

# PSE Molekulardynamik: Entwicklung eines Molekulardynamik-Simulators

Vorbesprechung

Philipp Neumann, Nikola Tchipev  
Prof. Dr. Hans-Joachim Bungartz

2. Juli 2015



# Übersicht

**Molekulardynamik - Beispiele**

**Molekulardynamik - Herausforderungen**

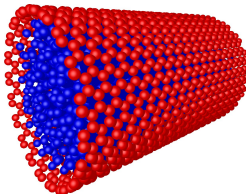
**Praktikumsinhalt**

**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)
- Aktuelles Beispiel: Nanofiltration

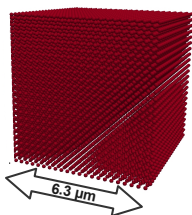
Allgemein wird Simulation da eingesetzt, wo Experimente gefährlich oder teuer oder gar unmöglich sind.

# Molekulardynamik - Herausforderungen

- Größenordnungen
  - Längenmaß Angström:  $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m} = 0.1 \text{ nm}$
  - Typische Größe der Domain: 10 - 1000 Å.
  - Typische Zeitschrittweite: 1 fs ( $10^{-15} \text{ s}$ ),  $10^6 - 10^9$  Zeitschritte.
  - $10^2 - 10^9$  Moleküle
  - Bsp: 1 Zeitschritt rechnet  $\approx 1 \text{ s}$ :  $10^6 \text{ s} \approx 277 \text{ h} \approx 11.5 \text{ d}$ .
- Rechenintensität
- Algorithmetik

## Beispiel: Weltgrößte Molekulardynamik-Simulation auf SuperMUC (Feb. 2013):

- Simulation auf 146.016 Cores mit  $4.125 \cdot 10^{12}$  Molekülen.
- Flüssiges Krypton: Würfel mit Kantenlänge  $l = 6.3 \mu\text{m}$



# Praktikumsinhalt

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

# Organisatorischer Ablauf

## Praktikum:

- Entwicklung in Teams von 3 Studenten
- 5 Aufgabenblätter
- keine Prüfungen, dafür “aktives Mitarbeiten”:  
→ Vorstellen eigener Lösungen / Implementierungen, etc...
- Termin: Freitags, 12:15 - 13:45 Uhr  
ab der 1. Vorlesungswoche  
→ alle 2-3 Wochen: Besprechung/Blattvorstellung

**”Hausaufgabe” für die Ferien: C++-Tutorial anschauen ;).**

# Fragen?

