

Dieser Artikel erklärt, wie mit Modellen, Hypothesen, Computern und Programmen Forschungsfragen beantwortet und neue gestellt werden (können).

Molekulardynamik auf Hochleistungsrechnern

Selbstorganisation und dynamische
Strukturen in Flüssigkeiten
Von Jure Gujt & Eckhard Spohr

Eine immer wieder gestellte Frage an Theoretiker lautet: „Wozu benötigt man eigentlich so riesige Rechner in der Chemie (oder Biologie, oder Physik, oder ...), wenn doch nur das Experiment die letztendliche Antwort darüber geben kann, wie sich die Natur verhält?“

Die Antwort auf diese Frage kann in vielfältiger Weise gegeben werden, wofür hier eigentlich nicht der Raum ist. Es sollen nur kurz drei Punkte angerissen werden. Erstens ist es so, dass in den Naturwissenschaften, und nicht nur da, trotz

oder gerade wegen der heutzutage immer rascheren Generierung von neuen Daten und der Erschließung von neuen Anwendungsfeldern für ‚Big Data‘ das Verständnis und die Interpretation dieser Datenmengen zunehmend wichtiger wird. Dabei fungieren Computer als Datenanalyse-Werkzeuge einerseits und als alternative Datengenerierungswerkzeuge in Computersimulationen andererseits. Zum zweiten gibt es viele Beispiele dafür, dass Daten eben nicht im Labor erzeugbar sind, zum Beispiel solche unter sehr extremen

Umgebungsbedingungen. Dann muss man auf Simulationsrechnungen ausweichen, die aber nur wirklich aussagekräftig sind, wenn man vorher in analoger Weise das Verhalten der Substanzen und Systeme unter alltäglicheren Bedingungen studiert und mit dem Experiment verglichen hat. Die Etablierung geeigneter Modelle und Rechenmethoden, die diesen Simulationen zugrunde liegen, ist ein formidables Unterfangen und hat die Naturwissenschaften in den letzten Jahrzehnten von einem Gedankenge-



Jure Gujt. Foto: Vladimir Unković

bäude, in dem Theorie und Experiment sich komplementär gegenüberstehen, hin zum Paradigma eines Dreiklangs aus Experiment, analytischer Theorie („mit Papier und Bleistift“) und Computersimulation („Computational Science“) transformiert. Darin haben Computersimulationen einen festen Platz gefunden, der in seiner Bedeutung ständig zunimmt. Drittens, und nicht zuletzt, machen Computersimulationen Spaß, da man wie in einem Brennglas sehr direkt die Beziehung zwischen Ursache und Wirkung beobachten kann. Manche Wissenschaftler*innen nennen dies auch das „virtuelle Labor“.¹

Was wäre, wenn...?

Chemische Prozesse laufen bevorzugt in Lösung ab, da zum einen im Gegensatz zur festen Phase die Beweglichkeit von Molekülen in Flüssigkeiten sehr hoch ist und chemische Reaktionen rasch ablaufen können, und da zum anderen durch die Wahl des Lösungsmittels auch spezifisch gewünschte Wechselwirkungen zwischen den Reaktanden erreicht werden können. Das Verständnis solcher Steuerungsmechanismen auf der atomaren Ebene ist auch Gegenstand aktueller Forschung, wie sie zum Beispiel im DFG-Exzellenzcluster RESOLV gebündelt ist², an dem unsere Arbeitsgruppe beteiligt ist. In einem solchen Verbund ergänzen und stützen theoretische Forschungsprojekte das Experiment, sei es durch Interpretation von Daten, sei es durch Modellrechnungen im Sinne eines „was wäre, wenn...?“.

Im Gegensatz zu Feststoffen, deren Eigenschaften sich ganz wesentlich aus ihrer Regelmäßigkeit und Ordnung heraus erschließen, und im Gegensatz zu Gasen, deren Eigenschaften bei relativ geringer Dichte ganz gut aus der Überlegung abgeleitet werden können, dass nur zwei oder drei unterschiedliche Moleküle (in einem ‚Cluster‘) miteinander wechselwirken und sie

ansonsten weitgehend unabhängig voneinander sind, ist die Situation in einer Flüssigkeit viel komplizierter. Aus der Schule ist den meisten noch die Definition der Aggregatzustände fest, flüssig und gasförmig über die Nah- und Fernordnung der Atome und Moleküle geläufig. Die fehlende Fernordnung in einer Flüssigkeit einerseits und die große Zahl von dicht gepackten Molekülen andererseits, die die Nahordnung beeinflussen, legen es nahe, dass man viele unterschiedliche „Konfigurationen“ (also Anordnungen von Molekülen in einem chemischen System) separat betrachten und darüber in statistischer Weise mitteln muss, um ihre Eigenschaften zu verstehen. Dieses statistische Verfahren bedeutet einen erheblichen Rechenaufwand, für den große Rechner wie die CRAY-XT6m³ und die magnitUDE⁴ extrem nützlich sind, die vom Zentrum für Informations- und Medizindienste (ZIM)⁵ und vom Center for Computational Sciences and Simulation (CCSS)⁶ gemeinsam an der Universität Duisburg-Essen betrieben werden.

Statistische Thermodynamik

Die wissenschaftliche Disziplin, die sich mit dieser Art der Mittelung über Konfigurationen von Atomen und Molekülen in für die Forschung interessanten chemischen (oder biologischen, oder physikalischen) Systemen befasst, ist die statistische Thermodynamik. Dabei geht es, ganz einfach gesprochen, darum, dass man aus der statistischen Beschreibung von ‚vielen‘ Atomen und Molekülen im Computer die Eigenschaften eines realen Systems, das noch ‚viel mehr‘ Atome und Moleküle enthält, vorhersagen beziehungsweise berechnen kann. Offensichtlich ist hier wichtig, was man genau unter ‚viel‘ und unter ‚viel mehr‘ versteht. Typische Systeme, die man im Computer realisieren kann, enthalten zwischen einigen Hundert und

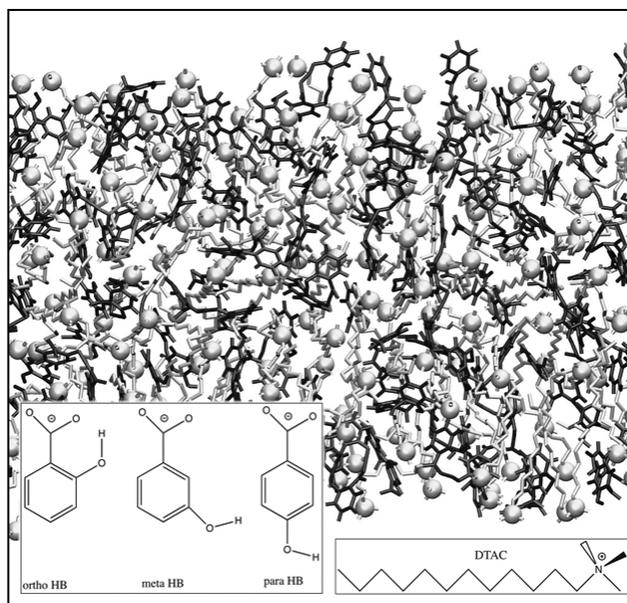
einigen Millionen Atome, manchmal auch Milliarden. Das ist aber im Vergleich zu realen Systemen immer noch sehr wenig. So sind zum Beispiel in einem Liter Wasser etwa 10^{26} Atome, also 100 Millionen mal eine Milliarde Milliarden Atome enthalten. Das stellt Forscher*innen bei der Computersimulation dann vor die schwierige Aufgabe, wie sie einerseits mit den vorhandenen Computerressourcen ökonomisch umgehen können, und wie andererseits überhaupt abgeschätzt werden kann, ob und, wenn ja, wo eine Nutzung der Ressource Rechenzeit sinnvoll ist, da man vielleicht nie die minimal notwendige Systemgröße oder Beobachtungszeit für die interessanten Prozesse erreichen kann.

Im Verlauf der Erläuterung dieser Problematik wird auch klar werden, wieso *ein einzelner* Rechner nicht ausreicht, sondern wieso man eine ganze Palette unterschiedlich leistungsfähiger Maschinen benötigt, um zum Ziel zu kommen. Da die einzelnen Arbeitsgruppen lediglich kleinere Systeme betreiben können, ist die Zusammenarbeit vieler Forschergruppen zur Bündelung der Anforderungen an einer Universität notwendig. Dies wird in der Kooperation zwischen dem CCSS und dem ZIM seit etlichen Jahren erfolgreich realisiert. Die Kooperation hat seit 2010 zunächst zur Anschaffung des CRAY-Xt6m-Computers und 2016 zur Anschaffung der NEC-MagnitUDE geführt. Beide großen Systeme wurden in der Vergangenheit bis heute (CRAY-Xt6m) beziehungsweise werden in der Gegenwart und Zukunft (NEC-magnitUDE) zur Lösung vielfältiger wissenschaftlicher Probleme an der UDE genutzt. Sie sind aber auch die Grundlage für die Nutzung noch größerer Ressourcen in nationalen und internationalen Rechenzentren, da man für die erfolgreiche Antragstellung an diesen Zentren auch nachweisen muss, wie gut die eigenen Programme und Anwendungen *skalieren*, was, salopp formuliert,

bedeutet, wie gut man Rechnungen auf vielen Rechenkernen oder -prozessoren parallelisieren kann, um schneller zu Resultaten zu gelangen.

Flüssigkeiten und Lösungen

Wir wollen die Vorgehensweise der Nutzung von Rechenanlagen für Computersimulationen am Beispiel der Micellbildung aus amphiphilen Molekülen in wässriger Lösung erläutern. Micellen sind Aggregate von meist kettenförmigen Molekülen, die oft ein geladenes Ende haben, das sich gut in Wasser lösen lässt (man sagt auch, dass die Moleküle mit Wasser „stark wechselwirken“). Chemisch damit verknüpft ist im gleichen Molekül eine mehr oder weniger lange Kette von (meistens) Kohlenstoffatomen, die eher schwach mit Wasser, dafür aber stärker miteinander wechselwirken. Das Resultat ist häufig ein sich schon bei sehr niedrigen Molekülkonzentrationen bildendes mehr oder weniger kugelförmiges Aggregat, bei dem sich außen die gut löslichen geladenen Gruppen und innen die schlechter löslichen Kohlenstoffketten befinden (s. Abb. 1). Dies ist ein Beispiel für das aus der Schule noch bekannte chemische Prinzip, wonach gilt: „Ähnliches löst Ähnliches“ (*similis similibus solvuntur*). Die Aggregate sind über relativ lange Zeiträume (auf der Skala der Bewegung der einzelnen Atome) stabil, aber auf der Zeitskala von Sekunden oder Minuten verändern sie ständig ihre Form und zerfallen beziehungsweise bilden sich neu. Ähnliche Prinzipien werden in lebenden Organismen zur räumlichen und zeitlichen Trennung von Funktionalität genutzt. Man kann micellare Systeme prinzipiell auch, da sie ja gut in wässriger Lösung löslich sind, zum Transport von nicht gut wasserlöslichen Molekülen wie zum Beispiel manchen pharmazeutischen Wirkstoffe verwenden, indem man ein solches Molekül im unpolaren Kern der Micelle versteckt.



(1) Schnappschuss einer durch ortho-HB-Ionen stabilisierten zylindrischen Micelle. Etwa 14.000 Wassermoleküle wurden bei der graphischen Darstellung weggelassen.
Quelle: eigene Darstellung

Ausgangspunkt des hier kurz umrissenen Forschungsprojektes war die experimentelle Beobachtung,⁷ dass micellbildende Dodecyl-Trimethyl-Ammonium-Moleküle (DTAC-Moleküle) sehr unterschiedlich auf die drei chemisch sehr ähnlichen isomeren Hydroxybenzoat (HB)-Anionen reagieren. Diese Anionen besitzen eine identische Zusammensetzung, jedoch eine unterschiedliche räumliche Anordnung der Atome. Man nennt solche Moleküle *Isomere*; das sogenannte *ortho*-Isomer ist mit dem Wirkstoff Aspirin chemisch verwandt. Es wurde beobachtet, dass schon ein ganz geringer Zusatz dieses *ortho*-Isomeren (im Gegensatz zu den beiden anderen Isomeren) dazu führt, dass sich aus den eher kugelförmigen Micellen lange zylinder- oder fadenförmige Micellen bilden, was sonst meist erst bei sehr viel höherer Konzentration der DTAC-Kettenmoleküle passiert (s. Abb. 1). Da man damit potenziell über einen molekularen Mechanismus zur Steuerung von Form und Beweglichkeit solcher Strukturen verfügt, ist für den Experimentator

natürlich die Frage interessant, warum die doch sehr ähnlichen Moleküle solche unterschiedliche Wirkungen auf das Micellaggregat haben. Dieser Frage widmete sich Jure Gujt in seiner Dissertation an der Universität von Ljubljana, die mit zum großen Teil am Lehrstuhl für Theoretische Chemie in Essen durchgeführten Molekulardynamik (MD)-Simulationsrechnungen erarbeitet wurde.

MD-Simulationen

In MD-Simulationen erzeugt man die für die Mittelung über Molekülanordnungen nötigen Konfigurationen dadurch, dass man die zeitliche Entwicklung der Atome und Moleküle unter ihren wechselseitigen Kräften durch numerische Lösung der Newtonschen Bewegungsgleichungen verfolgt, und den Zustand des Systems in regelmäßigen Abständen abspeichert und während beziehungsweise nach der Simulation analysiert. Genauigkeit und Aussagekraft des Verfahrens sind dadurch limitiert, dass entweder bei einer

hochgenauen (und damit rechenzeitintensiven) Berechnung der Wechselwirkungen (z.B. mittels Verfahren der Elektronenstrukturtheorie) die mögliche Systemgröße gering ist, oder in hinreichend großen Systemen die Wechselwirkungen nur in sehr grober Näherung berechnet werden können.

Wir haben mit Hilfe der MD-Simulation zunächst nur die Stabilität einer bereits gebildeten Zylindermicelle untersucht. Um eine hinreichend große Zahl von DTAC-Molekülen (in unserem Fall 180) in Wasser bei niedriger Konzentration zu lösen, sind so viele Wassermoleküle notwendig, dass die Gesamtzahl der Atome notwendigerweise sehr

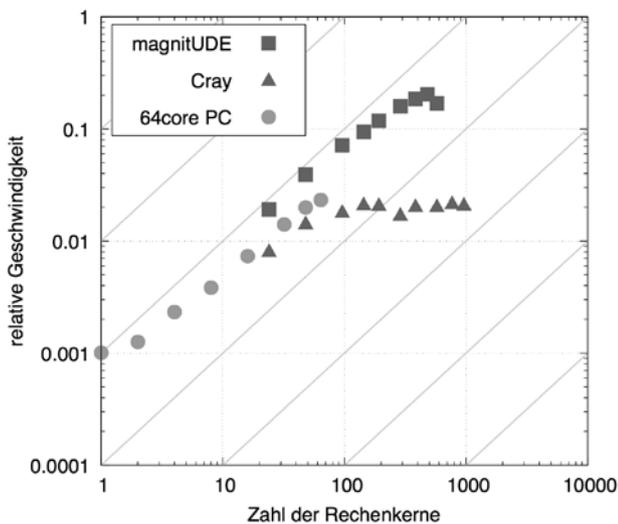
groß ist. Die experimentellen Gegebenheiten kann man gar nicht direkt reproduzieren, stattdessen muss man sowohl bei der Konzentration der Micellbildner, als auch bei den diese Micellen in ihrer Form beeinflussenden HB-Anionen, Abstriche machen und deutlich höher konzentrierte Lösungen als im Experiment simulieren. Dies zeigt auch ein typisches Dilemma: das Experiment kann häufig keine atomistischen Aussagen treffen (da man in der Regel die Atome nicht direkt beobachten kann) und die Computersimulation kann das System in der Regel nicht bei den experimentellen Bedingungen simulieren bzw. die Wechselwirkungen nur sehr approximativ

bestimmen. Wir haben uns dann für ein System aus 180 DTAC-Molekülen, 180 HB-Anionen und 180 Natriumchlorid-Ionenpaaren zur Neutralisierung entschieden, die in etwa 14.000 Wassermolekülen gelöst sind. Insgesamt enthalten diese simulierten Systeme mehr als 50.000 Atome (s. Abb. 1).

Zeitintensive Simulationen

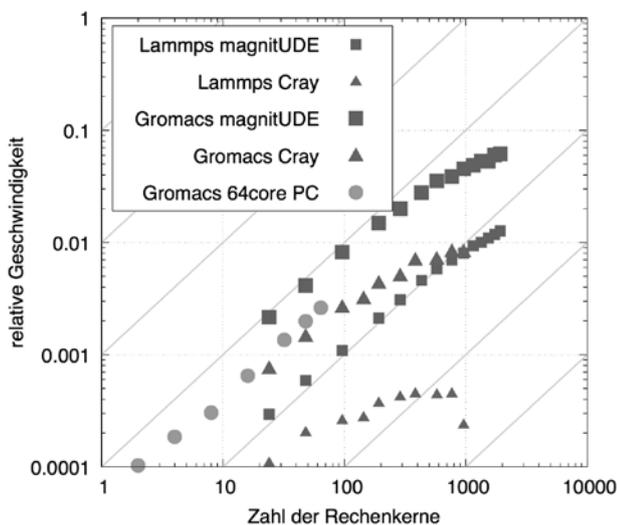
Zentrales Problem einer jeden Computersimulation ist die lange Zeitdauer einer einzelnen Simulationsrechnung, die typischerweise für die genannten Systeme zwischen 5.000 und 10.000 Stunden Prozessorzeit dauern, damit man das System selbst über eine Zeit von größenordnungsmäßig 100 Nanosekunden (also eine zehnmillionstel Sekunde) beobachten kann. Mit einem einzelnen relativ schnellen aktuellen PC-Prozessor würde das also größenordnungsmäßig ein Jahr (vielleicht einige Monate mehr oder weniger) dauern. Angesichts des typischen Zeitraums für eine Dissertation von etwa drei Jahren ist das deutlich zu lange! Man muss also die Rechenzeit verkürzen. Durch weitere Vereinfachungen bei der Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen den Atomen ist dies nicht mehr möglich, weil bereits die einfachste gerade noch sinnvolle Approximation bei dieser Rechenzeitabschätzung zugrunde gelegt ist. (Für Expert*innen: die Simulationsrechnungen basieren auf der physikalisch gerade noch akzeptablen, aber häufig gemachten Approximation, dass die Wechselwirkungen zwischen Atomen gruppenweise addiert werden können, dass also der Einfluss anderer Atome auf die Art der Wechselwirkung nur in Form eines effektiven Potentials⁸ einbezogen wird.)

Man muss also die Arbeit auf mehr als einen Prozessor verteilen. Kritisch ist dabei, wie gut die Rechnung *skaliert*. Der Idealfall perfekter Skalierung wäre erreicht, wenn bei Verdopplung der Zahl der Prozessoren eine Halbierung der Rechen-



(2) Skalierungsverhalten auf den drei unterschiedlichen Rechnersystemen für das kleine System aus 51.700 Atomen.

Quelle: J.Gujt, E. Spohr, unveröffentlicht



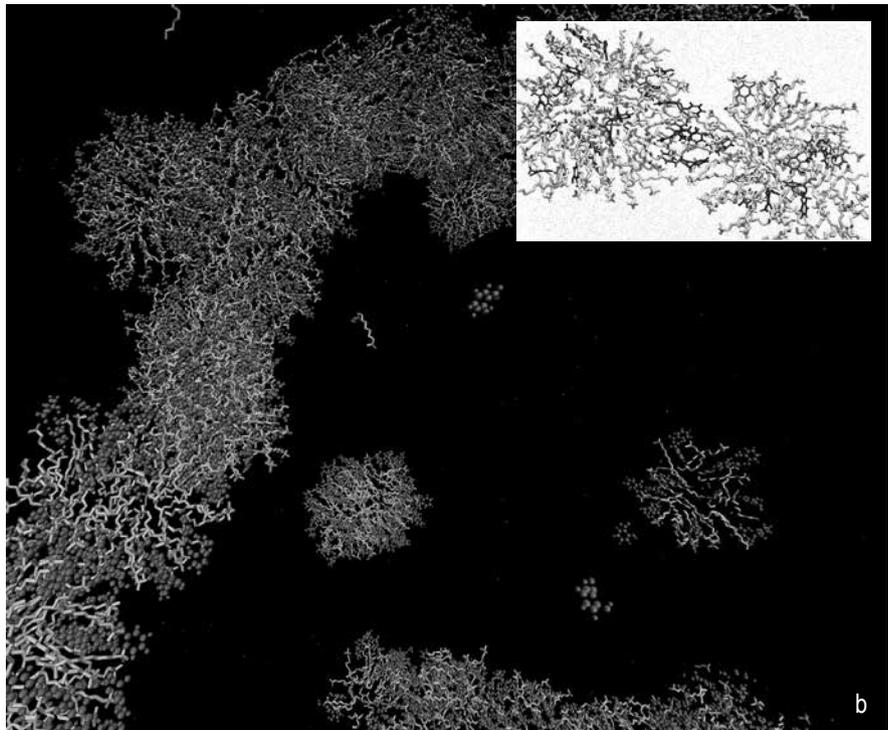
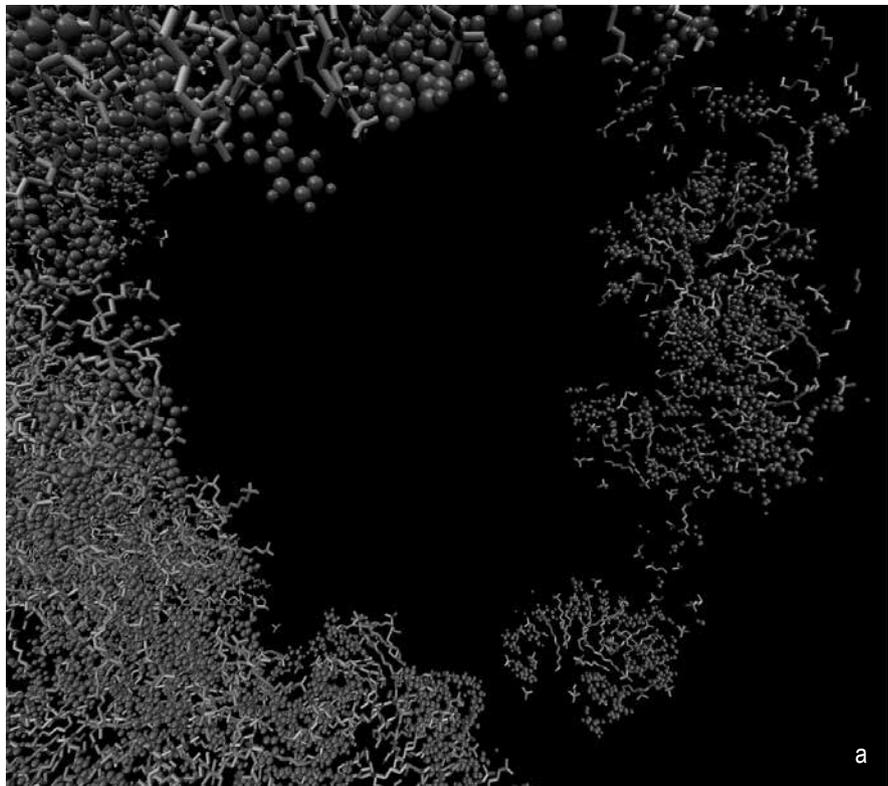
(3) Skalierungsverhalten für das System aus 549.000 Atomen für die verwendeten Rechnerarchitekturen und zwei verschiedene Molekulardynamik-Codes.

Quelle: J.Gujt, E. Spohr, unveröffentlicht

zeit erreicht würde, sich bei erneuter Verdopplung der Prozessorzahl die Rechenzeit noch einmal halbieren würde und so weiter, so dass sich zum Beispiel bei Verwendung von 1.024 Prozessoren die Rechenzeit auf ungefähr ein Tausendstel reduzieren würde. Wie in einer Behörde oder einem Unternehmen kann dies allerdings nicht immer so weiter gehen, weil ja irgendwann der Organisations-, Overhead (hier die „Kommunikation“ zwischen den Prozessoren) den Zeitgewinn durch zusätzliche Ressourcen auffrisst. Wie lange also diese Proportionalität zwischen Ressourceneinsatz und Beschleunigung der Rechnung funktioniert, hängt von der Art der Wechselwirkungen zwischen den Atomen, der Organisation des Computercodes und der Architektur des Rechners ab.

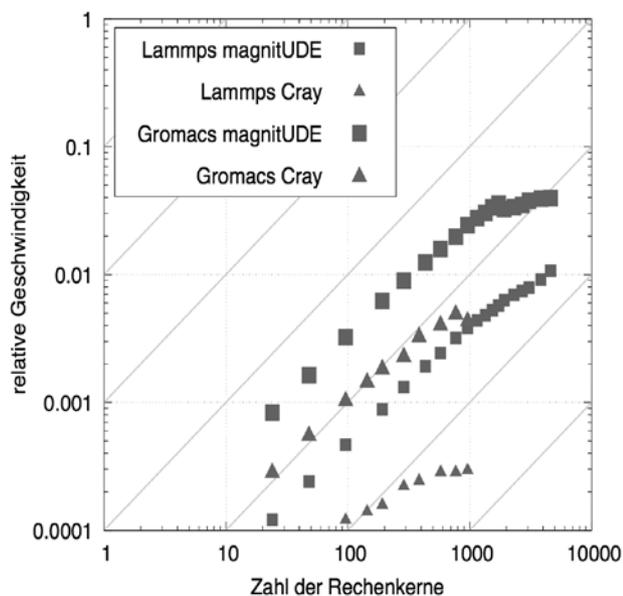
Der Idealfall

Im Idealfall müsste also eine lineare Beziehung zwischen der reziproken Rechenzeit $1/T$ und der Zahl der Rechenkerne N in der Form $1/T = f * N$ bestehen, wobei f ein Faktor ist, der von Problemgröße und Prozessorgeschwindigkeit abhängt. In doppelt logarithmischer Form ist dann $\ln(1/T) = \ln f + \ln N$. Trägt man also den Logarithmus von $1/T$ gegen den Logarithmus der Zahl der Prozessoren auf, dann sollte man eine Gerade mit der Steigung 1 erwarten. Abbildung (2) zeigt diese doppeltlogarithmische Auftragung sowie diverse Hilfslinien mit der idealen Steigung 1. Ein großer Teil der Rechnungen wurde mit einfachen modernen Server-PCs der Arbeitsgruppe durchgeführt. Relativ neue Maschinen mit bis zu 64 Rechenkernen zeigen durchgängig einen Verlauf parallel zu einer der Hilfslinien. Durch Einsatz von 64 Kernen kann man also im Beispiel die Rechnung um einen Faktor von ungefähr 25 beschleunigen, so dass Rechnungen für die Zylindermicellen innerhalb von einigen wenigen Wochen möglich sind. Dass der Faktor nicht nahe bei 64 liegt, ist



(4) Schnappschüsse der simulierten selbstorganisierten Micellstrukturen für die konzentriertere Lösung mit 549.000 Atomen (a) und die verdünntere Lösung mit 1.399.500 Atomen (b), wobei die etwa 150.000 beziehungsweise 450.000 Wassermoleküle nicht gezeigt sind. Der Einschub zeigt die Verbrückung zweier Micellen durch die ortho-HB-Moleküle.

Quelle: eigene Darstellung



(5) Skalierungsverhalten für das System aus 1.499.500 Atomen für zwei verschiedene Molekulardynamik-Codes.

Quelle: J. Gujt, E. Spohr, unveröffentlicht

teilweise auch eine Konsequenz der internen Architektur der verwendeten Prozessoren. Der schon etwas betagte CRAY-XT6m-Rechner (Installationsjahr 2010) zeigt bis zur Verwendung von 64 Kernen durchaus ähnliche Leistungen wie der aktuelle Server-PC. Man erkennt aber auch am Abknicken der Kurve für mehr als hundert Kerne, dass die Maschine für die (relativ) kleinen Systeme keine wesentliche Beschleunigung mehr bewirkt. Aufgrund der Vielzahl der verfügbaren Rechenknoten können wir allerdings Parameter systematisch verändern, um die Stabilität unserer Simulationsergebnisse gegen die gemachten Annahmen und physikalischen Approximationen zu überprüfen. Zu guter Letzt zeigt die Kurve für den State-of-the-art-Supercomputer magnitUDE, dass diese moderne Architektur noch einmal eine deutliche Steigerung pro Kern ermöglicht (erkennbar daran, dass die Kurve insgesamt höher liegt). Trotz des eher kleinen zu berechnenden Systems kann durch Einsatz von mehreren Hundert Rechenkernen insgesamt eine weitere Erhöhung der Geschwindigkeit um fast eine Größenordnung, also eine Reduktion der Rechenzeit von einigen Wochen auf zwei bis drei Tage, erreicht werden.

Brückenbildung

Aus diesen Rechnungen lernten wir dann, dass die unterschiedlichen molekularen Zusätze auf existente Micellen in unterschiedlicher Weise wirken. Gerade die Moleküle, die experimentell als besonders stark wirksam aufgefallen waren, lagern sich in sehr charakteristischer Weise in die Außenhülle der Micellen so ein, dass sie sich mit den entsprechenden Molekülen in anderen Micellen verbinden könnten.⁹

Daraus entstand die Hypothese, dass die Bildung von Brücken aus zwei HB-Molekülen ein möglicher Mechanismus zur Fusion der kugelförmigen Micellen zu den beobachteten längeren zylindrischen Objekten sein könnte (s. Abb. 4). In Simulationen, in denen wir die Entstehung von Micellen aus den Einzelmolekülen verfolgten, ergaben sich auch Anhaltspunkte für diese Hypothese, jedoch konnten Einzelereignisse des Verschmelzens kleiner Strukturen statistisch nicht hinreichend gesichert werden, und es war auch nicht klar, ob diese langfristig stabil sein würden.

Um viele Verschmelzungs- und Zerfallereignisse zu beobachten, kann man entweder ein System mit sehr wenigen Micellen über längere

Zeit beobachten, oder, was im Rahmen der statistischen Mechanik äquivalent dazu ist, man kann ein System mit vielen Micellen beobachten. Im Idealfall kann man aus beiden Simulationen ähnliche Ergebnisse erhalten (ein Maß für das *ergodische Verhalten*¹⁰ des simulierten Systems). Eine Vergrößerung des Systems ist allerdings aus physikalischen Gründen attraktiver, da man im großen System auch etwas über die dreidimensionale Anordnung der Micell-Strukturen (also die Hierarchie der Strukturen: von Molekülen zu Micellen, von Micellen zu Micellaggregaten) lernen kann. Darüber hinaus hat die Systemvergrößerung den Vorteil, dass man beim Einsatz von Großrechnern mehr Rechenkerne pro Rechenschritt einsetzen kann. Eine Verlängerung (z.B. eine Verzehnfachung) der Beobachtungszeit hätte eben auch eine Verlängerung der Wartezeit bis zur Fertigstellung der Rechnung (Verzehnfachung) zur Folge und wäre damit wenig praktikabel. Wir haben daher sehr viel größere Systeme mit insgesamt 549.000 Atomen simuliert.

Große Systeme

Für die größeren Systeme haben wir wieder Skalierungstests auf den Maschinen durchgeführt, die in Abbildung (3) gezeigt sind. Man erkennt, dass die Server-PCs zwar am besten skalieren, jedoch mit nur 64 Kernen insgesamt zu klein sind, um Ergebnisse in akzeptabler Zeit zu produzieren. CRAY-XT6m und NEC-magnitUDE skalieren bis zum Einsatz einiger Hundert Rechenkerne ganz gut und die Gesamtzeit für die Rechnung nimmt auch bei Einsatz von 1.024 Kernen (CRAY-XT6m) beziehungsweise 2.048 Kernen (NEC-magnitUDE) noch zu, obwohl dann die Rechnung doch bereits drei- oder viermal so lange dauert als es bei idealem Verhalten zu erwarten wäre, die Rechnung wird dann also ineffizient.

Die Abbildung (4a) zeigt dann ein typisches Arrangement der micellbildenden Moleküle für eines der Systeme, die teilweise auf der CRAY-XT6m, teilweise auf der NEC-magnitUDE berechnet wurden. Man erkennt, dass näherungsweise kugelförmige Gebilde sich aneinander anlagern und, stabilisiert durch die brückenbildenden HB-Moleküle, relative stabile Filamente bilden. Dabei könnte es sich um die Vorläufer, oder, da man die genaue Atomordnung aus dem Experiment auch nicht ermitteln kann, vielleicht sogar um die gesuchten Strukturen selbst handeln. Da bei dieser Simulation die Konzentration der strukturbildenden Moleküle noch zu hoch war, bildeten sich nicht nur perlenkettenartige Filamente, sondern auch Micellhaufen, die im Experiment so nicht beobachtet wurden.

Realistischere Konzentrationen

In einem weiteren Schritt, der den aktuellen Status unserer Forschung widerspiegelt, haben wir daher die Konzentration der Moleküle um einen Faktor 3 reduziert. Dies geschieht dadurch, dass man dreimal so viele Wassermoleküle, die in den Abbildungen nicht gezeigt sind, simuliert (s. Abb. 4b). Dadurch konnte man in der Tat die Filamente besser in der Lösung isolieren, die gerade statistisch analysiert werden. Die Tatsache, dass der bei weitem größte Teil des Rechenaufwands dann in der Simulation der Struktur und Dynamik des Lösungsmittels Wasser steckt, ist eine der zentralen Limitierungen der Computersimulation auf dem Gebiet der wässrigen Lösungen. Diese Begrenzungen können durch größere Rechenkapazität in Kombination mit modernen Simulationsverfahren, die über die oben beschriebene einfache Moleküldynamik in Echtzeit und in kleinen Schritten hinausgehen, teilweise überwunden werden. Dieser Aspekt soll hier aber nicht weiter erörtert werden.

Gromacs und Lammps

Abbildung (5) zeigt das Skalierungsverhalten der beiden Supercomputer für zwei verschiedene Molekulardynamik-Codes, die wir zur Simulation eines Systems aus insgesamt fast 1,5 Millionen Atomen benutzen. Gromacs¹¹ ist ein vor allem in der molekularen Biologie verwendeter Molekulardynamik-Code, der durch Assemblerprogrammierung zentraler Programmteile extrem schnell für diejenigen Probleme ist, die man damit lösen kann. Lammps¹² ist ein ausnehmend vielseitiger Molekulardynamik-Code, der nicht nur für Flüssigkeiten und Lösungen, sondern auch für Pulver und Festkörper eingesetzt wird. Diese Vielseitigkeit und die damit verbundene interne Struktur führt bei kleinen Prozessorzahlen zu deutlich geringerer Rechenleistung. Allerdings erkennt man auch, dass der Gromacs-Code ab 2.048 Kernen deutlich „einbricht“, während die Steigung der Kurve für den Lammps-Code auf der magnitude ein sehr viel besseres Skalierungsverhalten bis zu ungefähr 5.000 Rechenkernen zeigt. Für noch größere Systeme kann sich also in der Zukunft der Wechsel von Gromacs auf den Lammps-Code als nützlich erweisen, insbesondere, wenn man berücksichtigt, dass Lammps noch nicht so stark „ausoptimiert“ ist wie Gromacs. Abbildung (4b) zeigt eine Struktur der erhaltenen selbstorganisierten Filamente aus Micellen, die ihrerseits wieder jeweils aus 40 bis 100 Molekülen bestehen.

Schluss

Wir wollten mit diesem Artikel zeigen, wie das Wechselspiel aus Computer-Hardware, und -Software, physikalischen Prinzipien und chemischen Modellen dazu verwendet werden kann, Hypothesen zu entwickeln und zu evaluieren, die die Mechanismen der hierarchischen Selbstorganisation von Molekülen hin zu großen Strukturen

erhellen. Die Forschung in diesem Feld der molekularen Wissenschaften (molekulare Biologie und Medizin, Chemie, Physik und Materialforschung) ist inhärent interdisziplinär und sehr stark dominiert vom Zugang zu Rechenanlagen verschiedener Größenordnungen. Ohne solche Rechenanlagen ist Forschung auf höchstem Niveau heutzutage in vielen Bereichen fast nicht mehr möglich. Die Universität Duisburg-Essen ist mit den gemeinsam vom CCSS und dem ZIM betriebenen Supercomputern gut aufgestellt. Dies erkennt man u.a. auch daran, dass die NEC-magnitUDE seit ihrer Inbetriebnahme in den „Top500“¹³, der Liste der 500 schnellsten Supercomputer, vertreten ist, so wie es die CRAY-XT6m bei Inbetriebnahme im Jahr 2010 war.

Die Supercomputer von heute sind die Desktop-Geräte von morgen. Mit Betrieb und Nutzung eigener Supercomputeranlagen ermöglicht unsere Universität jungen Forscher*innen und Promovierenden die Nutzung von Zukunftstechnologie auf hohem Niveau für ihre wissenschaftliche Karriere.

Summary

Why does chemistry need large computers? Because the interactions between individual atoms and molecules determine the behavior of chemical systems, and because the numerical calculation of these interactions is difficult and numerically expensive. Computer simulations of these interactions form one of the pillars of modern natural sciences. Computers are particularly useful when it comes to disordered systems such as liquids and solutions in which hierarchical processes of self-organization take place on different time and length scales. A current research project of our group is the study of the formation and fusion of so-called micelles (which are, in

turn, self-assembled structures in aqueous solutions composed of many molecules with a hydrophilic (water-loving) and a hydrophobic (water-hating) end) into cylindrical and three-dimensional entities. The dependence of this behavior on small ions with specific activity offers the potential to manipulate the shape and dynamics of the micellar systems themselves. Instrumental and essential for such studies is the use of computer systems of varying computational power, which we demonstrate on the basis of our experience with the performance of server PCs in our group and the supercomputers CRAY-XT6m and NEC-magnitUDE at the Center of Computational Sciences and Simulation at our university.

Eckhard Spohr diplomierte 1983 und promovierte 1986 an der Universität Mainz. Dann war er bis 1988 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Max-Planck-Institut für Chemie in Mainz. Es folgte ein Feodor Lynen Fellowship der Alexander von Humboldt Stiftung am Department of Chemistry der University of California in Irvine. Von 1991 bis 2000 war er wissenschaftlicher Mitarbeiter der Abteilung für Theoretische Chemie an der Universität Ulm, wo er sich 1995 habilitierte. Es folgte eine zweijährige Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Energieforschung am Forschungszentrum Jülich, bevor Eckhard Spohr von 2002 bis 2007 dort seine eigene Arbeitsgruppe zum Thema „Grundlagen der Physikalischen Chemie“ leitete. Seit 2007 bekleidet er den Lehrstuhl für Theoretische Chemie an der Universität Duisburg-Essen. 1988 bekam Spohr die Otto Hahn-Medaille der Max Planck Gesellschaft verliehen und erhielt 1998 den Merckle Forschungspreis der Universität Ulm. Er ist national und international in vielen Gremien wie DFG und DAAD, der Israel Science Foundation oder auch der American Chemical Society als Gutachter gefragt.

Anmerkungen/Literatur

- 1) <http://www.theochem.rub.de/teaching/lab.de.html>
- 2) <https://www.rub.de/solvation>
- 3) <https://www.uni-due.de/ccss/cray.shtml>
- 4) https://www.uni-due.de/ccss/magnitude_main.php
- 5) <https://www.uni-due.de/zim>
- 6) <https://www.uni-due.de/ccss>
- 7) Šarac, B.; Mériguet, G.; Ancian, B.; Bešter-Rogač, M. (2013): *Langmuir* 29, 4460–4469.
- 8) Allen, M.P. and Tildesley, D.J. (1987): *Computer Simulation of Liquids*, Oxford Science Publications, Clarendon Press, Oxford, 1987.
- 9) Gujt, J.; Bešter-Rogač, M.; Spohr, E. (2016): *Langmuir* 32, 8275–8286.
- 10) Reif, F. (1965): *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, McGraw-Hill, Singapore.
- 11) <http://www.gromacs.org>
- 12) <http://lammmps.sandia.gov>
- 13) <http://www.top500.org>

Die Autoren

Jure Gujt studierte Chemie in Ljubljana, wo er 2015 auch promovierte. Von 2011 bis 2015 war er Juniorforscher am Lehrstuhl für Physikalische Chemie in Ljubljana; seit 2015 ist er Postdoc in der Arbeitsgruppe von Prof. Eckhard Spohr an der Universität Duisburg-Essen. Für seine Dissertation am Lehrstuhl von Eckhard Spohr erhielt Jure Gujt 2013 und 2014 Stipendien der Slowenischen Regierung. 2015 wurde ihm der Krka Preis für seine Dissertation verliehen.



Eckhard Spohr. Foto: Vladimir Unkovic

DuEPublico

Duisburg-Essen Publications online

UNIVERSITÄT
DUISBURG
ESSEN

Offen im Denken

ub | universitäts
bibliothek

Dieser Text wird über DuEPublico, dem Dokumenten- und Publikationsserver der Universität Duisburg-Essen, zur Verfügung gestellt. Die hier veröffentlichte Version der E-Publikation kann von einer eventuell ebenfalls veröffentlichten Verlagsversion abweichen.

DOI: 10.17185/duepublico/70373

URN: urn:nbn:de:hbz:464-20190813-104021-5

Erschienen in: UNIKATE 50 (2017), S. 28-37

Alle Rechte vorbehalten.