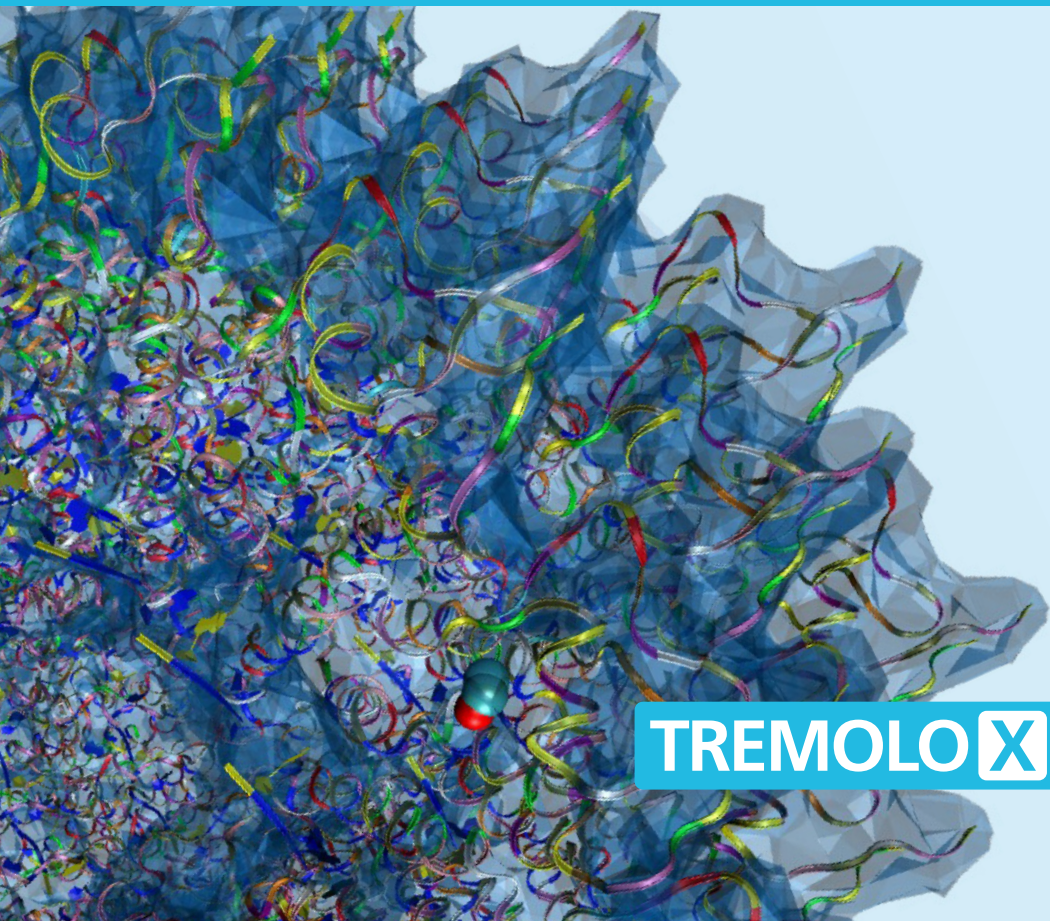


# TREMOLO-X

## MOLEKULARDYNAMISCHE SIMULATION



**TREMOLO X**

# TREMOLO-X NUMERISCHE SIMULATION DER MOLEKÜLDYNAMIK

## MOLEKULARDYNAMISCHE SIMULATION

Tremolo-X ist ein Softwarepaket zur numerischen Simulation der Wechselwirkungen zwischen Atomen und Molekülen, der Molekuldynamik. Die SCAI-Software zeigt die Eigenschaften von Werkstoffen auf der Nanoskala. Tremolo-X bietet somit die Voraussetzung zum Entwurf neuer, innovativer Materialien.

The screenshot displays the Tremolo-X software interface. The main window is titled 'TremoloGUI - project: 'tercoff''. It features several panels:

- Particle types:** A table listing particle types (C, Si, Ge, B, N) with their respective element names, masses, and degrees of freedom.
- Tersoff Potentials:** A table defining Tersoff potential parameters for different atom types.
- Simulation parameters:** A section for setting simulation conditions like target temperature and time interval.
- 3D Visualization:** A 3D rendering of a molecular structure, showing a complex network of atoms and bonds.

Overlaid on the interface is a mathematical formula defining the force function  $f_c(r_{ij})$  and the total energy  $E$ :

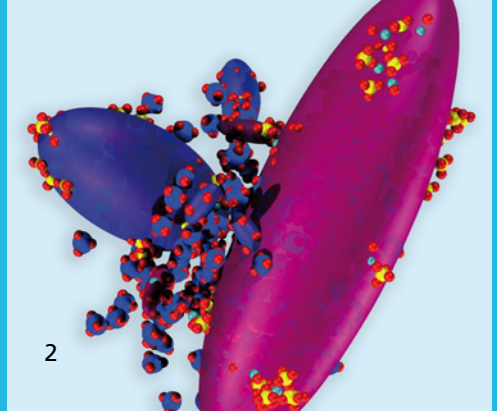
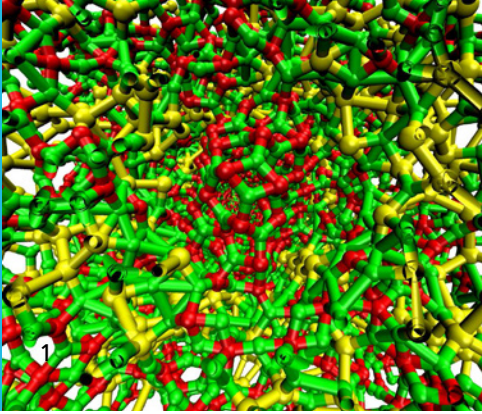
$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_{i,j} f_c(r_{ij}) \chi_{Rij} f_f(r_{ij}) + b_{ij} f_b(r_{ij})$$

$$f_f(r_{ij}) = A_{ij} \exp(-\lambda_{ij} r_{ij})$$

$$f_b(r_{ij}) = -B_{ij} \exp(-\mu_{ij} r_{ij})$$

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1 & r_{ij} < R_{ij} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{r_{ij} - R_{ij}}{S_{ij} - R_{ij}}\right) & R_{ij} < r_{ij} < S_{ij} \\ 0 & S_{ij} < r_{ij} \end{cases}$$

Bildschirmdarstellung der Software Tremolo-X



## PARALLELE EFFIZIENZ

Die Anwendungen von Tremolo-X laufen besonders effizient auf Parallelrechnern. Die Software verwendet dabei sowohl Baumalgorithmen als auch Gitteralgorithmen, um kurz- und langreichweitige Potentiale berechnen zu können.

## GRAFISCHE BEDIENOBERFLÄCHE

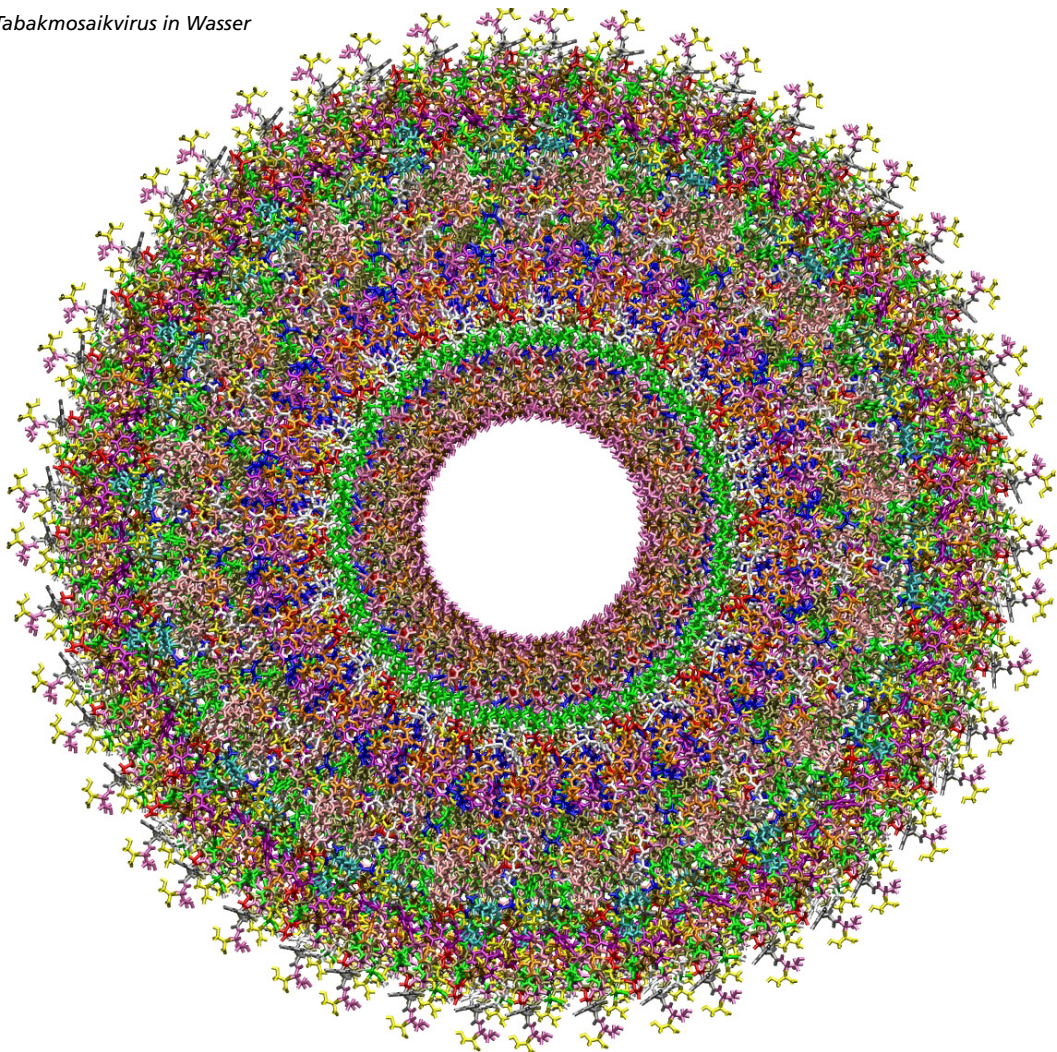
Das Softwarepaket Tremolo-X beinhaltet eine benutzerfreundliche grafische Bedienoberfläche. Diese ermöglicht das einfache Aufsetzen und Auswerten numerischer Experimente.

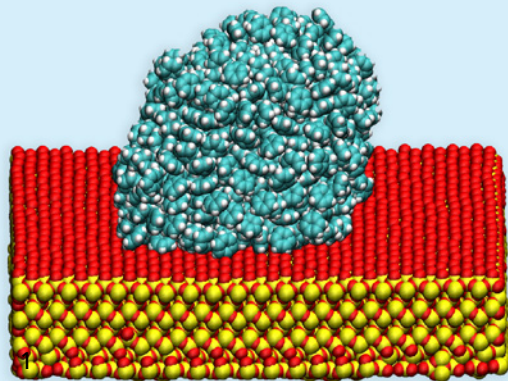
## MODELLIERUNG

Tremolo-X umfasst effiziente parallele Implementierungen aller gängigen Potentialtypen zur Modellierung von Systemen in den Bereichen Materialwissenschaft, Nanotechnologie, Biochemie und Biophysik.

*1 BN-Nanoröhren ver-  
stärkte SiBN-Keramik  
2 Baustein in zement-  
artigem C-S-H Gel*

*Tabakmosaikvirus in Wasser*





*1 Benzol auf*

*Siliziumdioxid*

## VORTEILE

- Benutzerfreundliche grafische Bedienoberfläche
- Parallele Version für Rechner mit verteiltem Speicher (MIMD) mittels Message-Passing Interface (MPI) umgesetzt
- Parallele Implementierung der reaktiven Mehrkörperpotentiale von Brenner, Marian, Tersoff, Feuston-Garofalini, Stillinger-Weber und Sutton-Chen
- Parallele Implementierung von Bindungs-, Winkel-, Torsions- und uneigentliche Torsionspotentialen mit fester Nachbarschaftsstruktur
- NVE-, NVT- und NPT-Ensembles sowie Strukturoptimierung und dissipative Partikeldynamik (DPD)
- Verschiedene Zeitintegratoren und lokale Optimierer: Verlet und Mehrschritt Beeman-Verlet sowie Fletcher-Reeves und Polak-Ribière
- Berechnung vieler Messgrößen, zum Beispiel: Diffusionskoeffizienten, Spannungs-Dehnungs-Diagramme, Elastizitätskonstanten, Verteilungsfunktionen, Korrelationsfunktionen und Kürzeste-Weg-Ring-Statistiken
- Effiziente Implementierung kurzreichweitiger Potentiale via Linked-Cell-Verfahren und Parallelisierung mittels dynamischer lastbalancierter Gebietszerlegung
- Verschiedene schnelle Algorithmen für langreichweitige Potentiale: Particle-Mesh-Ewald mit Gebietszerlegung und paralleler 3D-FFT und parallelem Mehrgitter als auch Barnes-Hut-/Fast-Multipol-Methoden und Parallelisierung mit raumfüllenden Kurven
- Modulare Implementierung ermöglicht die einfache Erweiterbarkeit um weitere Potentialtypen

# REFERENZEN

## PROJEKTE UND KOOPERATIONEN

Tremolo-X kam bereits in vielen praktischen Projekten aus unterschiedlichen Anwendungsbereichen zum Einsatz. Erfolgreiche Berechnungen konnten beispielsweise in der Nanotechnologie, den Materialwissenschaften, der Biochemie oder auch der Biophysik durchgeführt werden.

Eine Auswahl von Projekten und Kooperationen, bei denen Tremolo-X für molekulardynamische Simulationen eingesetzt wurde:

- **ScaFaCoS – Scalable fast coulomb solver**

Ein vom Bundesministerium für Bildung und Forschung gefördertes Projekt deutscher Forschungseinrichtungen und Partnern aus der Industrie (darunter IBM und BASF).

- **CODICE – Computationally driven design of innovative cement-based materials**

Ein im 7ten EU-Rahmenprogramm gefördertes, internationales Forschungsprojekt von Forschungseinrichtungen und Partnern aus der Industrie (darunter BASF und CTG).

- **Nanodrähte und Nanoröhren: von kontrollierter Synthese zur Funktion**

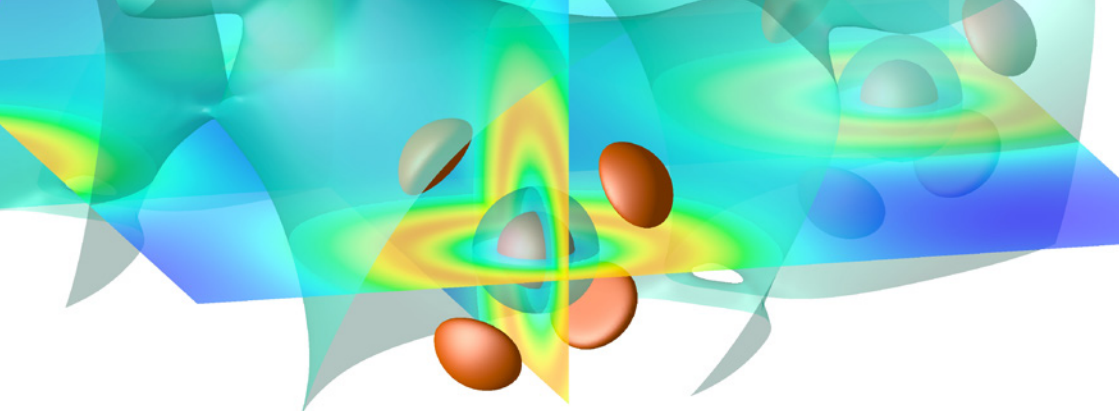
Schwerpunktprogramm 1165 der Deutschen Forschungsgemeinschaft

- **Numerik für Multiskalenmodelle und singuläre Phänomene**

Sonderforschungsbereich 611 der Deutschen Forschungsgemeinschaft

- **Anorganische Festkörper ohne Translationssymmetrie**

Sonderforschungsbereich 408 der Deutschen Forschungsgemeinschaft



## GESCHÄFTSFELD VIRTUAL MATERIAL DESIGN

Die Abteilung »Virtual Material Design« am Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI simuliert neue Materialien auf der Nano-, Mikro- und Makroskala. Dabei kommen große Parallelrechner mit modernen numerischen Multiskalen-Methoden aus der Quantenmechanik, Moleküldynamik und der Kontinuumsmechanik zum Einsatz. Ziel ist es, innovative Werkstoffe mit interessanten Eigenschaften im Rechner zu kreieren und zu untersuchen, um so Struktur- und Designvorschläge zu machen, noch bevor Stoffe real im Labor synthetisiert werden.

Mit Hilfe der numerischen Simulation können so Experimente im Labor durch virtuelle Experimente im Rechner ersetzt werden. Dies senkt die Entwicklungskosten und erlaubt die Kreation völlig neuartiger Materialien.

### Leistungsangebot

Die Schwerpunkte der Forschungs- und Entwicklungsarbeit der Abteilung »Virtual Material Design« liegen auf:

- Multiskalen-Modellierung und Numerische Simulation in der Materialwissenschaft und Nanotechnologie
- Hochleistungsrechnen in Quantenmechanik, Moleküldynamik und Kontinuumsmechanik

Außerdem bietet Fraunhofer SCAI in diesen Bereichen seinen Partnern und Kunden individuelle Lösungen an. Dazu gehören insbesondere die mathematische Modellierung und Entwicklung von Algorithmen sowie maßgeschneiderte Software und numerische Simulation.

## **KONTAKT**

Fraunhofer-Institut für Algorithmen und  
Wissenschaftliches Rechnen SCAI

Dr. Jan Hamaekers  
Leiter des Geschäftsfelds Virtual Material Design

Schloss Birlinghoven 1  
53757 Sankt Augustin

Telefon +49 2241 14-4230  
[tremolo-x@scai.fraunhofer.de](mailto:tremolo-x@scai.fraunhofer.de)

[www.scai.fraunhofer.de](http://www.scai.fraunhofer.de)  
[www.tremolo-x.de](http://www.tremolo-x.de)