

PSE Molekulardynamik: Entwicklung eines Molekulardynamik-Simulators

Vorbesprechung

Nikola Tchipev
Prof. Dr. Hans-Joachim Bungartz

30. Juni 2016



Übersicht

Molekulardynamik - Beispiele

Molekulardynamik - Herausforderungen

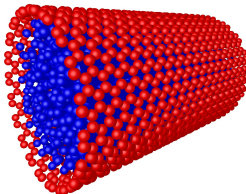
Praktikumsinhalt

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

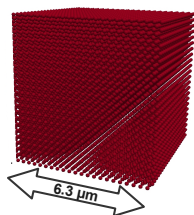
Allgemein wird Simulation da eingesetzt, wo Experimente gefährlich oder teuer oder gar unmöglich sind.

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} 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
- Algorithmen

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:
 - Git
 - Eclipse CDT
 - Tests mit CppUnit
 - Dokumentation mit Doxygen
 - Debugger
 - VTune
 - ...

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?

