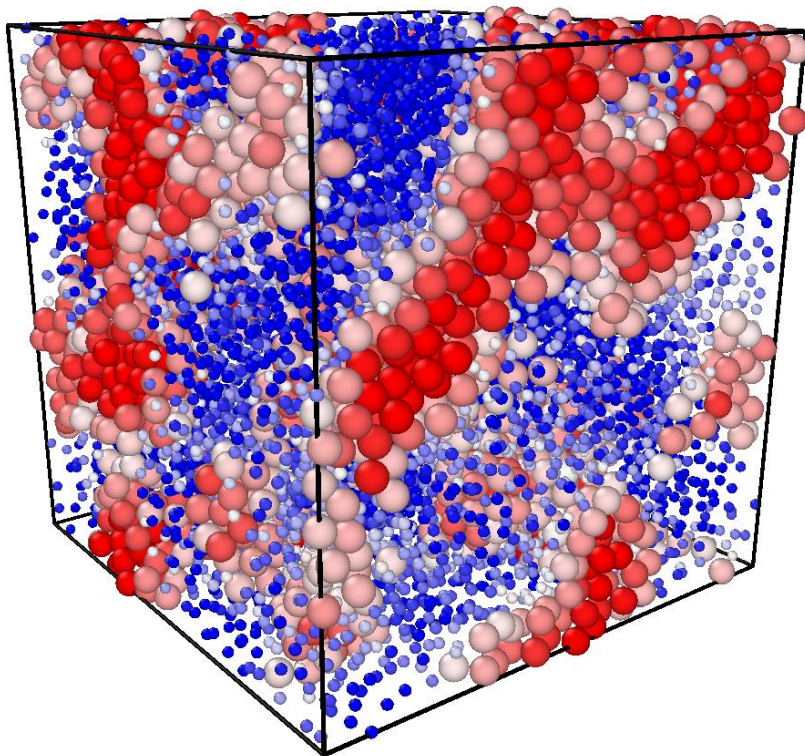


Pengantar Simulasi Dinamika Molekular

Implementasi Dengan Python dan LAMMPS



Muhammad Moldynniz Mutiara

Achmad Benny Mutiara

Rina Refianti



PENERBIT GUNADARMA

PENGANTAR SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR: *Implementasi Dengan Python & LAMMPS*

- Penyusun : Muhammad Moldynniz Mutiara, Achmad Benny Mutiara, Rina Refianti
- Desain : M. Alhazen Mutiara
- Desain dan Layout : M. Alhazen Mutiara

ISBN: xxx-xxx-xxxx-xx-x

Cetakan Pertama, Januari 2026

Diterbitkan pertama kali oleh Gunadarma

Jl. Margonda Raya No. 100, Pondokcina, Depok 16424

Telp. +62-21-78881112, 7863819 Faks. +62-21-7872829

e-mail : penerbit@gunadarma.ac.id

Hak Cipta dilindungi undang-undang. Dilarang mengutip atau memperbanyak dalam bentuk apapun sebagian atau seluruh isi buku tanpa izin tertulis dari penerbit.

KATA PENGANTAR

Puji syukur kami panjatkan kepada Allah SWT, yang telah memberikan rahmat dan kemudahan sehingga bisa menyelesaikan Buku yang berjudul **Pengantar Simulasi Dinamika Molekular: Implementasi Dengan Python & LAMMPS**.

Buku ini disusun dengan mengambil materi dari paper-paper karya penulis terkenal di bidang Simulasi Dinamika Molekular dan juga digabungkan pengalaman penulis dalam menyelesaikan riset yang terkait dengan bidang Simulasi Dinamika Molekular. Buku ini disusun dalam 8 bab, yang mencakup: Prinsip Simulasi Dinamika Molekular, Implementasi dengan Python dan LAMMPS, Urutan langkah simulasi, Analisis hasil simulasi, dan wawasan tentang simulasi komputer pada sistem gelas atau kaca.

Misi dari penerbitan buku ini adalah untuk digunakan mahasiswa, dosen, peneliti dan pembaca yang tertarik pada Simulasi Dinamika Molekular. Mengingat saat ini buku jenis ini masih jarang ditulis oleh penulis dari Indonesia.

Akhirnya kami mengucapkan terima kasih kepada Warek II Universitas Gunadarma, dan rekan-rekan dosen yang banyak membantu sehingga bisa diterbitkannya buku ini.

Tiada gading yang tak retak, kami masih menyadari bahwa buku ini masih jauh dari sempurna, saran dan kritik yang sangat membangun sangat kami harapkan.

Depok, Januari 2026

MMM, ABM dan RR

DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR	iii
DAFTAR ISI	v
DAFTAR GAMBAR	ix
SINOPSIS	xiii
1 PENDAHULUAN	1
2 PRINSIP SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR	3
2.1 Pendahuluan	3
2.2 Model	3
2.3 Kondisi Batas Periodik dan Konvensi Citra Minimum	6
2.4 Integrasi Numerik	7
2.5 Bak Temperatur	7
2.5.1 Bak Temperatur Statistik	8
2.5.2 Algoritma Nosé-Hoover	10
2.6 Inisialisasi Posisi Dan Kecepatan	11
3 IMPLEMENTASI SIMULASI MD DENGAN PYTHON	13
3.1 Inisialisasi Posisi	13
3.2 Alat Pembuatan Grafik dan Visualisasi	15
3.3 Inisialisasi Kecepatan	17
3.4 Percepatan	18

3.5	Simulasi Dinamika Molekuler NVE	21
3.6	Python: Lebih Banyak Alat Analisis Dan Visualisasi	22
3.7	Simulasi Dinamika Molekuler NVT	26
4	IMPLEMENTASI SIMULASI MD DENGAN LAMMPS	29
4.1	Pengantar LAMMPS	29
4.2	Simulasi NVE Dengan LAMMPS	30
4.3	Simulasi NVT	33
5	URUTAN PELAKSANAAN SIMULASI	35
6	ANALISIS	37
6.1	Fungsi Distribusi Radial	37
6.1.1	Fungsi Distribusi Radial Dengan Python	38
6.1.2	Interpretasi Fungsi Distribusi Radial	41
6.1.3	Fungsi Distribusi Radial Dengan LAMMPS	42
6.2	Pergeseran kuadrat rata-rata (<i>Mean square displacement</i>)	43
6.2.1	Pergeseran Kuadrat Rata-Rata (MSD) Dengan Python	43
6.2.2	Pergeseran Kuadrat Rata-Rata Dengan LAMMPS	46
6.2.3	Interpretasi Perpindahan Kuadrat Rata-Rata	48
7	SOAL-SOAL YANG DISARANKAN	51
8	WAWASAN: Bagaimana Simulasi Komputer Dapat Berkontribusi Pada Pemahaman Tentang Dinamika Kaca/Gelas dan Cairan Kaca/Gelas ?	55
8.1	Gambaran Umum	55
8.2	Model dan Detail Simulasi	56
8.3	Hasil	57
8.4	Kesimpulan	68
A	Formalisme Hamiltonian Untuk Termostat Nosé-Hoover	71
B	Integrasi Fox-Anderson Dari Persamaan Nosé-Hoover	75
C	Sistem Batch	77

D LAMMPS Dan Software OVITO	79
D.1 LAMMPS (Simulator Paralel Masif Atom/Molekul Skala Besar)	79
D.1.1 Fitur Umum Pada LAMMPS	80
D.1.2 Output	80
D.2 Software OVITO	80
E Algoritma Paralel LAMMPS	83
DAFTAR PUSTAKA	89

Penerbit Gunadarma

Penerbit Gunadarma

DAFTAR GAMBAR

2.1	Diagram alir program simulasi dinamika molekul.	4
2.2	Sketsa sistem biner dua dimensi yang mengilustrasikan kondisi batas periodik dan konvensi citra minimum. Untuk mengidentifikasi tetangga j dari partikel i , posisi $\mathbf{r}_j$ dari partikel j dipilih dari posisi j di dalam sistem (di dalam bingkai tebal) dan posisi citra periodik j (di dalam kotak yang dibingkai dengan garis tipis), sedemikian sehingga r_{ij} adalah minimum. Tetangga i memenuhi $r_{ij} < r_{\alpha\beta}^{\text{cut}}$ dan berada di dalam lingkaran biru besar.	6
2.3	Diagram alir untuk dinamika molekuler dengan algoritma kecepatan Verlet. . .	8
2.4	Diagram alir untuk menghitung kecepatan dari distribusi Maxwell-Boltzmann. . .	10
3.1	Visualisasi posisi partikel, yang awalnya ditetapkan pada kisi kubik.	16
3.2	Komponen y dari partikel 8 sebagai fungsi waktu t (dalam satuan waktu LJ $\sqrt{m_A \sigma_{AA}^2 / \epsilon_{AA}}$) untuk model Kob-Andersen dari $N = 1000$ partikel dimulai dengan konfigurasi awal <code>initposvel</code> , dan untuk 50 langkah waktu dengan $\Delta t = 0,005$. (Waktu terbesar adalah $50 \times 0,005 = 0,25$.)	23
3.3	$z(x)$ untuk konfigurasi awal dalam lingkaran kecil hitam dan untuk konfigurasi akhir pada $t = 0,25$ (dalam satuan waktu LJ $\sqrt{m_A \sigma_{AA}^2 / \epsilon_{AA}}$) dalam lingkaran besar merah.	24
3.4	Energi total per partikel $E_{\text{tot}}/N = (E_{\text{kin}} + V)/N$ sebagai fungsi waktu (dalam satuan LJ) untuk simulasi NVE dengan $n_{\text{MD}} = 50$ dan dengan $\Delta t = 0,005$. Nilai $-6,161$ di kiri atas menunjukkan bahwa label tanda centang pada sumbu vertikal adalah $E_{\text{tot}}/N + 6,151$. Posisi dan kecepatan awal dibaca dari file <code>initposvel</code> ($T = 0,5$).	25
3.5	Ketergantungan temperatur terhadap waktu untuk NVT tetap dengan $T = 0.2$, <code>nstepBoltz</code> = 10, dan $n_{\text{MD}} = 50$ dengan $\Delta t = 0.005$	26

6.1	Sketsa penentuan fungsi distribusi radial. Untuk menghitung $g_{AA}(r)$, histogram jarak pasangan r_{ij} disimpan dalam array <code>gofrAAhist</code> . Lebar setiap bin adalah Δr . Terdapat <code>grnbinmax</code> bin.	38
6.2	Fungsi distribusi pasangan radial untuk model Kob-Andersen dengan $N = 1000$, $L = 9,4$ pada $T = 0,5$. Panah vertikal hijau menunjukkan posisi puncak $g_{AA}(r)$	40
6.3	Sketsa susunan partikel untuk mengilustrasikan interpretasi fungsi distribusi radial. Lapisan tetangga pertama, kedua, ketiga, dan keempat ditunjukkan dengan lingkaran hijau tua (garis tebal). Jari-jari lapisan ini sesuai dengan posisi puncak fungsi distribusi radial seperti yang ditunjukkan dengan panah vertikal hijau tua pada Gbr. 6.2 untuk contoh $g_{AA}(r)$	41
6.4	Pergeseran kuadrat rata-rata $\langle r^2 \rangle$ sebagai fungsi waktu t (dalam satuan LJ) untuk model Kob-Andersen. Konfigurasi awal diseimbangkan pada $T = 0,5$. Hasilnya adalah untuk simulasi NVE untuk $N = 1000$ dan untuk 1000 langkah waktu (dengan program Python, merekam $\langle r^2 \rangle$ setiap langkah waktu). Setelah peningkatan tajam untuk waktu yang sangat singkat, $\langle r^2 \rangle$ mencapai dataran tinggi (plateau). Untuk interpretasi gambar ini, lihat Bagian 6.2.3.	45
6.5	Pergeseran kuadrat rata-rata $\langle r^2 \rangle$ sebagai fungsi waktu t (dalam satuan LJ) untuk model Kob-Andersen. Konfigurasi awal diseimbangkan pada $T = 0,5$. Hasilnya adalah untuk simulasi NVE dengan $N = 1000$ dan untuk 10^7 langkah waktu (dengan LAMMPS dan menyimpan $\langle r^2 \rangle$ dalam interval logaritmik.)	48
8.1	Ketergantungan temperatur konstanta difusi untuk atom silikon dan oksigen (kotak terisi dan lingkaran terbuka, masing-masing). Garis lurus adalah hasil pencocokan data temperatur rendah dengan hukum Arrhenius yang memberikan energi aktivasi yang ditetapkan. Nilai eksperimental untuk energi aktivasi (dari Ref. [73] dan [74]) juga diberikan. Diadaptasi dari Ref. [66].	58
8.2	Bagian diri dari fungsi korelasi van Hove untuk atom oksigen versus jarak r untuk waktu yang berjarak sama pada sumbu waktu logaritmik (lihat label). a) $T = 6100$ K, b) $T = 2750$ K. Panah menandai lokasi puncak sekunder. Dari Ref. [68].	60
8.3	Gambar utama: Ketergantungan temperatur viskositas sebagaimana ditentukan dari simulasi, (kotak terisi), dan dari eksperimen <i>Urbain dkk.</i> , (lingkaran terbuka) Ref. [78]. Sisipan: Ketergantungan temperatur dari $k_B T / D\eta$ untuk konstanta difusi silikon dan oksigen (lingkaran dan kotak, masing-masing). Dari Ref. [68].	61

8.4	Ketergantungan waktu dari $P_b(t)$, probabilitas bahwa ikatan Si–O yang ada pada waktu $t = 0$ juga ada pada waktu t , untuk semua temperatur yang diteliti. Garis putus-putus horizontal pada e^{-1} digunakan untuk mendefinisikan waktu hidup τ_b dari suatu ikatan. Dari Ref. [68].	62
8.5	Ketergantungan temperatur dari hasil kali antara masa hidup ikatan Si–O dan konstanta difusi silikon dan oksigen (simbol terisi dan simbol terbuka, masing-masing). Dari Ref. [68].	63
8.6	a) Ketergantungan waktu dari fungsi hamburan menengah tak koheren $F_s(q, t)$ untuk atom oksigen untuk semua suhu yang diteliti. Nilai vektor gelombang q adalah $1,7\text{\AA}^{-1}$ dan sesuai dengan lokasi puncak difraksi tajam pertama dalam faktor struktur statis. Garis putus-putus horizontal pada e^{-1} digunakan untuk mendefinisikan waktu relaksasi- α τ . b) Data yang sama seperti pada a) tetapi diplot terhadap waktu yang diskalakan ulang $t/\tau(T)$. Dari Ref. [66].	65
8.7	Hubungan dispersi untuk mode yang berbeda pada $T = 2900\text{ K}$. Simbol yang terisi dan terbuka masing-masing sesuai dengan korelasi Si–Si dan O–O. Karakter pertama dalam label (L,T) menunjukkan longitudinal dan transversal, dan karakter kedua (O,A) menunjukkan optik dan akustik. Hubungan dispersi yang diberi label BP adalah untuk puncak boson. a) Semua vektor gelombang diper-timbangkan. b) Hubungan dispersi pada vektor gelombang kecil untuk korelasi O–O. Dua garis lurus adalah hubungan dispersi yang diharapkan jika kecepatan suara eksperimental diasumsikan [84]. Diadaptasi dari Ref. [68].	67
D.1	Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)	79
D.2	Open Visualization Tool (OVITO)	81
E.1	Algoritma paralel LAMMPS.	83
E.2	Skema dekomposisi domain pada paralelisasi MPI (A) simulasi ortogonal dan (B) triklinik (<i>triclinic</i>)	84
E.3	Dekomposisi sistem 2D dengan 12 MPI (<i>rank</i>). Warna atom menunjukkan ketidakseimbangan beban setiap subdomain dengan warna hijau optimal dan merah paling tidak optimal	85
E.4	Komunikasi ghost atom	86
E.5	FFT paralel dalam PPPM	87

Penerbit Gunadarma

SINOPSIS

Buku ini menyajikan pengantar simulasi dinamika molekuler dalam konteks model Kob-Andersen dari sebuah kaca.

Buku ini memperkenalkan seperangkat alat lengkap untuk melakukan dan menganalisis hasil simulasi pada NVE dan NVT tetap. Format modular buku ini memungkinkan pembaca untuk memilih bagian yang sesuai dengan kebutuhan mereka.

Buku dimulai dengan pengantar dinamika molekuler yang independen dari bahasa pemrograman, diikuti dengan pengantar implementasi menggunakan Python dan kemudian paket perangkat lunak sumber terbuka LAMMPS yang tersedia secara gratis. Kami juga menje laskan alat analisis untuk pengujian cepat program selama pengembangannya dan menghi tung fungsi distribusi radial dan perpindahan kuadrat rata-rata menggunakan Python dan LAMMPS

Buku ini pada bab terakhir menyajikan juga wawasan tentang Bagaimana Simulasi Komputer Dapat Berkontribusi PadaPemahaman Tentang Dinamika Kaca dan Cairan Kaca?

Penerbit Gunadarma