



Thermodynamik-Kolloquium, Bayreuth 05.10.2010

Molekulare Simulationen mit *ms2*

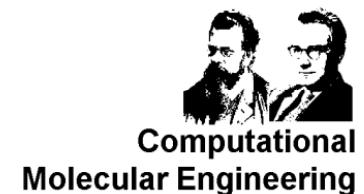
S. Deublein¹, G. Guevara-Carion¹,
M. Bernreuther², E. Elts³, J. Vrabec⁴, H. Hasse¹

¹ Lehrstuhl für Thermodynamik, TU Kaiserslautern

² Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart

³ Lehrstuhl für Wissenschaftliches Rechnen, TU München

⁴ Lehrstuhl für Thermodynamik und Energietechnik, Universität Paderborn

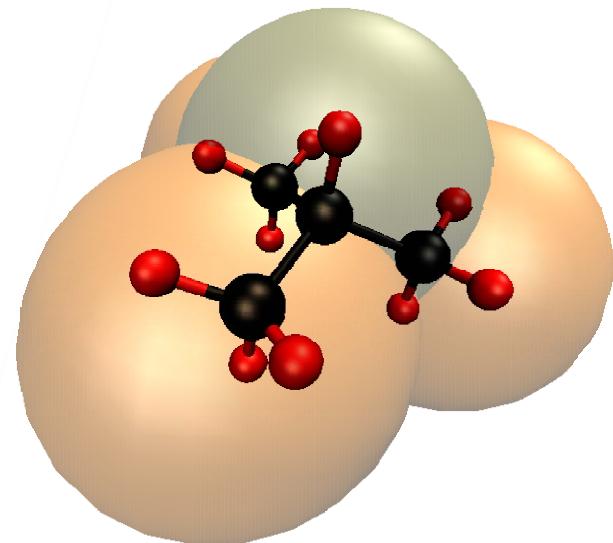




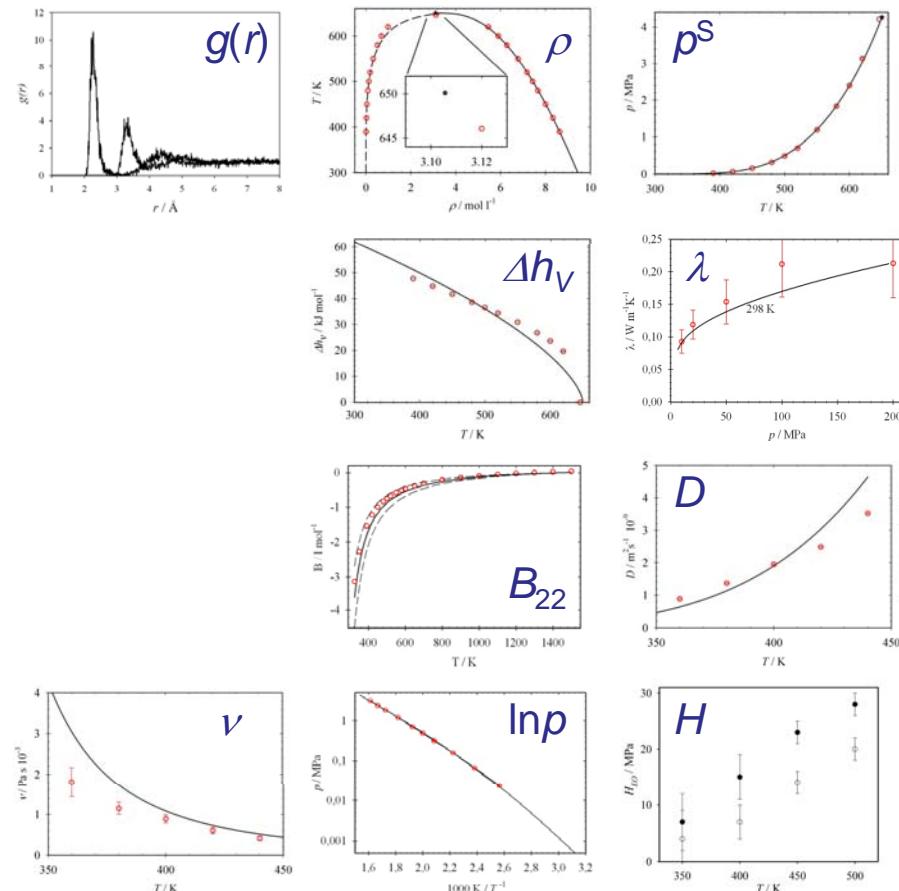
Molekulare Simulation

Molekulare Modelle

- ✓ Geometrie
- ✓ Elektrostatik
- ✓ Dispersion & Repulsion



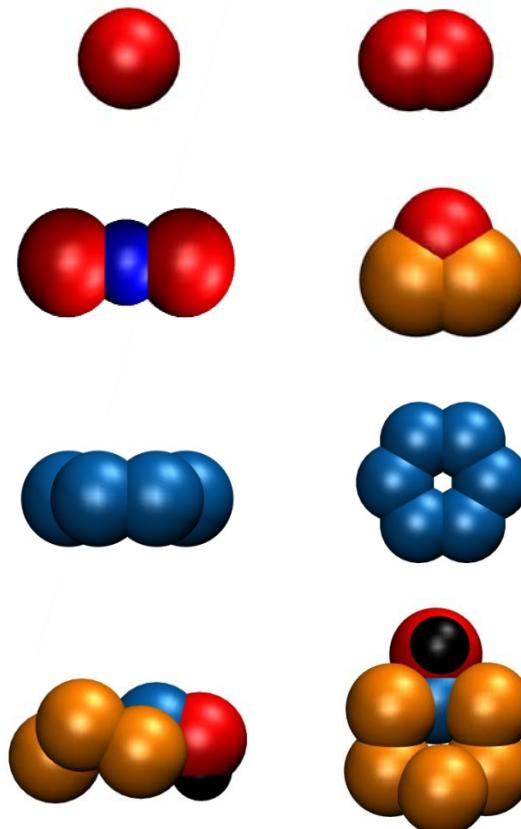
Thermodynamische Größen



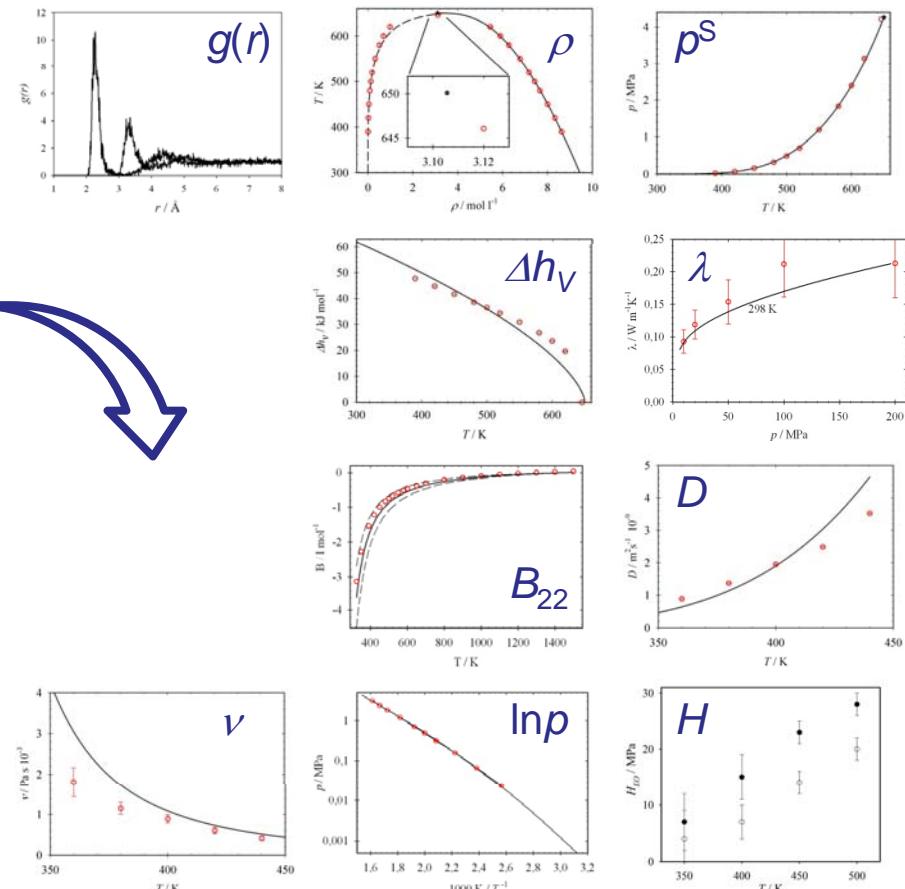


Molekulare Simulation

Molekulare Modelle



Thermodynamische Größen





ms2 – Ziele und Anforderungen

Anwendung:

- Berechnung aller gängigen thermodynamischen Zustandsgrößen
- Hochgenaue Ergebnisse (industrielle Anwendung)
- Einfaches User-Handling (GUI)
- Einfache Erweiterung
- Schnelle Antwortzeiten

Informationstechnologie:

- Niedriger Laufzeit
- Nutzbarkeit auf unterschiedlichen Hardwareplattformen
- Numerische Robustheit



Molekulare Simulationen mit *ms2*

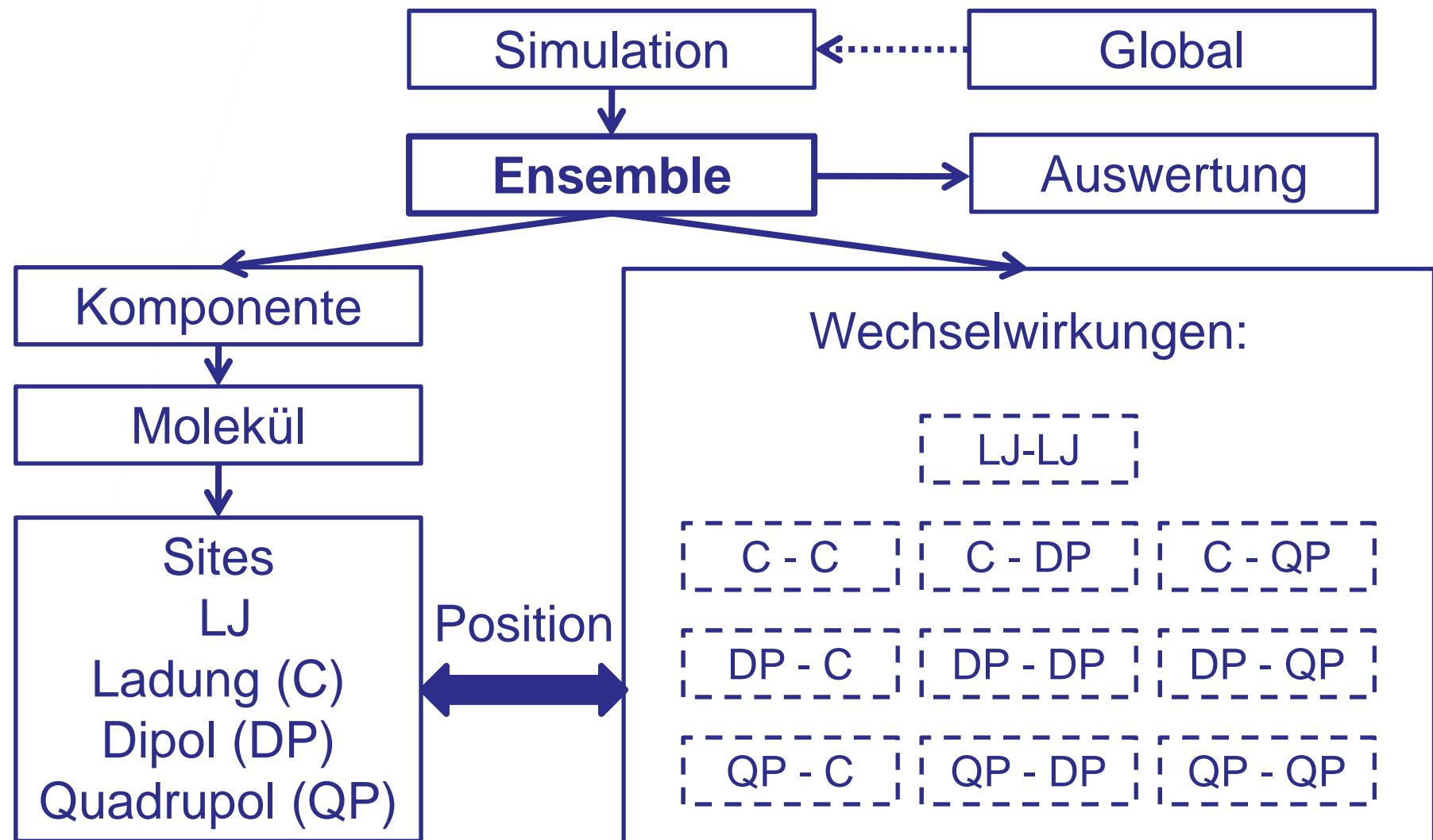
Simulationsbedingungen

- ✓ Molekulardynamik (MD) / Monte Carlo (MC)
- ✓ Reinstoffe / Mischungen
- ✓ Starre Moleküle
- ✓ Unterschiedliche Ensembles
- ✓ Grand Equilibrium Methode für VLE-Rechnung

Stoffeigenschaften:

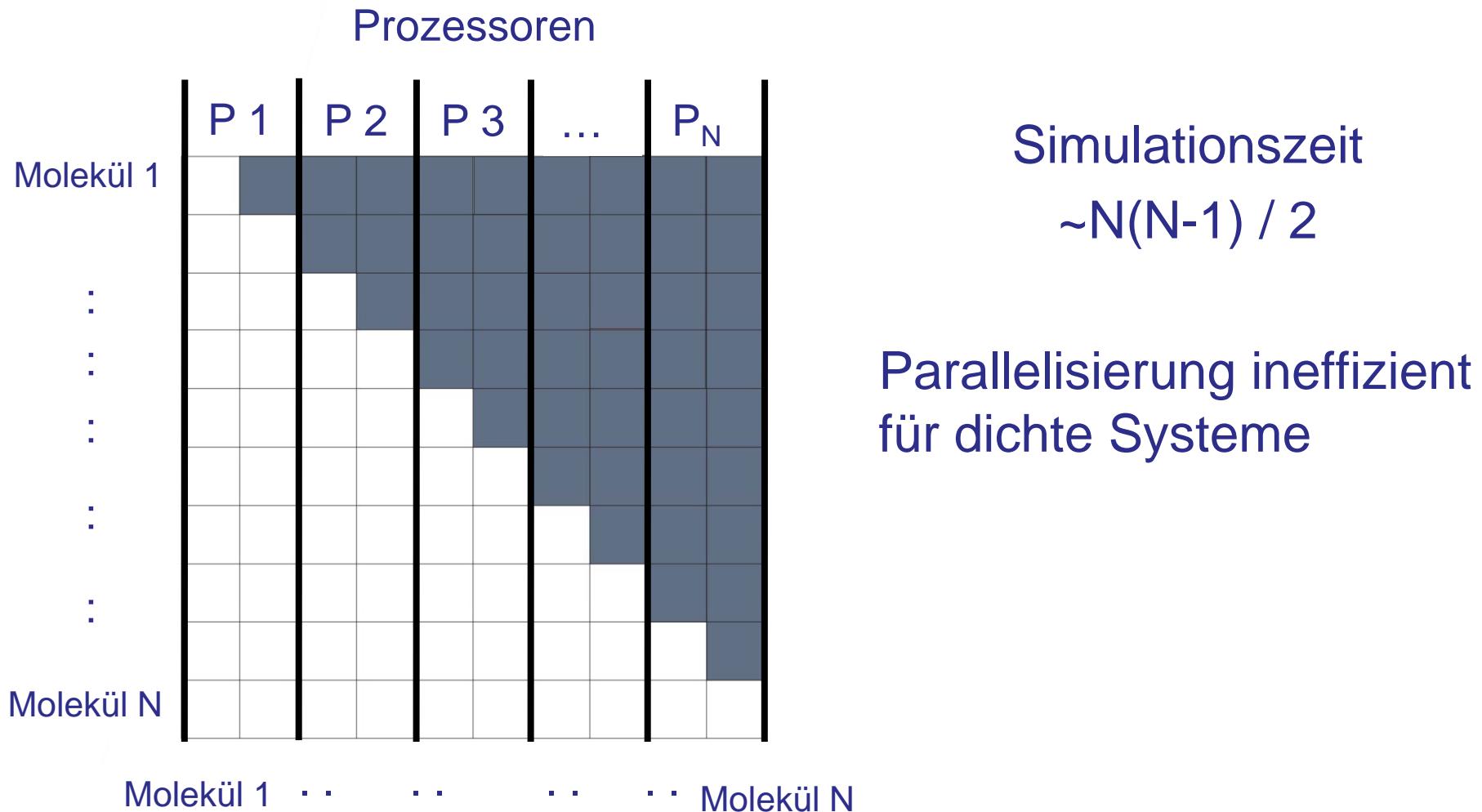
- ✓ Statisch: thermische, kalorische und entropische Größen
- ✓ Dynamisch: Transportgrößen (Diffusionskoeffizienten, Viskositäten) über Green-Kubo

ms2 – Code: Modularer Aufbau



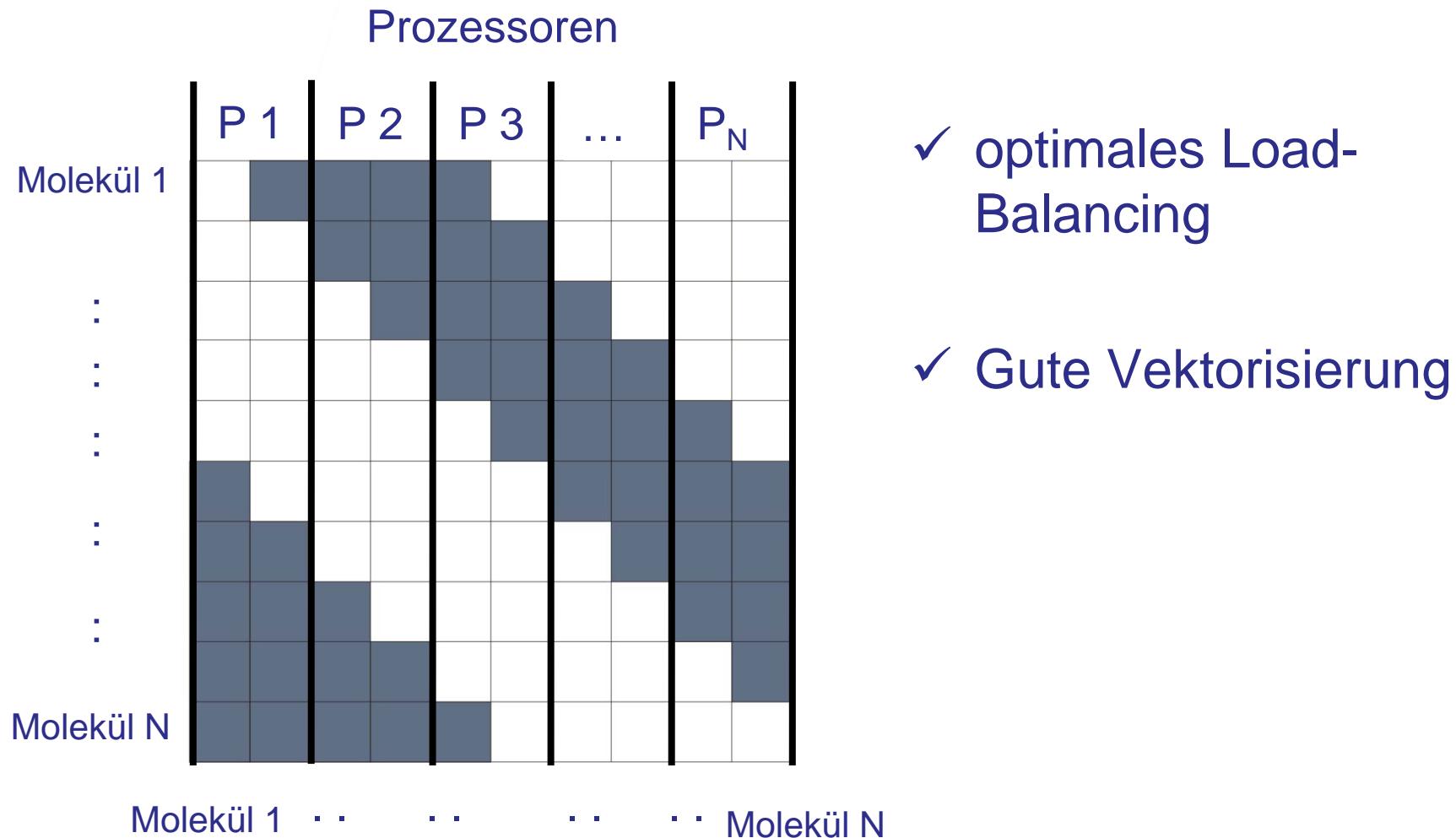


Parallelisierung MD – Trivial



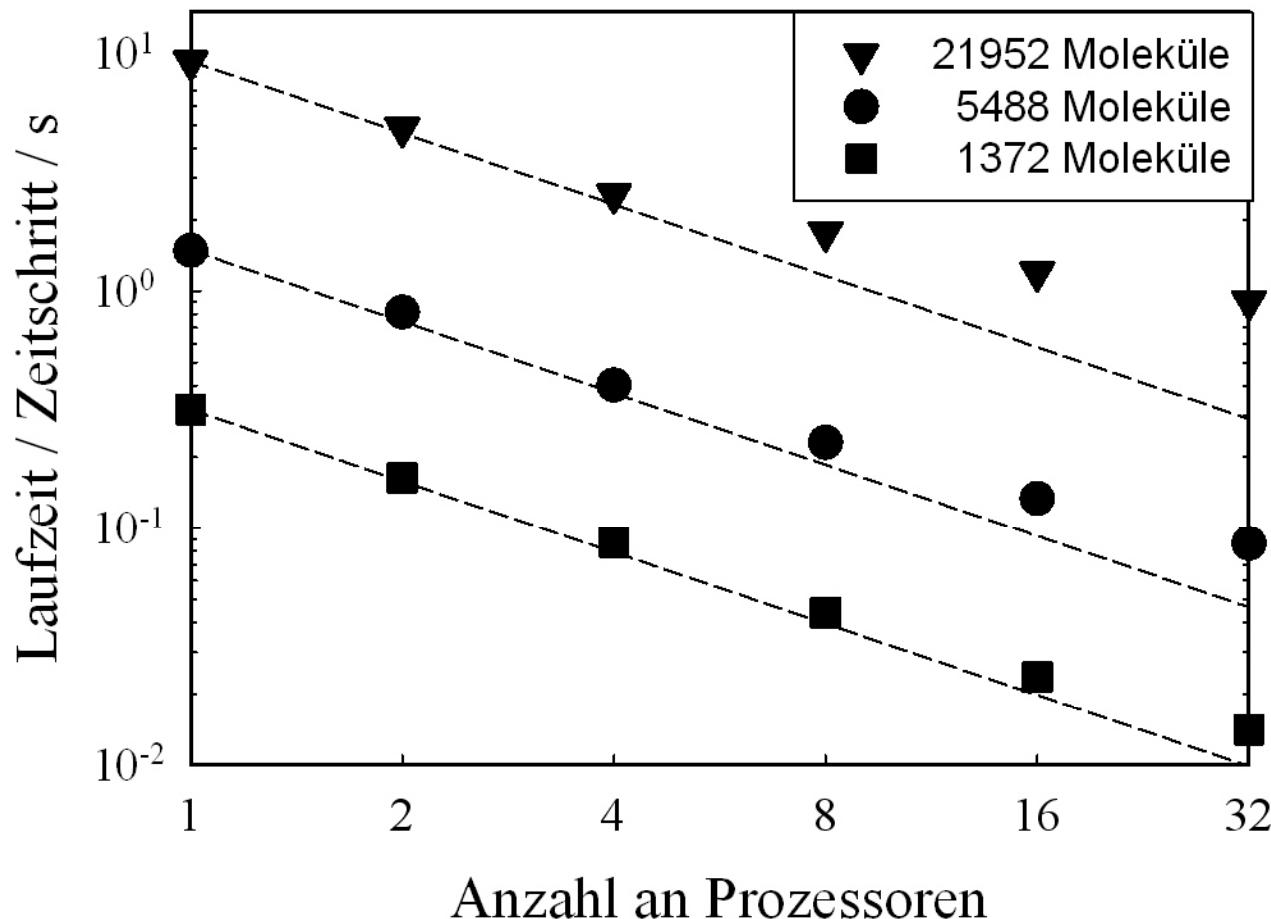


Parallelisierung – Force decomposition





MD – Speedup



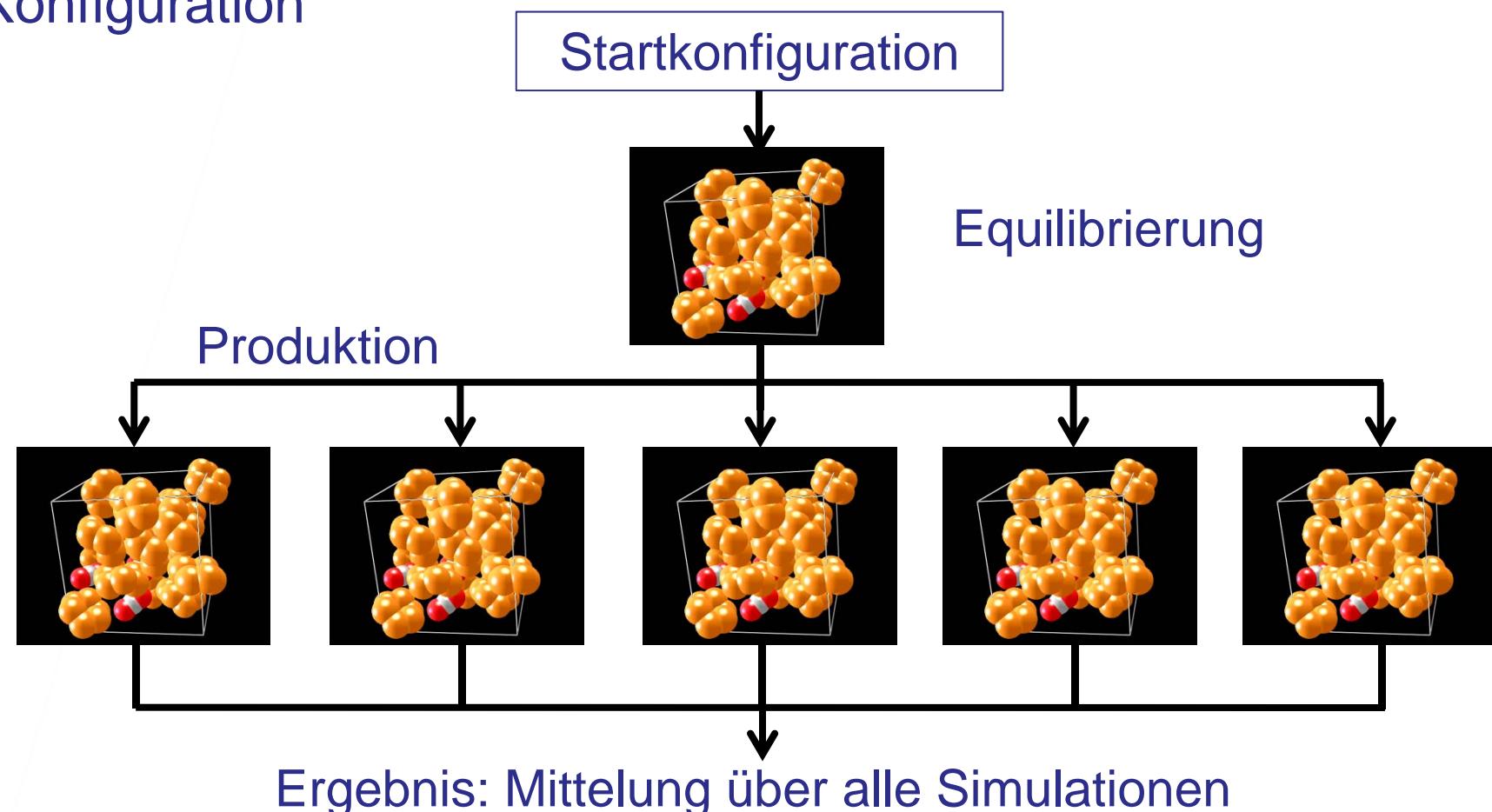
**Equimolare
Mischung
Ethanol+Methanol**

NVT, T = 298 K

✓ Skaliert gut bis
32 Prozessoren

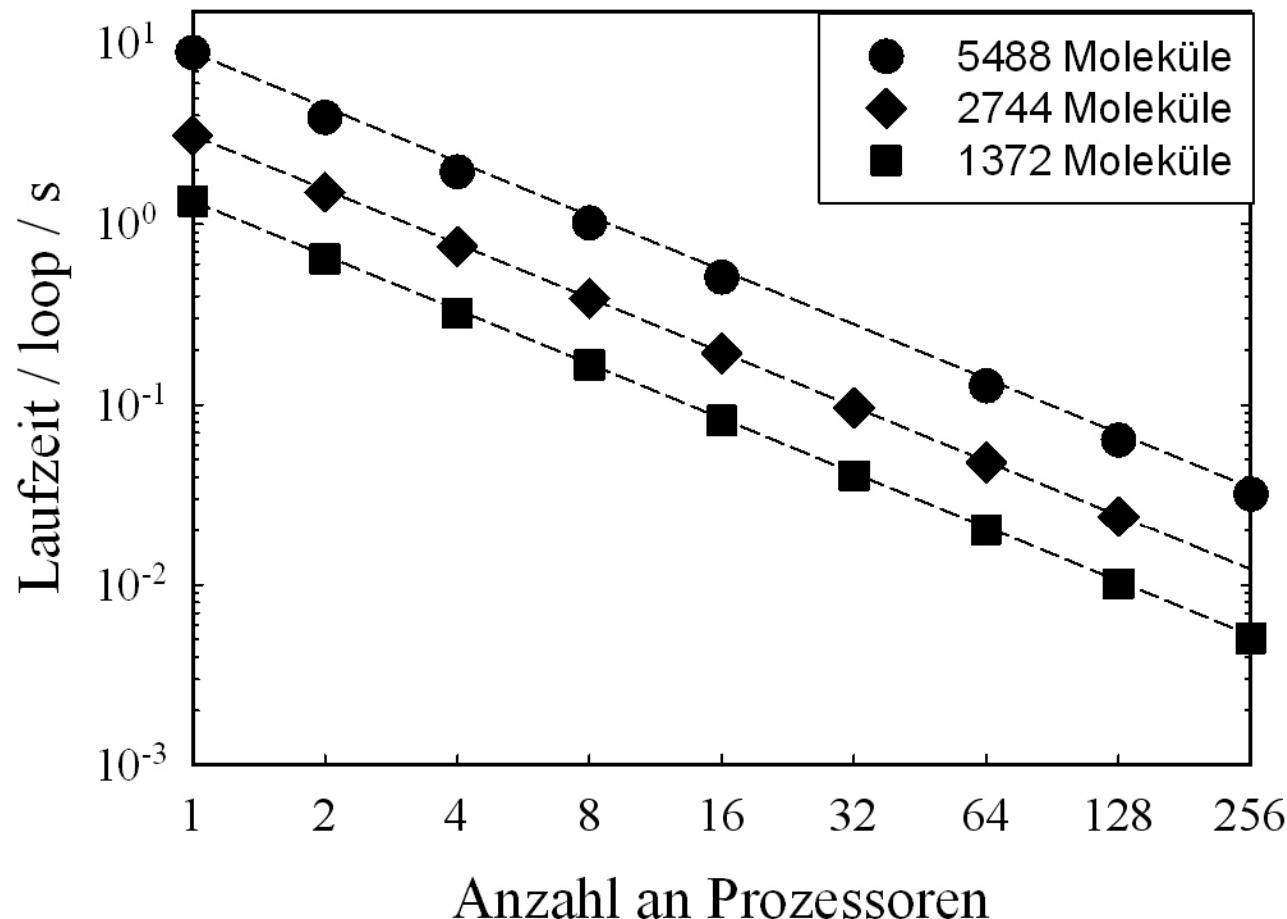
Parallelisierung MC: Optimalparallelisierung

Starten vieler Markov-Ketten, ausgehend von equilibrierter Konfiguration





MC – Speedup



**Equimolare
Mischung
Ethanol+Methanol**

NVT, T = 298 K

- ✓ Nahezu perfektes Skaling
- ✓ Unabhängig von der Teilchenzahl

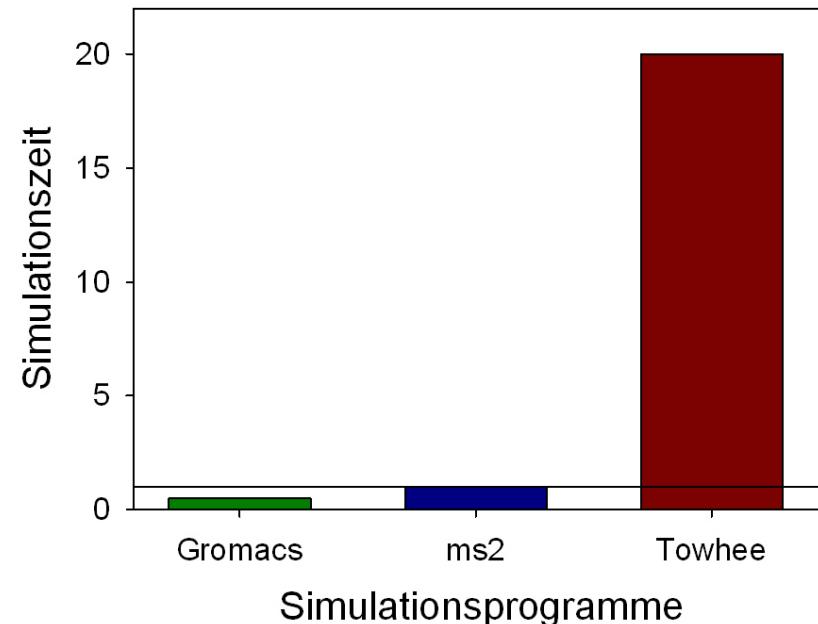


Vergleich mit anderen Simulations-Programmen – pVT-Verhalten

Equimolare Mischung aus Methanol + Ethanol mit 1372 Molekülen im NVT-Ensemble

- Molekulardynamik:
ms2 vs. Gromacs 4.0
- Monte Carlo:
ms2 vs. MCCCS Towhee

Basis: Gleiche Anzahl an Konfigurationen





Vergleich mit anderen Simulations-Programmen – VLE

Equimolare Mischung aus Methanol + Ethanol

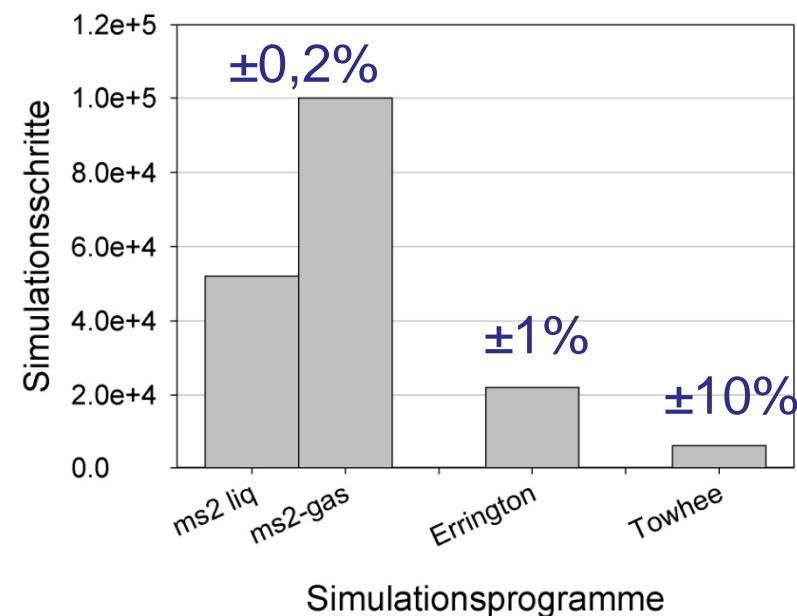
Flüssigphase: 1372 Moleküle

Gasphase: 500 Moleküle

Monte Carlo:

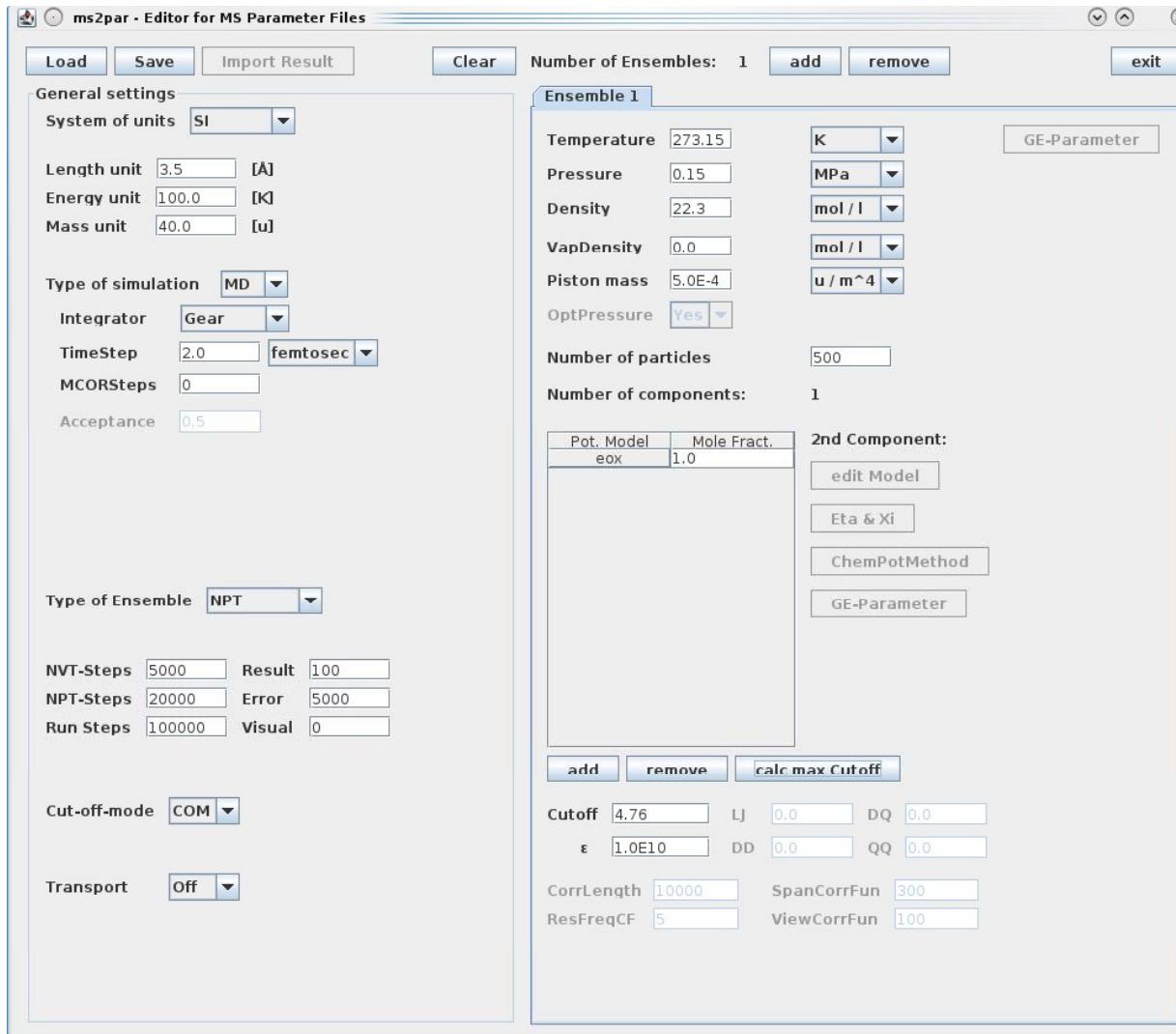
- *ms2* vs. MCCCS Towhee
- *ms2* vs. Errington

Basis: Gleiche Rechenzeit
(96 Stunden)





ms2-Eingabe: ms2par



- JAVA – basierend
- Generiert & Modifiziert Inputdaten für *ms2*
- Einfacher Einstieg für *ms2*-User

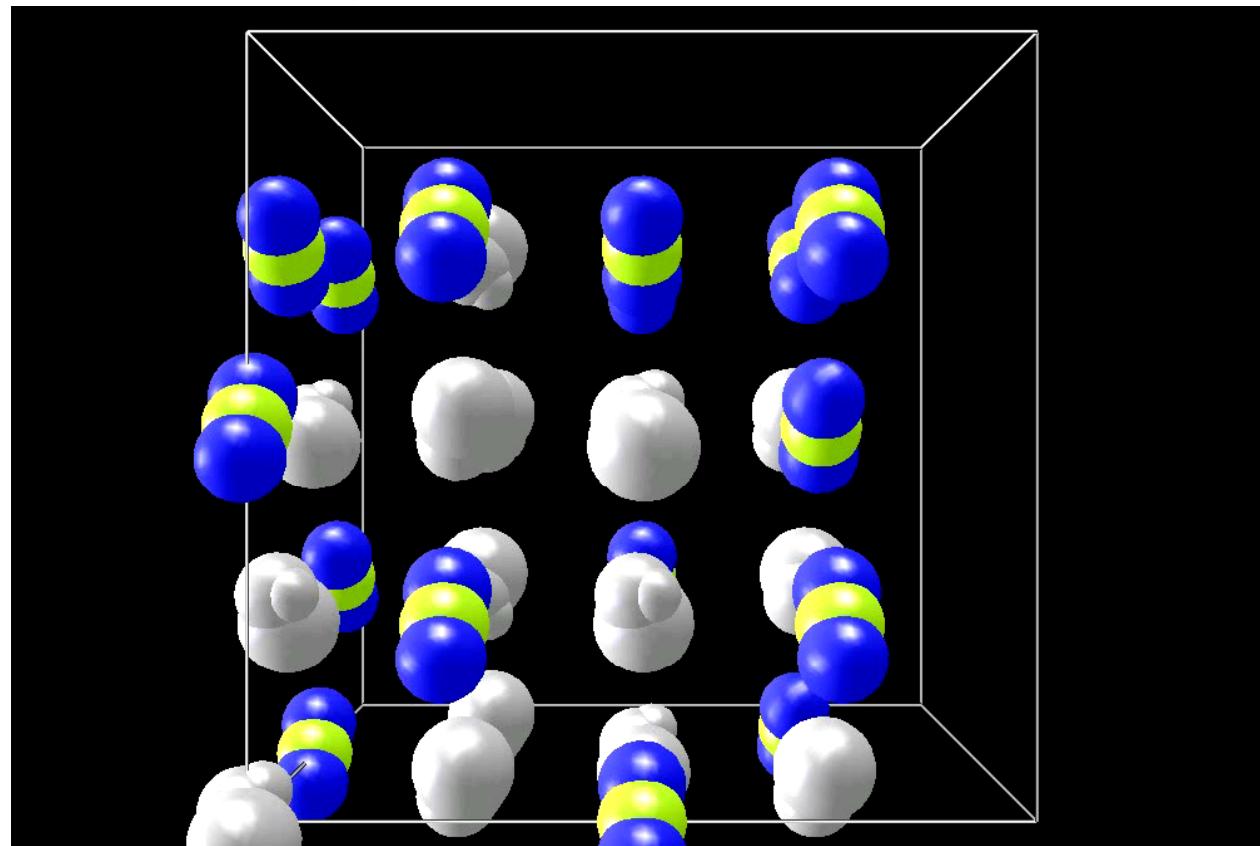


ms2-Auswertung: ms2chart



- JAVA – basierend
- Analyse „on the fly“
- Überblick über alle Ergebnisse
- Hilfreich bei vielen Simulationen

ms2-Visualisierung: ms2molecules



- OpenGL
- Visualisierung „on the fly“ möglich
- Rendering
- Snapshots und movies (avi) möglich



Zusammenfassung

- ✓ Neues Simulationstool zur Berechnung thermodynamischer Stoffgrößen
- ✓ Einfaches Handling der Simulationen mit GUI
- ✓ Schnelle Antwortzeiten / Lange Laufzeiten möglich
- ✓ Hohe Genauigkeit der Ergebnisse

- ✓ Frei verfügbar für akademische Nutzung unter
<http://www.ms-2.de>



Ausblick / Erweiterungen von *ms2*

Anwendung

- ✓ Erweiterung auf flexible Moleküle
- ✓ Berechnung langreichweiterer Wechselwirkungen
 - Ewald-Summation

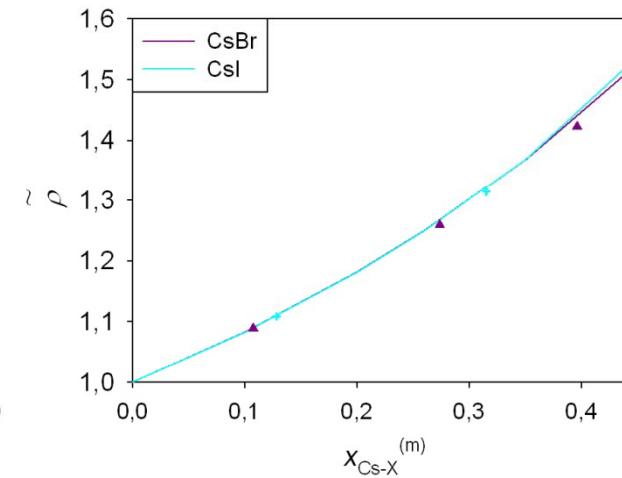
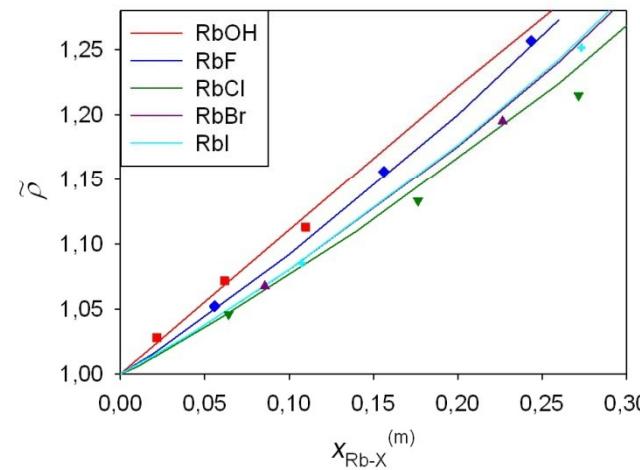
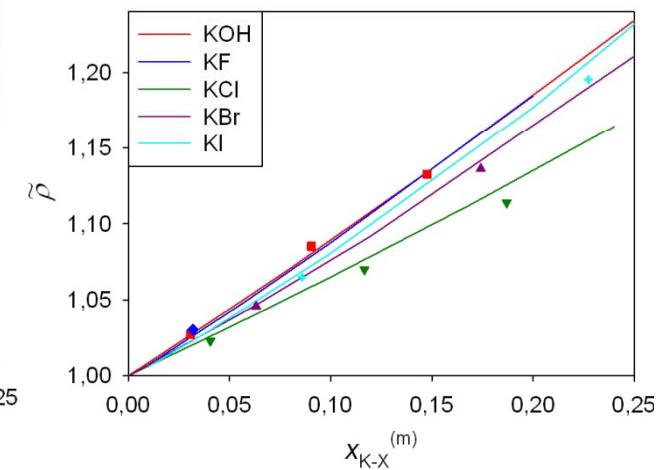
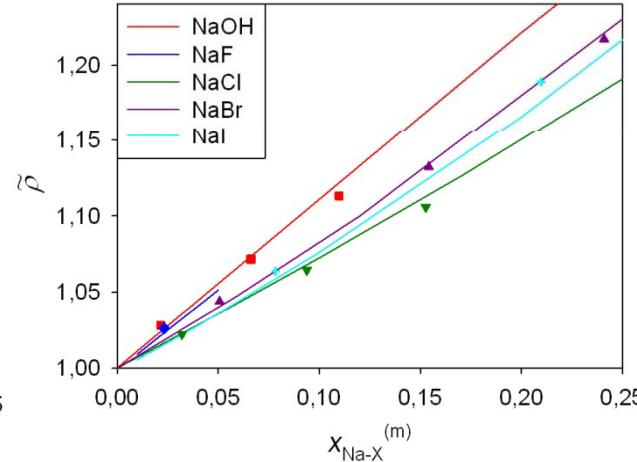
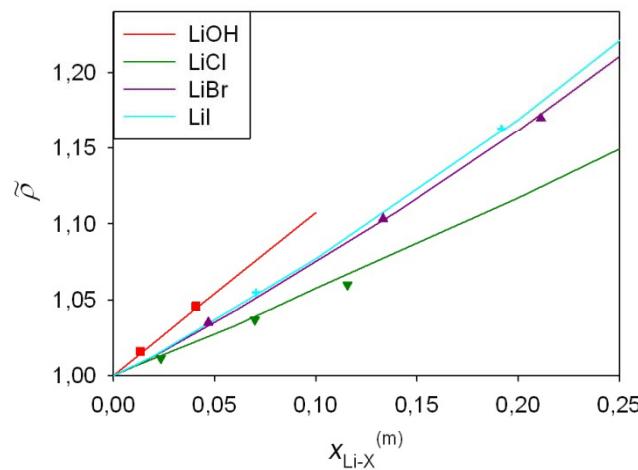
Informationstechnologie

- ✓ Integer-Arithmetik
- ✓ Hybrid MPI/OpenMPI Parallelisierung



Wässrige Elektrolytlösungen mit *ms2*

Normierte Dichten bei 293 K: Alkali/Halogenid Salze





Acknowledgements



**Finanzielle
Förderung durch
das BMBF**

