

PSE Molekulardynamik - Entwicklung eines Molekulardynamik-Simulators

Thermostat; Linux-Cluster

Wolfgang Eckhardt

9. Dezember 2011



Übersicht

Zeitplan

Thermostat

LRZ Linux-Cluster

Zeitplan

- Blatt 4: Abgabe zum 12. Januar
 - Thermostat
 - Periodische Randbedingungen
 - Rayleigh-Taylor Instabilität
 - Fallender Tropfen
 - Performance Messung / Verbesserung
- Blatt 5: Abgabe zum 2. Februar
 - Simulation einer Membran
 - Shared-Memory Parallelisierung mit OpenMP

Thermostat

Zusammenhang zwischen Temperatur und kinetischer Energie (ungeordnete Teilchenbewegung):

$$E_{kin} = \frac{\text{dim}N}{2} T$$

mit

$$E_{kin} = \sum_{\text{particles } i} \frac{1}{2} m v_i^2$$
$$T = \frac{2E_{kin}}{3N} = \frac{2 \sum_{\text{particles } i} \frac{1}{2} m v_i^2}{3N}$$

Einstellen der gewünschten Temperatur durch Skalierung der Teilchengeschwindigkeiten:

$$\beta_\gamma = \sqrt{\frac{E_{kin}^D}{E_{kin}}}$$

LRZ Linux-Cluster

- Webseite: <http://www.lrz.de/services/compute/linux-cluster/>
- Login: ssh *kennung@lx64ia2.lrz.de*
- Verfügbare Programme / Compiler / Bibliotheken werden über Module verwaltet:
 - module list
 - module avail
 - module (un)load
- Auf Login-Knoten nur kürzere Programmläufe (mit 1 / wenigen Prozessen)! Sonst über Batch-Job:
 - qsub
 - qstat
 - sge-jobcheck
- Vorsicht bei erzeugten Dateien (Plattenplatz wird mit gesamtem Projekt geteilt!)