

# Praktikum High Performance Computing

## Projektaufgabe Molekulardynamik

Wolfgang Eckhardt  
Thomas Auckenthaler

18. Januar 2011



# Übersicht

**MD-Simulation: Prinzipieller Ablauf**

**Zeitintegration**

**Kraftbestimmung - Lennard-Jones Potential**

**Kurzreichweitige Kräfte**

**MD – Implementierung**

## MD-Simulation: Prinzipieller Ablauf

- Gegeben: Moleküle mit Positionen  $x$  und Geschwindigkeiten  $v$  (sog. Phasenraum)
- Zwischen Molekülen wirken Kräfte
- Kraft auf ein Molekül  $i$ :

$$F_i = \sum_{i \neq j} F_{ij}$$

- Molekül wird gemäß diesen Kräften bewegt, d.h. eine neue Position und neue Geschwindigkeit werden bestimmt

$$F = m \cdot \ddot{x} \Rightarrow \ddot{x} = \frac{F}{m}$$

- Gewöhnliche Differentialgleichung mit Anfangsbedingungen:  $F = m\ddot{x}$ , gesucht  $x$  zu einem Zeitpunkt  $t$ .
- Wie bestimmt man die Kräfte?
- Wie bestimmt man Position  $x$  und Geschwindigkeit  $v$ ?

## Diskretisierung - Zeitintegration

$$F = m \cdot \ddot{x}$$

- Diskretisierung der Ableitungen durch Differenzenquotienten (aus Taylor-Reihe hergeleitet):

$$\frac{\delta x}{\delta t} = \frac{x(t + \delta t) - x(t - \delta t)}{2 \cdot \delta t} \quad (1)$$

$$= \frac{x^{n+1} - x^{n-1}}{2 \cdot \delta t} \quad (2)$$

$$\frac{\delta^2 x}{\delta t^2} = \frac{x^{n+1} - 2 \cdot x^n + x^{n-1}}{\delta t^2} \quad (3)$$

- Einsetzen in unsere DGL liefert

$$F_i^n = m \cdot \ddot{x}_i^n \quad (4)$$

$$= m \cdot \frac{x_i^{n+1} - 2 \cdot x_i^n + x_i^{n-1}}{\delta t^2} \quad (5)$$

$$x_i^{n+1} = 2 \cdot x_i^n - x_i^{n-1} + \delta t^2 \cdot F_i^n / m_i \quad (6)$$

## Diskretisierung - Zeitintegration

- Störmer-Verlet-Verfahren:

$$x_i^{n+1} = 2 \cdot x_i^n - x_i^{n-1} + \delta t^2 \cdot F_i^n / m_i \quad (7)$$

$$v_i^n = \frac{x_i^{n+1} - x_i^{n-1}}{2 \cdot \delta t} \quad (8)$$

- Velocity-Störmer-Verlet-Verfahren:

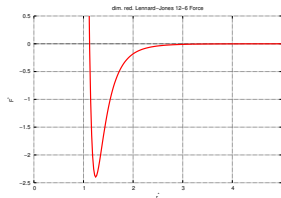
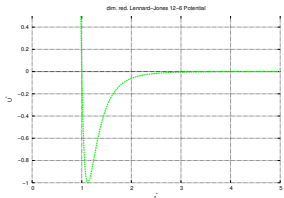
- (8) nach  $x^{n-1}$  auflösen und in (7) einsetzen liefert (9)
- weitere Umformungen von (7) und (8) ergeben (10):

$$x_i^{n+1} = x_i^n + \delta t \cdot v_i^n + \frac{F_i^n \cdot \delta t^2}{2 \cdot m_i} \quad (9)$$

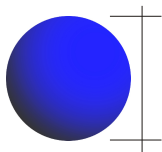
$$v_i^{n+1} = v_i^n + \frac{(F_i^n + F_i^{n+1}) \delta t}{2 \cdot m_i} \quad (10)$$

# Kraftbestimmung - Lennard-Jones Potential

- Potential  $U$  beschreibt potentielle Energie eines Körpers
- Kraft  $F = -\nabla U$
- Bsp.: Gewichtskraft / Lageenergie
- Hier: Lennard-Jones-12-6 Potential:  $U_{LJ}(r_{ij}) = 4\epsilon \left( \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right)$ 
  - $m = 6$ : van der Waals Anziehung (van der Waals Potential)
  - $n = 12$ : Pauli Repulsion (Softsphere Potential)
  - Modellierung von Gasen / Flüssigkeiten: (z.B. Edelgase wie Argon)
  - Kraft zwischen 2 Molekülen:  $F_{ij} = -\frac{\partial U(r_{ij})}{\partial r_{ij}} = \frac{24\epsilon}{r_{ij}} \left( 2 \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right)$



# LJ Atom-Parameter



atom	$\epsilon$ [ $1.38066 \cdot 10^{-23} \text{ J}$ ] <sup>a</sup>	$\sigma$ [ $10^{-1} \text{ nm}$ ] <sup>b</sup>
H	8.6	2.81
He	10.2	2.28
C	51.2	3.35
N	37.3	3.31
O	61.6	2.95
F	52.8	2.83
Ne	47.0	2.72
S	183.0	3.52
Cl	173.5	3.35
Ar	119.8	3.41
Br	257.2	3.54

<sup>a</sup>Boltzmann-Konstante:  $k_B := 1.38066 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}}$

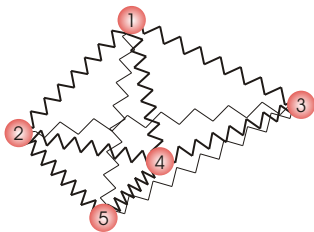
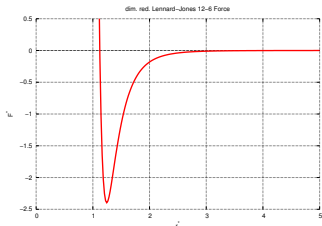
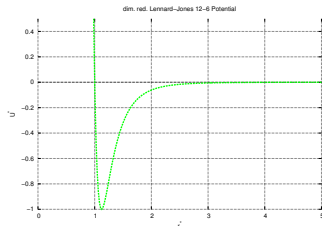
<sup>b</sup> $10^{-1} \text{ nm} = 1 \text{ \AA}$  (Ångström)

$\epsilon$  = Energyparameter

$\sigma$  = Längenparameter (vgl. van der Waals Radius)

→ Parameter Fitting mittels Experimenten

# Kurzreichweitige Kräfte

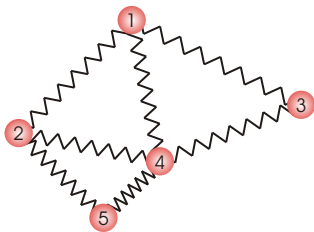
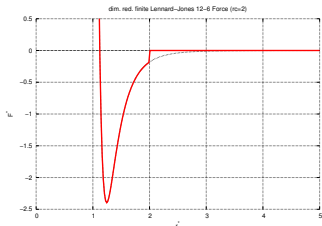
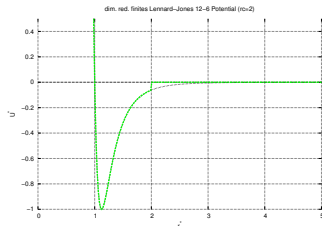


$F_{ij}$	Kraftmatrix				
-	$F_{12}$	$F_{13}$	$F_{14}$	$F_{15}$	
$-F_{12}$	-	$F_{23}$	$F_{24}$	$F_{25}$	
$-F_{13}$	$-F_{23}$	-	$F_{34}$	$F_{35}$	
$-F_{14}$	$-F_{24}$	$-F_{34}$	-	$F_{45}$	
$-F_{15}$	$-F_{25}$	$-F_{35}$	$-F_{45}$	-	

- Schneller Abfall der Kräfte mit zunehmender Entfernung  
volle Matrix mit  $\mathcal{O}(n^2)$ , überwiegend sehr kleinen Einträgen



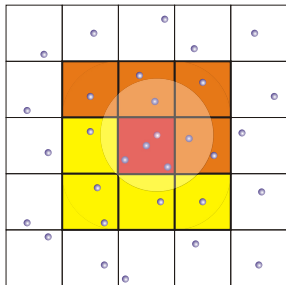
# Kurzreichweitige Kräfte



$F_{ij}$	Kraftmatrix				
-	$F_{12}$	$F_{13}$	$F_{14}$	0	
$-F_{12}$	-	0	$F_{24}$	$F_{25}$	
$-F_{13}$	0	-	$F_{34}$	0	
$-F_{14}$	$-F_{24}$	$-F_{34}$	-	$F_{45}$	
0	$-F_{25}$	0	$-F_{45}$	-	

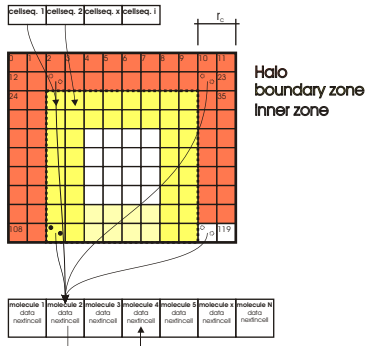
- Abschneideradius (cut-off radius) reduziert Berechnungsaufwand erheblich  
dünnbesetzte Kraftmatrix mit  $\mathcal{O}(n)$  Einträgen

## Klassischer Linked-Cell Algorithmus



- Moleküle sind in kubische Zellen mit Seitenlänge  $r_c$  eingeordnet
- Lediglich die Nachbarzellen müssen nach Interaktionspartnern durchsucht werden
- runtime:  $\mathcal{O}(n)$
- Nur die Hälfte der Nachbarzellen werden explizit durchlaufen (sog. Fortwärtznachbarn, 3. Newton'sches Gesetz)
- Datenstruktur wird in jedem Zeitschritt aktualisiert.

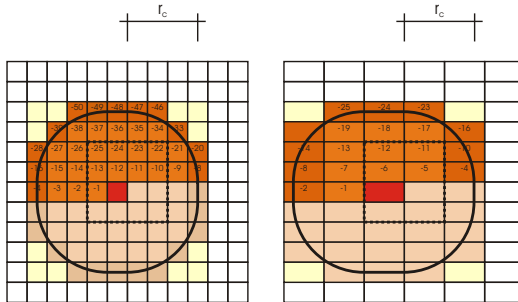
# Linked-Cell Algorithmus – Datenstruktur I



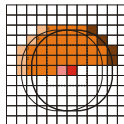
- Zellen werden in Array gespeichert
- Jede Zelle hält eine Liste mit den Molekülen, die in ihr enthalten sind
- Halo-Region:
  - Moleküle werden nach jeder Iteration gelöscht
  - für periodische Randbedingungen benötigt
- Boundary-Region: wird für reflektierende und periodische Randbedingungen benötigt.

- Reflektierende Randbedingungen: bewegt sich ein Partikel in den Halo, so wird eine Kraft orthogonal zum Rand aufaddiert
- Periodische Randbedingungen: die Domain wird periodisch fortgesetzt.
  - Partikel betreten Domain am gegenüberliegenden Rand.
  - Partikel des gegenüberliegenden Randes werden in Halo kopiert.

# Linked-Cell Algorithmus – Datenstruktur II



- Offset-Maske, um die Nachbarzellen zu bestimmen
- Cache-Effizienz wird durch die Bearbeitungsreihenfolge beeinflusst (Zeitliche Lokalität)



# Aufgabe: Parallelisierung einer Molekulardynamik-Simulation

Szenario: Rayleigh-Taylor Instabilität

## Sonstiges

Visualisierung: mit Paraview für das kleine Szenario (nicht zu viele Zeitschritte rausschreiben!)

### Weiterführendes Material zu MD:

- Folien zu Algorithmen des Wissenschaftlichen Rechnens II
- Griebel, Knappek, Zumbusch: Numerical Simulation in Molecular Dynamics, Springer Verlag