

C2115

Praktický úvod do superpočítání

2. lekce

Petr Kulhánek

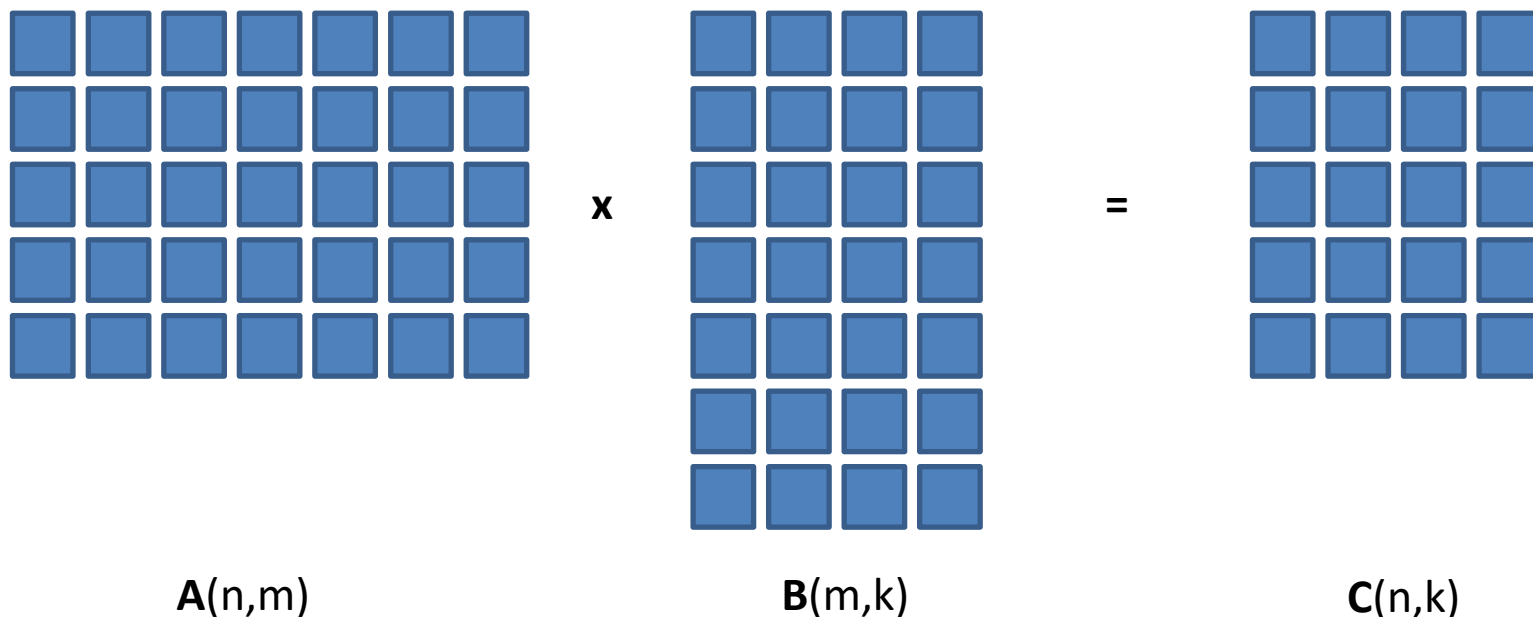
kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita, Kamenice 5, CZ-62500 Brno

Modelové problémy a systémy

- násobení matic
- numerická integrace
- QM a MD výpočty
- predikce 3D struktur (alphafold)

Násobení matic



Využití:

- hledání vlastních čísel a vektorů čtvercových matic (kvantová chemie)
- řešení soustavy lineárních rovnic (QSAR, QSPR)
- transformace (posunutí, rotace, škálování - zobrazení a grafika)

Opakování/samostudium:

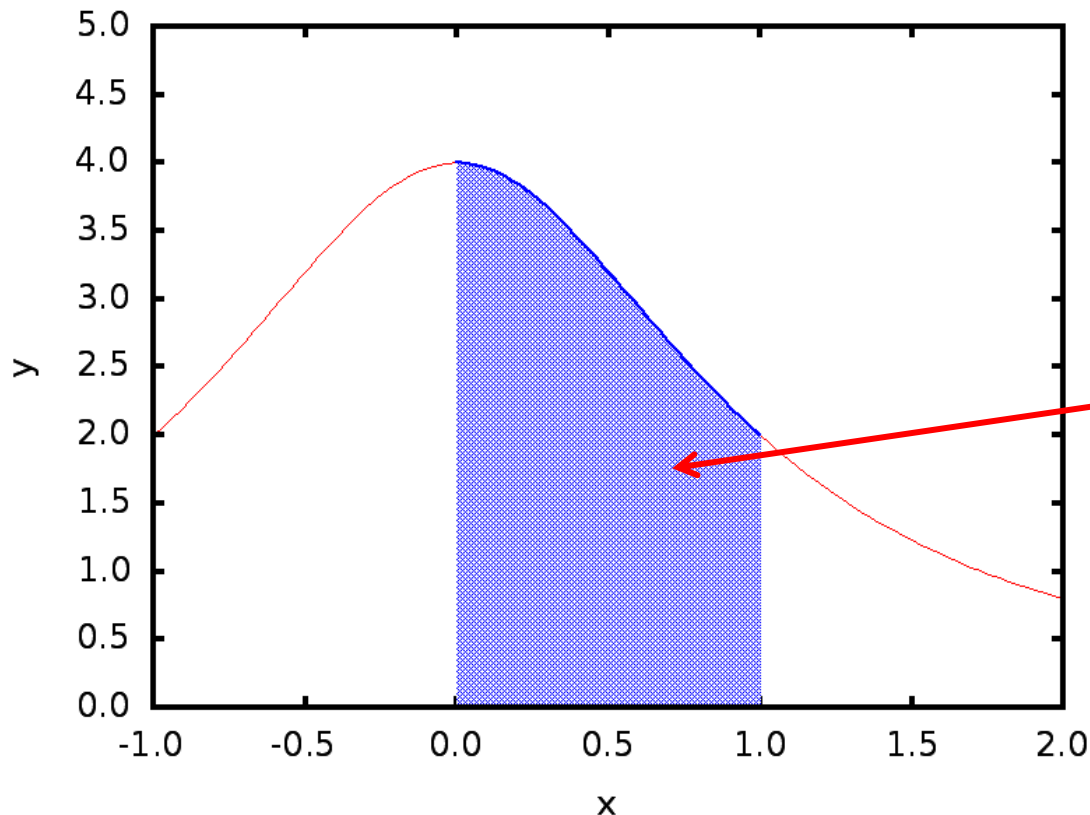
- Jak se násobení matic provádí?
- Kolik operací je nutné provést?



Numerická integrace

Výpočet určitých integrálů je možné provádět numerickými metodami, které se používají pokud:

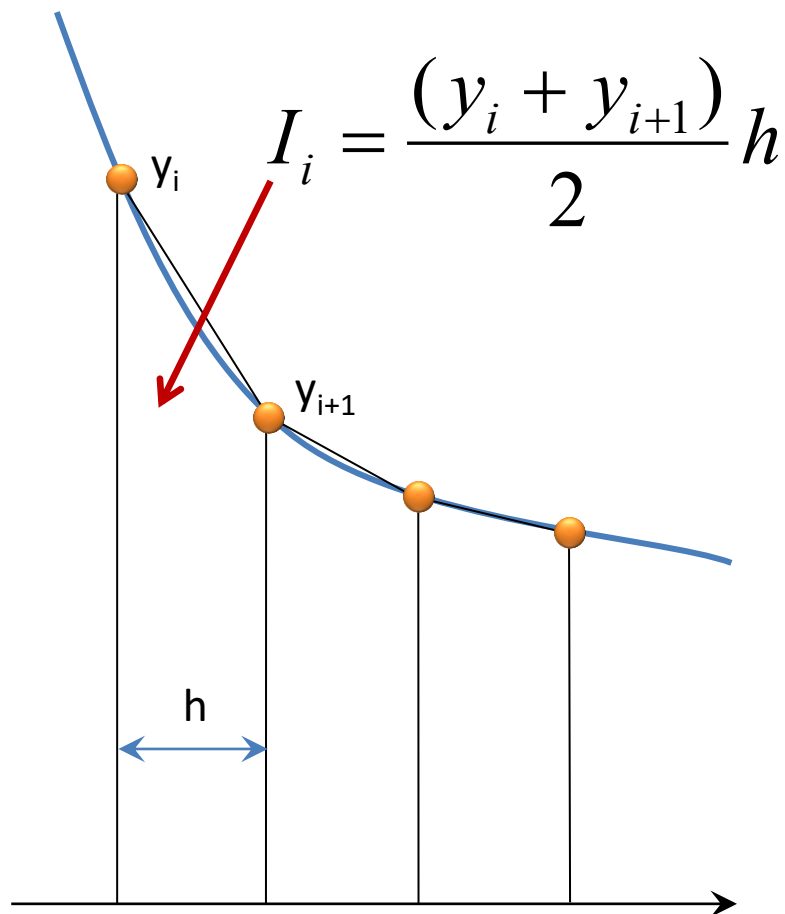
- funkci není možné integrovat analyticky
- analytická integrace je prakticky nerealizovatelná (přesnost vs výpočetní náročnost)



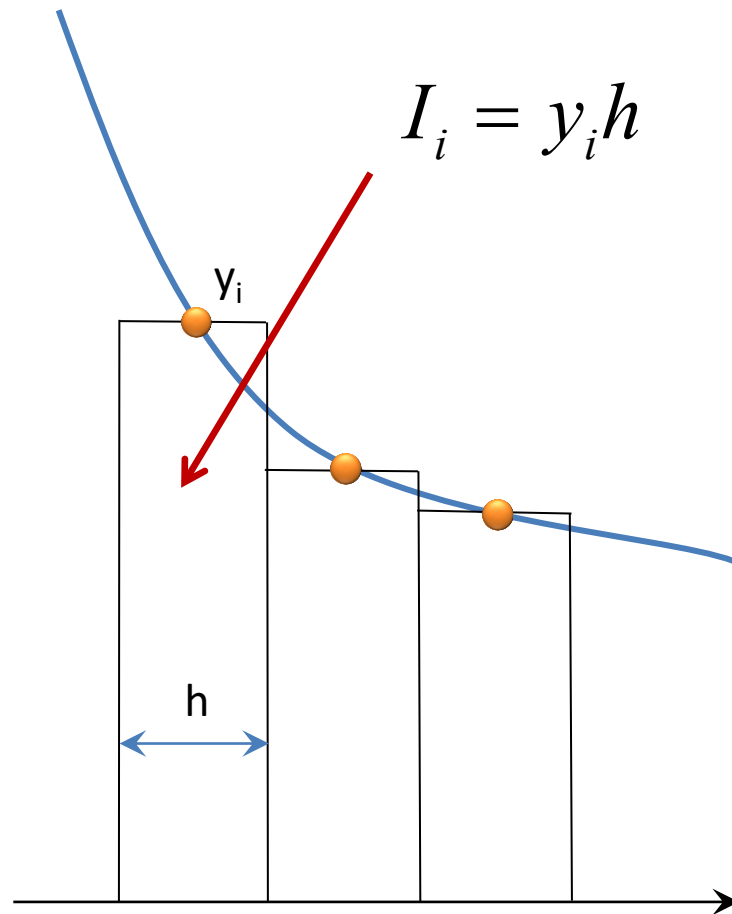
$$I = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$$

určitý integrál je plocha pod křivkou
v rozsahu integračních mezí

Metody numerická integrace



lichoběžníková metoda



obdélníková metoda



Fulleren C_{60}

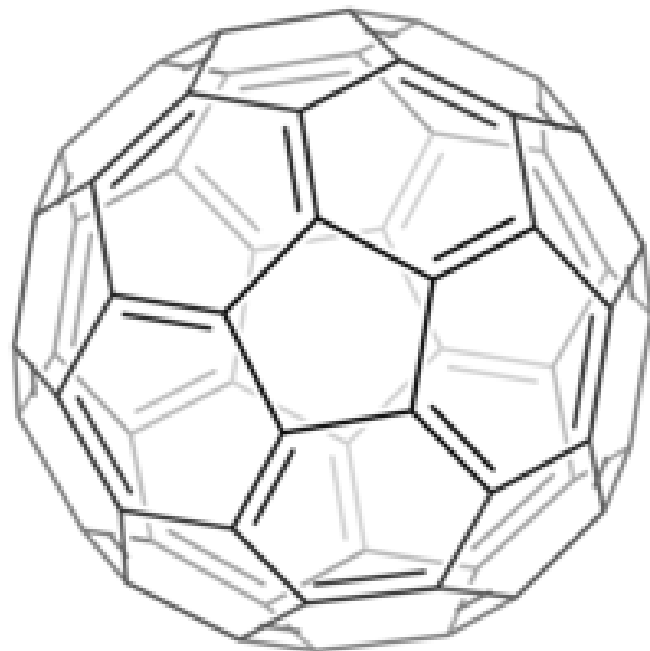
<https://en.wikipedia.org/wiki/Buckminsterfullerene>

Úkoly:

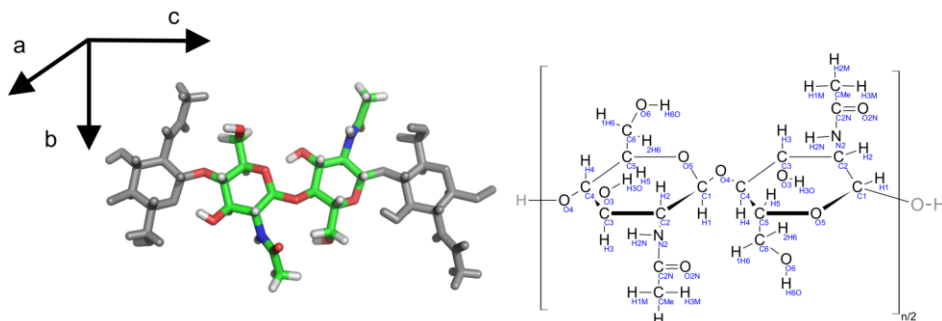
- vytvoření modelu molekuly C_{60}
- optimalizace geometrie
- výpočet molekulárních vibrací

Metody:

- semiempirická kvantově-chemická metoda PM6

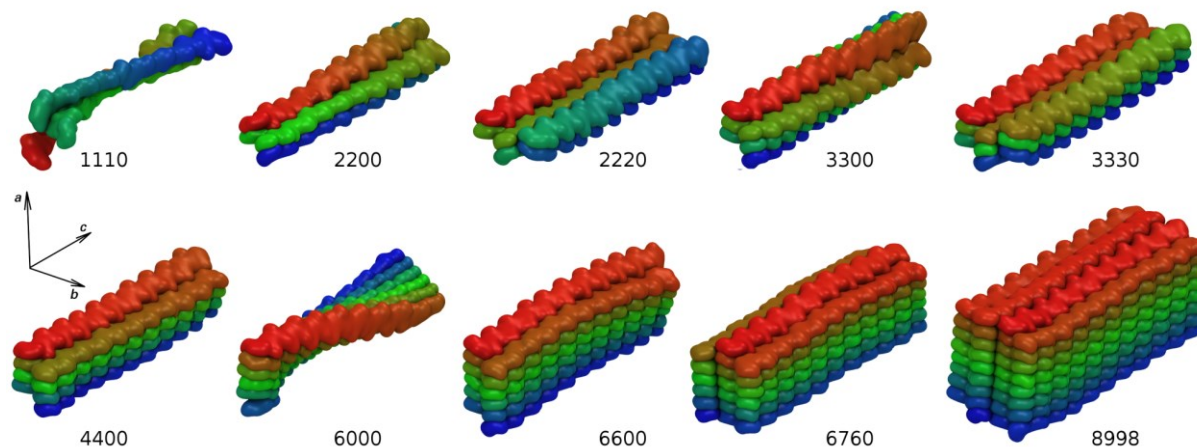


Chitinové vlákna



stavební jednotka

mechanické vlastnosti
chitinových nanovláken



Úkoly:

- MD simulace vlákna 6000

Strelcova, Z.; Kulhanek, P.; Friak, M.; Fabritius, H.-O.; Petrov, M.; Neugebauer, J.; Koca, J. The structure and dynamics of chitin nanofibrils in an aqueous environment revealed by molecular dynamics simulations. *RSC Adv.* **2016**, *6* (36), 30710–30721
DOI: 10.1039/c6ra00107f

Souvislost s kurzem C2115

Násobení matic:

- limitující faktory související s architekturou počítačů (paměťová propustnost)
- optimalizované knihovny pro numerické výpočty (BLAS, LAPACK, Intel MKL, AMD MCL)

Numerická integrace:

- limitující faktory související s architekturou počítačů (zaokrouhlovací chyby a jejich dopad na výsledek integrace)
- paralelizace výpočtu (OpenMP versus MPI)

Fulleren C_{60} :

- spouštění výpočtů v programu Gaussian
 - v MetaCentru (PBSPro)
 - na klastru WOLF (PBSPro a Infinity)

Chitinové vlákno:

- molekulárně dynamické simulace v programu pmemd
 - škálování CPU paralelní implementace
 - srovnání běhu na CPU a GPU

Predikce 3D struktur:

- alphafold (AI [Artificial Intelligence] na GPU)

Cvičení 1

Fulleren C_{60} :

1. Postavte 3D model molekuly fullerenu C_{60} a proveďte jeho optimalizaci pomocí silového pole MMFF94. Ke stavbě 3D modelu použijte strukturu ve formátu SMILES (wikipedie pro C_{60}). Výsledný model uložte ve formátu xyz. Ke stavbě použijte buď program avogadro nebo nemesis.

Chitinové vlákno:

Ekvilibrovaný model chitinového vlákna je možné nalézt v adresáři:

`/home/kulhanek/Documents/C2115/Lesson02/chitin`

topologie systému je 6000.parm7

souřadnice, rychlosti a velikost boxu je v 6000.rst7

2. Zobrazte model v programu VMD.
3. Kolik atomů model obsahuje?
4. Kolik vláken chitinu model obsahuje?
5. Jaký tvar má simulační box?

Samostudium

1. Jak se provádí násobení matic?
2. Kolik operací je zapotřebí při násobení matic provést?
3. Jaká je výpočetní komplexita násobení matic?
4. Která metoda numerické integrace je přesnější, obdélníková nebo lichoběžníková?
5. Nalezněte jiné metody numerické integrace.
6. Je možné numerickou integrací vypočítat neurčitý integrál?

