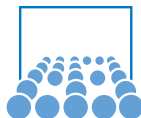


PSE Molekulardynamik - Entwicklung eines Molekulardynamik-Simulators

Molekulardynamik-Simulation: Anwendungen und Parallelisierung

Wolfgang Eckhardt

13. Januar 2011



Übersicht

Optimierungsmöglichkeiten

Anwendung 1: Kristallisation von Argon

Optimierungsmöglichkeiten

Sprachmittel:

- Const-Schlüsselwort
- Inlining
- Return Value Optimisation
- Runtime Type Information (RTTI) und Exceptions:
-fno-rtti -fno-exceptions
- Templatisierung

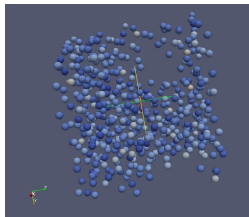
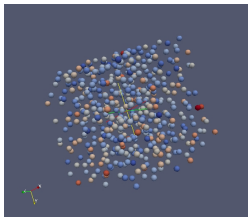
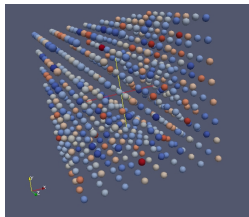
Algorithmisch:

- Molekül-Typ
- Abstand übergeben / mit quadratischem Abstand rechnen?

Compiler:

- Compiler-Optionen / "besserer" Compiler
- Profile Guided Optimisation

Anwendung 1: Kristallisation von Argon

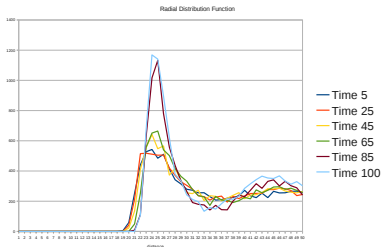
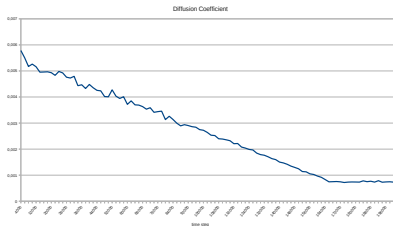


- Langsames Abkühlen: Kristallisation
- Schnelles Abkühlen: Erstarren resultiert in Glaszustand

Wie kann man den Aggregatzustand eines Stoffs feststellen?

- Diffusion:
Bewegung eines Partikels in der Zeit $t - t_0$, gemittelt über alle Partikel (und evtl. über mehrere Zeitschritte):

$$\text{Var}(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \| x_i(t) - x_i(t_0) \|^2$$



- Radiale Paarverteilungsfunktion (Radial Pair Distribution Function - RDF):
Wahrscheinlichkeit, im Abstand r um ein Molekül herum ein zweites Molekül zu finden
Bestimmung:

- Diskretisiere Abstand $0 \leq r < r_{cutoff}$ in Intervalle der Länge δr :
- Zähle Molekülpaare, deren Abstand in Intervall $]r_i; r_i + \delta r]$ fällt
- Berechne lokale Dichte, indem die bestimmte Zahl durch das Volumen $\frac{4\pi}{3} \left((r_i + \delta r)^3 - r_i^3 \right)$ geteilt wird.