

LAMMPS

Općenito

LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) je standardna računalno-kemijska aplikacija za molekulsku dinamiku, s naglaskom na modeliranje materijala. Aplikacija ima sposobnost simulacija materijala u čvrstom stanju (poput metala i poluvodiča), ali i biomolekula te polimera.

Razvojni tim je opisuje kao "paralelni simulator" čestica na atomskoj, mezo- ili kontinuumskoj razini.

LAMMPS može raditi na pojedinačnim (jednojezgrenim) procesorima ili paralelno (na višejezgrenim procesorima) koristeći MPI standard razmjene poruka između procesa te koristeći prostornu dekompoziciju simulacijske domene.

Verzija LAMMPS-a dostupna na računalnom klasteru Isabella kompajlirana je Intelovim C/C++ i Fortran kompajlerima te koristi Open MPI knjižnice.

Moduli

Moduli koji dopremaju LAMMPS u vašu okolinu definirani su u tablici niže:

Verzija	Modul
23Jun2022	lammeps/23Jun2022

Primjer korištenja

Ulazne tj. *input* podatke za primjere niže možete preuzeti u [zip arhivi](#).

Primjer serijskog izvođenja

run.sge

```
#!/bin/bash

#$ -N lammeps
#$ -cwd

module load lammeps/23Jun2022

lmp -in in.chain
```

Primjer paralelnog izvođenja

run.sge

```
#!/bin/bash

#$ -N lammeps
#$ -cwd
#$ -pe *mpi 8

export OMP_NUM_THREADS=${NSLOTS}

module load lammeps/23Jun2022

mpirun -np ${NSLOTS} lmp -sf intel -in in.chain -pk intel 0 mode double
```

Praktični primjer

Simulacija molekulske dinamike elektrolita (vodena otopina natrijevog klorida) omeđenog ugljikovim stijenkama

Izračun se može podijeliti u tri dijela:

1. formacija sustava elektrolita
2. minimizacija energije sustava elektrolita
3. ekvilibracija sustava elektrolita

Sve input datoteke i detaljan opis parametara dostupni su na [web stranici](#).

Formacija sustava elektrolita

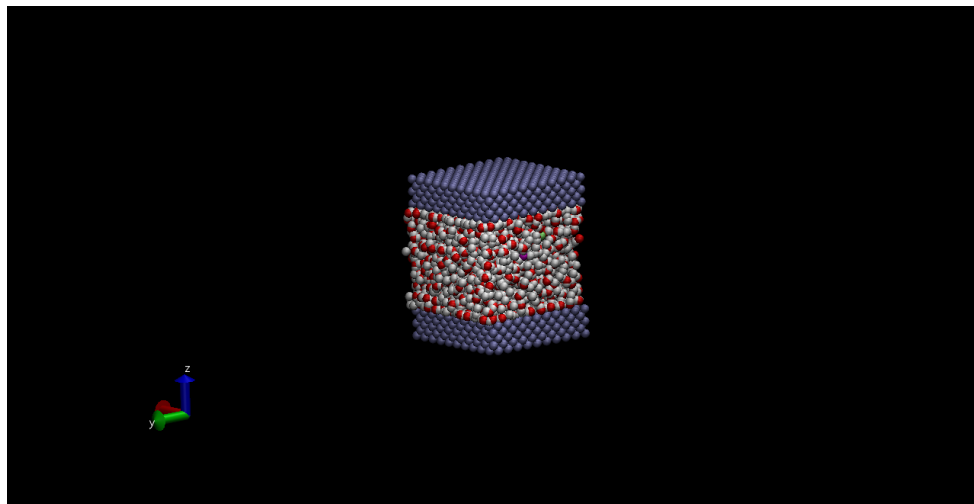
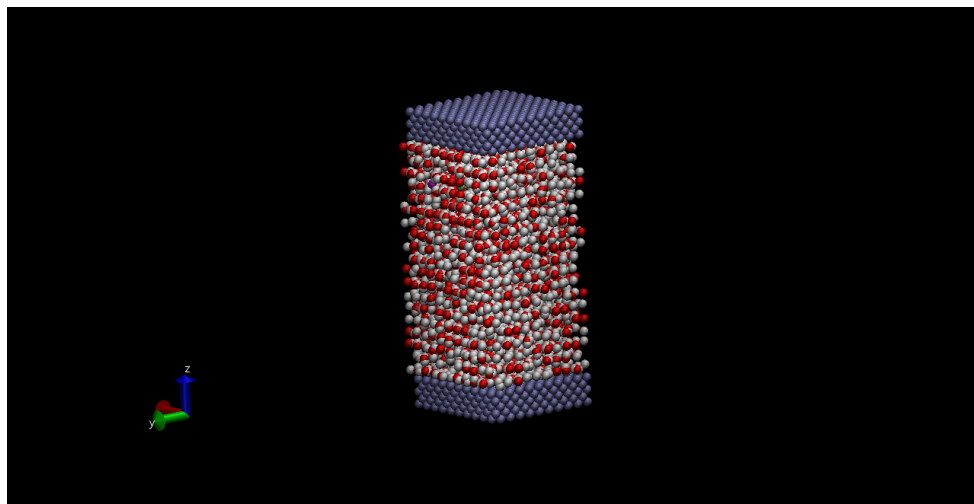
Prvi korak uključuje formaciju simulacijske kutije ispunjene vodenom otopinom natrijevog klorida omeđenom dvije stijenke koje čine fiksirani ugljikovi atomi. Atomi su predstavljeni poput točaka opisanih nabojem i masom. Veze između njih okarakterizirane su Lennard-Jonnes potencijalom (opis interakcija kratkog dometa) te Coulombovim interakcijama (opis interakcija dugog dometa). Simulacijska kutija pravokutnog je oblika sa 6 različitih tipova atoma; 2 tipa atoma ugljika (razlikuju se ovisno koju stijenku čine zbog praktičnih razloga) koji su esencijalno identični, atom vodika, kisika, natrija i klora. Eksplisitne molekule vode opisane su TIP4P modelom (parametri: pozicije, kutovi, veze) koji sadrži 4 točke naboja, uključujući elektronegativni dio kisikovog atoma.

Minimizacija energije sustava elektrolita

Sustav postavljen u prethodnom koraku sadrži atome koji mogu biti na nedovoljnoj udaljenosti naspram ostalih atoma, što rezultira neprirodno velikim silama i posljednično brzinama prilikom numeričkog rješavanja Newtonovih jednadžbi gibanja. Korak minimizacije omogućava zauzimanje prigodnih pozicija atoma unutar simulacijske kutije što omogućuje uspješnu provedbu simulacije.

Ekvilibracijska faza

Posljednja je faza produkcijska tijekom koje se sustav dovodi do ekvilibrija postupno uvodeći tlak od 1 atm i temperaturu od 300 K. Prilikom doseganja prethodno definiranih vrijednosti ekvilibrijskog stanja, simulacija uspješno završava. Sustav je potom spreman za provođenje dodatnih analizi poput simulacije s fleksibilnim ugljičnim stijenkama.



Slika 1. Prva i posljednja struktura dinamičke evolucije sustava u vremenu dobivena provedbom treće, ekvilibrijske faze.