

PSE Molekulardynamik - Entwicklung eines Molekulardynamik-Simulators

Vorbesprechung

Wolfgang Eckhardt
Prof. Dr. H.-J. Bungartz

25. Juli 2011



Übersicht

Molekulardynamik - Beispiele

Molekulardynamik - Herausforderungen

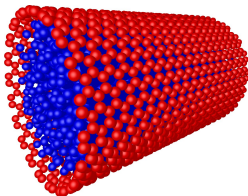
Praktikumsinhalt

Organisatorischer Ablauf

Was ist Molekulardynamik? - Beispiele

Simulation von Gasen, Flüssigkeiten oder Festkörpern, indem die Interaktion einzelner Moleküle betrachtet wird.

- nanoskalige Strömungen: Simulation von Strömungen durch Nanoröhrchen

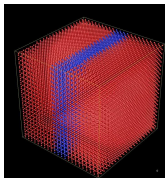


- Faltung von Proteinen (auch: ab-initio MD)
- Keimbildungsprozesse (Kondensation)

Allgemein wird Simulation da eingesetzt, wo Experimente gefährlich oder teuer oder gar unmöglich sind.

Molekulardynamik - Herausforderungen

- Größenordnungen



- Längenmaß Angström: $1\text{Å} = 10^{-10}\text{m} = 10\text{nm}$
- Typische Größe der Domain: 10 - 1000 Å.
- Typische Zeitschrittweite: 1 fs (10^{-15}s), $10^6 - 10^9$ Zeitschritte.
- $10^2 - 10^9$ Moleküle
- Rechenintensität
- Algorithmik

Praktikumsinhalt

- Entwicklung eines Molekulardynamik-Simulators in C++
 - Simulation von Gasen / Flüssigkeiten / Festkörpern
 - verschiedene Algorithmen
 - verschiedene Szenarien
 - Visualisierung
 - Effiziente / Hardware-bewusste Programmierung
 - evtl. parallele Programmierung mit OpenMP
- SW-Entwicklung im Team
- Umgang mit SW-Tools:
 - SVN
 - Eclipse CDT
 - Tests mit CppUnit
 - Dokumentation mit Doxygen
 - Debugger
 - ...

Organisatorischer Ablauf

- Entwicklung in Teams von 3 Studenten
- 5 - 6 Aufgabenblätter
- keine Prüfungen, dafür “aktives Mitarbeiten”, Vorstellen eigener Lösungen / Implementierungen, etc...
- Termin: Freitags, 12:15 - 13:45 Uhr
ab der 1. Vorlesungswoche