

Modelado Molecular II

Quinta tarea a 15/ Noviembre / 2019

NT 704804 Karina Chiñas Fuentes

1. *Elabore un archivo de entrada para LAMMPS para llevar a cabo el proceso de dinámica molecular NPT del agua utilizando el potencial de interacción reaxFF. Se recomienda elaborar el archivo de entrada a partir del ejemplo que proporciona LAMMPS para el cálculo de sistemas CHO con reaxFF (directorio de Examples\reax\CHO). Para elaborar este nuevo archivo, tome en cuenta también el archivo de entrada LAMMPS desarrollado en clase para el estudio del punto de fusión del níquel. Tenga cuidado en construir la caja de simulación con una densidad adecuada.*

Mi archivo, funcional, llamado **in.CHO-H2O** contiene lo siguiente:

REAX potential for H2O system

units **real**
boundary **p p p**

atom_style **charge**
read_data **data.H2O**
replicate **5 5 5**

pair_style **reax/c lmp_control**
pair_coeff *** *ffield.reax.cho H C O**

velocity **all create 300.0 4928459**

neighbor **2 bin**
neigh_modify **every 10 delay 0 check no**

#fix **1 all nve**
#fix **2 all qeq/reax 1 0.0 10.0 1e-6 param.qeq**
#fix **3 all temp/berendsen 500.0 500.0 100.0**

fix **1 all npt temp 300.0 300.0 0.1 iso 1.0 1.0 1.0**
fix **2 all qeq/reax 1 0.0 10.0 1e-6 param.qeq**

thermo **1**
timestep **0.001**
#dump **1 all atom 30 dump.reax.cho**
run **25000**

Mientras que mi archivo **data.H2O** contiene lo siguiente:

```
# H2O example
```

```
3 atoms
```

```
3 atom types
```

```
-1.5521 1.5521 xlo xhi
```

```
-1.5521 1.5521 ylo yhi
```

```
-1.5521 1.5521 zlo zhi
```

```
Masses
```

```
1 1.0080
```

```
2 12.0107
```

```
3 15.9994
```

```
Atoms
```

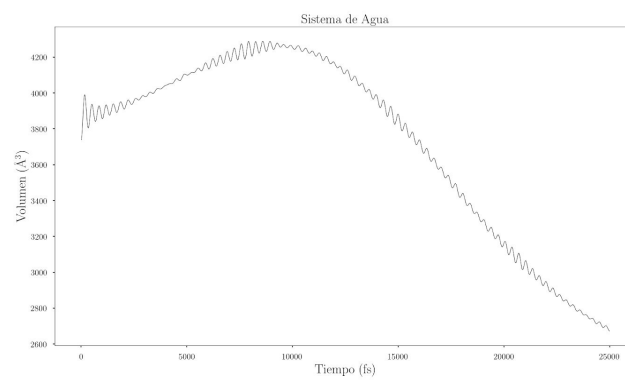
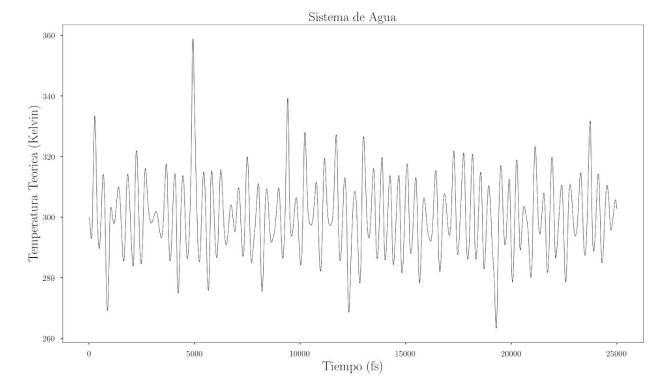
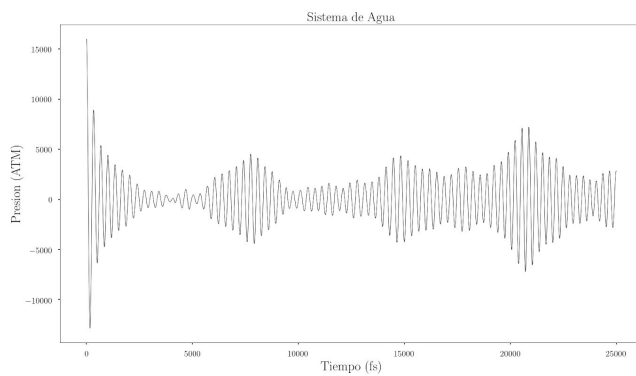
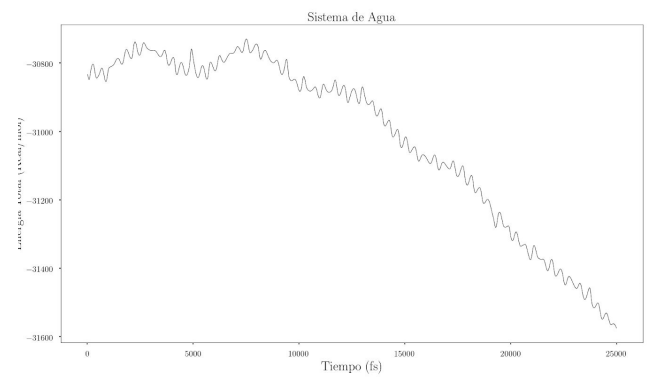
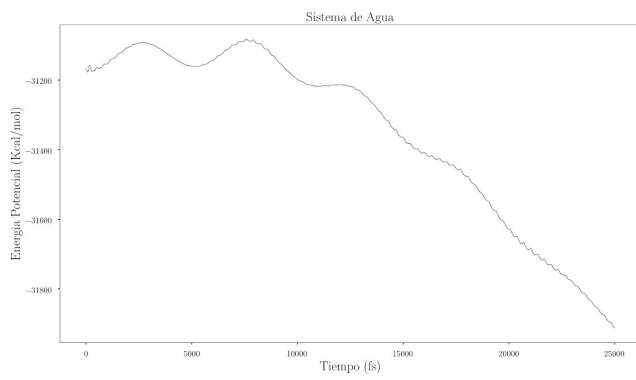
```
1 3 0.000 0.0000 0.000 0.000
```

```
2 1 0.000 0.757 0.586 0.000
```

```
3 1 0.000 -0.757 0.586 0.000
```

2. Una vez que sea funcional el archivo de entrada LAMMPS construido, lleve a cabo una o varias corridas de dinámica molecular con un número de partículas conveniente para determinar el número de pasos temporales necesarios para alcanzar el equilibrio termodinámico en una simulación típica del sistema (use una temperatura de 300 K y una presión de una atmósfera para la simulación). Construya un gráfico de la temperatura instantánea contra tiempo y otro de energía total instantánea también contra tiempo que muestren que la condición de equilibrio se alcanzó.

Como se muestra en el código anterior, ya se tenía considerado la temperatura de 300 K y una presión de 1 atm. Las gráficas resultantes, de todas las variables que se tratan, son las siguientes.



El *output* final del código marcó lo siguiente:

Loop time of 1490.27 on 1 procs for 25000 steps with 375 atoms

Performance: 0.001 ns/day, 16558.541 hours/ns, 16.775 timesteps/s

99.1% CPU use with 1 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	1099.6	1099.6	1099.6	0.0	73.78
Neigh	142.28	142.28	142.28	0.0	9.55
Comm	1.37	1.37	1.37	0.0	0.09
Output	1.0253	1.0253	1.0253	0.0	0.07
Modify	245.83	245.83	245.83	0.0	16.50
Other		0.1919			0.01

Nlocal: 375 ave 375 max 375 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0
 Nghost: 6814 ave 6814 max 6814 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0
 Neighs: 326408 ave 326408 max 326408 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 326408
 Ave neighs/atom = 870.421
 Neighbor list builds = 2500
 Dangerous builds not checked

Please see the log.cite file for references relevant to this simulation

Total wall time: 0:24:50

- Utilizando número de pasos temporales adecuados, determine la energía total promedio y la densidad promedio del sistema para temperaturas de 300K, 310K, 320K, ..., 380K. Elabore con los datos calculados los gráficos correspondientes de energía total promedio y densidad promedio del agua como función de la temperatura.

Para generar los datos que se piden, lo único cambié fue la línea de código:

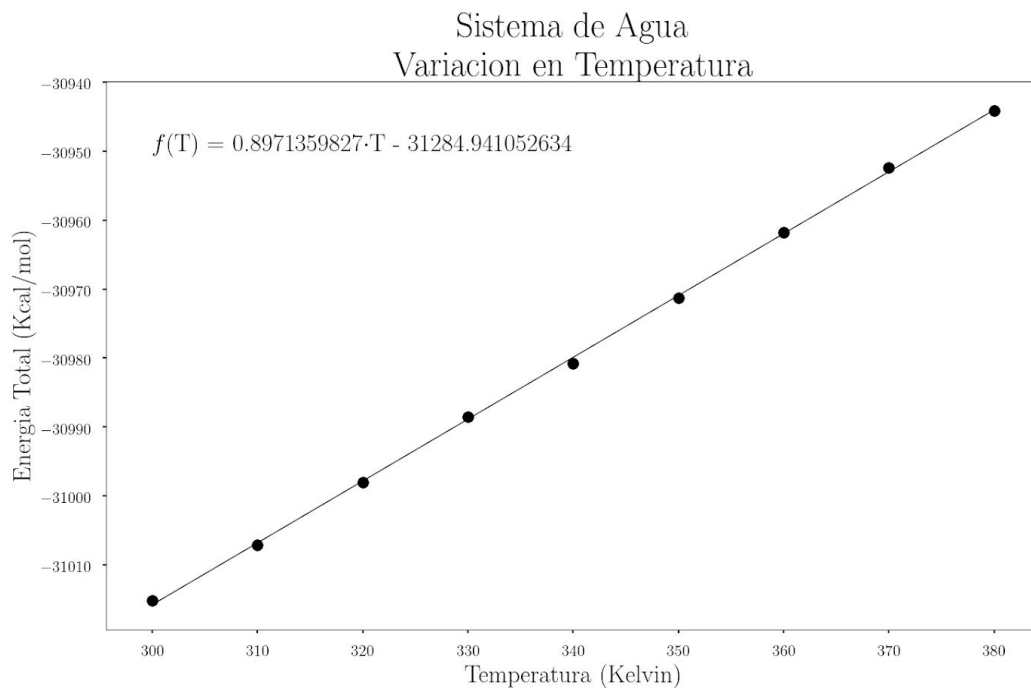
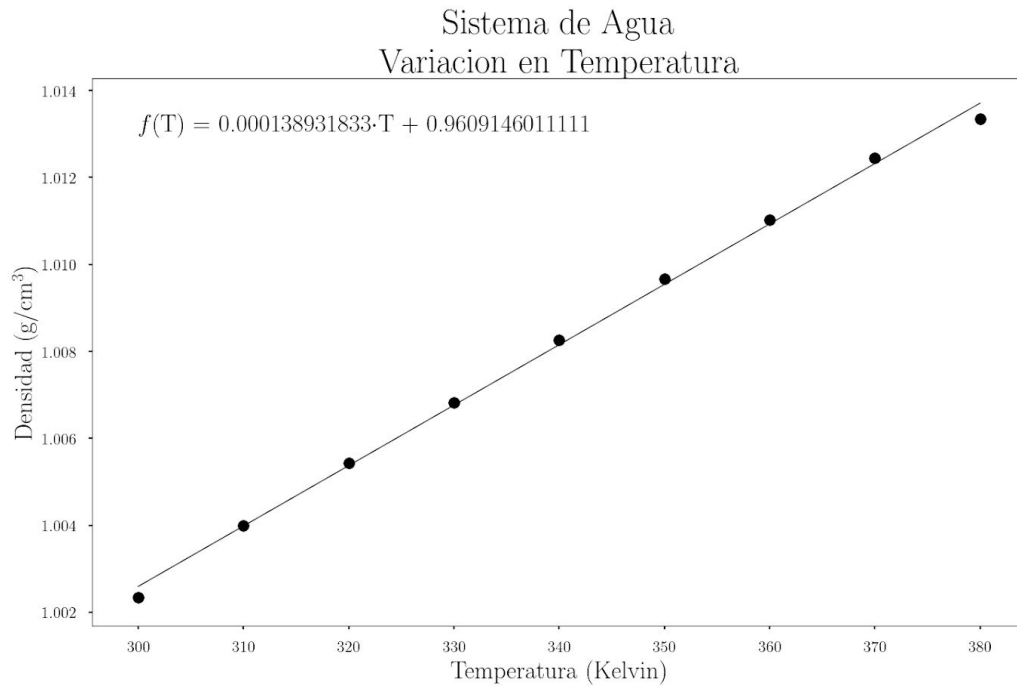
```
fix 1 all npt temp 300.0 300.0 0.1 iso 1.0 1.0 1.0
```

donde ambos 300.0 los cambié a los datos que se piden. La densidad la calculé con la siguiente relación:

$$\rho = \frac{(\text{Número de Partículas})(\text{Masa Molar})}{(\text{Vol}_{\text{promedio}})(\text{N de Avogadro})(1 \times 10^{-24})} \left[\frac{\text{g}}{\text{cm}^3} \right]$$

Para el caso de número de partículas, multipliqué los valores en la línea de **replicate**; los demás valores fueron: número de partículas = 5[^]3, masa molar = 18.01528, vol promedio (aritmético) fue el

valor promedio de los datos calculados por LAMMPS, número de Avogadro = 6.022×10^{23} . Los resultados de cada código se encuentran resumidos en la siguientes gráficas.



Donde $F(T)$ es la regresión lineal que calculé para tener una idea de la dispersión entre datos; la pendiente de la función puede ser utilizada para estimar valores fuera de los calculados.

4. Comente en relación al material incluido en el documento.

Es evidente que la gráfica de la Energía Total contiene lo que se espera: a mayor temperatura, mayor energía en el sistema. Sin embargo, la gráfica de la densidad no muestra lo esperado, es claro que cuando la energía del sistema aumenta, el volumen del sistema también debe de aumentar. Sin embargo, no es eso lo que se observa en los resultados, ya que la densidad es inversamente proporcional al volumen. Para hacer el cálculo de los datos que contienen las gráficas, realicé el siguiente programa en PYTHON.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib import colors as mcolors
from matplotlib import rc
import pandas as pd
import os

T = [300 + 10*i for i in range(9)]
Files = [f"RCSV{t}" for t in T]

DF = [pd.read_csv(Files[i] + ".csv", sep = ",", header = None) for i in
range(len(T))]

for i in range(len(DF)):
    DF[i].columns=["Step", "Temp", "E_pair", "E_mol", "TotEng", "Press", "Volume"]

# ESTAS SON LAS LINEAS ENCARGADAS DE CALCULAR EL PROMEDIO DE ENERGIA

df_E = [DF[i]["TotEng"] for i in range(len(DF))]
Eprom = []
for i in range(len(df_E)):
    E = 0
    for j in range(len(DF[0]["TotEng"])):
        E = E + DF[i]["TotEng"][j]
    Eprom.append(E/len(DF[0]["TotEng"]))

t = np.linspace(min(T),max(T), len(T))
t = 0.8971359827*t - 31284.941052634

plt.figure(figsize = (17,10))
plt.plot(T,t, linewidth = 0.9, label = "Ajuste de Datos", color = 'k')
plt.scatter(T,Eprom, label = "Datos de LAMMPS",color = 'k')
```

```

plt.text(300,-30950, "$f$(T) = 0.8971359827$\cdot T - 31284.941052634",
fontsize = 25)

plt.title("Sistema de Agua \n Variacion en Temperatura", fontsize = 35)
plt.ylabel("Energia Total (Kcal/mol)", fontsize = 25)
plt.xlabel("Temperatura (Kelvin)", fontsize = 25)
plt.show()

# ESTAS SON LAS LINEAS ENCARGADAS DE CALCULAR EL PROMEDIO DEL VOLUMEN

df_V = [DF[i]["Volume"] for i in range(len(DF))]
Vprom = []
for i in range(len(df_V)):
    V = 0
    for j in range(len(DF[0]["Volume"])):
        V = V + DF[i]["Volume"][j]
    Vprom.append(V/len(DF[0]["Volume"]))

# ESTAS SON LAS LINEAS ENCARGADAS CALCULAR LA DENSIDAD DADO EL PROMEDIO
DEL VOLUMEN

Dnsty = np.zeros(len(Vprom))
for i in range(len(Vprom)):
    Dnsty[i] = (5**3)*(18.01528/((Vprom[i])*(6.022e23)*(1e-24)))

t = np.linspace(min(T),max(T), len(T))
t = 0.000138931833*t + 0.9609146011111

plt.figure(figsize = (17,10))

plt.plot(T,t, linewidth = 0.9, label = "Ajuste de Datos", color = 'k')
plt.scatter(T,Dnsty, label = "Datos de LAMMPS",color = 'k')

plt.text(300,1.01305, "$f$(T) = 0.000138931833$\cdot T + 0.9609146011111",
fontsize = 25)

plt.title("Sistema de Agua \n Variacion en Temperatura", fontsize = 35)
plt.ylabel("Densidad (g/cm$^3$)", fontsize = 25)
plt.xlabel("Temperatura (Kelvin)", fontsize = 25)
plt.show()

```

Intenté encontrar el error, sin embargo me cuesta trabajo ya que calculé el valor del volumen promedio al igual que la de la energía. Los valores que me dan de volumen promedio, por cada aumento en temperatura, fueron los siguientes:

**[3730.7027812749034,
3724.57407888446,
3719.249452191234,
3714.13626932271,
3708.8364047808764,
3703.645251792828,
3698.6939804780873,
3693.4971282868514,
3690.2158290836664]**

Eso indica que lo incorrecto no viene por parte del cálculo con la fórmula, sino del programa de LAMMPS, como tal; no sé cómo arreglarlo.