



Large Systems 1 / Molekulardynamik (LS1/Mardyn):

Projekt, Simulation, Entwicklung

Tagung der Arbeitsgruppen “Molekulare Thermodynamik”
an den Lehrstühlen **LTD** und **ThET**

26. Februar 2009, Kaiserslautern

Martin Horsch



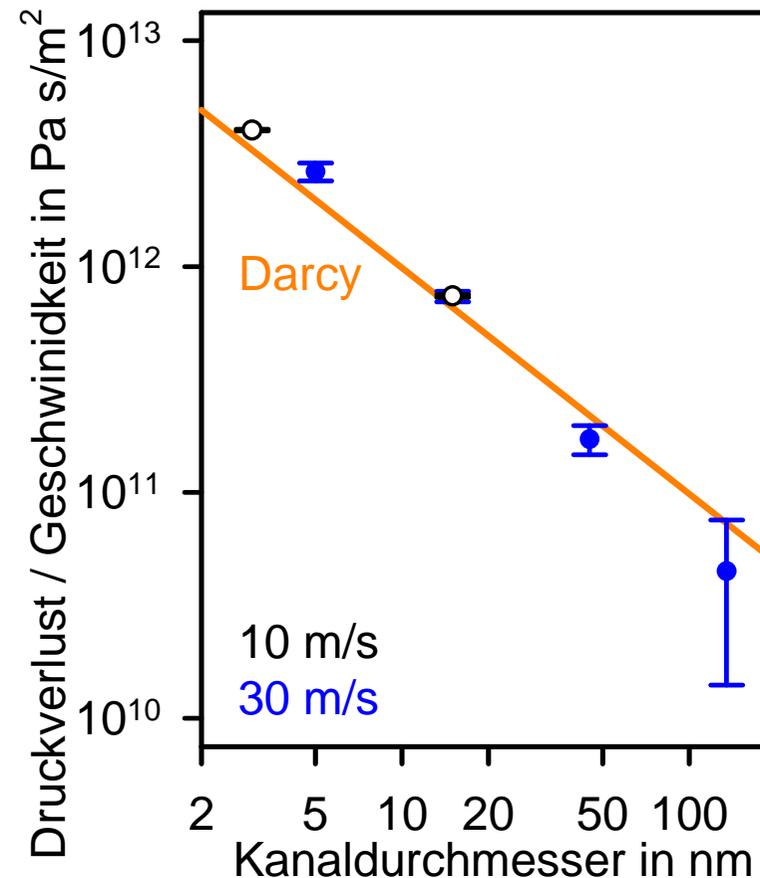
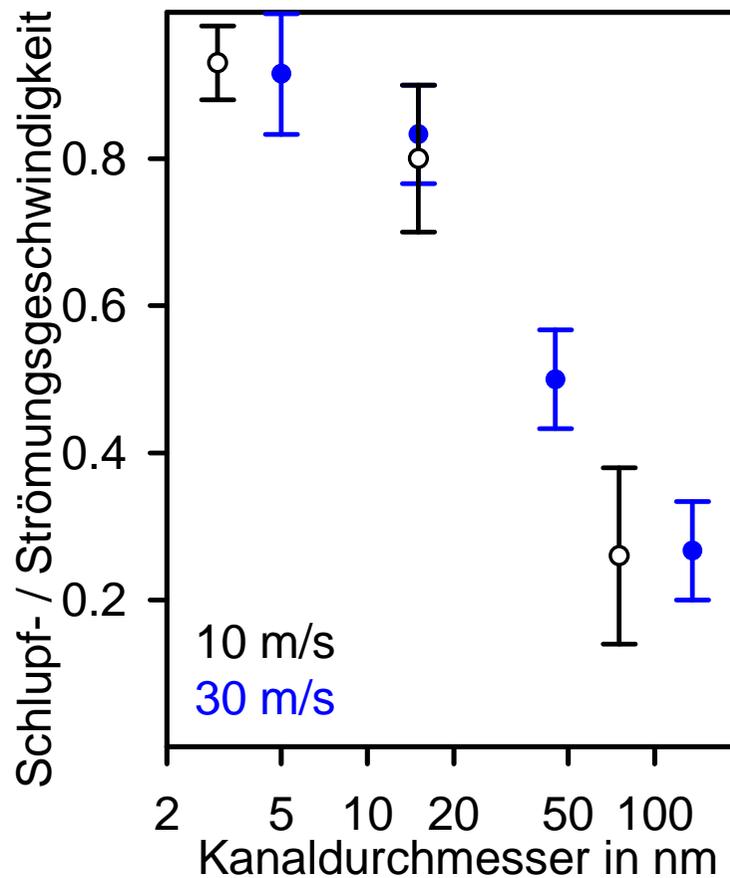
Projekt: Beschreibung SFB 716 TP A.1

MD-Simulation mehrphasiger Strömungen realer Fluide in Nanokanälen

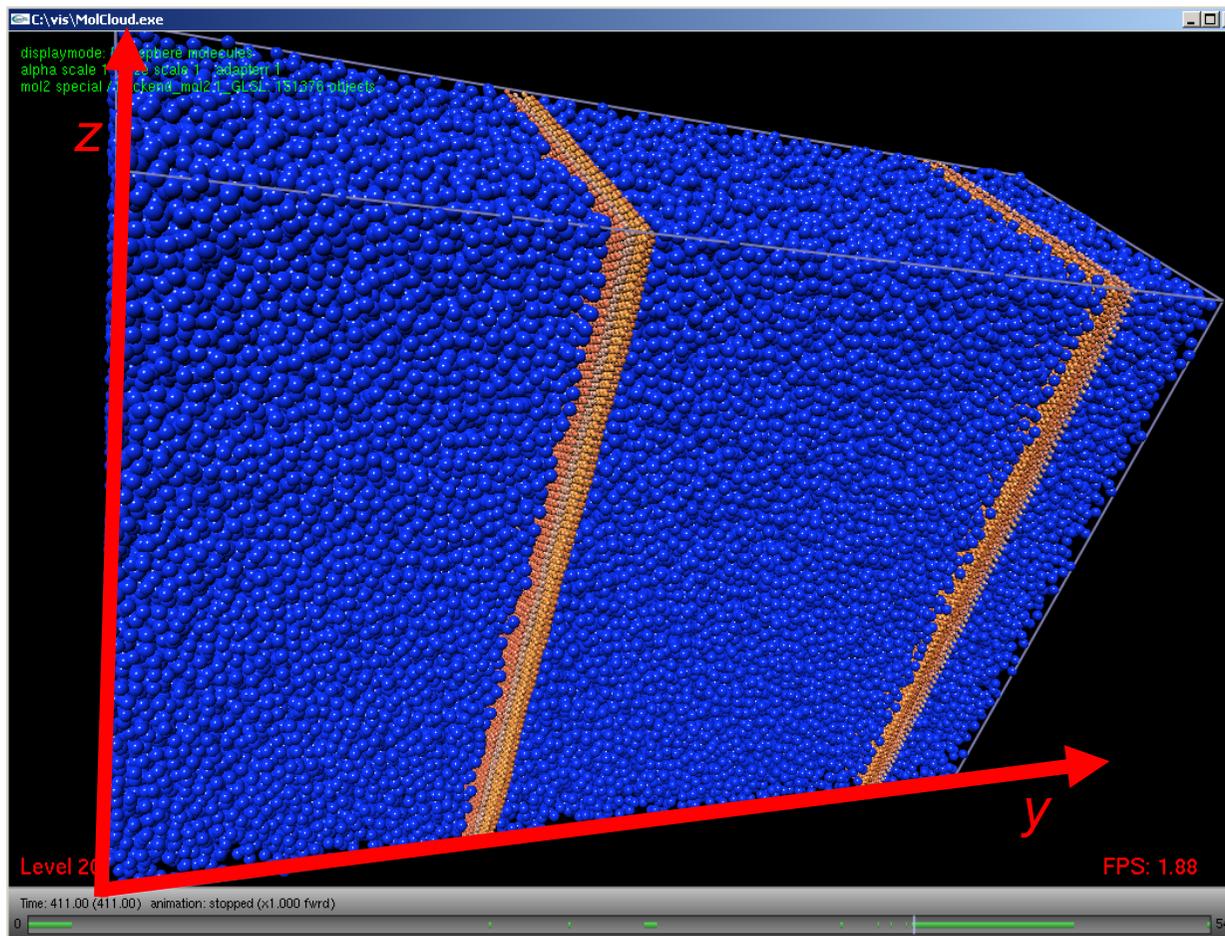
- durch gleichförmige Beschleunigung gesteuerte Strömungen
- molekulare Simulation nanoskaliger Kanäle
 - Simulation großer Systeme erforderlich
 - in erster Förderperiode charakteristische Längen bis zu 100 nm
- mehrphasige Fluide in Kanälen aus Kohlenstoff/Silizium
 - Untersuchung der Koexistenz fluider Phasen
 - Implementierung eines geeigneten Festkörpermodells
 - Untersuchung der Fluid-Wand-Wechselwirkung

Projekt: Beispiel für Simulationsergebnisse

Poiseuille-Strömung von Methan durch Graphitplatten



Simulation: Aufbau des Systems



Poiseuille-Strömung:

Fluid wird
in z-Richtung
beschleunigt

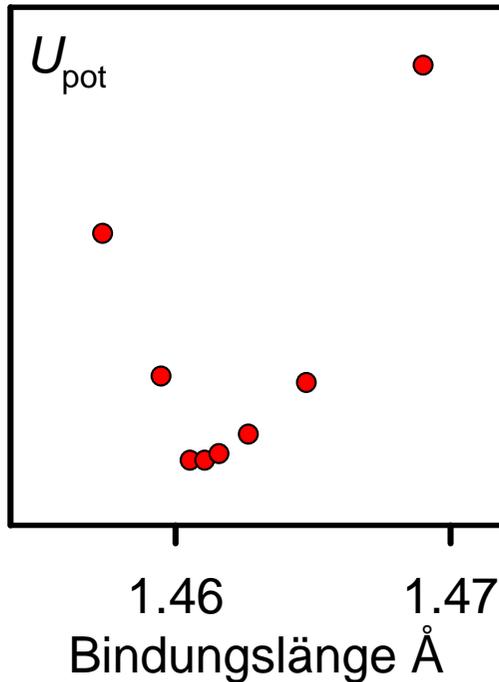
Couette-Strömung:

Eine Wand wird
in z-Richtung
beschleunigt

Randwinkel:

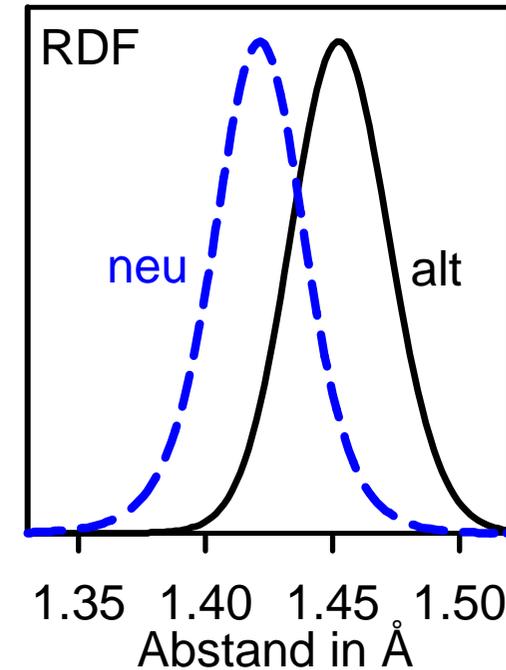
Meniskus zwischen
den Wänden

Simulation: Wandmodellierung



Bindungslänge:

Tersoff-Potential: 1.461 Å
Realer Wert: 1.421 Å



Abschneiden

$R = 2.0 \text{ \AA}$ (1.8 Å)
 $S = 2.35 \text{ \AA}$ (2.1 Å)

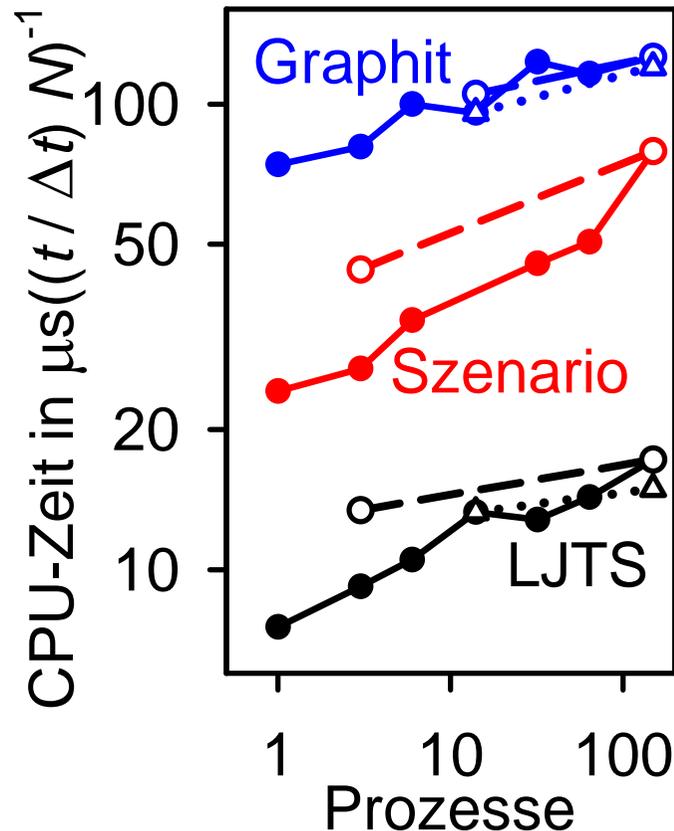
Anziehung

$\mu = 2.275 \text{ \AA}^{-1}$ (2.2119 Å⁻¹)

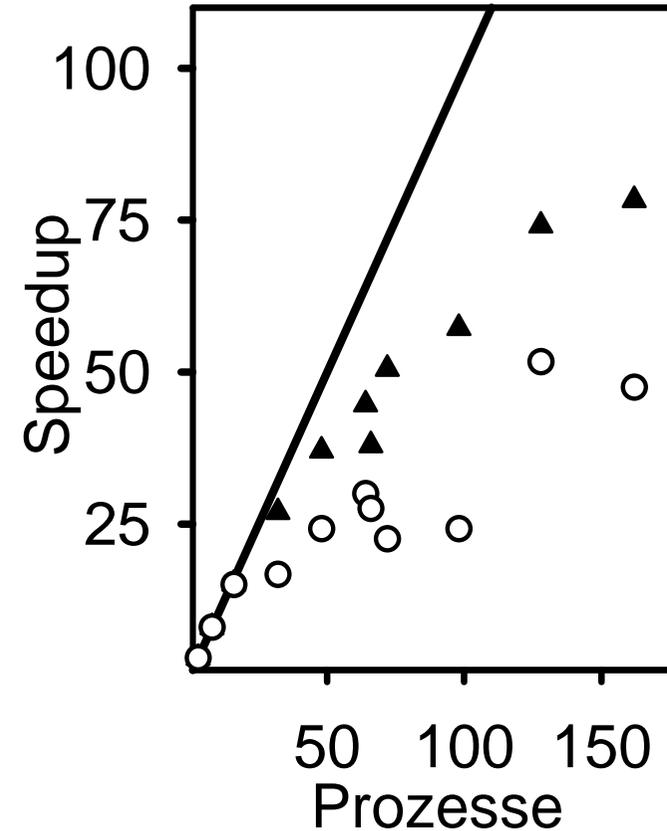
Abstoßung

$\lambda = 3.587 \text{ \AA}^{-1}$ (3.4879 Å⁻¹)

Simulation: Skalierung



Projektszenario



● starke Skalierung △○ schwache Skalierung

○ ohne Rücksicht auf Geometrie
▲ mit Rücksicht auf Geometrie



Entwicklung: Challenge Group





Entwicklung: Versionen von LS1/Mardyn

Trunk und Branches:

- Sinnvolle Einteilung
- Fertige Branches in den Trunk mergen
- Round-Robin-Verfahren

Verschiedene Versionen des Trunks oder eines Branches:

- Sinnvoll während der Entwicklungsphase
- Ziel: *ein* MD-Code oder Bibliothek/Baukasten?
- Beim Einbauen neuer Features auf #ifdefs verzichten
 - Ausnahme: PARALLEL und NDEBUG



Zeithorizont

März April Mai 2. Halbjahr 2010 2011 ...



Entwicklung

Mergen

Optimieren

Challenge Group

● Hier ist Ihr Standort.



Zeithorizont

März April Mai 2. Halbjahr 2010 2011 ...



Entwicklung

Mergen Optimieren Release Challenge Group

Öffentlichkeit

THMT'09 26C3

Publikation