erlaubt unabhängig von der Komplexität der Problemstellung eine effiziente Verwaltung beider Parameter. Das *Master-Objekte* Konzept für *Quaternionen* vereinfacht die Simulation unterschiedlich geformter Objekte durch eine initiale Objektdefinition und der anschließend Berechnung von lediglich Änderungen bezüglich dieser Anfangsorientierung.

Abschließend zeigt Kapitel 6 die Flexibilität des entwickelten Programmcodes auf unterschiedlichen Plattformen. Diese reichen von einem Opteron Cluster mit 12 CPUs bis zu einem NEC Xeon Cluster mit 400 CPUs im Vergleich zu einem Shared Memory System. Auf 64 CPUs erreicht der entwickelte Code ein lineares *Scale-up* von nahezu 70% mit ca. 100 Million berechneten Partikeln und von etwa 74% mit 1.5 Million Partikeln auf 16 CPUs. Ein *Speed-up* von 185% wurde mit 64 CPUs und 1.5 Million Partikeln gemessen. Die Performanz ist mit einer *zeitabhängigen* Lastbalancierung optimiert, die sowohl für Fluid Partikel als auch für beliebig große Objekte geeignet ist und unabhängig von auftretenden Dichteunterschieden arbeitet. Für einen getesteten Dichteunterschied von  $\rho = 1$  bis 29 konnte die Simulationsgeschwindigkeit um einen Faktor 14 im Vergleich zu einer äquidistanten Gebietszerlegung erhöht werden.





# Publications

Parts of this work have been published at the following journals and conferences:

Note that in 2007 my family name has changed from **Glatzel** to **Steiner**.

## Publications related to this work

### Journals

**T. Steiner**, C. Cupelli, R. Zengerle, and M. Santer, *Simulation of Advanced Microfluidic Systems with Dissipative Particle Dynamics*, submitted to Microfluidics and Nanofluidics.

C. Cupelli, B. Henrich, **T. Glatzel**, R. Zengerle, M. Moseler, and M. Santer, *Dynamic Capillary Wetting Studied with Dissipative Particle Dynamics*, New Journal of Physics 10, DOI:10.1088/1367-2630/10/4/043009, 2008, 043009.

### Conferences

**T. Glatzel**, C. Cupelli, U. Kuester, R. Zengerle, and M. Santer, *3D-Simulations Of Aggregating Beads In Microfluidic Chambers On High Performance Computers Compared To Experiments*, in Proc. International Conference on Miniaturized Systems for Chemistry and Life Sciences ( $\mu$ TAS), 5-9 November, Tokyo, Japan (2006), pp. 53 - 55.

**T. Glatzel**, C. Cupelli, U. Kuester, R. Zengerle, M. Santer, *Aggregating Beads in Microfluidic Chambers on High Performance Computers Compared to Experiments*, in Proc. International Conference Multiscale Materials Modeling (MMM), 18-22 September, Freiburg, Germany (2006), pp. 54 - 56.

C. Cupelli, B. Henrich, **T. Glatzel**, M. Moseler, R. Zengerle, and M. Santer, *Capillary Impregnation of Nano Pores*, in Proc. International Conference Multiscale Materials Modeling (MMM), 18-22 September, Freiburg, Germany (2006), pp. 37 - 40.

M. Santer, M. Moseler, C. Cupelli, B. Henrich, A. Wonisch, **T. Glatzel**, R. Zengerle, *Dissipative Particle Dynamics as a Practical Simulation Tool for Nanofluidic Applications*, Proc. First International Nanofluidics Workshop, 18-20 April, Boekelo, The Netherlands (2005).

## Other Publications, not directly linked to this thesis

### Patents

J. Ducr  e, R. Zengerle, T. Brenner, **T. Steiner**, *Liquid-Handling Apparatus Having a Liquid Switch and Method for Handling Liquids*, (U.S. Application No.: 10/957,950)

R. Zengerle, J. Ducr  e, H.P. Schlosser, T. Brenner, **T. Glatzel**, *Mischervorrichtung und Verfahren zum Mischen von zumindest zwei Fl  ssigkeiten*, (Veröffentlichungs-Nr.: DE000010361411A1)

J. Ducr  e, R. Zengerle, **T. Glatzel**, T. Brenner, *Vorrichtungen und Verfahren zum Erzeugen von Fluidanordnungen aus Fluiden*, (Veröffentlichungs-Nr.: DE000010356369A1)

### Journals

**T. Glatzel**, C. Litterst, C. Cupelli, T. Lindemann, C. Moosmann, R. Niekrawietz, W. Streule, R. Zengerle, and P. Koltay, *Computational Fluid Dynamics (CFD) Software Tools for Microfluidic Applications - A Case Study*, Computers & Fluids 37, Vol. 3, (2008), pp. 218 - 235.

J. Ducr  e, T. Brenner, S. Haeberle, **T. Glatzel**, R. Zengerle, *Multilamination of Flows in Planar Networks of Rotating Microchannels*, Microfluidics and Nanofluidics, 2, (2006).

J. Ducr  e, S. Haeberle, T. Brenner, **T. Glatzel**, R. Zengerle, *Patterning of Flow and Mixing in Rotating Radial Microchannels*, Microfluidics and Nanofluidics, 2, (2006).

T. Brenner, **T. Glatzel**, R. Zengerle, J. Ducr  e, *Frequency-dependent Transversal Flow Control in Centrifugal Microfluidics*, Lab on a Chip, (2005).

---

## Conferences

J. Ducr  e, H.P. Schlosser, S. Haeberle, **T. Glatzel**, T. Brenner, R. Zengerle, *Centrifugal Platform for High-Throughput Reactive Micromixing*, in Proc. International Conference on Miniaturized Systems for Chemistry and Life Sciences ( $\mu$ TAS), 26-30 September, Malm  , Sweden, (2004), pp. 554 - 556.

J. Ducr  e, T. Brenner, **T. Glatzel**, R. Zengerle, *Ultrafast Micromixing by Coriolis-Induced Multilamination of Centrifugal Forces*, in Proc. Actuator, 14-16 June, Bremen, Germany (2004), pp. 533 - 536.

J. Ducr  e, T. Brenner, **T. Glatzel**, R. Zengerle, *A Coriolis-Based Split-and-Recombine Laminator for Ultrafast Mixing on Rotating Disks*, in Proc. International Conference on Miniaturized Systems for Chemistry and Life Sciences ( $\mu$ TAS), October 5-9, Squaw Valley, California, USA (2003), pp. 603 - 606.

T. Brenner, **T. Glatzel**, R. Zengerle, J. Ducr  e, *A Flow Switch Based on Coriolis Force*, in Proc. International Conference on Miniaturized Systems for Chemistry and Life Sciences ( $\mu$ TAS), October 5-9, Squaw Valley, California, USA (2003), pp. 903 - 906.

J. Ducr  e, **T. Glatzel**, T. Brenner, R. Zengerle, *Coriolis-Induced Flow Control for Micro- and Nanofluidic Lab-on-a-disk Technologies*, in Proc. International Forum on Micro Nano Integration (MINIT), 3-4 December, Potsdam, Germany (2003), pp. 147 - 153.

J. Ducr  e, **T. Glatzel**, T. Brenner, R. Zengerle, *Coriolis-Induced Flow Control in Centrifugal Microfluidics*, in Proc. NanoTech, 25-27 November, Montreux, Switzerland (2003).

J. Ducr  e, T. Brenner, **T. Glatzel**, R. Zengerle, *Coriolis-Induced Switching and Mixing of Laminar Flows in Rotating Microchannels*, in Proc. Micro.tec, 14-15 October, Munich, Germany (2003), pp. 397 - 404.



# Glossary

Parameter	Description
$A_{ij}$	Repulsion amplitude for conservative force
$\mathbf{a}_i$	Acceleration of fluid particle $i$
$A(\mathbf{q})$	Matrix of rotation for quaternions
$B_{ij}$	(MDPD)
$C_d$	Drag coefficient
$D_{dif}$	Diffusion coefficient
$\mathbf{e}_{ij}$	Unit vector
$F$	Force
$\mathbf{F}_i$	Total force acting on fluid particle $i$
$\mathbf{f}_{ij}^C$	Pairwise conservative force acting between particle $i$ and $j$
$\mathbf{f}_{ij}^D$	Pairwise dissipative force acting between particle $i$ and $j$
$\mathbf{f}_{ij}^R$	Pairwise random force acting between particle $i$ and $j$
$\tilde{\mathbf{f}}_{ij}^R$	Random force with tensorial structure (FPM)
$\mathbf{f}_{ij}^{D,t}$	Translational part of dissipative force (FPM)
$\mathbf{f}_{ij}^{D,\omega}$	Rotational part of dissipative force (FPM)
$F^B$	Body force
$\mathbf{g}$	Gravitational force
$I$	Moments of inertia
$I_b$	Bead flow rate
$I_i$	Moments of inertia of fluid particle $i$
$J_V$	Volume flow rate
$k_B$	Boltzmann constant
$L$	Characteristic length for dimensional numbers

*Continued on next page*

## Glossary

---

Parameter	Description
$\mathbf{L}_{CM}$	Angular momentum of the rigid object
$m_i$	Mass of a fluid particle $i$
$M = \sum m_i$	Total mass of a rigid object
$\text{Ma}$	Mach number
$n_p$	Average number of fluid particles per processor
$N$	Total number of particles
$p$	Pressure
$p_r$	Reflecting probability of the reflecting boundary method
$\mathbf{p}_i$	Linear momentum of fluid particle $i$
$\mathbf{P}_{CM}$	Linear momentum of the rigid object
$\mathbf{q} = (\chi, \eta, \xi, \zeta)$	Quaternion with four parameter $\chi, \eta, \xi, \zeta$
$P$	Pressure tensor
$\nabla p$	Pressure gradient
$\text{Pe}$	Peclet number
$r_c = 1$	Cutoff distance
$r_d$ with $r_d < r_c$	Cutoff distance ( <i>MDPD</i> )
$R_i, R_j$	Radius of a spherical particle $i, j$
$\mathbf{r}_i$	Position of fluid particle $i$
$\mathbf{r}_{ij}$	Distance between fluid particle $i$ and $j$
$\dot{\mathbf{r}}_i$	Velocity of fluid particle $i$
$\ddot{\mathbf{r}}_i$	Acceleration of fluid particle $i$
$\mathbf{r}_{rel}$	Relative positions between fluid particles
$\mathbf{R}_{CM}$	Position of the center of mass of a rigid object with respect to the laboratory frame
$R(\theta, \phi, \psi)$	Matrix of rotation
$\text{Re}$	Reynolds number
$\widetilde{\text{Re}}$	Position dependent Reynolds number
$S_c$	Scale-up of a simulation
$S_p$	Speed-up of a simulation
$t$	Time

*Continued on next page*

---

Parameter	Description
$T$	Temperature
$T_{ij}$	Relative torque between particle $i$ and $j$ ( <i>FPM</i> )
$\mathbf{T}$	Torque with respect to $O$
$U$	Characteristic velocity for dimensional numbers
$\tilde{U}$	Average velocity for dimensional number
$\mathbf{v}_i$	Velocity of fluid particle $i$
$\mathbf{v}_{ij}$	Relative velocity between fluid particle $i$ and $j$
$\mathbf{V}_{CM}$	Velocity of rigid object
$X, Y, Z$	Coordinate axis of the laboratory frame
$x, y, z$	Coordinate axis of the body centered frame
$\gamma$	Damping constant
$\dot{\gamma}$	Shear rate
$\eta$	Shear viscosity
$\rho$	Density
$\bar{\rho}$	Local density ( <i>MDPD</i> )
$\sigma$	Amplitude of the random variable $\xi_{ij}$
$\xi_{ij}$	Random variable with Gaussian distribution and unit variance
$\omega$	Angular velocity
$\omega_i$	Angular velocity of particle $i$ ( <i>FPM</i> )
$\boldsymbol{\Omega}_q$	Angular velocity in quaternion description
$\psi, \phi, \theta$	Euler angle

---



# Contents

<b>Summary</b>	<b>v</b>
<b>Zusammenfassung</b>	<b>vii</b>
<b>Publications</b>	<b>xii</b>
<b>Glossary</b>	<b>xv</b>
<b>1 Introduction</b>	<b>1</b>
1.1 Simulations of Complex Microfluidic Phenomena in Life Science	1
1.2 Top-Down Versus Bottom-Up Approaches in FP Simulations . . . . .	4
1.3 DPD as a Framework for Mesoscale Simulations . . . . .	11
1.4 Aim And Structure of This Work . . . . .	13
<b>Part I: Fluid Particle Methods for Microfluidic Applications</b>	<b>15</b>
<b>2 Theory and Foundations of Fluid Particle Approaches</b>	<b>17</b>
2.1 Equation of Motion, Thermostats and Equation of State . . . . .	17
2.2 Additional Degrees of Freedom . . . . .	19
2.3 User Defined Equation of State - Multi-Body DPD . . . . .	21
2.4 Compound Objects with Quaternion Dynamics . . . . .	23
2.5 Integrating the Equation of Motion for Fluid Particles and Objects	28
<b>3 Extracting Fluid Properties and Setting Boundary Conditions</b>	<b>35</b>
3.1 Measuring Transport Parameters: Viscosity as an Example . . . . .	35
3.2 Pressure Boundary Conditions . . . . .	43
3.3 Validating the Reflecting Boundary and Gravitational Method	46
3.4 Hydrodynamic Behavior in DPD . . . . .	53
<b>4 Bead Aggregation in Microfluidic Structures</b>	<b>57</b>
4.1 From Design to Simulation . . . . .	57
4.2 Assessment of the Simulation . . . . .	62

4.3	Flow Field in Confined Geometries . . . . .	66
4.4	The Hydrodynamic Drag on a Bead . . . . .	70
4.5	Influence of Geometry on Flow Fields and Bead Aggregation . . . . .	72
4.6	Bead Aggregation: Simulation Versus Experiment . . . . .	74
<b>Part II: Parallelization for High-Performance Computing</b>		<b>81</b>
<b>5</b>	<b>Customizing the Simulation Approach</b>	<b>83</b>
5.1	Parallelization With Domain Decomposition . . . . .	83
5.2	Multi-Processor Procedures for Point Particles . . . . .	89
5.3	Assign Multiple Material Properties to Species . . . . .	93
5.4	Efficient Handling of Objects in Simulations . . . . .	102
5.5	Distributed Memory Versus Shared Memory Parallelization . . . . .	105
<b>6</b>	<b>Performance Optimization of the Simulation Code</b>	<b>107</b>
6.1	Cell Indexing Arrays and Verlet Skins . . . . .	107
6.2	Dynamic Load Balancing Procedures . . . . .	110
6.3	Performance of Different Load Balancing Schemes . . . . .	114
6.4	Performance Across Different Computer Platforms . . . . .	118
<b>7</b>	<b>Conclusion</b>	<b>125</b>
<b>Bibliography</b>		<b>129</b>
<b>Appendix</b>		<b>147</b>
<b>A</b>	<b>Structure of the Simulation Code</b>	<b>149</b>
<b>B</b>	<b>Subroutines of the Main Program</b>	<b>157</b>
<b>C</b>	<b>Quaternion Subroutines</b>	<b>173</b>
<b>D</b>	<b>Load Balancing Subroutines</b>	<b>175</b>
<b>E</b>	<b>Multi-Species Identification Subroutines</b>	<b>183</b>
<b>Acknowledgments</b>		<b>185</b>