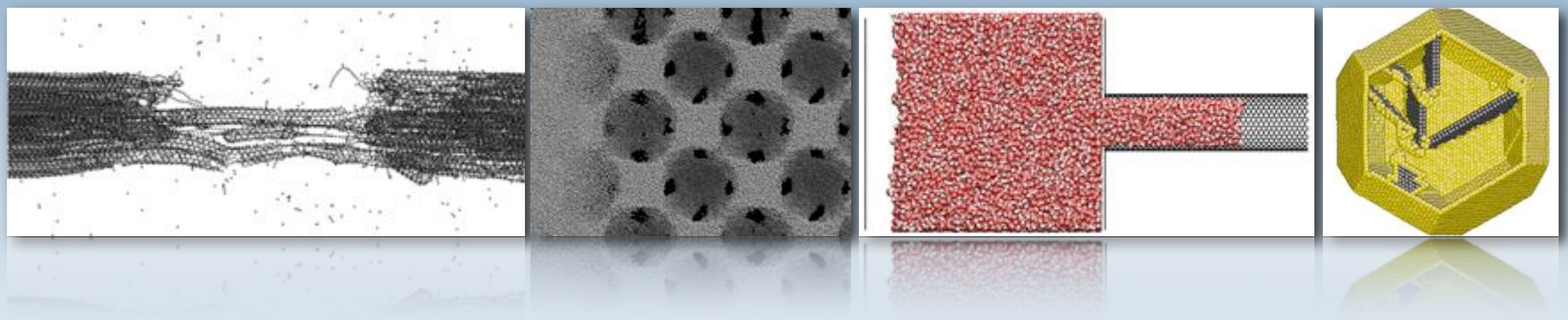
Breve introducción a LAMMPS



Javier A. Wachter Ch.
javier.wachter@gmail.com

Indice

- Introducción
- Instalación y ejecución de LAMMPS
- Archivos de entrada
- Comandos importantes
- Archivos de salida
- Ejemplos

javier.wachter@gmail.com

Introducción

Creador y desarrollador principal:
Steve Plimpton
Staff member at Sandia National Laboratories, a US Department of Energy lab.

Algunas características de LAMMPS:

- Paralelismo
- Compatible con CUDA
- Corre una o varias simulaciones a partir de un script
- Sintaxis para definir y usar variables y fórmulas
- Es gratis! (licencia GPL)

Introducción

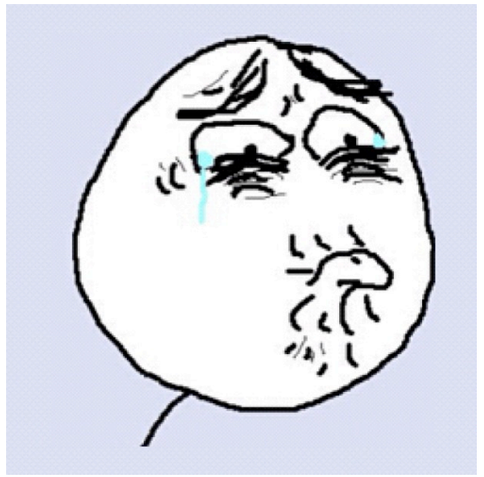
Creador y desarrollador principal:
Steve Plimpton
Staff member at Sandia National Laboratories, a US Department of Energy lab.

Algunas características de LAMMPS:

- Paralelismo
- Compatible con CUDA
- Corre una o varias simulaciones a partir de un script
- Sintaxis para definir y usar variables y fórmulas
- Es gratis! (licencia GPL)

Introducción

Que cosas NO hace LAMMPS:



- Correr a través de una interfaz gráfica
- Construir sistemas moleculares
- Realizar análisis sofisticado
- Visualizar simulaciones y graficar datos de salida
- Asignar coef. de potenciales “automágicamente”

javier.wachter@gmail.com

Instalando LAMMPS

Requerimientos:

- C++, Fortran(gfortran)
- (+ XCODE en Mac OS X)
- Openmpi http://open.mpi.org
- FFTW3 http://www.fftw.org
- Lammps http://lammps.sandia.gov

Instalando LAMMPS

Otros requerimientos

- KIM (knowledgebase of interatomic models) http://www.openkim.org

- Python para correr Pizza

  http://pizza.sandia.gov

- Paciencia! En el manual se advierte que la instalación puede ser un proceso **no-trivial** (editar makefile, librerias, etc)

Instalando LAMMPS

Instalación de Lammps

- Extraer contenido:

```
$tar xvzf lammps.tar.gz
```

- Construir librerias requeridas por algunos modulos de Lammps

```
lib > atc, awpd, gpu, kim, linalg,
meam, cuda, reax, poems:

$make -f Makefile.g++

$make -f Makefile.gfortran
```

Instalando LAMMPS

Instalación de Lammps

- Revisar archivos Makefile.lammps y ver referencias a librerias como lgfortran, laplack y lablas.
- Para saber que modulos se instalarán:

```
$lammps/src/make package-status
```

Instalando LAMMPS

```
Terminal — 58×34
MacBook-Pro:src javierwachter$ make package-status
Installed  NO: package ASPHERE
Installed YES: package CLASS2
Installed YES: package COLLOID
Installed YES: package DIPOLE
Installed  NO: package FLD
Installed  NO: package GPU
Installed YES: package GRANULAR
Installed  NO: package KIM
Installed YES: package KSPACE
Installed YES: package MANYBODY
Installed YES: package MC
Installed YES: package MEAM
Installed YES: package MOLECULE
Installed YES: package OPT
Installed YES: package PERI
Installed YES: package POEMS
Installed YES: package REAX
Installed YES: package REPLICA
Installed YES: package SHOCK
Installed  NO: package SRD
Installed YES: package XTC

Installed YES: package USER-MISC
Installed  NO: package USER-ATC
Installed  NO: package USER-AWPMD
Installed YES: package USER-CG-CMM
Installed  NO: package USER-CUDA
Installed YES: package USER-EFF
Installed YES: package USER-EWALDN
Installed  NO: package USER-OMP
Installed  NO: package USER-REAXC
Installed YES: package USER-SPH
MacBook-Pro:src javierwachter$
```

Stardard

Users

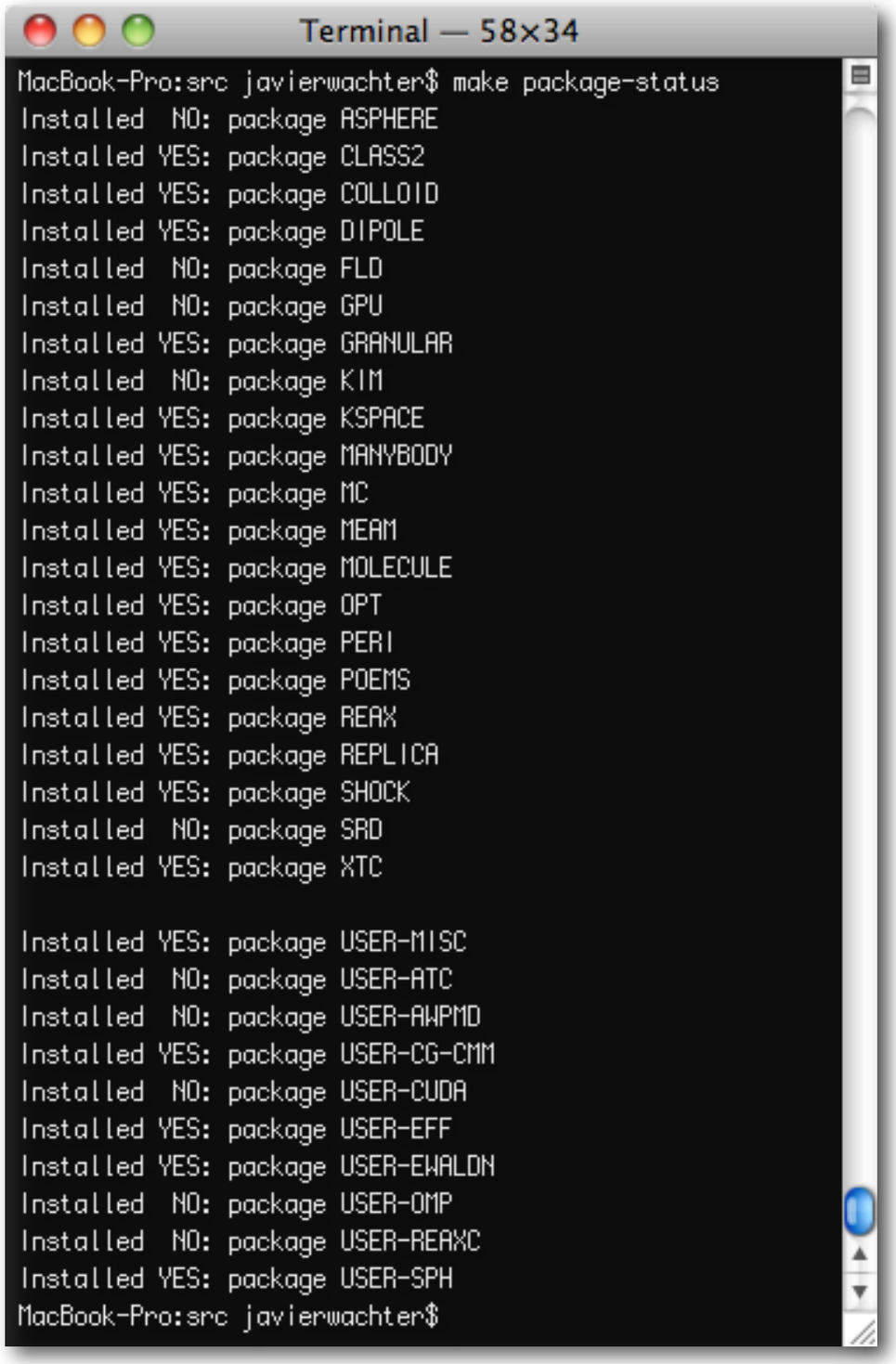
Potenciales de varios cuerpos
LJ, Buckingham, Coulomb, etc.

Potenciales embebidos modificados (se agregan fuerzas angulares)

y CUDA?
Manual dice que se puede usar GPU ó CUDA (no ambos)

javier.wachter@gmail.com

Instalando LAMMPS



Instalación de Lammps

- Agregando o eliminando paquetes:

```
$make yes-XX

$make no-XX

$make yes-user-xx

$make yes-all
```


javier.wachter@gmail.com

Instalando LAMMPS

- Finalmente compilamos lammps usando la configuración para openmpi:

  `$src/make openmpi`

  (En el directorio `$src/MAKE/` se encuentran múltiples configuraciones "máquinas", ubuntu, mac, etc)

- Se genera el ejecutable `lmp_openmpi`

- Ejecutamos con:

  `$mpirun -np N lmp_openmpi < nombre.in`

Secuencia de comandos

javier.wachter@gmail.com

Secuencia de comandos

- El script de lammps contiene cuatro etapas principales:

- Unidades y condiciones de borde
- Crear átomos, moléculas, grupos, regiones, etc.
- Comandos de Dinámica Molecular
- Generar archivos dump

in.shear.void (~/lammps-5May12/examples/shear) - gedit

in.shear.void

```
# 3d metal shear simulation

units           metal
boundary        s s p

atom_style      atomic
lattice         fcc 3.52
region          box block 0 16.0 0 10.0 0 2.828427
create_box      3 box

lattice         fcc 3.52 orient x 1 0 0 orient y 0 1 1 orient z 0 -1 1 &
                origin 0.5 0 0
create_atoms    1 box

pair_style      eam
pair_coeff      * * Ni_u3.eam

neighbor        0.3 bin
neigh_modify    delay 5

region          lower block INF INF INF 0.9 INF INF
region          upper block INF INF 6.1 INF INF INF
group           lower region lower
group           upper region upper
group           boundary union lower upper
group           mobile subtract all boundary

set             group lower type 2
set             group upper type 3

# void

region          void cylinder z 8 3.535534 2.5 INF INF
delete_atoms    region void

# temp controllers

compute         new3d mobile temp
compute         new2d mobile temp/partial 0 1 1

# equilibrate

velocity        mobile create 300.0 5812775 temp new3d
fix             1 all nve
```

Texto plano Ancho de la tabulación: 8 Ln 1, Col 1 INS

unidades: lj, metal, real

boundary: p f s, p p fs

definiendo estructura, tb se usa read_data

potencial interatómico

lista de vecinos

regiones y grupos

regiones y grupos: Void

velocidades iniciales

javier.wachter@gmail.com

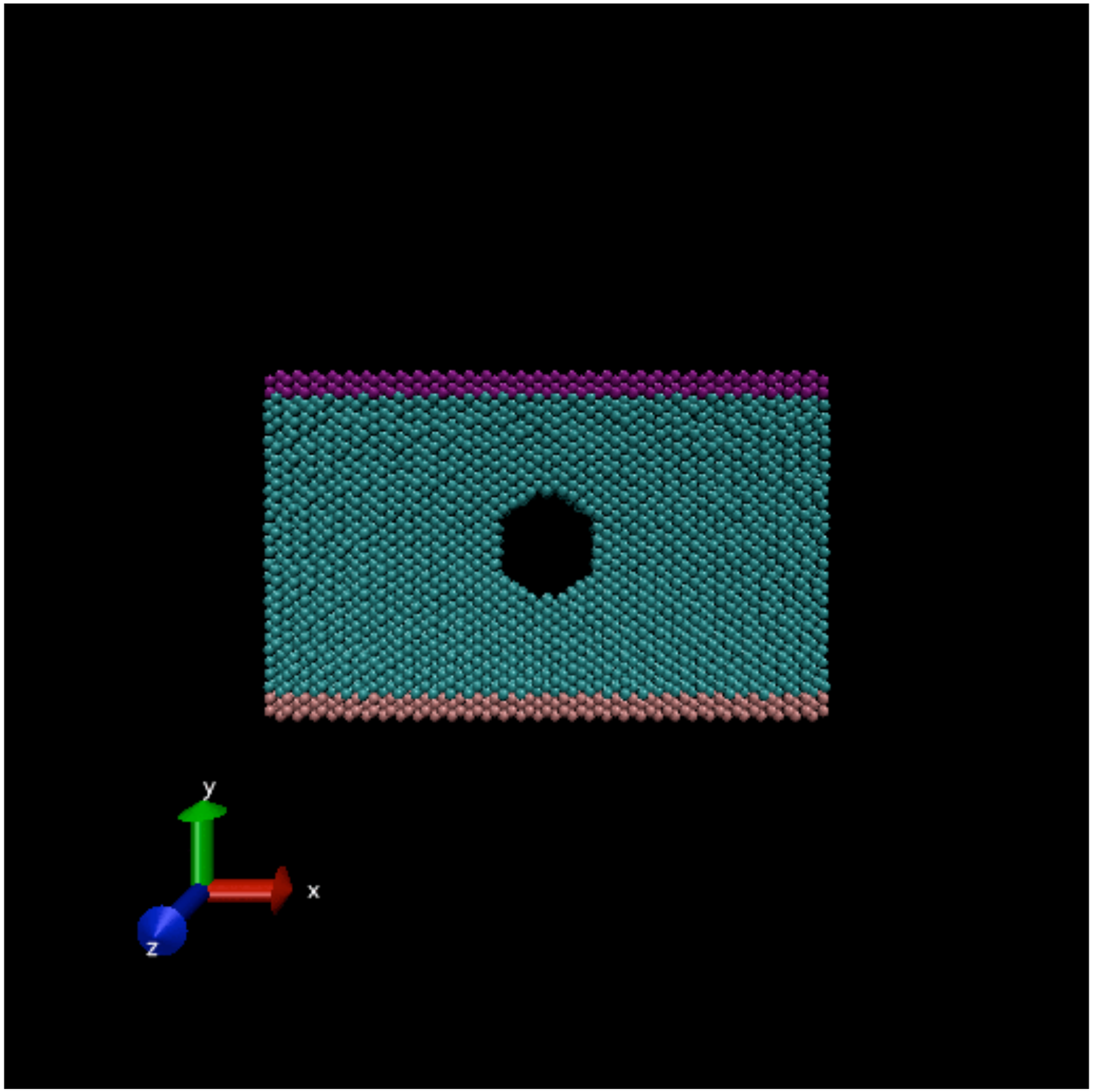
```
fix             1 all nve
fix             2 boundary setforce 0.0 0.0 0.0

fix             3 mobile temp/rescale 10 300.0 300.0 10.0 1.0
fix_modify      3 temp new3d

thermo          25
thermo_modify   temp new3d

timestep        0.001
run             100

# shear

velocity        upper set 1.0 0 0
velocity        mobile ramp vx 0.0 1.0 y 1.4 8.6 sum yes

unfix           3
fix             3 mobile temp/rescale 10 300.0 300.0 10.0 1.0
fix_modify      3 temp new2d

#dump           1 all atom 100 dump.shear.void

#dump           1 all image 100 image.*.jpg type type &
#               axes yes 0.8 0.02 view 0 0 zoom 1.5 up 0 1 0 adiam 2.0
#dump_modify    1 pad 4

thermo          100
thermo_modify   temp new2d

reset_timestep  0
run             3000
```

colectividad NVE, NVT, NPT, NPH

El comando dump genera un archivo con posiciones, velocidades, fuerzas, etc. Puede ser un archivo único que tiene toda la dinámica o en varios archivos incluso imágenes jpg.

número de pasos de simulación

Ejemplo 1: Esfuerzo de corte



javier.wachter@gmail.com

Ejemplo 2: Electrodeposición

Simulación de la dinámica de iones en la doble capa electroquímica

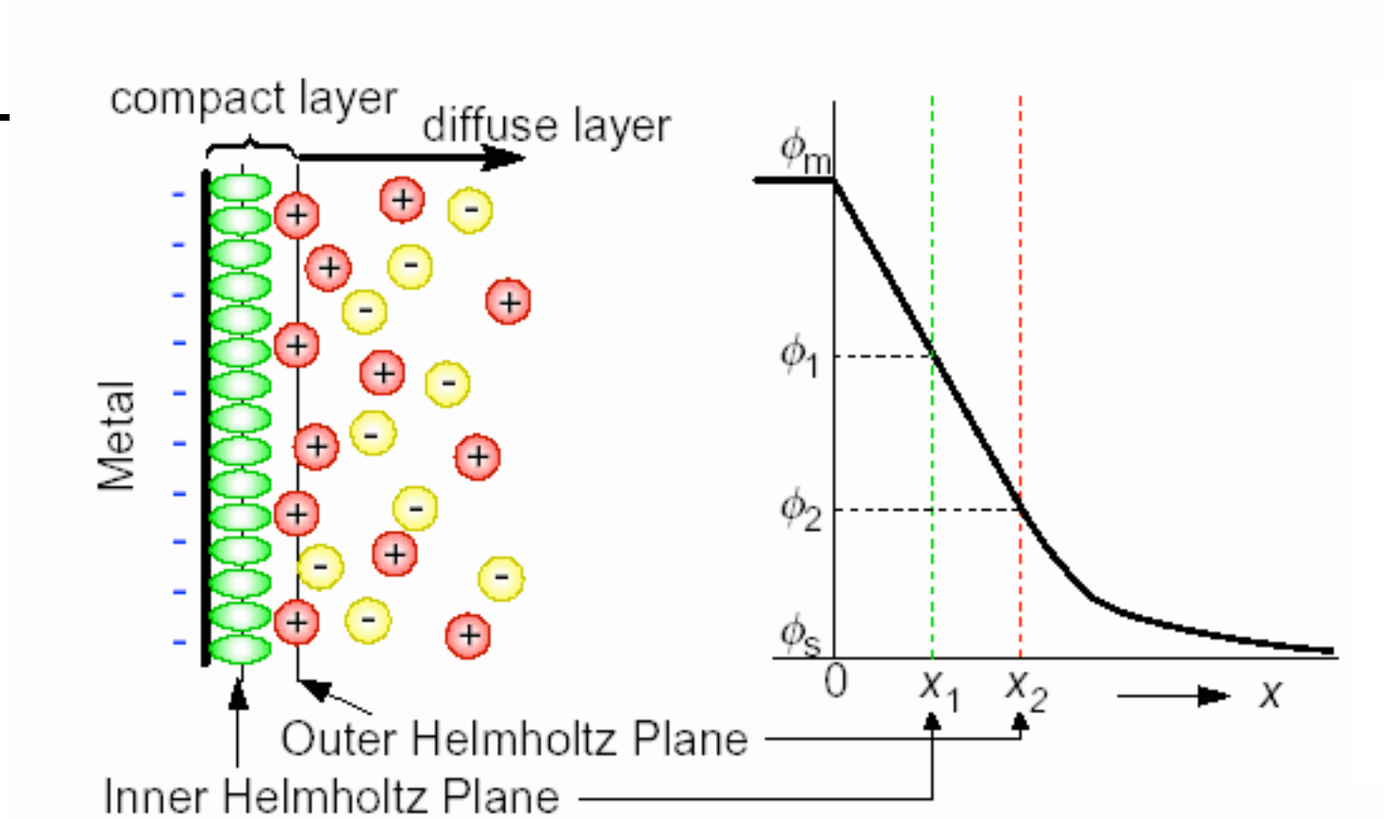
$WO_3 + H_2O \rightarrow WO_4^{2-} + \mathbf{2}H^+$

$NaOH \rightarrow Na^+ + \mathbf{(}OH\mathbf{)}^-$

Solvente: Agua

Iones: WO_4^{2-}, Na^+

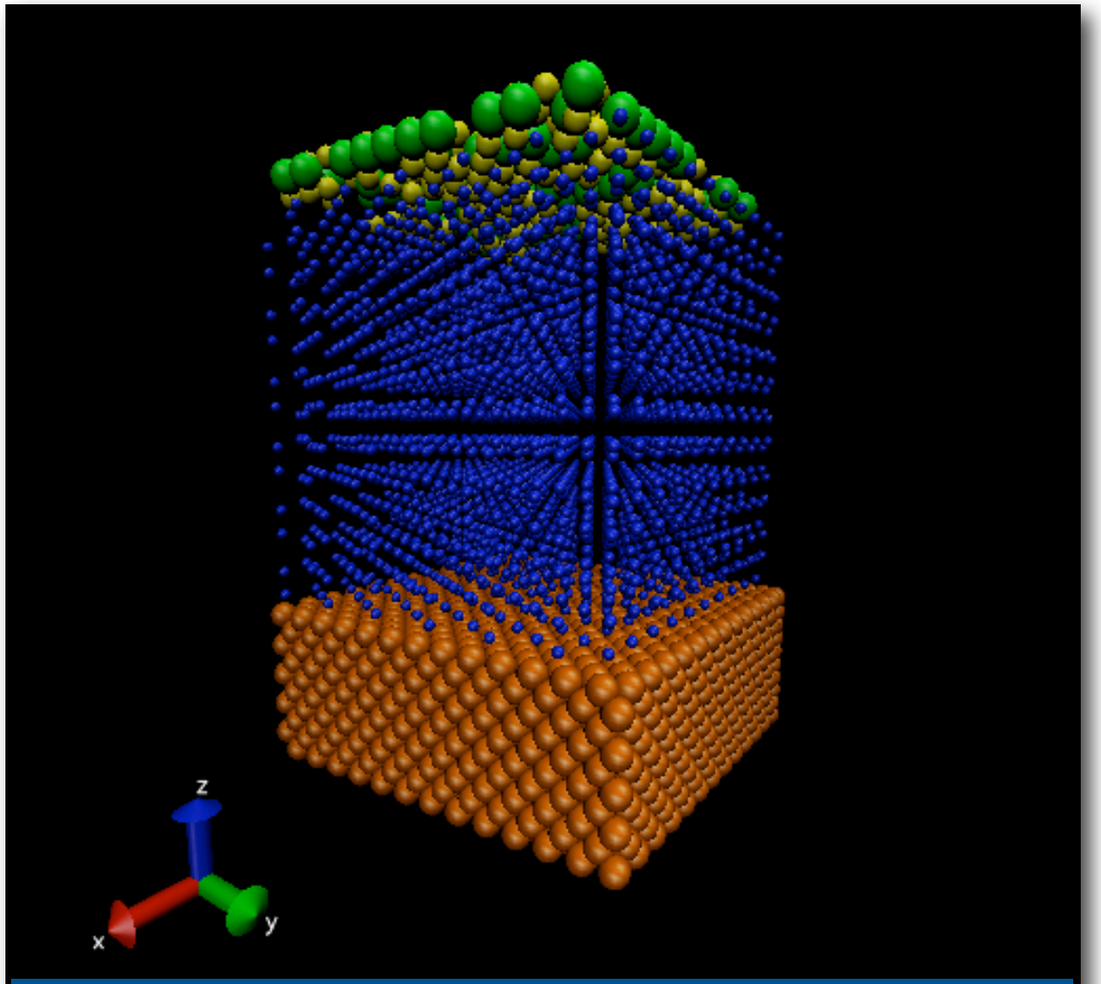
Sustrato: Cu



javier.wachter@gmail.com

Terminal — 69×42

```
#Electrodeposition Molecular Dynamics
units           real
dimension       3
boundary        p p f
atom_style      charge

read_data       conf_Ice_cu_ions_sinH.txt

# caja de sustrato fija
lattice none
region          box block -INF INF -INF INF -INF -14.44 units box

log             electrodep.log

group           sustrato type 3
group           solvente type 2
group           iones type 4 5

group           sustfijo region box

mass            1 1.0079
mass            2 15.9994
mass            3 63.55
mass            4 22.98
mass            5 247.84

pair_style hybrid lj/cut 10.0 buck 10.0 buck/coul/cut 10

pair_coeff 1 * lj/cut 0.0000 1.0 2.3
pair_coeff 2 2 lj/cut 0.155 3.170 8.0
pair_coeff 2 3 lj/cut 1.2083 2.7537 7.0
pair_coeff 2 4 lj/cut 0.6977 3.2988 8.2
pair_coeff 2 5 lj/cut 0.9048 4.225 11.0
pair_coeff 3 3 lj/cut 9.399 2.273 5.77
pair_coeff 3 4 lj/cut 5.427 2.883 7.2
pair_coeff 3 5 buck 2.1556e06 0.2987 0.0 10.0
pair_coeff 4 4 buck/coul/cut 9.5976e05 0.2688 0.0 10.0
pair_coeff 4 5 buck/coul/cut 1.2446e06 0.3415 0.0 10.0
pair_coeff 5 5 buck/coul/cut 1.6141e06 0.4141 0.0 10.0
#kspace_style pppm 1.0e-4
#kspace_modify slab 3.0
:
```



configuración inicial, ~10000 átomos

Condiciones de borde:

- Periódicas en x e y, fijas en z.

Se define un estilo híbrido de potenciales:

- lj/cut (Lennard Jones)
- buck (Buckingham, parte repulsiva)
- buck/coul/cut (buck+coulomb)

javier.wachter@gmail.com

Terminal — 84×31

```
neighbor        2.0 bin
neigh_modify    delay 0 every 10 check yes

timestep        1.0

thermo_style    custom step temp pe etotal press vol
thermo_modify   norm no flush yes

################ Equilibrio

fix             1 sustrato setforce Null Null 0.0
velocity        all create 10.0 12345689 dist uniform

fix             eq1 all nvt temp 10.0 10.0 100.0
#               iso 1.0 1.0 100.0

fix             walla all wall/reflect zhi 58.0 units box

compute         3 all pe/atom
compute         4 all ke/atom
compute         rdfdep all rdf 100
fix             rdf1 all ave/time 100 10 1000 c_rdfdep file rdf_nvt.dat mode vecto

thermo          100
dump            1 all custom 100 eq_nvt_10K.dump id type q x y z c_3 c_4
run             20000
unfix           eq1
unfix           rdf1
undump          1

:
```

Sustrato de cobre fijo con `setforce Null Null 0.0`

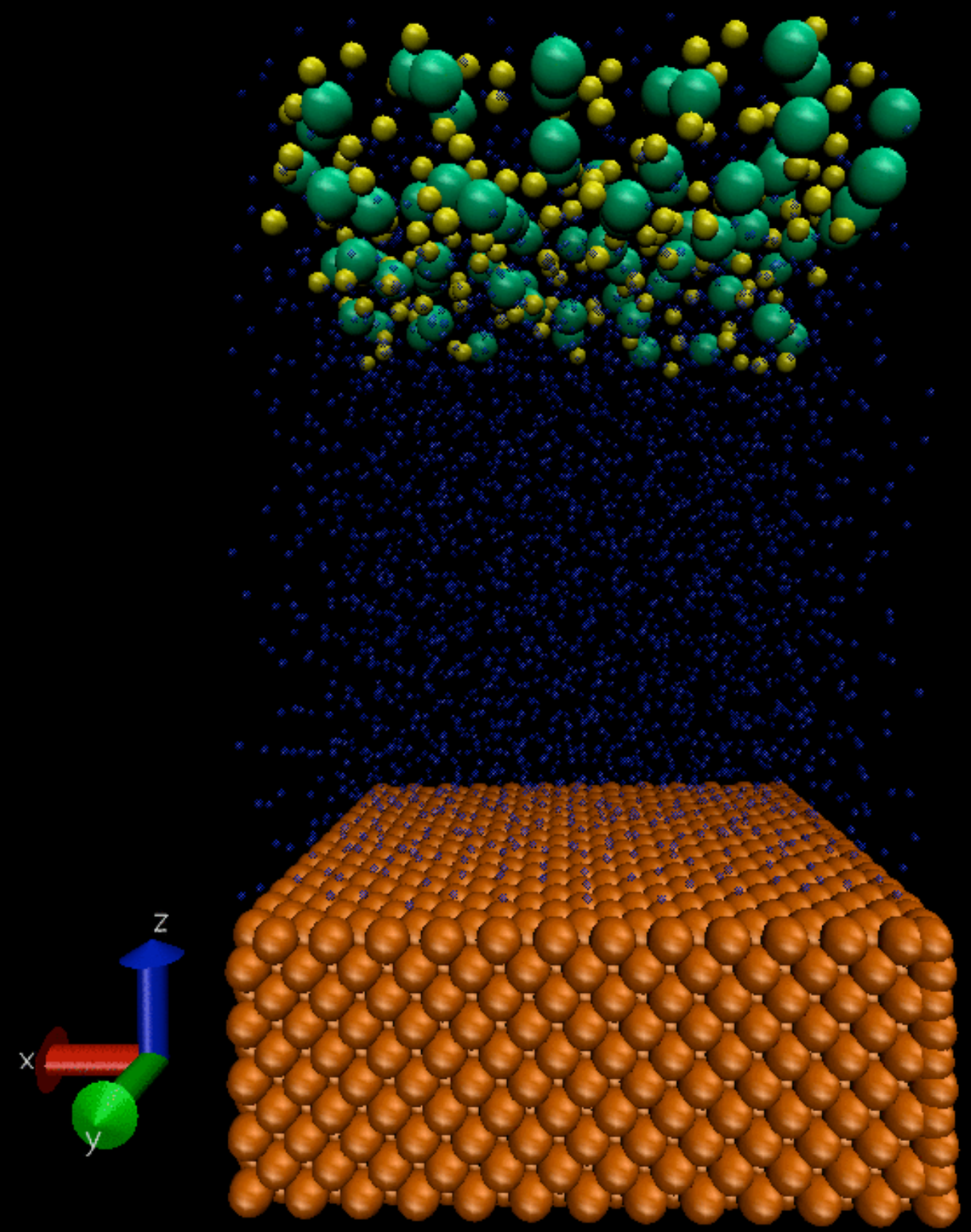
Pared superior con `fix wall`

Terminal — 84×31

```
run             20000
unfix           eq1
unfix           rdf1
undump          1

################ Calentamiento
reset_timestep  0
timestep        1.0

fix             hot all nvt temp 10.0 300.0 100.0
#                                 iso 1.0 1.0 100.0
thermo          100
dump            2 all custom 100 hot_nvt_10-300K.dump id type q x y z c_3 c_4
run             100000
unfix           hot
undump          2

################ Equilibrio NVT a 300K y Campo Electrico

fix             ef iones efield 0.0 0.0 0.35
fix             eq2 all nvt temp 300.0 300.0 100.0
#                                 iso 1.0 1.0 100.0
thermo          100
dump            3 all custom 100 eq_nvt_300K.dump id type q x y z c_3 c_4
run             100000
unfix           eq2
########################################
# SIMULATION DONE
print "All done"

(END)
```

Incluimos un campo eléctrico entre 0 y 1 Volt/Angstrom con T=300 K

javier.wachter@gmail.com

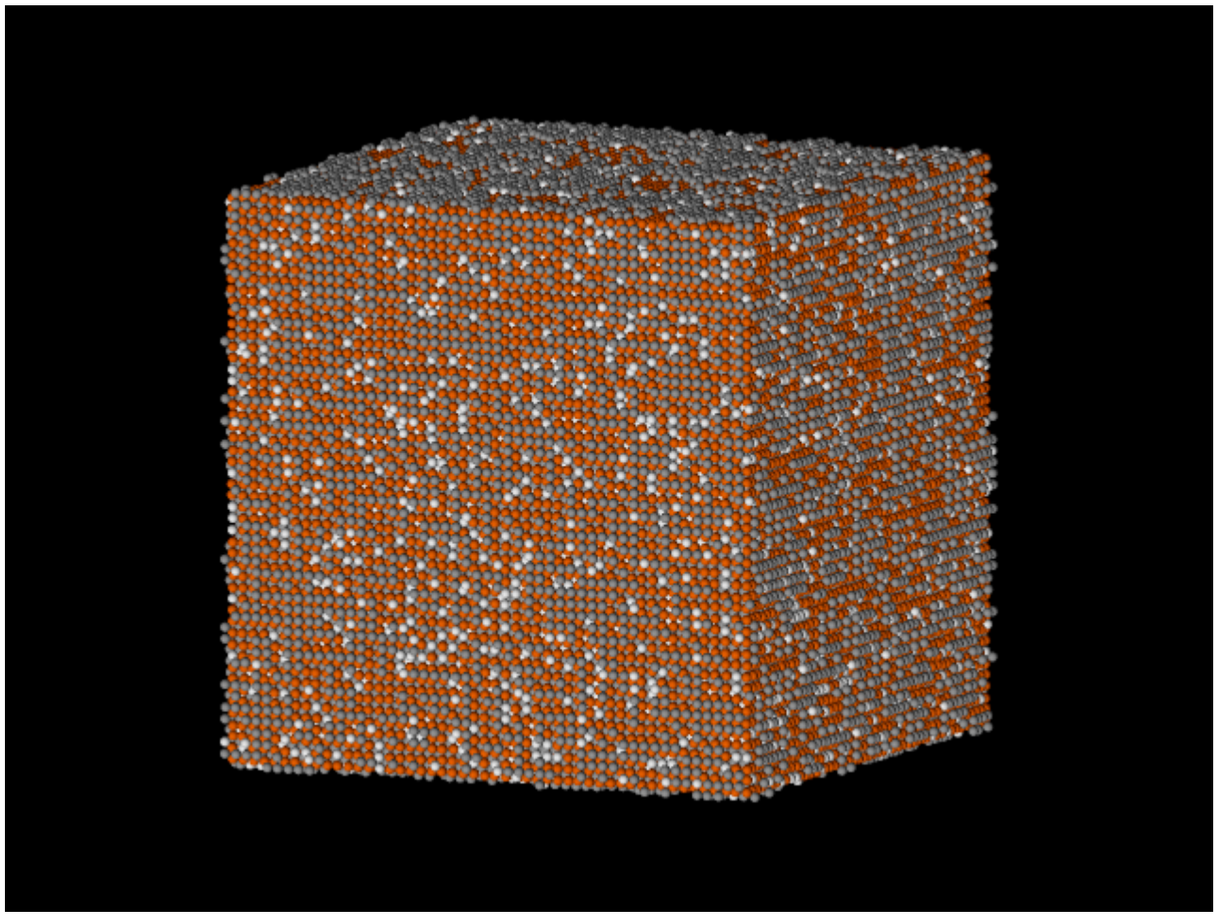

z
x
y

Otras herramientas...

En lammpsDIR/tools/ hay otras herramientas veamos el caso de CreateAtoms. ($tools/createatoms/)

```
&maincard
 ntypes=2
 perub=32.976,32.976,32.976
 perlb=0.0,0.0,0.0
 ilatseed=21
 amass=91.224,63.546,26.982,1.0,1.0
 ielement=40,29,13,1,1
 iseed=21
&end
&latcard
 lattype='sc'
 alat=3.2976,3.2976,3.2976
 xrot=1.0,0.0,0.0
 yrot=0.0,1.0,0.0
 zrot=0.0,0.0,1.0
 periodicity=1.0,1.0,1.0
 strain=0.0,0.0,0.0
 delx=0.0,0.0,0.0
&end
&subcard
 rcell=0.0,0.0,0.0
 ccell=1.0,0.0,0.0,0.0,0.0,0.0
&end
&subcard
 rcell=0.5,0.5,0.5
 ccell=0.0,1.0,0.0,0.0,0.0,0.0
&end

&subcard
&end
```

```
&defcard
 xmin=0.0
 xmax=32.976
 ymin=0.0
 ymax=32.976
 zmin=0.0
 zmax=32.976
 oldtype=0
 newtype=3
 prob=0.1
&end

&defcard
&end


&filecard
 dynamo="none"
 paradyn="none"
 lammps="cu50zr50al10b2-10xcube.lmp"
 xyz="cu50zr50al10b2-10xcube.xyz"
&end
```



javier.wachter@gmail.com

FIN

http://lammps.sandia.gov

Gracias por su atención!

Agradecimientos a Conicyt, contrato 21090391 y beca de término de tesis.