



Thermodynamik-Kolloquium, Bayreuth 05.10.2010

# Molekulare Simulationen mit *ms2*

S. Deublein<sup>1</sup>, G. Guevara-Carion<sup>1</sup>,  
M. Bernreuther<sup>2</sup>, E. Elts<sup>3</sup>, J. Vrabec<sup>4</sup>, H. Hasse<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Lehrstuhl für Thermodynamik, TU Kaiserslautern

<sup>2</sup> Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart

<sup>3</sup> Lehrstuhl für Wissenschaftliches Rechnen, TU München

<sup>4</sup> Lehrstuhl für Thermodynamik und Energietechnik, Universität Paderborn



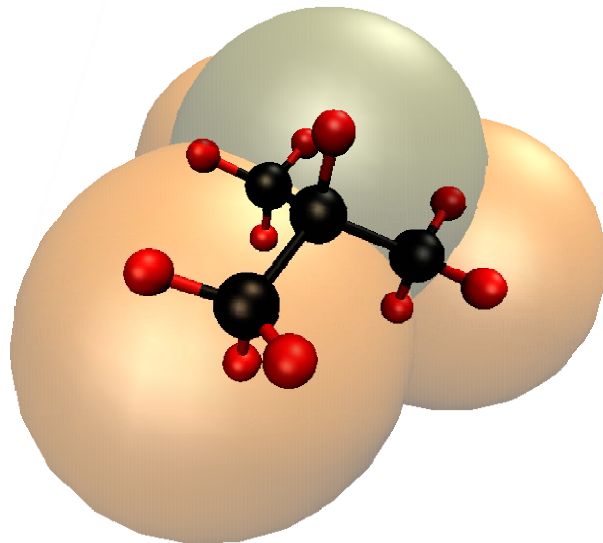
Computational  
Molecular Engineering



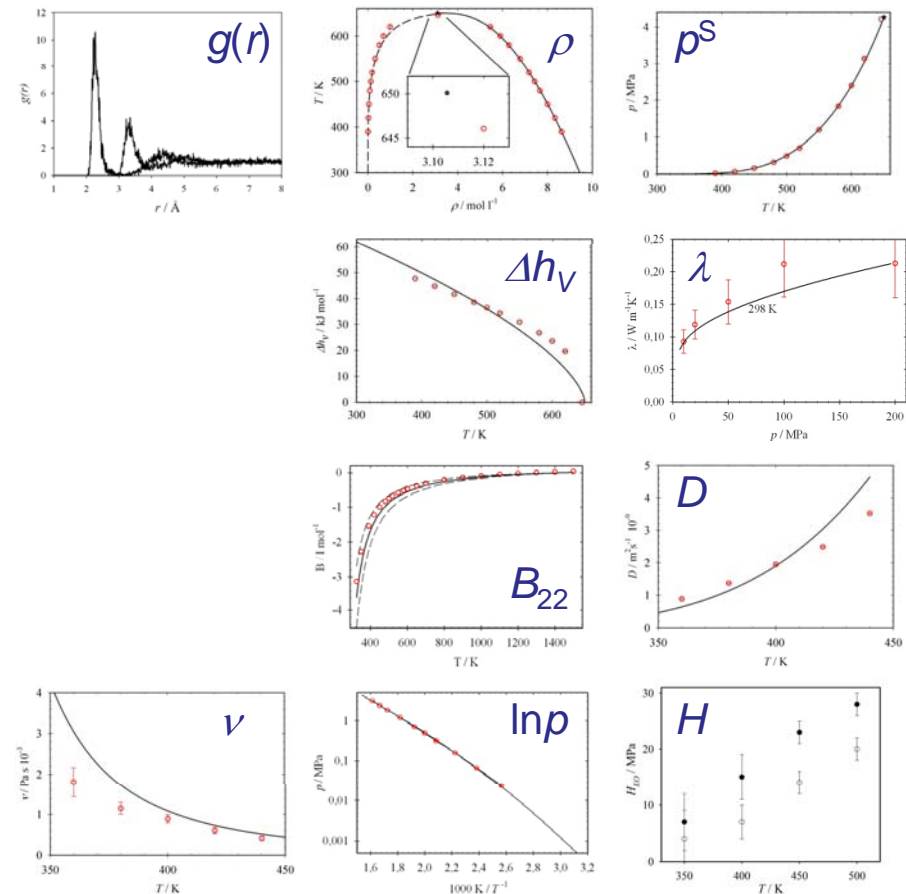
# Molekulare Simulation

## Molekulare Modelle

- ✓ Geometrie
- ✓ Elektrostatik
- ✓ Dispersion & Repulsion



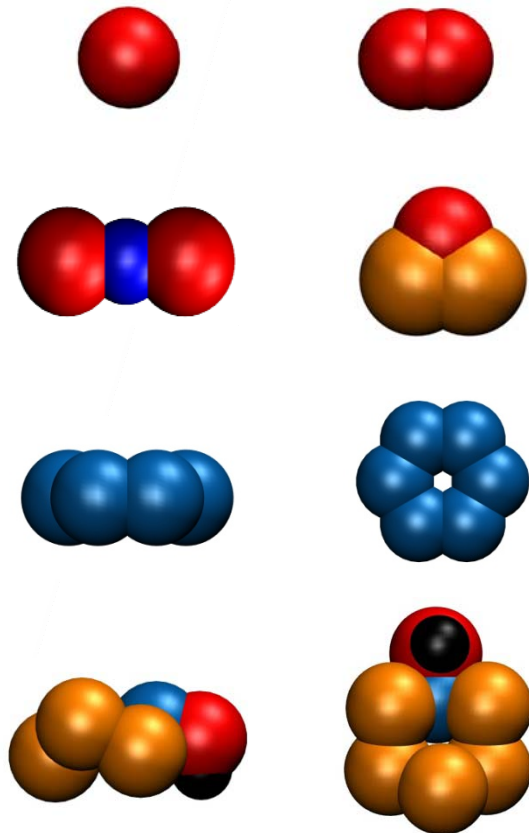
## Thermodynamische Größen



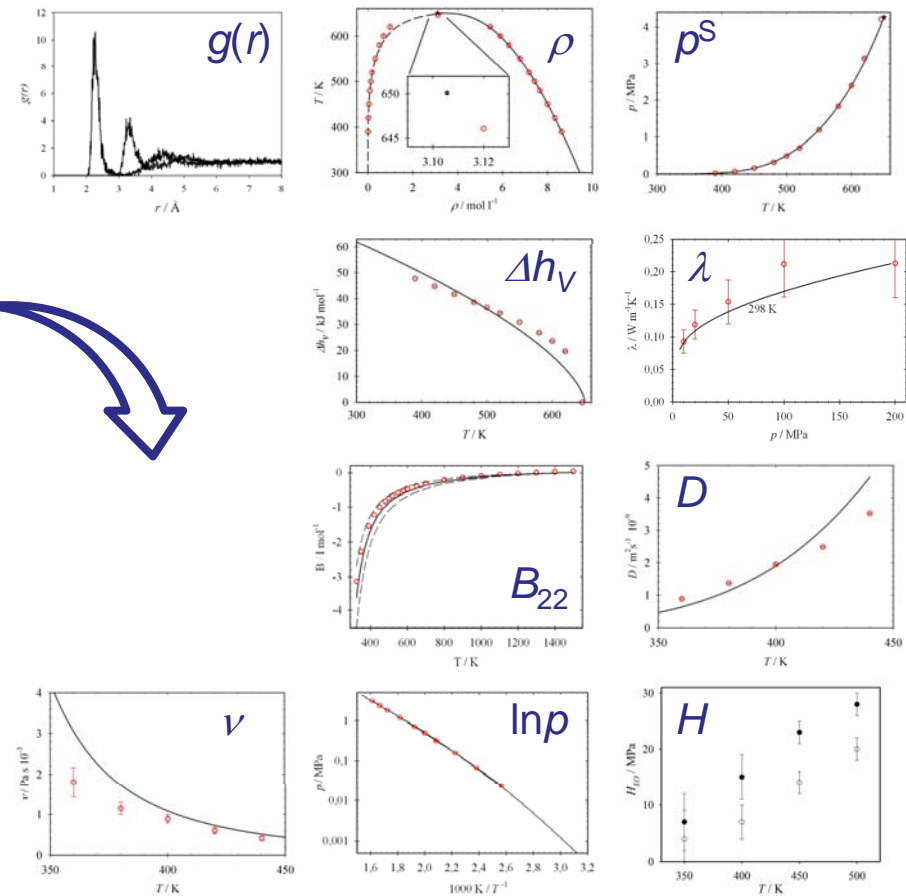


# Molekulare Simulation

## 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

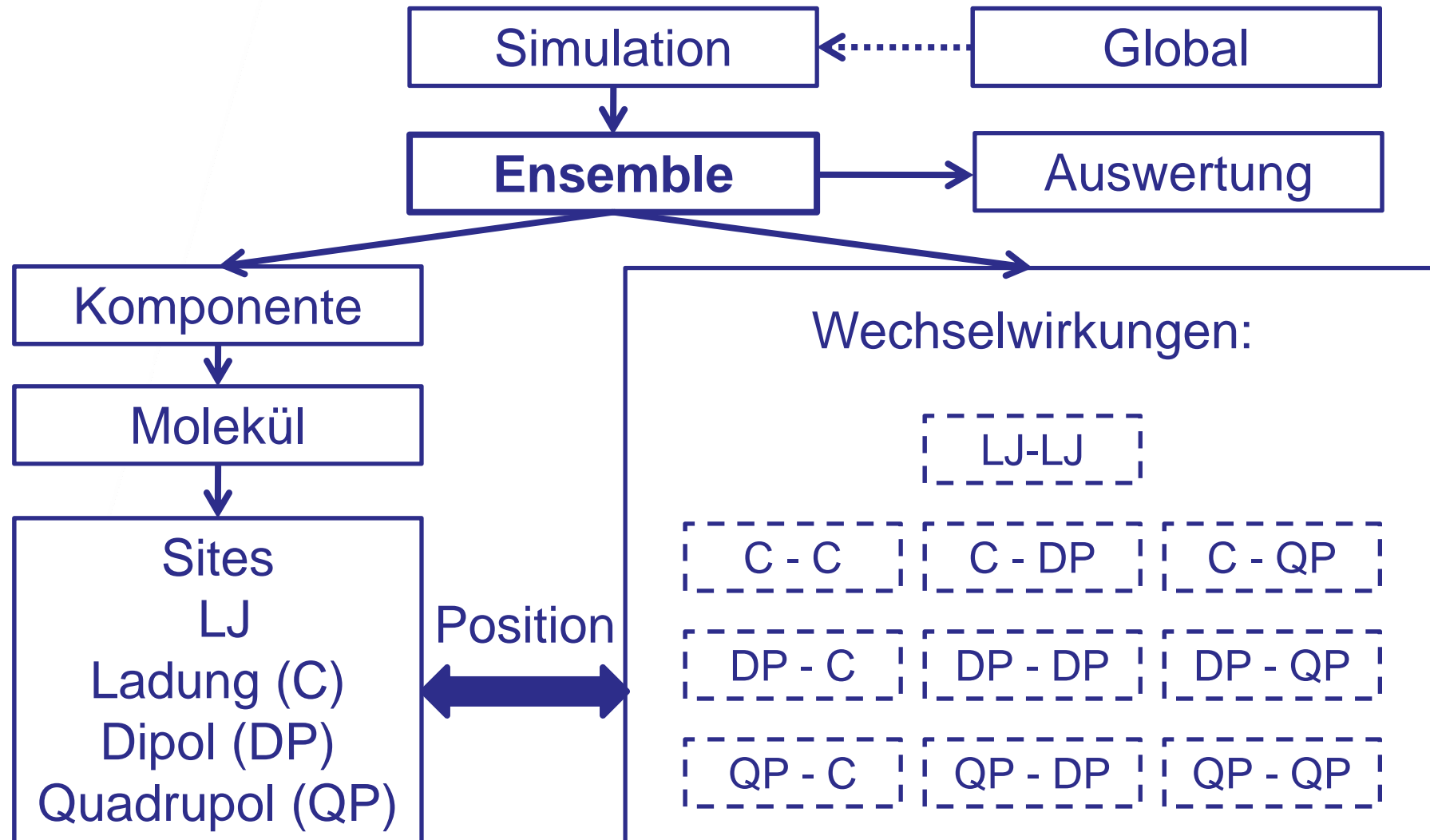
- ✓ Molekulardynamik (MD) / Monte Carlo (MC)
- ✓ Reinstoffe / Mischungen
- ✓ Starre Moleküle
- ✓ Unterschiedliche Ensembles
- ✓ Grand Equilibrium Methode für VLE-Rechnung

## Stoffeigenschaften:

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



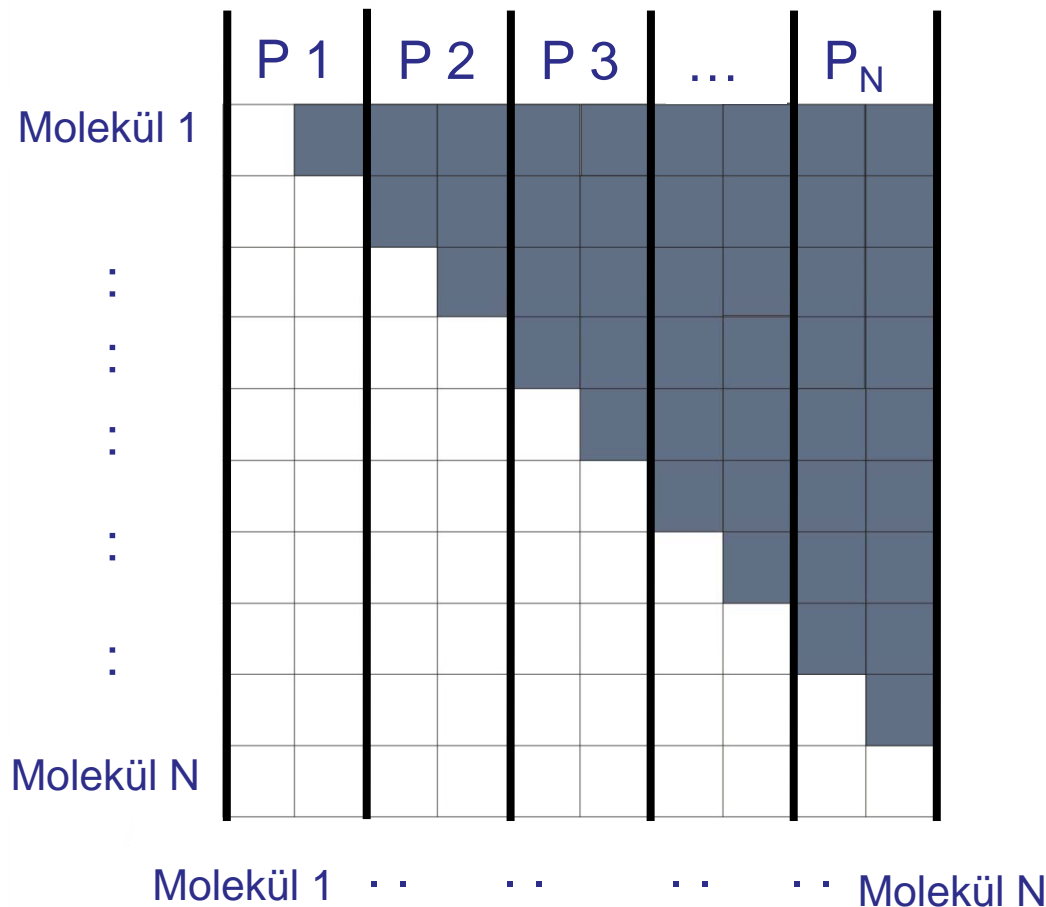
# ms2 – Code: Modularer Aufbau





# Parallelisierung MD – Trivial

Prozessoren



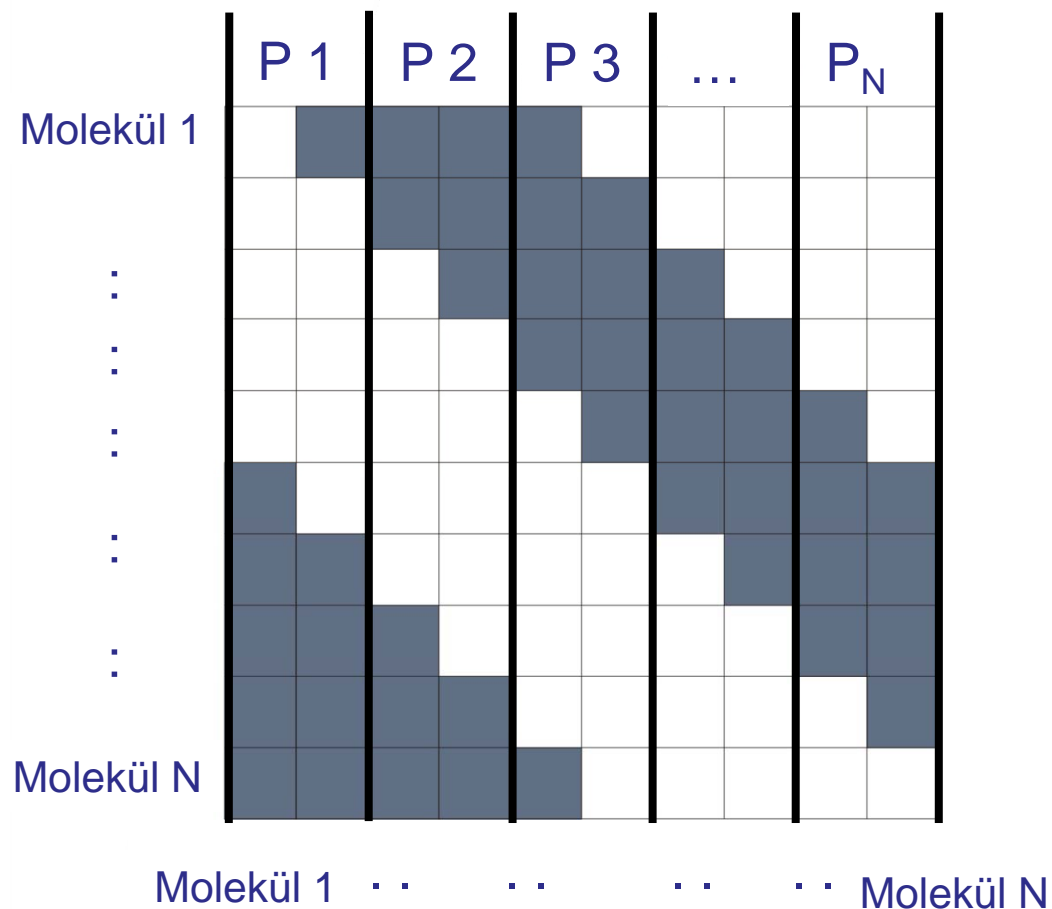
Simulationszeit  
 $\sim N(N-1) / 2$

Parallelisierung ineffizient  
 für dichte Systeme



# Parallelisierung – Force decomposition

Prozessoren



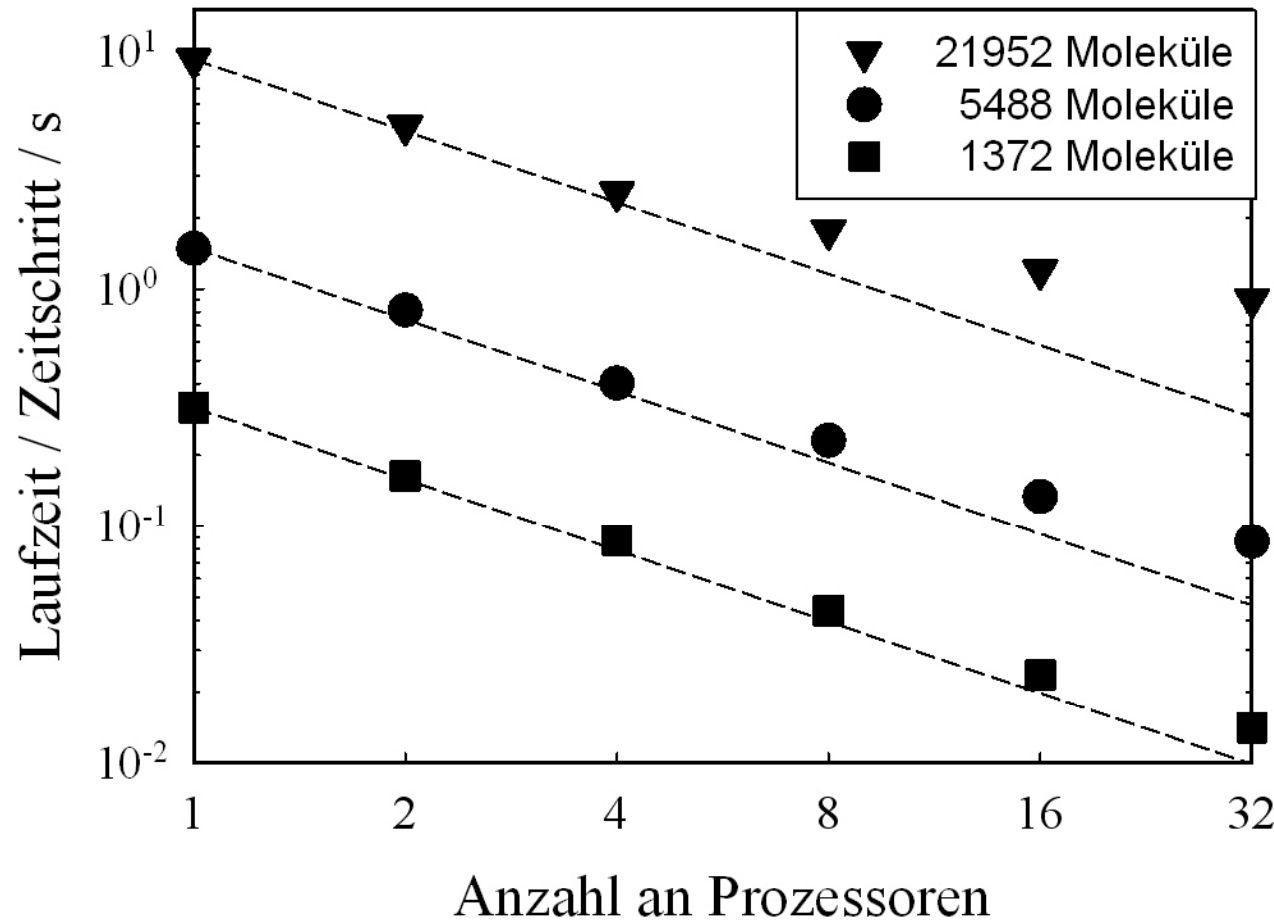
✓ optimales Load-Balancing

✓ Gute Vektorisierung





# MD – Speedup



**Equimolare  
Mischung  
Ethanol+Methanol**

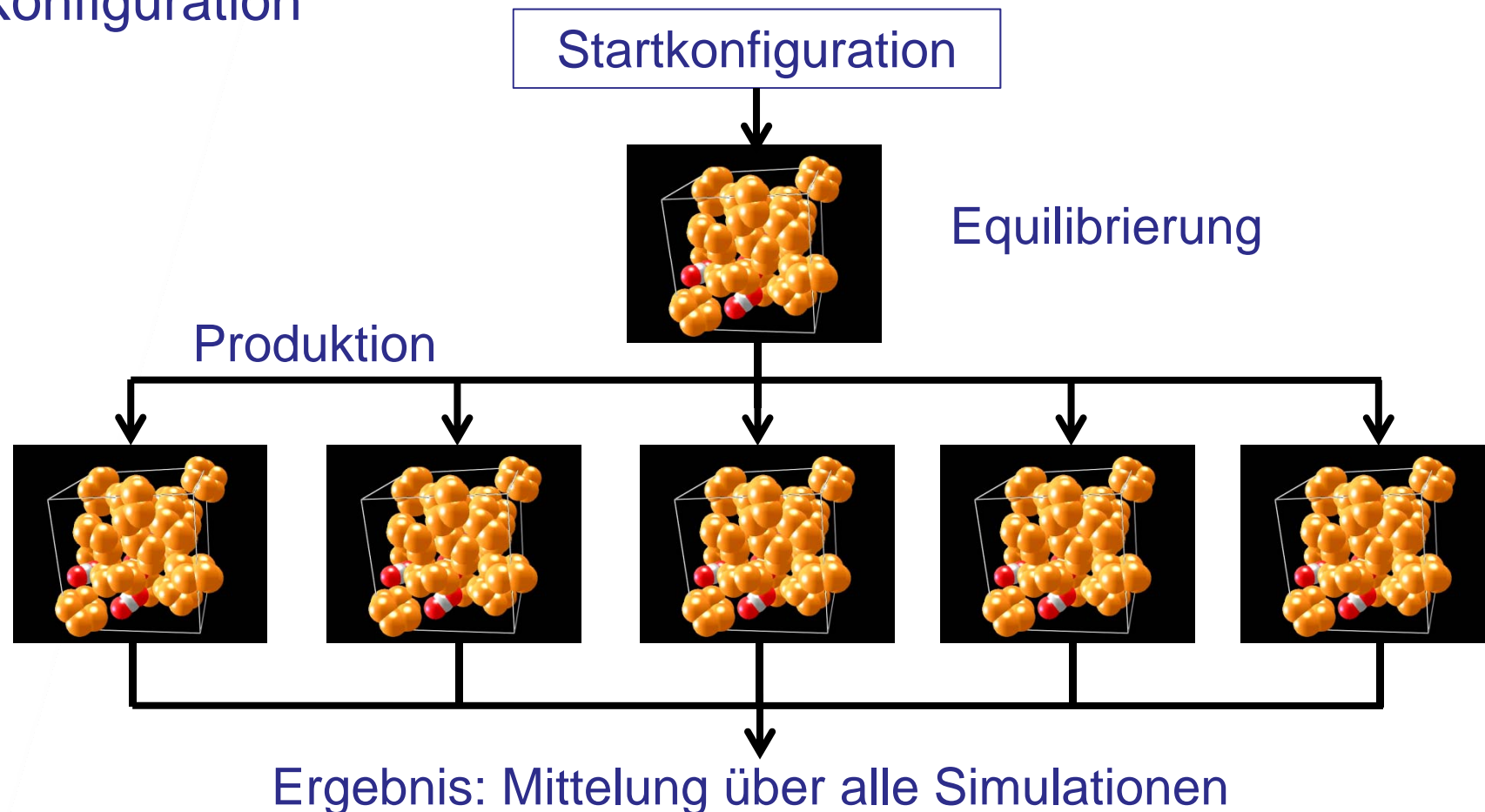
**NVT, T = 298 K**

✓ Skaliert gut bis  
32 Prozessoren



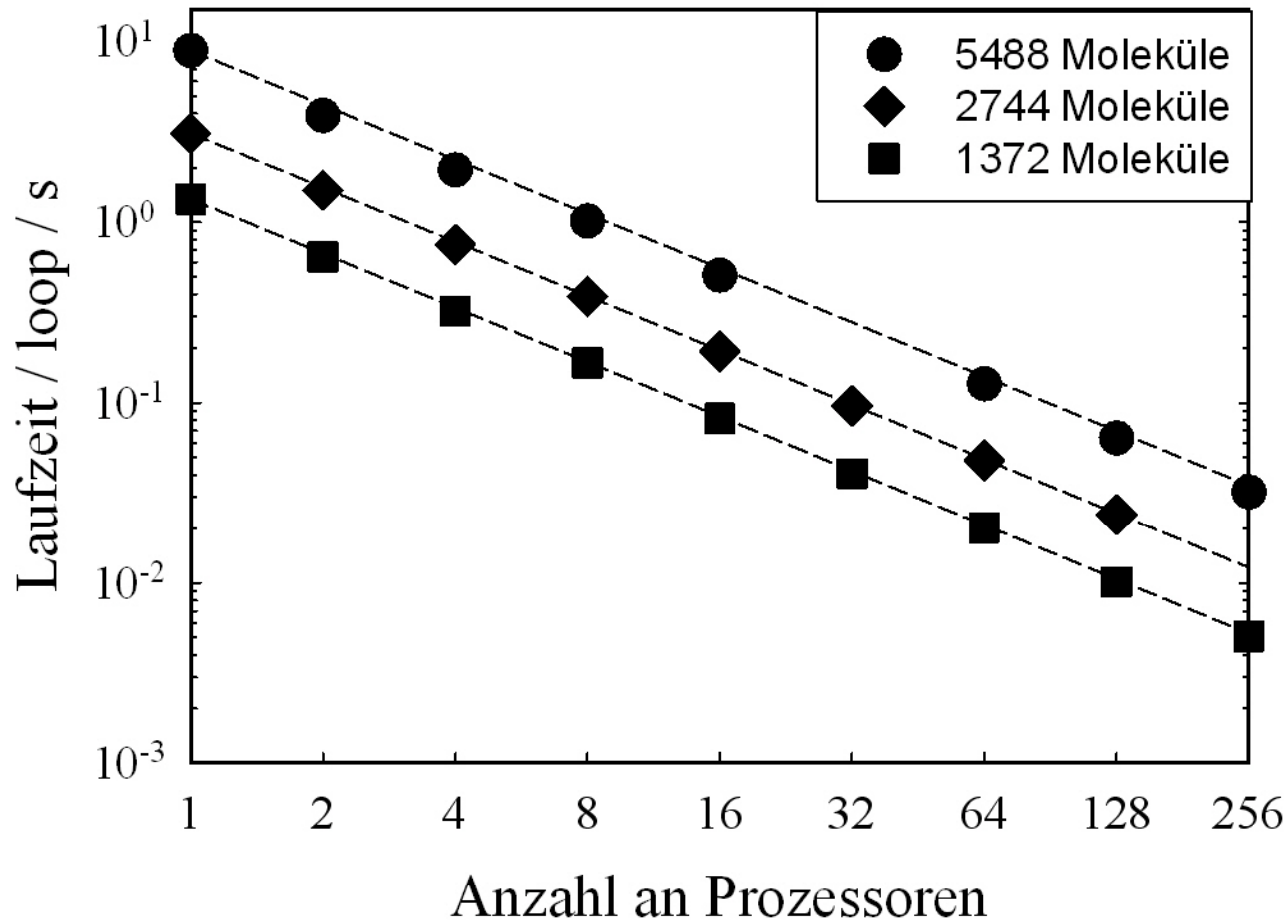
# Parallelisierung MC: Optimalparallelisierung

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

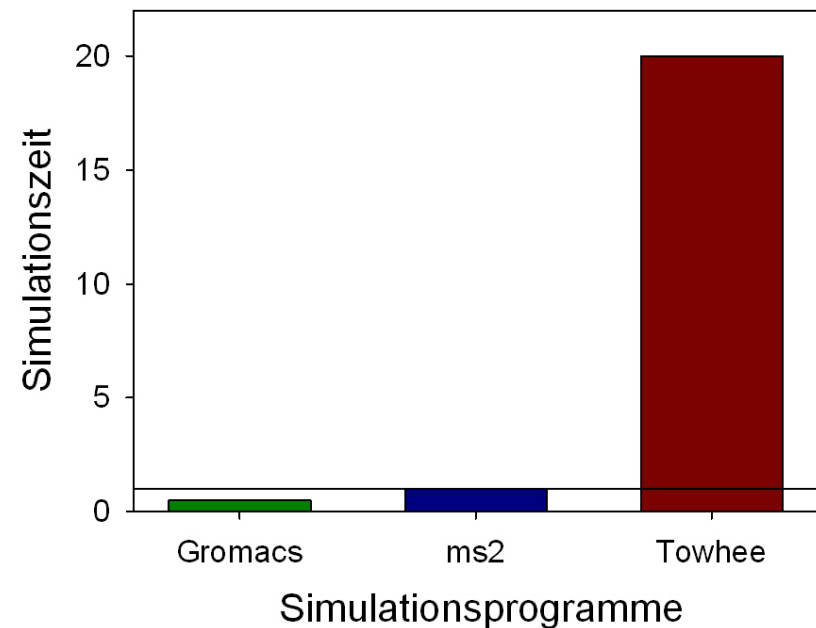


# Vergleich mit anderen Simulations- Programmen – $pVT$ -Verhalten

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

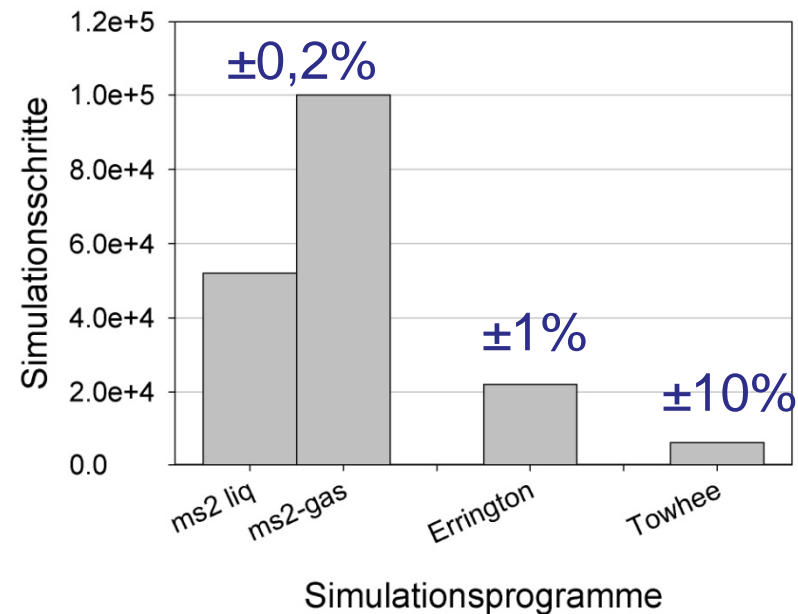
Flüssigphase: 1372 Moleküle

Gasphase: 500 Moleküle

Monte Carlo:

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

Basis: Gleiche Rechenzeit  
(96 Stunden)





# ms2-Eingabe: *ms2par*

ms2par - Editor for MS Parameter Files

Load Save Import Result Clear Number of Ensembles: 1 add remove exit

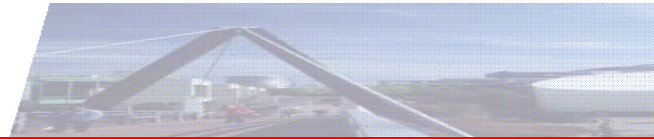
**General settings**  
 System of units SI  
 Length unit 3.5 [Å]  
 Energy unit 100.0 [K]  
 Mass unit 40.0 [u]  
 Type of simulation MD  
 Integrator Gear  
 TimeStep 2.0 femtosec  
 MCORSteps 0  
 Acceptance 0.5  
 Type of Ensemble NPT  
 NVT-Steps 5000 Result 100  
 NPT-Steps 20000 Error 5000  
 Run Steps 100000 Visual 0  
 Cut-off-mode COM  
 Transport Off

**Ensemble 1**  
 Temperature 273.15 K  
 Pressure 0.15 MPa  
 Density 22.3 mol/l  
 VapDensity 0.0 mol/l  
 Piston mass 5.0E-4 u/m^4  
 OptPressure Yes  
 Number of particles 500  
 Number of components: 1  

Pot. Model	Mole Fract.
eox	1.0

 2nd Component:  
 edit Model  
 Eta & Xi  
 ChemPotMethod  
 GE-Parameter  
 add remove calc max Cutoff  
 Cutoff 4.76 LJ 0.0 DQ 0.0  
 ε 1.0E10 DD 0.0 QQ 0.0  
 CorrLength 10000 SpanCorrFun 300  
 ResFreqCF 5 ViewCorrFun 100

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



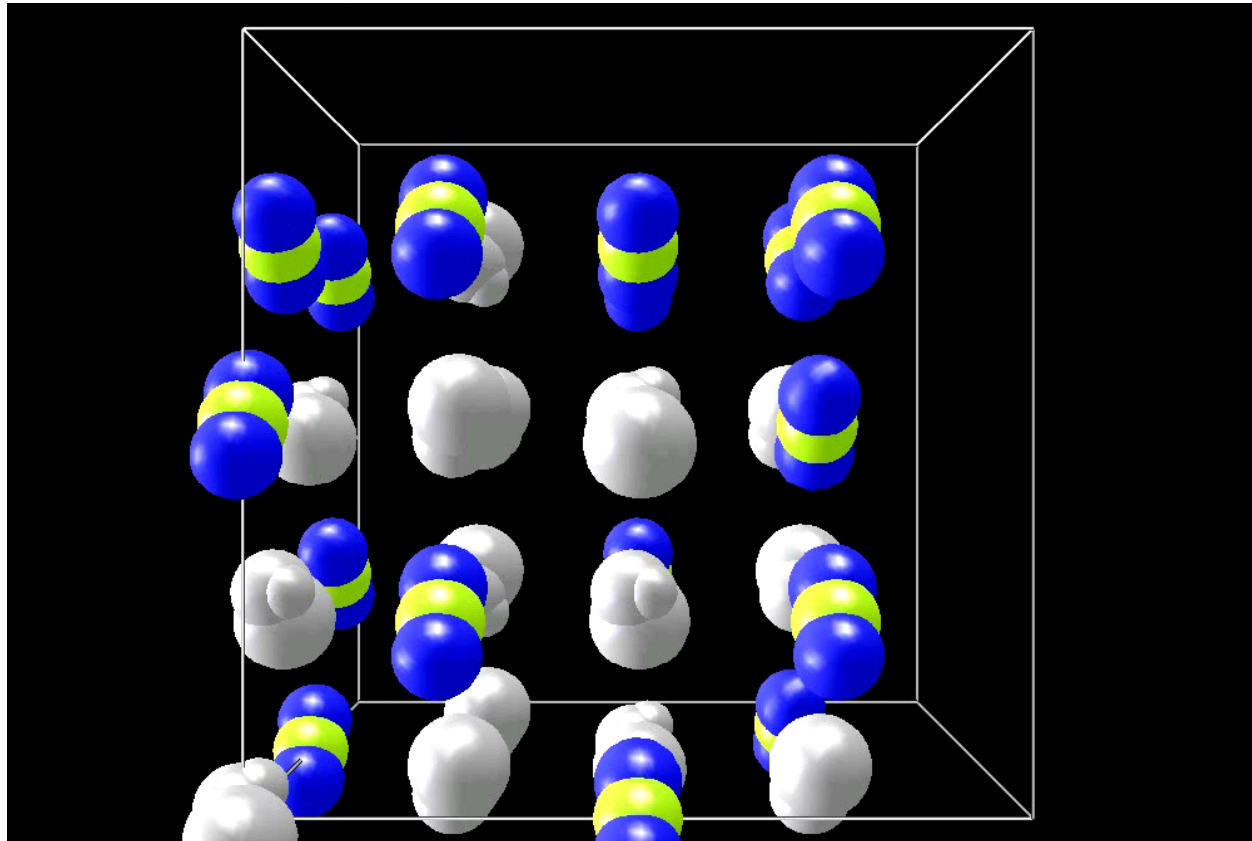
# ms2-Auswertung: *ms2chart*



- 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 langreichweitiger Wechselwirkungen  
→ Ewald-Summation

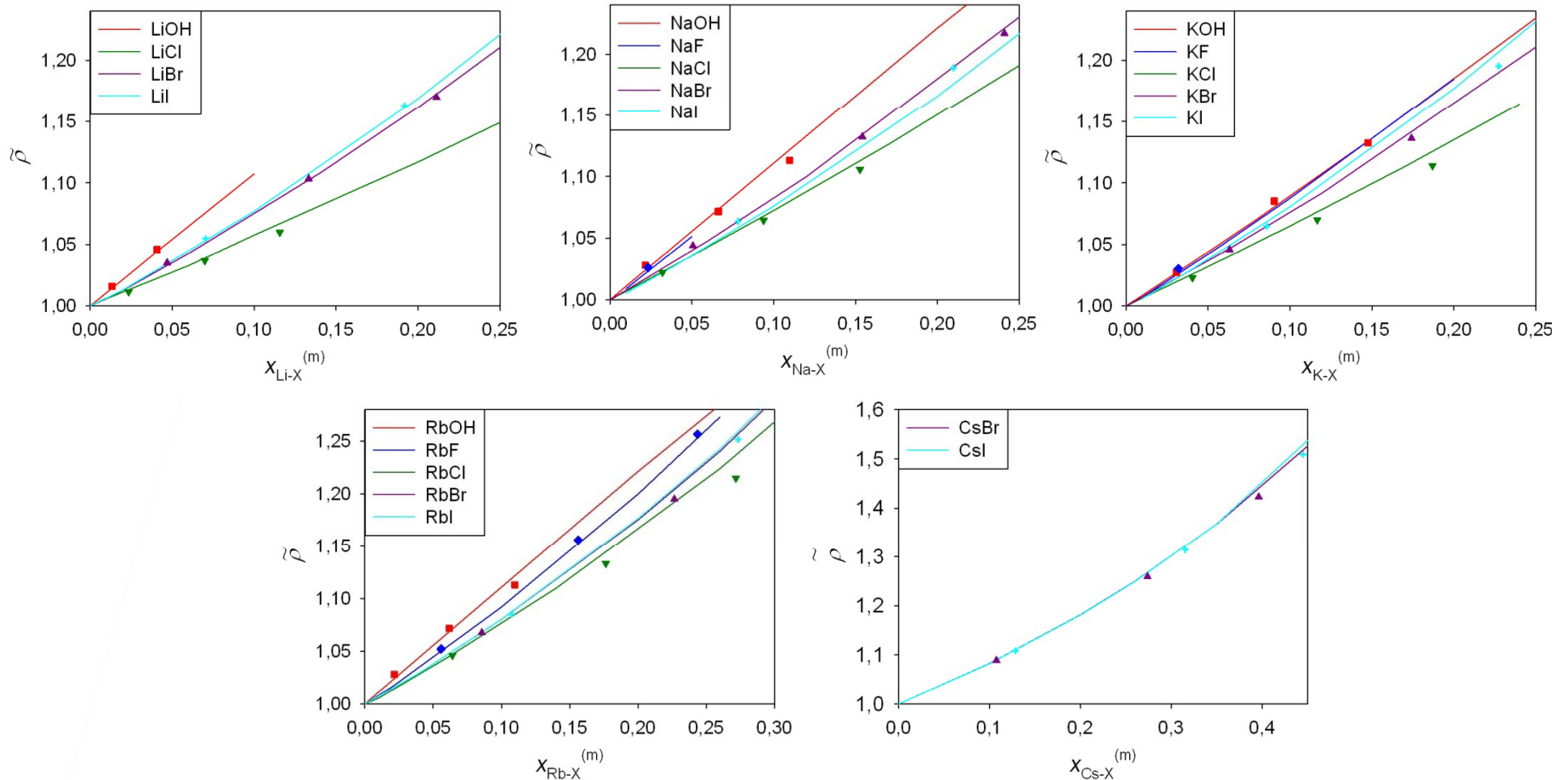
## Informationstechnologie

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



# Wässrige Elektrolytlösungen mit *ms2*

## Normierte Dichten bei 293 K: Alkali/Halogenid Salze





# Acknowledgements



**Finanzielle  
Förderung durch  
das BMBF**