



به نام خدا



آشنایی با دینامیک مولکولی

و

معرفی نرم افزار LAMMPS

سید مهدی واعظ علایی

دانشکده فیزیک دانشگاه تهران

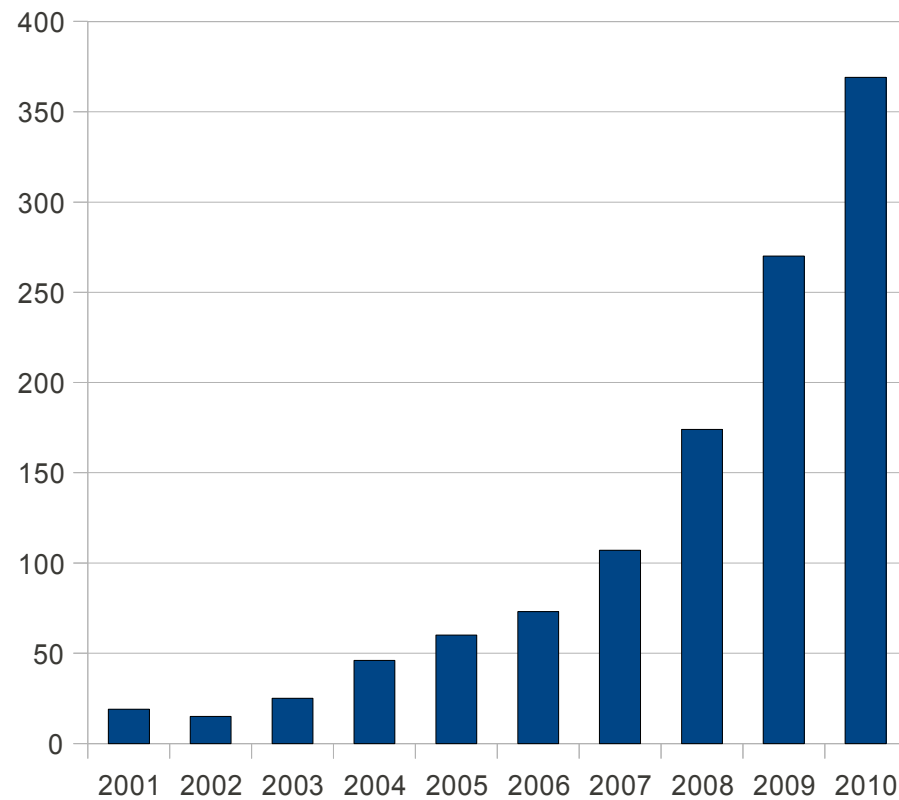
اسفند ۱۳۸۹

هدف از برگزاری دوره

- آموزش نرم افزار و نحوه استفاده از آن
- شبیه سازی های دینامیک مولکولی در مقیاس نانو
- معرفی قابلیتها و ایجاد انگیزه در استفاده بهینه از نرم افزار
- معرفی گستره وسیع قابلیتها

تعداد مقالات چاپ شده با استفاده از نرم افزار

LAMMPS



ساختار کارگاه

- مختصری از دینامیک مولکولی
- درباره نرم افزار و قابلیت های آن
- نحوه کار با نرم افزار (نوشتن فایل ورودی: input)
- نحوه بررسی نتایج و استخراج کمیت های فیزیکی
- شبیه سازی نانوساختارها و مطالعه خواص فیزیکی آنها
- شبیه سازی سیستم های زیستی
- شبیه سازی سیستم های درشت دانه و بیضی گونه ها

ساختار کارگاه (ادامه)

• روز اول

- معرفی نرم افزار
- آموزش نحوه اجرای مثالهای نرم افزار
- نحوه نمایش نتایج و محاسبه کمیات فیزیکی

• روز دوم

- شبیه سازی ساختارهای نانو، مواد زیستی و سیستم ذرات بیضی گون

ساختار کارگاه (ادامه)

- بخش تئوری

- آموزش به صورت کامل

- ارائه تمرین برای بازآموزی مسائل مطرح شده

- بخش عملی

- اجرای تمرینها توسط شرکت کنندگان و رفع اشکالات

- گروه الکترونیکی

- ارتباط با شرکت کنندگان و پاسخ به سوالات

مواد مورد نیاز

- کليه نرم افزارهای مورد استفاده متن باز هستند:

VMD —

LAMMPS —

Gnuplot —

- فایل های اجرایی و تمرین ها:

- <http://physics.ut.ac.ir/~smvaez/EE.zip>
- <http://physics.ut.ac.ir/~smvaez/vmd187win.zip>

انگیزه

- استفاده از لینوکس
- استفاده از خوشه‌های رایانه‌ای

مقدمه‌ای بر شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

نگاه چند-مقیاسی به مواد

Macroscale structural engineering

$O(1000\text{ m})$



$O(10\text{ m})$



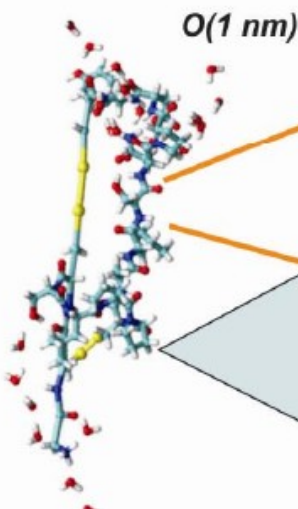
$O(1\text{ m})$



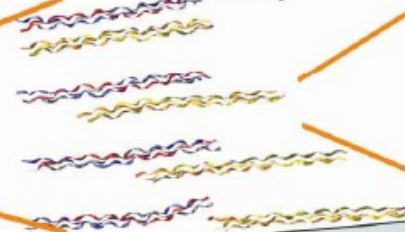
$O(0.1\text{ m})$



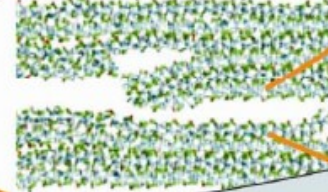
$O(1\text{ nm})$



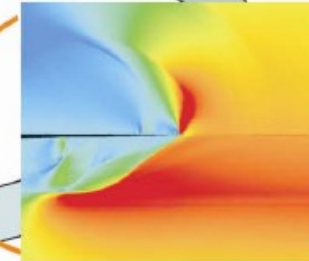
$O(100\text{ nm})$



$O(1\text{E-}6\text{ m})$

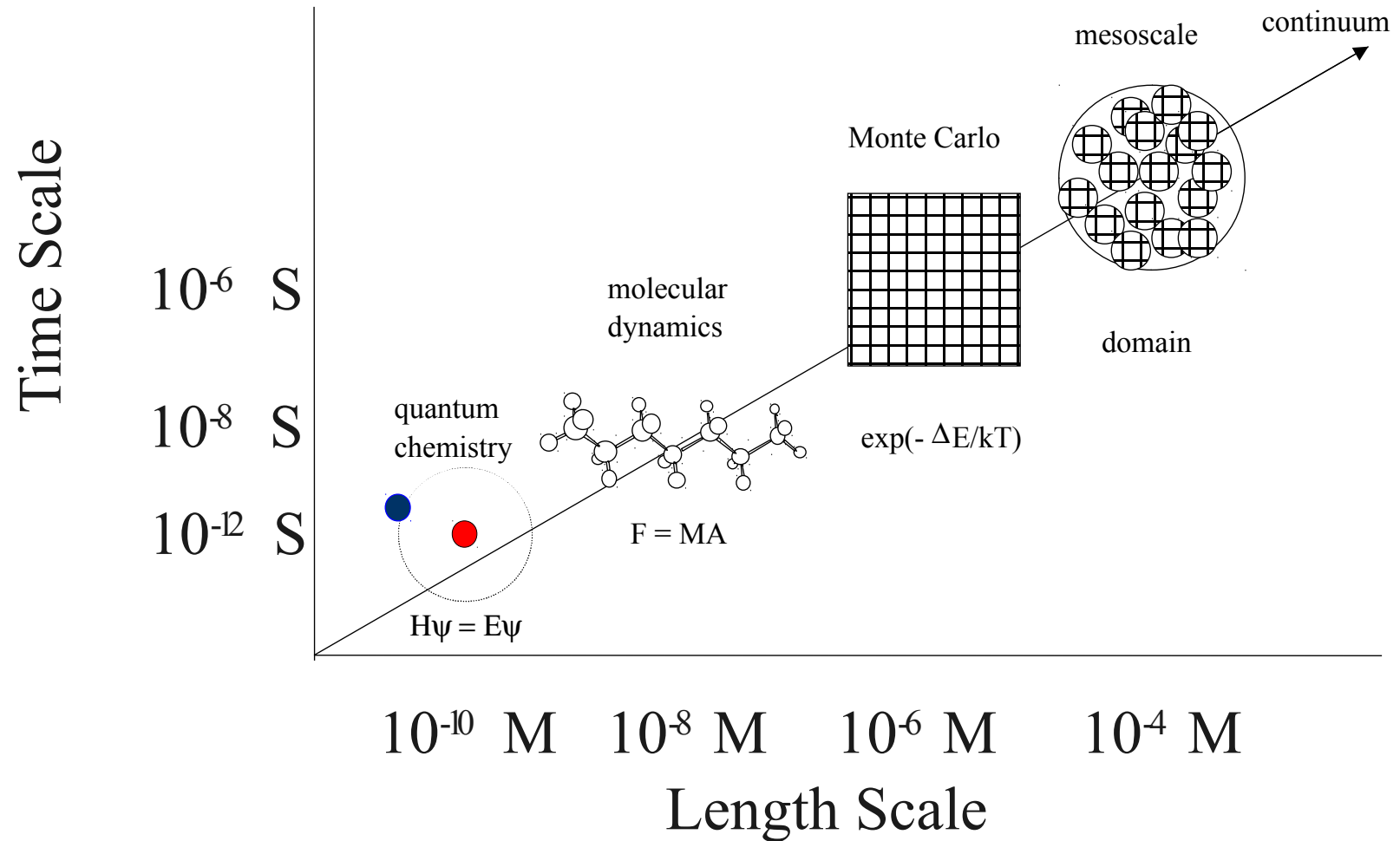


$O(0.01\text{ m})$

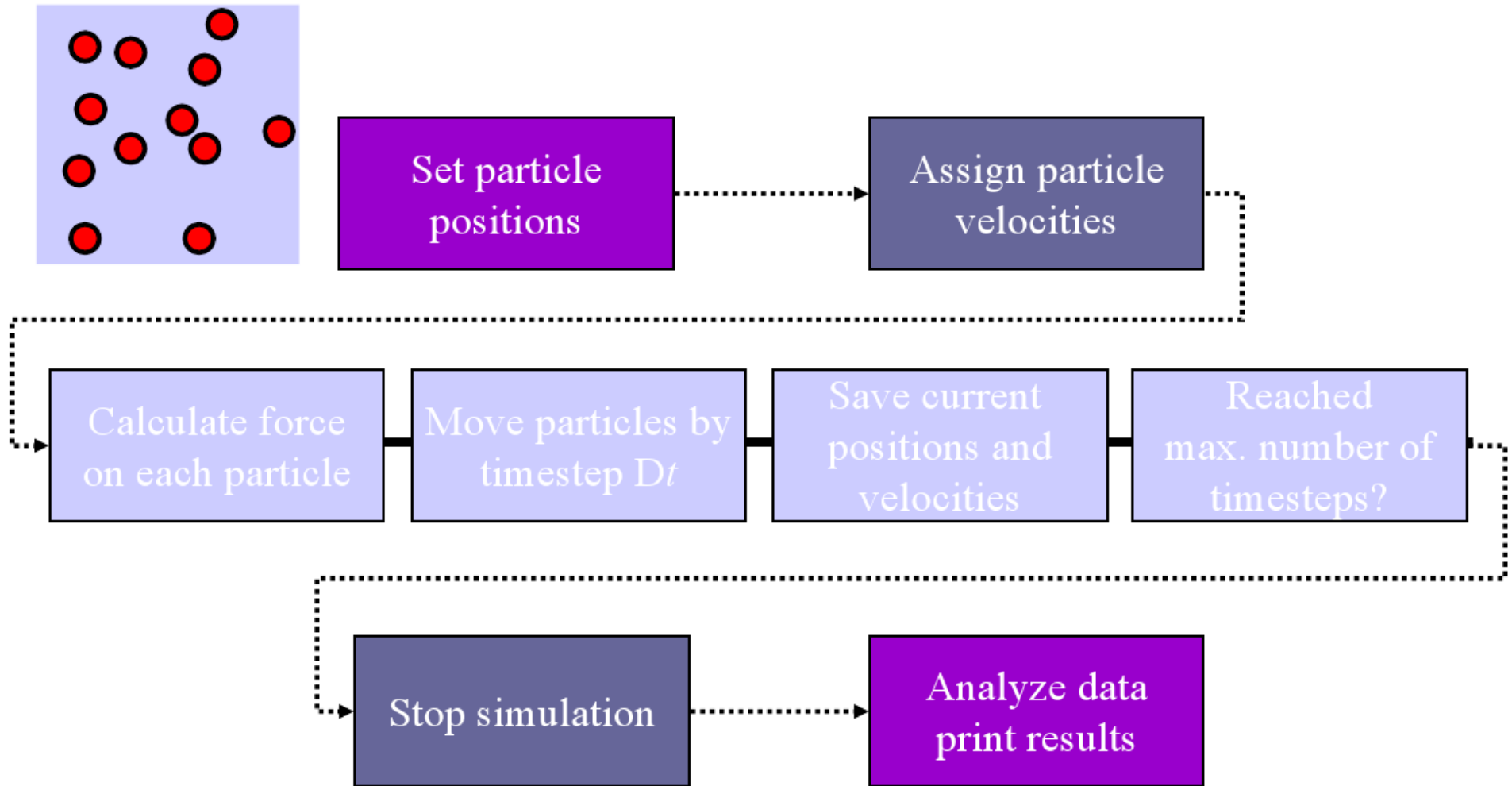


Ultrасcale structural engineering

نمونه شبیه‌سازی در چند مقیاس



یک شبیه سازی دینامیک مولکولی نوعی



شبه‌سازی دینامیک مولکولی

- قانون دوم نیوتن

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = - \frac{\partial V(\mathbf{r}^N)}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (i = 1, \dots, N)$$

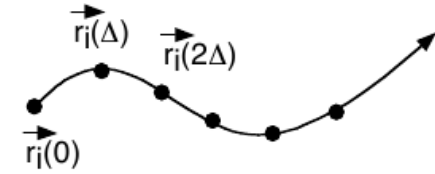
$$V = \sum_{i < j} u_{ij}(|\mathbf{r}_{ij}|) + \sum_{i, j < k} v_{jik}(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{r}_{ik})$$

- پتانسیلهای بس ذره‌ای



الگوریتم دینامیک مولکولی

$$\begin{cases} \vec{r}_i(t + \Delta) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t)\Delta + \frac{1}{2}\vec{a}_i(t)\Delta^2 \\ \vec{v}_i(t + \Delta) = \vec{v}_i(t) + \frac{\vec{a}_i(t) + \vec{a}_i(t + \Delta)}{2}\Delta \end{cases} \quad \vec{a}_i = -\frac{1}{m_i} \frac{\partial V}{\partial \vec{r}_i}$$

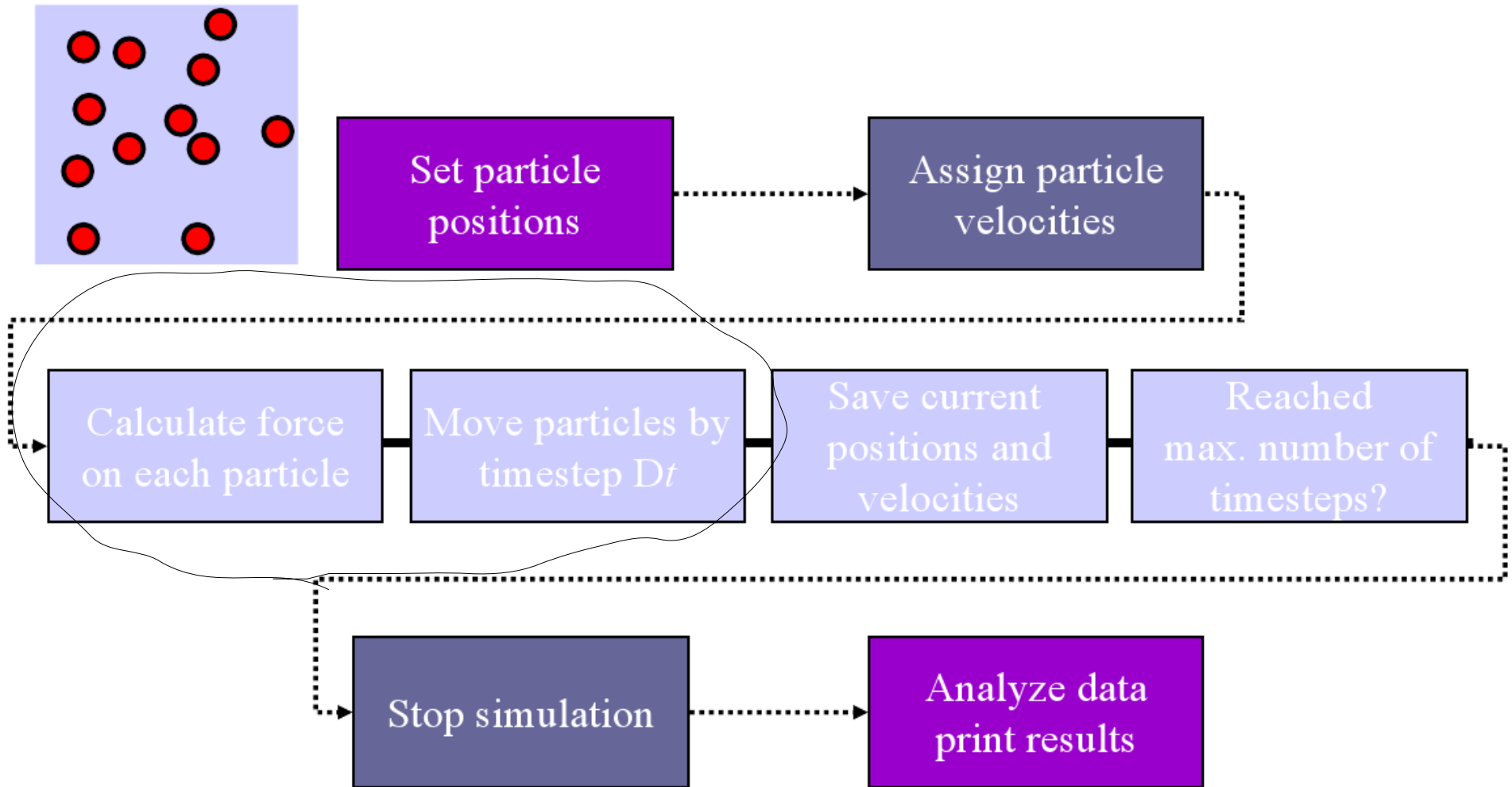


الگوریتم ورلت سرعتی

Given $(\vec{r}_i(t), \vec{v}_i(t))$

1. Compute $\vec{a}_i(t)$ as a function of $\{\vec{r}_i(t)\}$
2. $\vec{v}_i(t + \frac{\Delta}{2}) \leftarrow \vec{v}_i(t) + \frac{\Delta}{2} \vec{a}_i(t)$
3. $\vec{r}_i(t + \Delta) \leftarrow \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t + \frac{\Delta}{2})\Delta$
4. Compute $\vec{a}_i(t + \Delta)$ as a function of $\{\vec{r}_i(t + \Delta)\}$
5. $\vec{v}_i(t + \Delta) \leftarrow \vec{v}_i(t + \frac{\Delta}{2}) + \frac{\Delta}{2} \vec{a}_i(t + \Delta)$

یک شبیه سازی دینامیک مولکولی نوعی



تابع توزیع ماکسول-بولتزمن سرعتها

$$n(v) \propto \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} v^2 \exp\left(\frac{-mv^2}{2k_B T} \right)$$

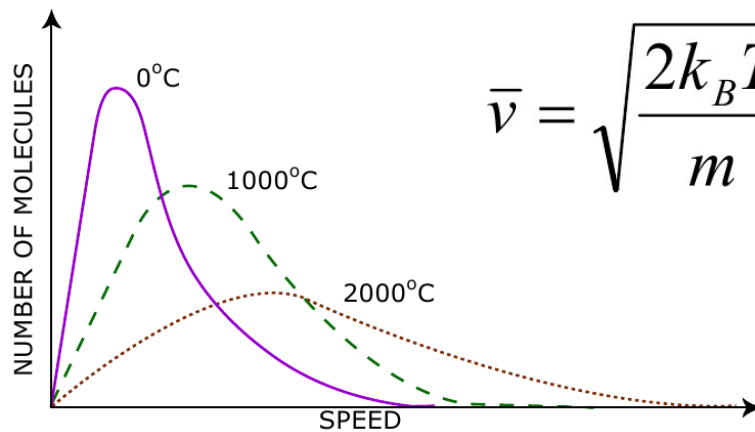


Figure by MIT OCW.

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}, \quad v_{rms} = \sqrt{\frac{3k_B T}{m}}$$

پتانسیل لنارد-جونز

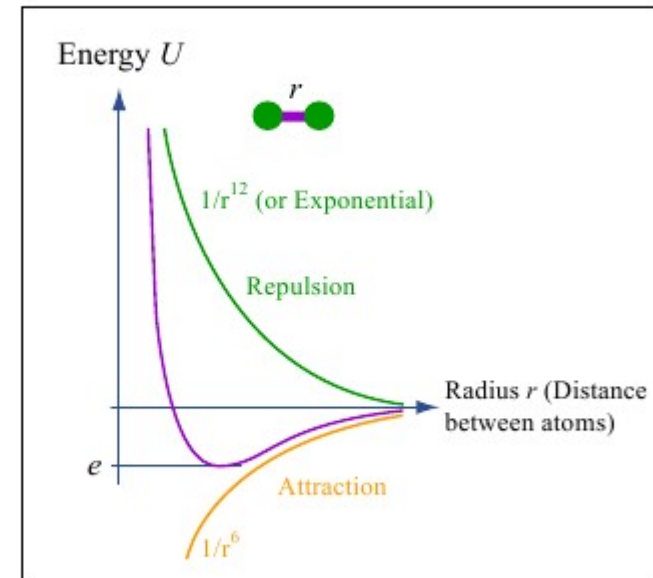
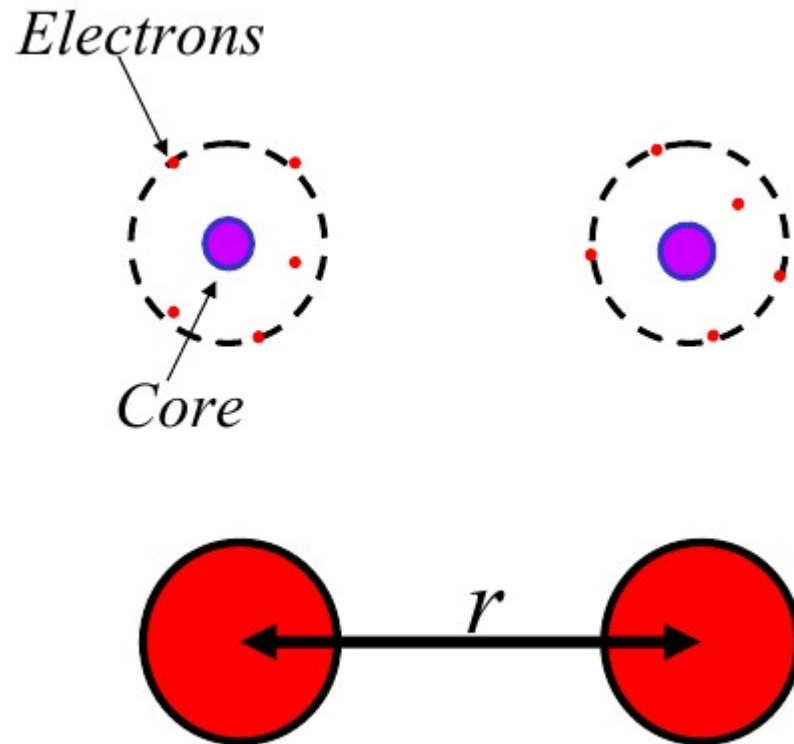


Figure by MIT OpenCourseWare.

• جاذبه: با به اشتراک گذاشتن الکترون

$$u(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

• دافعه: طرد پاولی

بی بعد سازی متغیرها

Parameter Values and Scales for the Lennard-Jones Potential

Quantity	Mass	Length	Energy	Time	Temperature
Unit	m	σ	ϵ	$\sqrt{m\sigma^2/\epsilon}$	ϵ/k_B
Value	$6.7 \times 10^{-26} \text{ kg}$	$3.4 \times 10^{-10} \text{ m}$	$1.65 \times 10^{-21} \text{ J}$	$4.5 \times 10^{-12} \text{ s}$	119 K

Property	Reduced Form
Length	$r^* = r/\sigma$
Time	$t^* = t/\tau = t(\epsilon/m\sigma^2)^{1/2}$
Temperature	$T^* = k_B T/\epsilon$
Force	$f^* = f\sigma/\epsilon$
Energy	$\phi^* = \phi/\epsilon$
Pressure	$P^* = P\sigma^3/\epsilon$
Number density	$N^* = N\sigma^3$
Density	$\rho^* = \sigma^3 \rho/m$
Surface tension	$\gamma^* = \gamma\sigma^2/\epsilon$

$$u(r) = 4 \left[\frac{1}{r^{12}} - \frac{1}{r^6} \right]$$

$$f(r) = \frac{48}{r} \left[\frac{1}{r^{12}} - \frac{1}{2r^6} \right]$$

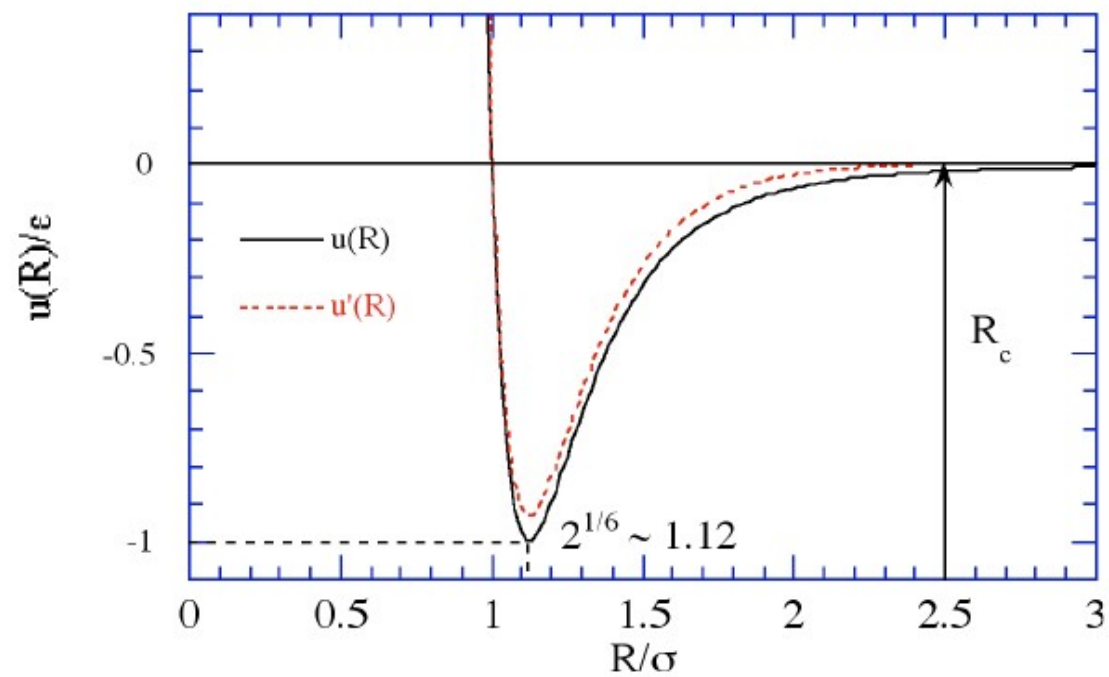
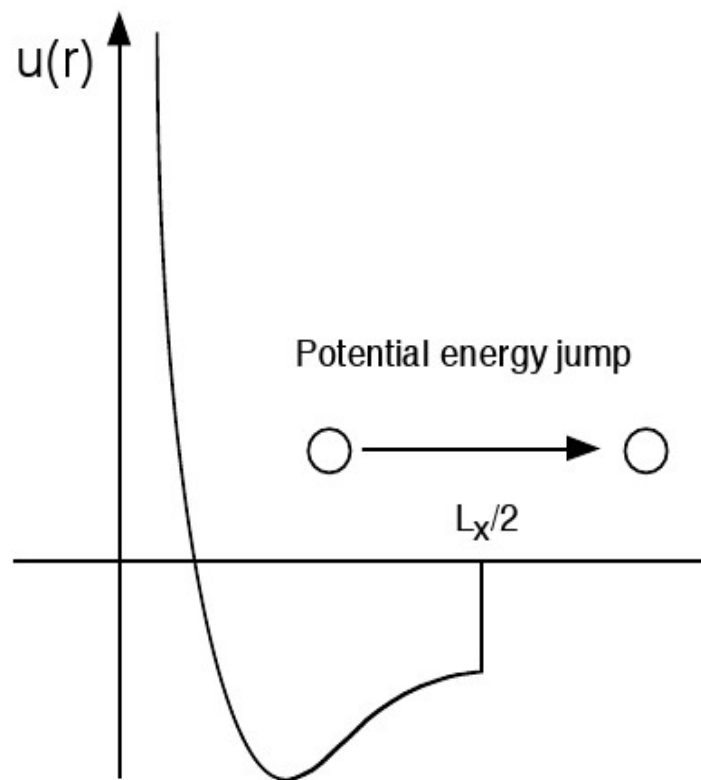


Figure: Truncated Lennard-Jones potential.

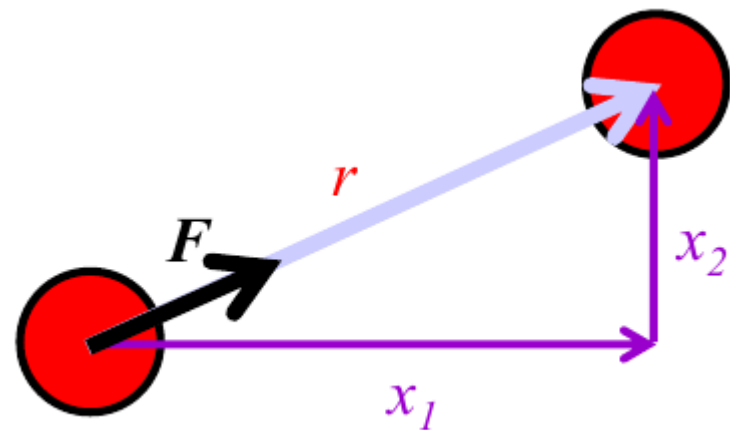
محاسبه نیروی وارد بر ذرات

محاسبه مقدار نیرو

$$f = -\frac{dU(r)}{dr}$$

محاسبه بردار نیرو در راستاهای مختلف

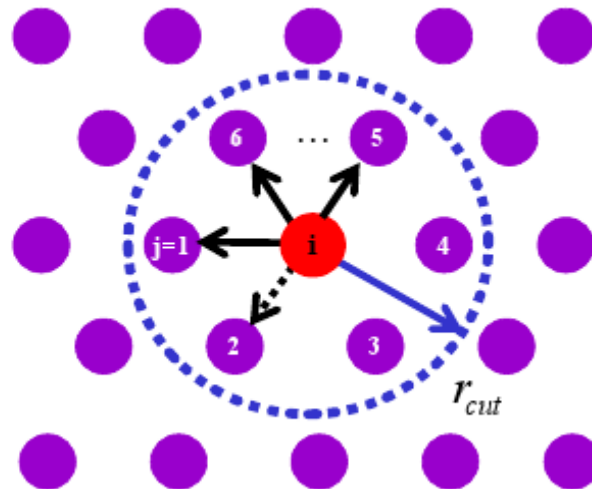
$$f_i = f \frac{x_i}{r}$$



الغوريتم محاسبه نیرو

for $i=1..N$

for $j=1..N (i \neq j)$



for $i=1..N$:

for $j=1..N (i \neq j)$:

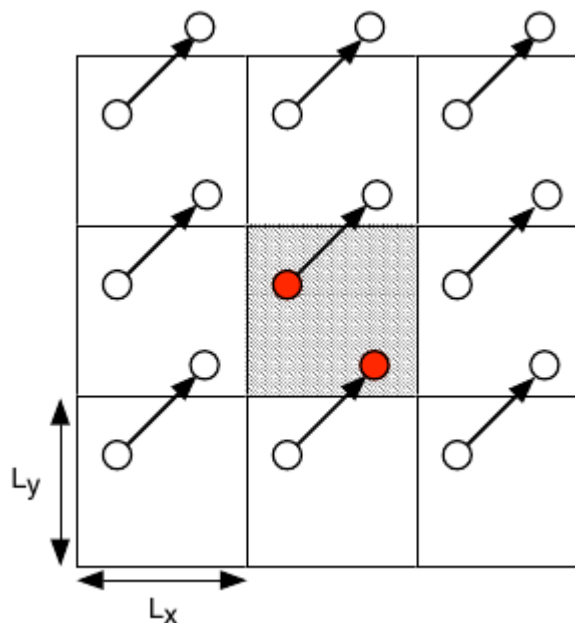
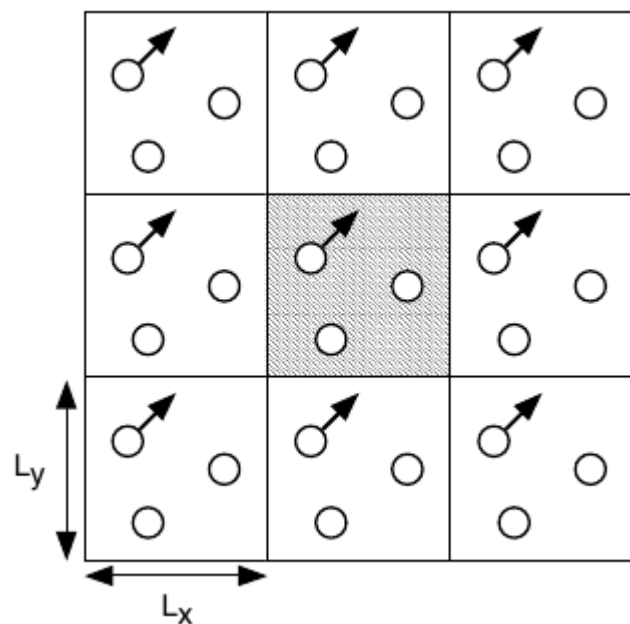
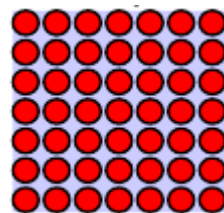
determine distance between i and j

calculate force and energy (if
 $r_{ij} < r_{cut}$, cutoff radius)

add to total force vector / energy

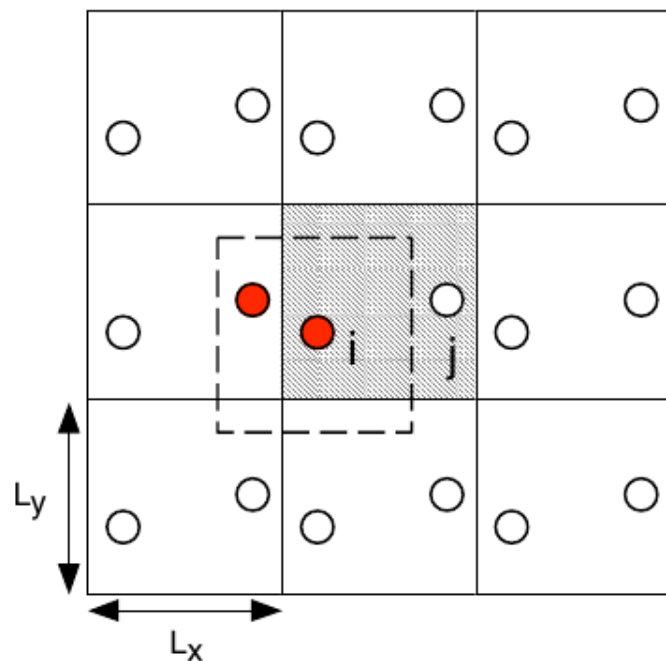
شرط مرزی دوره‌ای

کاهش اثر ذرات نزدیک به سطح در ابعاد کوچکتر



جابجایی بواسطه عبور از مرزها

شرط مرزی دوره‌ای (ادامه)



$$\begin{cases} -\frac{L_x}{2} \leq x_{ij} < \frac{L_x}{2} \\ -\frac{L_y}{2} \leq y_{ij} < \frac{L_y}{2} \\ -\frac{L_z}{2} \leq z_{ij} < \frac{L_z}{2} \end{cases}$$

محاسبه کمیت‌های فیزیکی

$$\langle \text{KE} \rangle = N \frac{3}{2} k_B T$$


از قضیه همپاری انرژی داریم:

$$T = \frac{1}{3} \frac{1}{N k_B} \left\langle \sum_{i=1}^N m_i \vec{v}_i^2 \right\rangle$$

$$\vec{v}_i^2 = \vec{v}_i \cdot \vec{v}_i$$

$$P = \frac{1}{3V} \left\langle \sum_{i=1}^N \left(\underbrace{m_i \vec{v}_i^2}_{\text{Kinetic contribution}} + \underbrace{\vec{r}_i \cdot \vec{f}_i}_{\text{Distance vector multiplied by force vector (scalar product)}} \right) \right\rangle$$

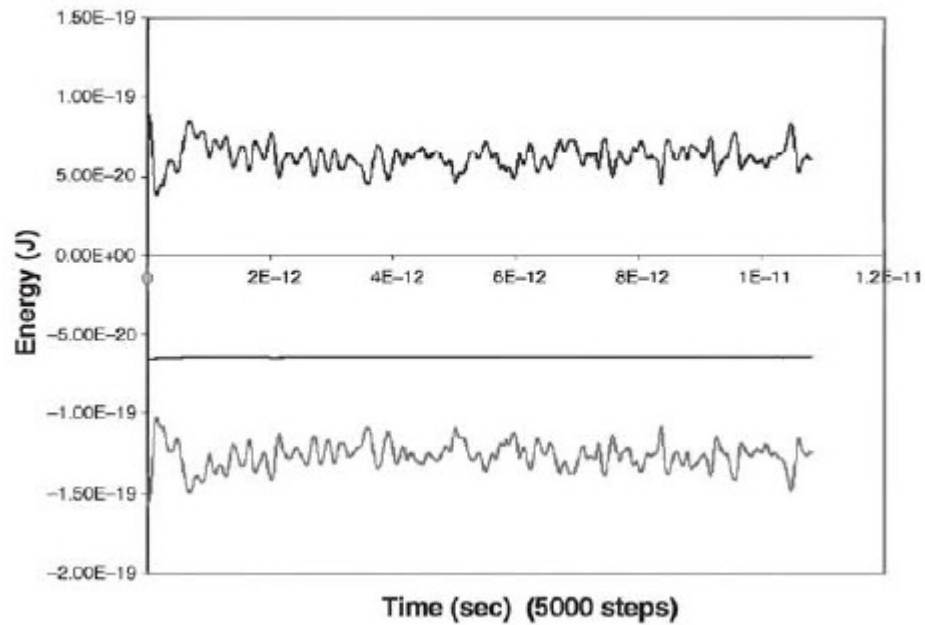
از قضیه ویرال داریم:

 Volume

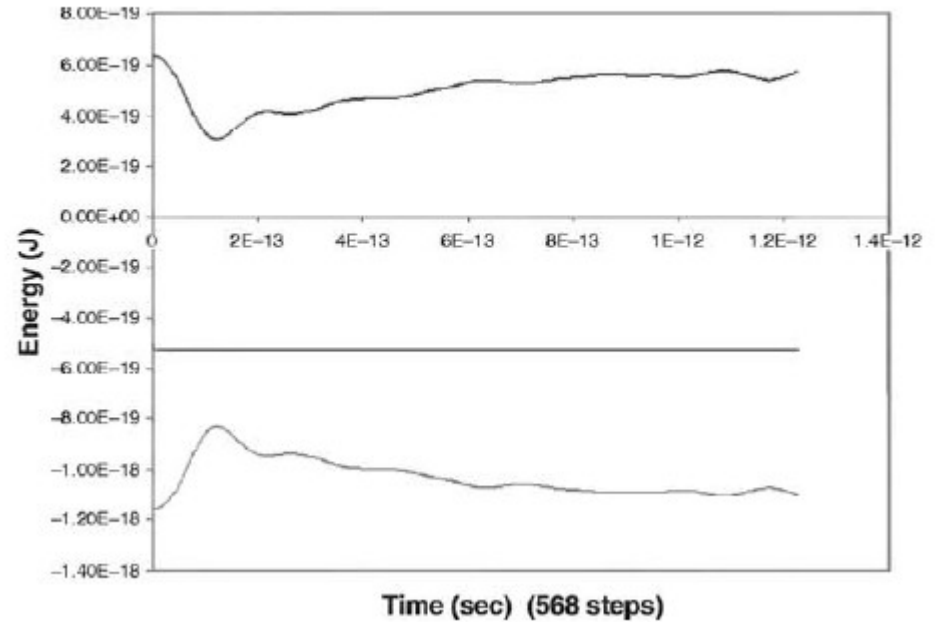
Kinetic contribution

Distance vector multiplied by force vector (scalar product)

**Energy vs Time
for 36 particles in a 2D box, initially at 150 K**



**Energy vs Time
for 300 particles 2D box, initially at 150 k**



اندازه گیری ترمودینامیکی کمیتها

$$\langle A \rangle = \frac{\int A \exp(-\beta E) d\vec{r} d\vec{p}}{\int \exp(-\beta E) d\vec{r} d\vec{p}}$$

$$\bar{A} = \frac{1}{T} \int_0^T A(t) dt$$

Mar 17 2005 3.320 Atomistic Modeling of Materials -- Gerbrand Ceder and Nicola Marzari

با فرض برقرار بودن ارگودیسیتی در سیستم این میانگین گیری ها مقداری برابر خواهند داشت.

سیستم شبیه‌سازی ما چه نوع سیستمی است؟

آنسامبلها (هنگردها)

Microcanonical

NVE

Canonical

NVT

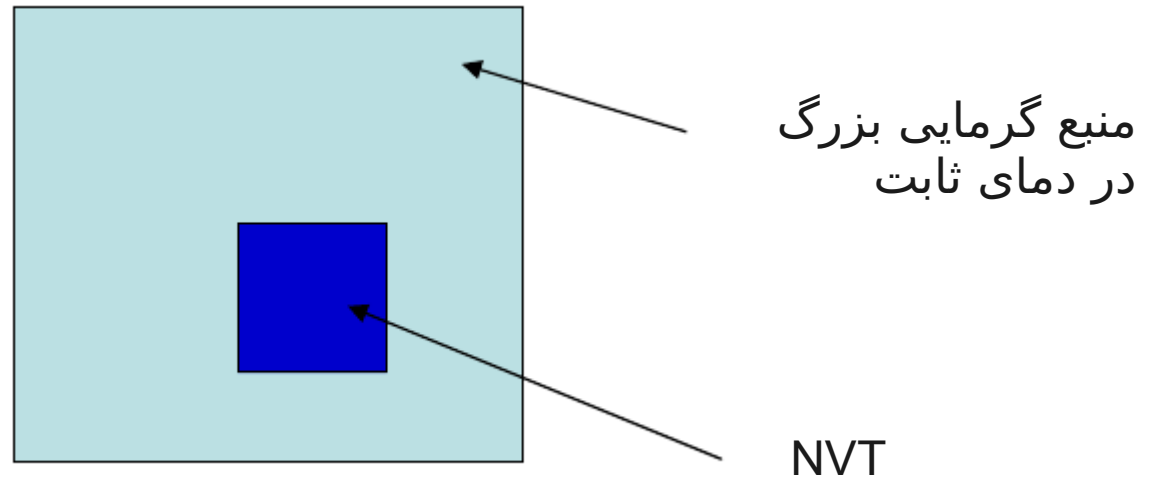
Isobaric-isothermal

NpT

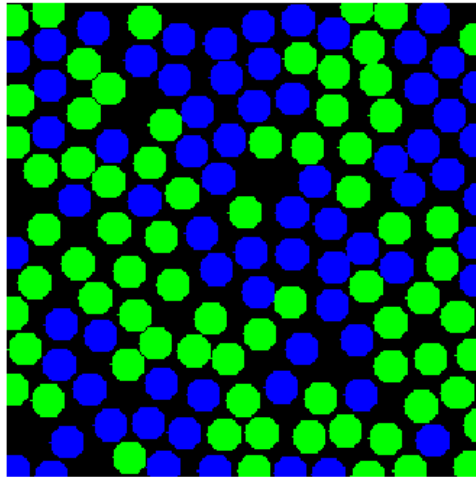
Grand canonical

$TV\mu$

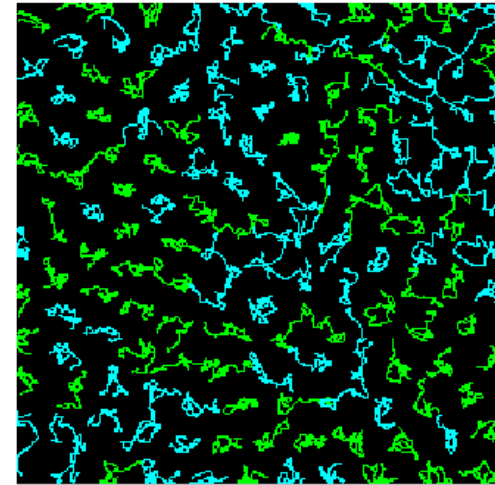
آنسامبل کانونیک



محاسبه ضریب پخش



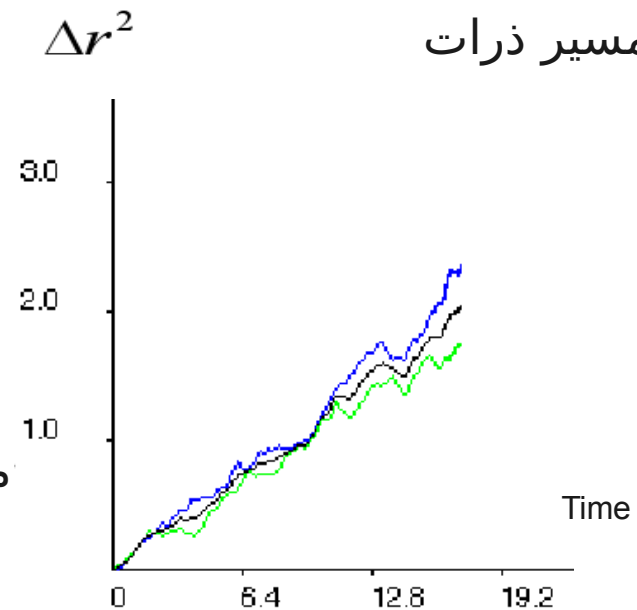
ذرات



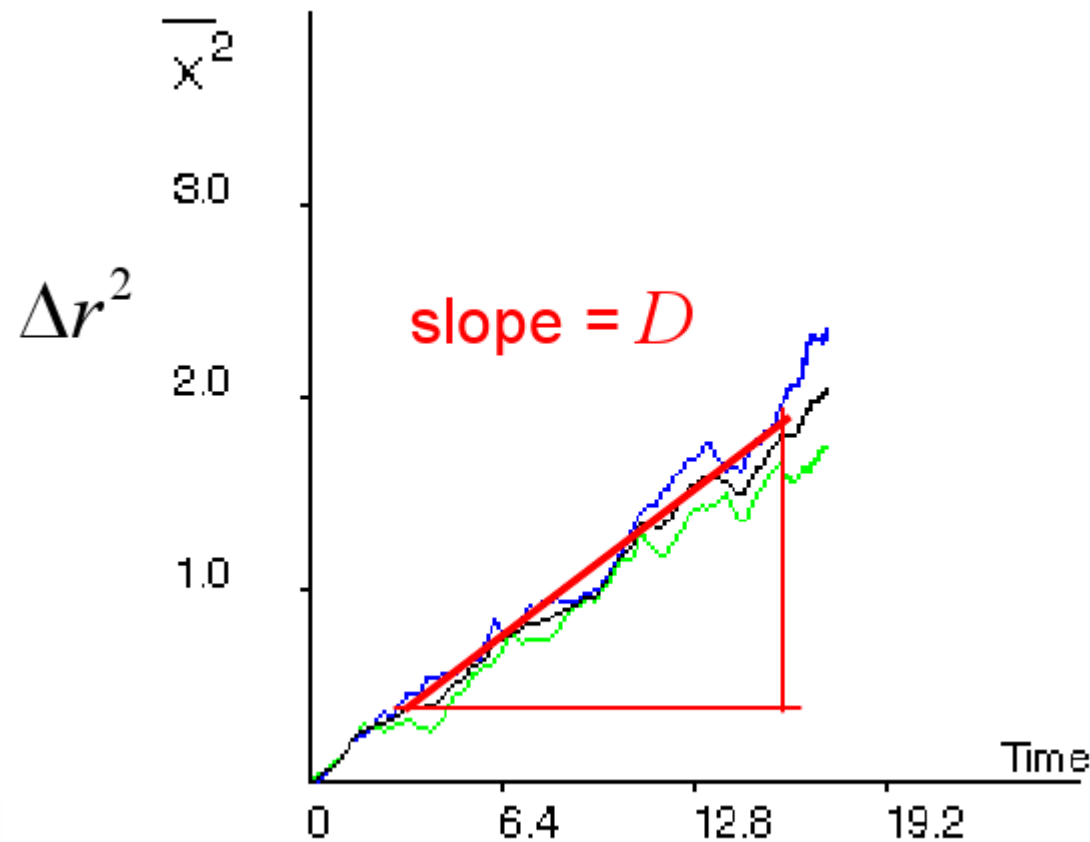
مسیر ذرات

$$\Delta r^2(t) = \frac{1}{N} \sum_i (\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(t=0))^2$$

مجدور میانگین مربعی MSD



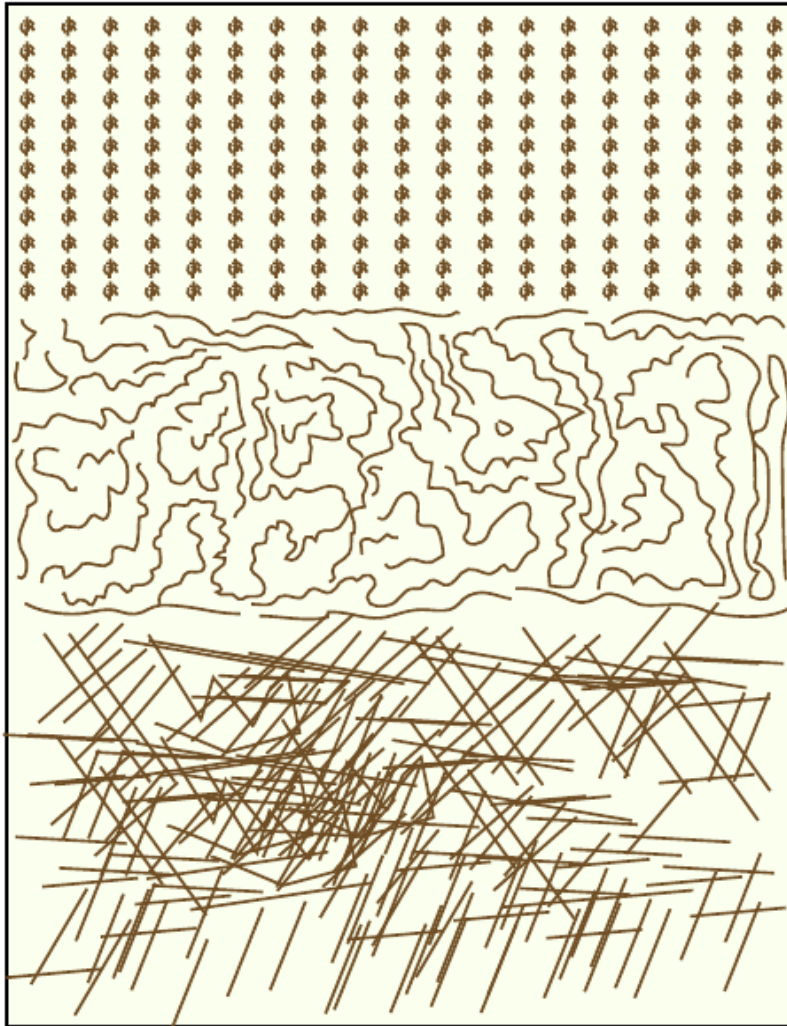
محاسبه ضریب پخش (ادامه)



$$D = \frac{1}{2d} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} (\Delta r^2(t))$$

↑
1D=1, 2D=2, 3D=3

شبیه‌سازی MD جامدات-بلوری، مایعات و گازها

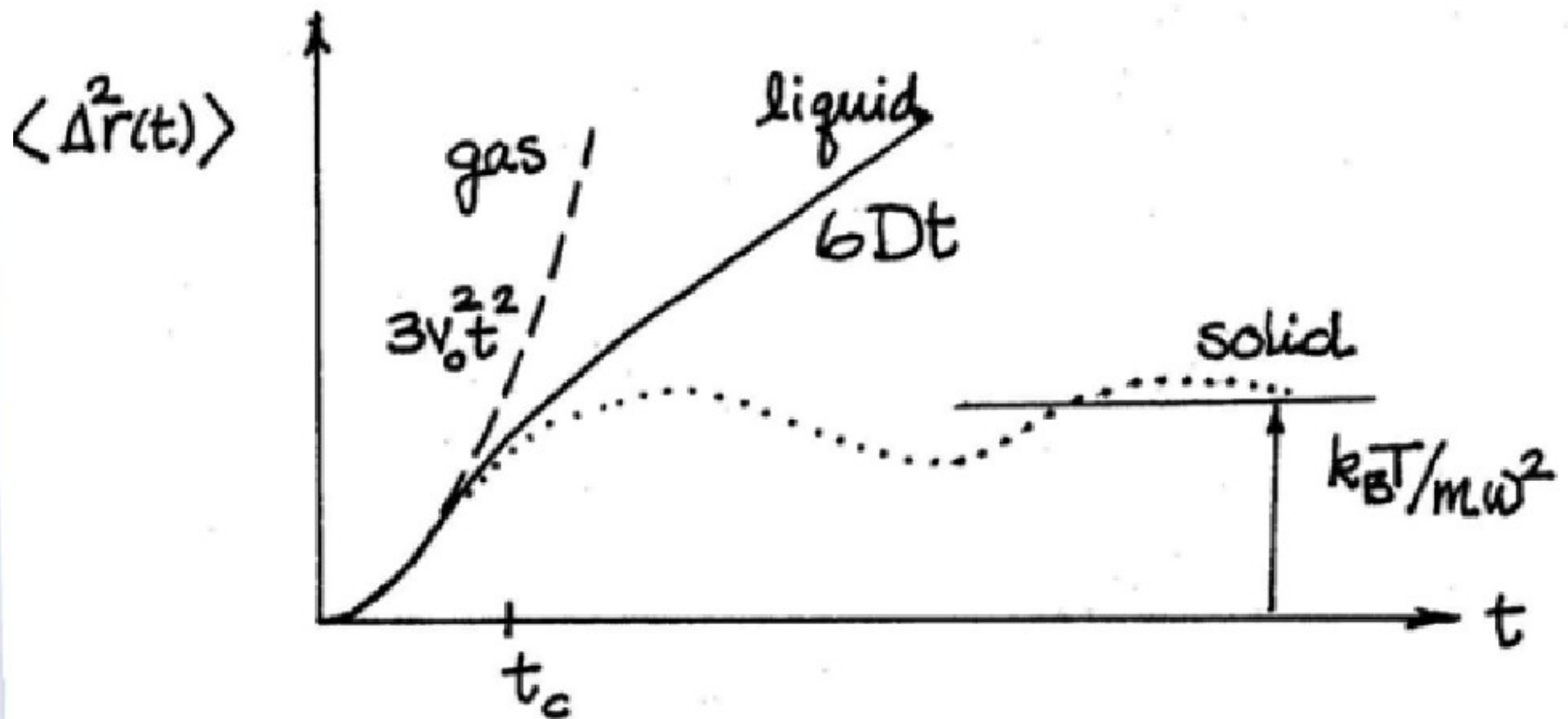


- جامدات: دارای ساختار و منظم

- مایعات: حرکت براونی

- گازها: مسیر آزاد میانگین بلند

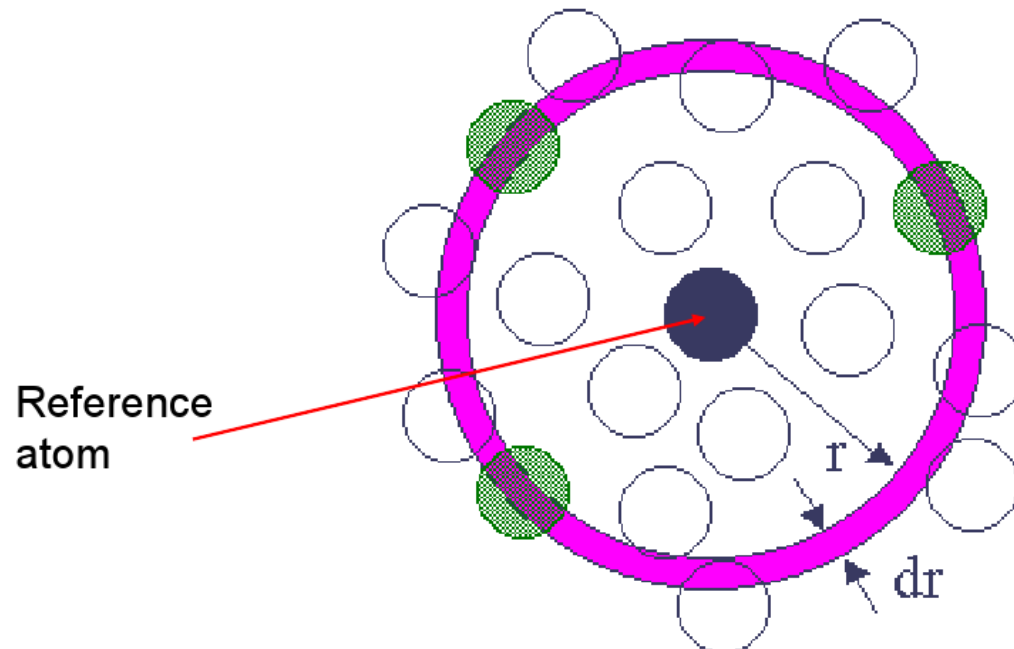
تشخیص فاز سیستم از روی مسیر اتمی



تابع توزیع شعاعی

تعداد اتمهای موجود
در پوسته نشان داده شده در شکل
 $g(r)2\pi r^2 dr$

Radial Distribution Function (RDF)



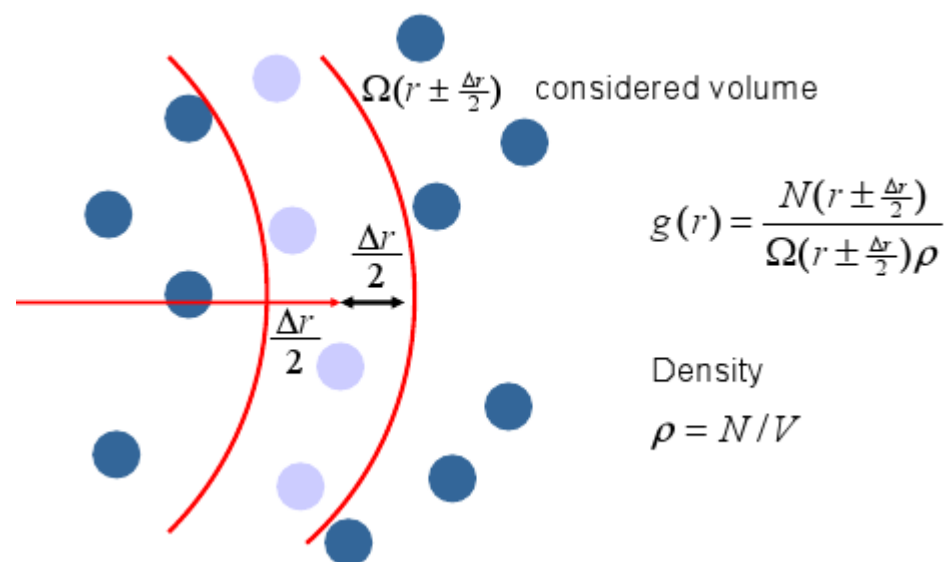
$$g(r) = \rho(r) / \rho$$

Number of atoms in the interval $r \pm \frac{\Delta r}{2}$

$$g(r) = \frac{\overbrace{\langle N(r \pm \frac{\Delta r}{2}) \rangle}^{\text{Number of atoms in the interval}}}{\underbrace{\Omega(r \pm \frac{\Delta r}{2})}_{\text{Volume of this shell (dr)}}} \frac{1}{\rho}$$

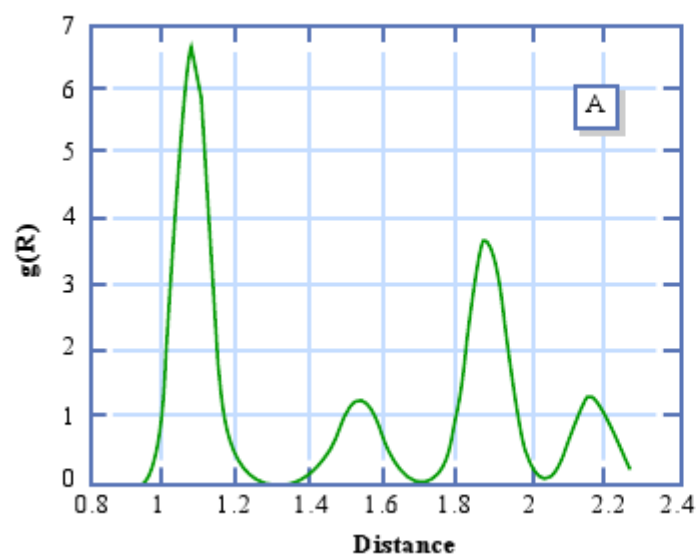
Volume of this shell (dr)

تابع توزیع شعاعی (ادامه)

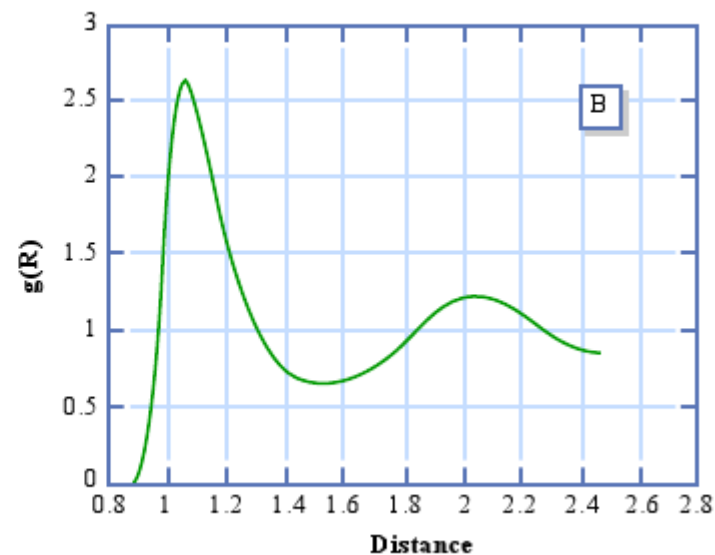


به صورت تجربی به وسیله اشعه ایکس و یا پراش-نوترون قابل اندازه‌گیری است.

تابع توزیع شعاعی (ادامه)

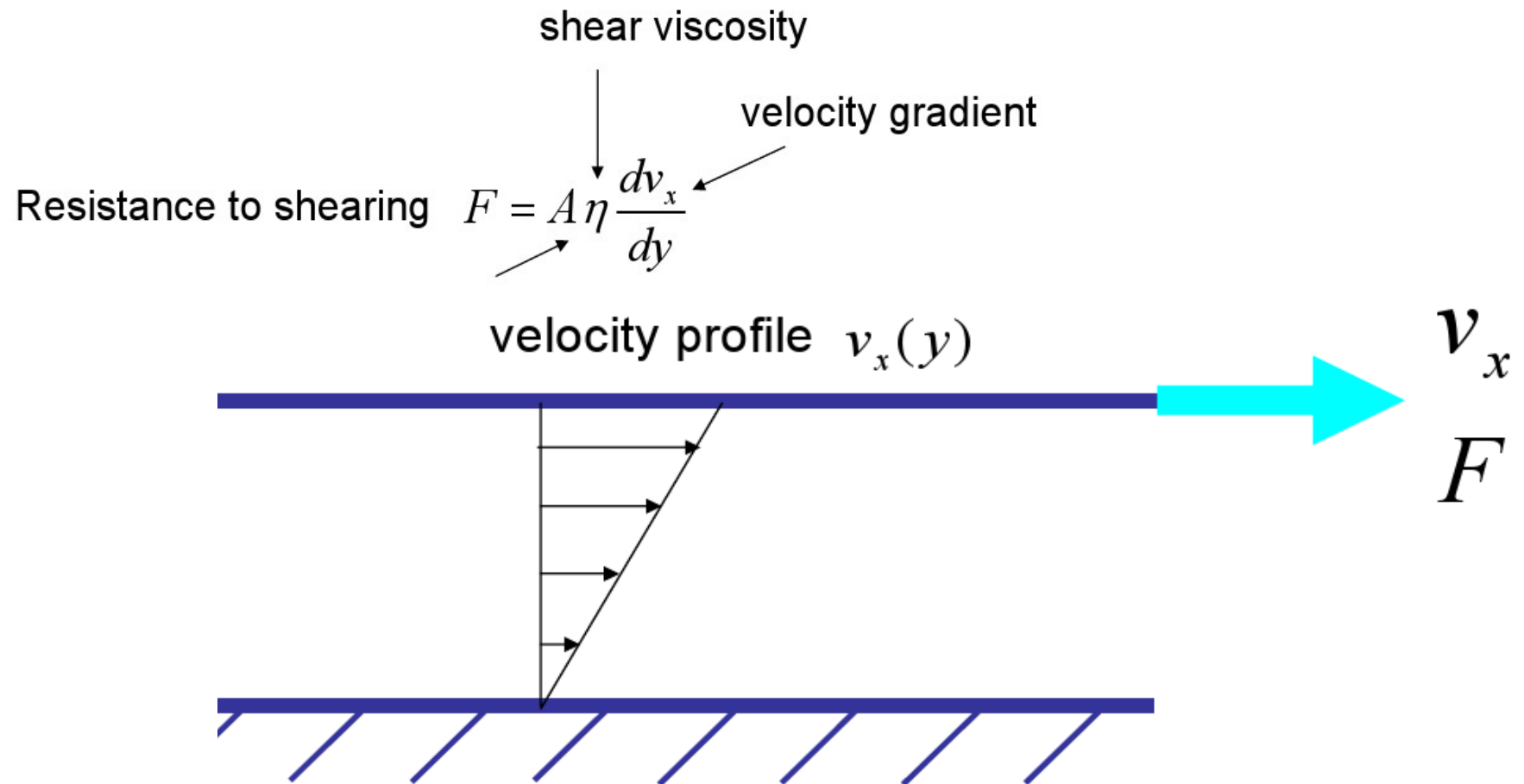


جامد



مایع

گرانروی برشی



فیلم

روابط گرین-کوبو برای محاسبه کمیت‌های فیزیکی

Diffusivity $D = \frac{1}{3} \int_{t'=0}^{t'=\infty} \langle v(0)v(t) \rangle dt'$

Shear viscosity $\eta = \frac{1}{Uk_B T} \int_{t'=0}^{\infty} \langle \sigma_{xy}(0)\sigma_{xy}(t') \rangle dt'$

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{\Omega} \left(- \sum_{\alpha=1..N} m_{\alpha} u_{\alpha,x} u_{\alpha,y} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1..N, \alpha \neq \beta} \frac{\partial \phi(r)}{\partial r} \frac{r_x}{r} \cdot r_y \Big|_{r=r_{\alpha\beta}} \right)$$

Thermal conductivity $\lambda = \frac{1}{Uk_B T^2} \int_{t'=0}^{\infty} \langle q(0)q(t') \rangle dt'$

$$q = \frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i v_i^2 + \sum_{i=1}^N U(r_{ij}) \right)$$

محاسبه کمیت‌های فیزیکی

<i>Property</i>	<i>Definition</i>	<i>Application</i>
Temperature	$T = \frac{1}{3} \frac{1}{Nk_B} \left\langle \sum_{i=1}^N m_i \vec{v}_i^2 \right\rangle \quad \vec{v}_i^2 = \vec{v}_i \cdot \vec{v}_i$	Direct
Pressure	$P = \frac{1}{3V} \left\langle \sum_{i=1}^N \left(m_i \vec{v}_i^2 + \vec{r}_i \cdot \vec{f}_i \right) \right\rangle$	Direct
Stress	$\sigma_{ij} = \frac{1}{\Omega} \left\langle \left(- \sum_{\alpha} m_{\alpha} u_{\alpha,i} u_{\alpha,j} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \alpha \neq \beta} \frac{\partial \phi(r)}{\partial r} \frac{r_i}{r} \cdot r_j \right) \right\rangle_{r=r_{\alpha\beta}}$	Direct
MSD	$\langle \Delta r^2(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_i (r_i(t) - r_i(t=0))^2$	Diffusivity
RDF	$g(r) = \left\langle \frac{N(r \pm \frac{\Delta r}{2})}{\Omega(r \pm \frac{\Delta r}{2}) \rho} \right\rangle$	Atomic structure (signature)
VAF	$\langle v(0)v(t) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{N_i} \sum_{k=1}^{N_i} v_i(t_k) v_i(t_k + t)$	Diffusivity, phase state, transport properties

پتانسیل مورس

Morse Potential Parameters for 16 Metals

Metal	αa_0	β	$L \times 10^{-22}$ (eV)	α (Å ⁻¹)	r_0 (Å)	D (eV)
Pb	2.921	83.02	7.073	1.1836	3.733	0.2348
Ag	2.788	71.17	10.012	1.3690	3.115	0.3323
Ni	2.500	51.78	12.667	1.4199	2.780	0.4205
Cu	2.450	49.11	10.330	1.3588	2.866	0.3429
Al	2.347	44.17	8.144	1.1646	3.253	0.2703
Ca	2.238	39.63	4.888	0.80535	4.569	0.1623
Sr	2.238	39.63	4.557	0.73776	4.988	0.1513
Mo	2.368	88.91	24.197	1.5079	2.976	0.8032
W	2.225	72.19	29.843	1.4116	3.032	0.9906
Cr	2.260	75.92	13.297	1.5721	2.754	0.4414
Fe	1.988	51.97	12.573	1.3885	2.845	0.4174
Ba	1.650	34.12	4.266	0.65698	5.373	0.1416
K	1.293	23.80	1.634	0.49767	6.369	0.05424
Na	1.267	23.28	1.908	0.58993	5.336	0.06334
Cs	1.260	23.14	1.351	0.41569	7.557	0.04485
Rb	1.206	22.15	1.399	0.42981	7.207	0.04644

Adapted from Table I in Girifalco, L. A., and V. G. Weizer. "Application of the Morse Potential Function to Cubic Metals." *Physical Review* 114 (May 1, 1959): 687-690.

Figure by MIT OpenCourseWare.

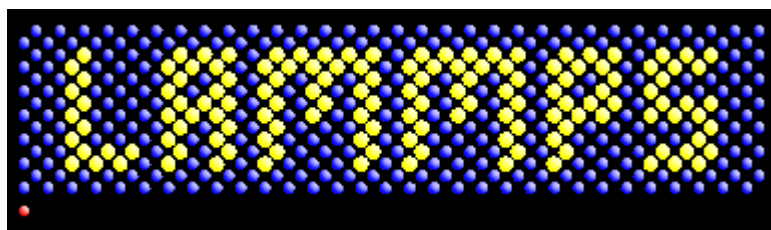
$$\phi(r_{ij}) = D \exp(-2\alpha(r_{ij} - r_0)) - 2D \exp(-\alpha(r_{ij} - r_0))$$

References

3.021J / 1.021J / 10.333J / 18.361J / 22.00J
Introduction to Modeling and Simulation
(Massachusetts Institute of Technology: MIT
OpenCourseWare), <http://ocw.mit.edu>

معرفی نرم افزار LAMMPS

- Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator



- به صورت سریال و موازی اجرا می شود.

- به زبان C++ نوشته شده است.

- موازی سازی شده بوسیله MPI

- متن باز

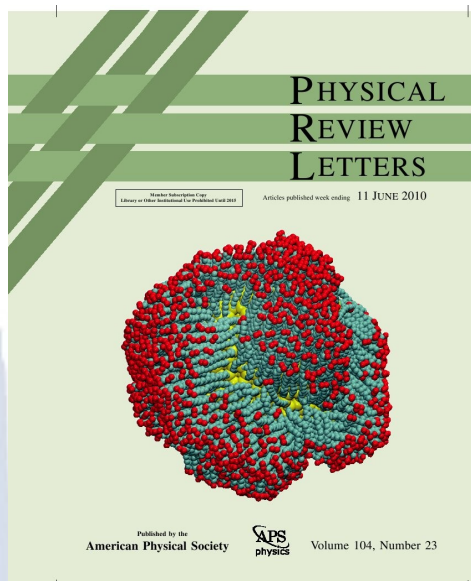
- ساده برای توسعه دادن

- با یک فایل ورودی (input) اجرا می شود

- نسخه های دیگری دارد، مثلاً برای مواد دانه ای و ...

- قابلیت محاسبات روی GPU-ها

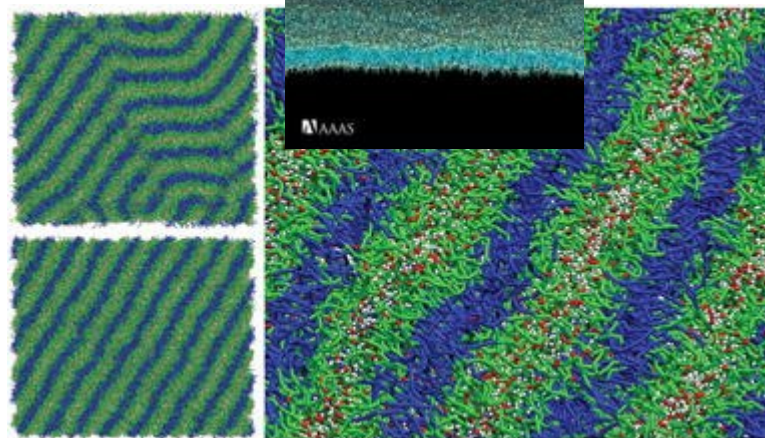
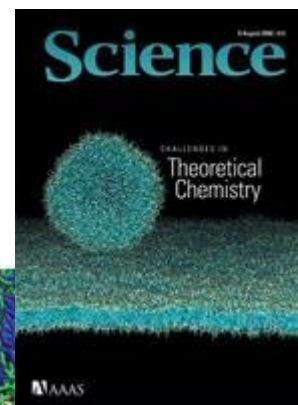
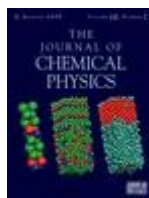
نمونه شبیه‌سازی‌های LAMMPS



Spontaneous Asymmetry of Coated Spherical Nanoparticles in Solution and at Liquid-Vapor Interfaces, J. M. D. Lane and G. S. Grest, Phys Rev Lett, 104, 235501 (2010)



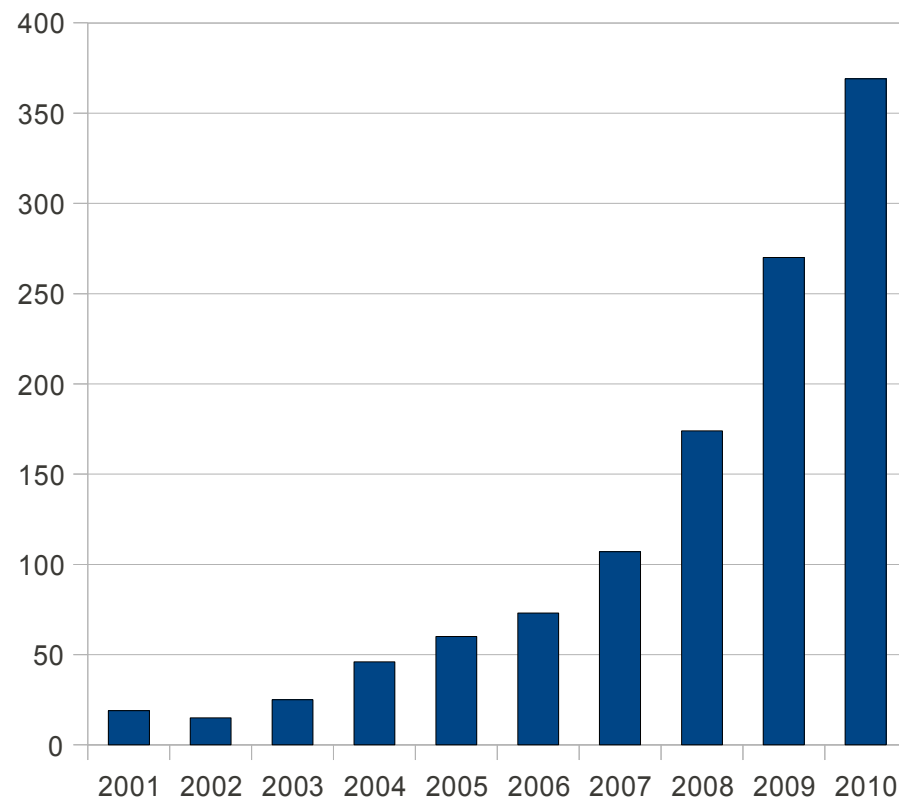
Water interacting with self-assembled monolayers



Large-Scale Molecular Dynamics Simulations of Self-Assembling Systems, M. L. Klein and W. Shinoda, Science, 321, 798-800 (2008).

تعداد مقالات چاپ شده با استفاده از نرم افزار

LAMMPS



استراتژی‌های سریع‌تر محاسبه نیروها

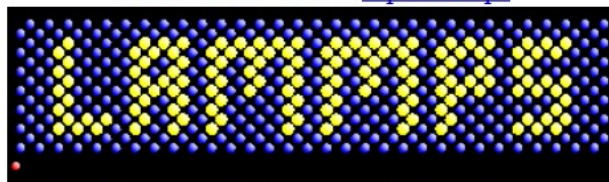
- لیست همسایه‌ها

- جداسازی

ساختار LAMMPS

LAMMPS Molecular Dynamics Simulator

lamp: a device that generates light, heat, or therapeutic radiation; something that illumines the mind or soul -- www.dictionary.com
 hover to animate -- [input script](#)



[physical analog \(start at 3:25\)](#) & [explanation](#)

Big Picture	Code	Documentation	Results	Related Tools	Context	User Support
Features	Download	Manual	Publications	Offsite LAMMPS packages	Authors	Mail list
Non-features	SourceForge	Commands	Pictures	Pizza.py Toolkit	History	MD to LAMMPS glossary
FAQ	Latest Features & Bug Fixes		Movies	Other codes	Funding	User Scripts
	Unfixed bugs		Benchmarks		Open source	User HowTos
	Coming attractions		Citing LAMMPS			Workshops
						Contribute to LAMMPS

چرا سیستم عامل ویندوز

کارهائیکه انجام نمی دهد

- run thru a GUI
- build molecular systems
- assign force-field coefficients automagically
- perform sophisticated analyses of your MD simulation
- visualize your MD simulation
- plot your output data

خصوصیات عمومی

- runs on a single processor or in parallel
- distributed-memory message-passing parallelism (MPI)
- spatial-decomposition of simulation domain for parallelism
- open-source distribution
- highly portable C++
- optional libraries used: MPI and single-processor FFT
- easy to extend with new features and functionality
- runs from an input script
- syntax for defining and using variables and formulas
- syntax for looping over runs and breaking out of loops
- run one or multiple simulations simultaneously (in parallel) from one script
- build as library, invoke LAMMPS thru library interface or provided Python wrapper
- couple with other codes: LAMMPS calls other code, other code calls LAMMPS, umbrella code calls both

انواع ذرات و مدلهما

- atoms
- coarse-grained particles (e.g. bead-spring polymers)
- united-atom polymers or organic molecules
- all-atom polymers, organic molecules, proteins, DNA
- metals
- granular materials
- coarse-grained mesoscale models
- extended spherical and ellipsoidal particles
- point dipolar particles
- rigid collections of particles
- hybrid combinations of these

میدانهای نیرو

- pairwise potentials: Lennard-Jones, Buckingham, Morse, Born-Mayer-Huggins, Yukawa, soft, class 2 (COMPASS), hydrogen bond, tabulated
- charged pairwise potentials: Coulombic, point-dipole
- manybody potentials: EAM, Finnis/Sinclair EAM, modified EAM (MEAM), embedded ion method (EIM), Stillinger-Weber, Tersoff, AI-REBO, ReaxFF, COMB
- electron force field (eFF)
- coarse-grained potentials: DPD, GayBerne, REsquared, colloidal, DLVO
- mesoscopic potentials: granular, Peridynamics
- bond potentials: harmonic, FENE, Morse, nonlinear, class 2, quartic (breakable)
- angle potentials: harmonic, CHARMM, cosine, cosine/squared, cosine/periodic, class 2 (COMPASS)
- dihedral potentials: harmonic, CHARMM, multi-harmonic, helix, class 2 (COMPASS), OPLS

میدانهای نیرو (ادامه)

- improper potentials: harmonic, cvff, umbrella, class 2 (COMPASS)
- polymer potentials: all-atom, united-atom, bead-spring, breakable
- water potentials: TIP3P, TIP4P, SPC
- implicit solvent potentials: hydrodynamic lubrication, Debye
- long-range Coulombics and dispersion: Ewald, PPPM (similar to particle-mesh Ewald), Ewald/N for long-range Lennard-Jones
- force-field compatibility with common CHARMM, AMBER, DREIDING, OPLS, GROMACS, COMPASS options
- handful of GPU-enabled pair styles

میدانهای نیرو (ادامه)

- hybrid potentials: multiple pair, bond, angle, dihedral, improper potentials can be used in one simulation overlaid potentials: superposition of multiple pair potentials

تولید اتمها



- read in atom coords from files
- create atoms on one or more lattices (e.g. grain boundaries)
- delete geometric or logical groups of atoms (e.g. voids)
- replicate existing atoms multiple times
- displace atoms

آنساملها، قیود و شرایط مرزی

- 2d or 3d systems
- orthogonal or non-orthogonal (triclinic symmetry) simulation domains
- constant NVE, NVT, NPT, NPH, Parinello/Rahman integrators
- thermostatting options for groups and geometric regions of atoms
- pressure control via Nose/Hoover or Berendsen barostatting in 1 to 3 dimensions
- simulation box deformation (tensile and shear)
- harmonic (umbrella) constraint forces
- rigid body constraints
- SHAKE bond and angle constraints
- bond breaking, formation, swapping
- walls of various kinds
- non-equilibrium molecular dynamics (NEMD)
- variety of additional boundary conditions and constraints

انتگرال گیرها

- velocity-Verlet integrator
- Brownian dynamics
- rigid body integration
- energy minimization via conjugate gradient or steepest descent relaxation
- rRESPA hierarchical timestepping

خروجی ها

- log file of thermodynamic info
- text dump files of atom coords, velocities, other per-atom quantities
- binary restart files
- parallel I/O of dump and restart files
- per-atom quantities (energy, stress, centro-symmetry parameter, CNA, etc)
- user-defined system-wide (log file) or per-atom (dump file) calculations
- spatial and time averaging of per-atom quantities
- time averaging of system-wide quantities
- atom snapshots in native, XYZ, XTC, DCD, CFG formats

خصوصیات ویژه

- stochastic rotation dynamics (SRD)
- real-time visualization and interactive MD
- atom-to-continuum coupling with finite elements
- coupled rigid body integration via the POEMS library
- Direct Simulation Monte Carlo for low-density fluids
- Peridynamics mesoscale modeling
- targeted and steered molecular dynamics
- two-temperature electron model

با تشکر!