

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS  
PRO REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO  
DEPARTAMENTO DE APOIO A PESQUISA  
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

VISUALIZAÇÃO EM SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL USANDO ATOMEYE

Bolsista: Mateus Caldas Rêgo de Queiroz, CNPq

Manaus

2012

UNIVERSIDADE FEDERAL DO AMAZONAS  
PRO REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO  
DEPARTAMENTO DE APOIO A PESQUISA  
PROGRAMA INSTITUCIONAL DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA

RELATÓRIO FINAL

*PIB – E/0126/2011*

VISUALIZAÇÃO EM SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL USANDO ATOMEYE

Bolsista: Mateus Caldas Rêgo de Queiroz, CNPq

Orientador: Prof. Dr. Denilson da Silva Borges

Manaus

2012

# Sumário

Resumo . . . . .	2
Introdução . . . . .	3
Revisão Bibliográfica . . . . .	4
Métodos Utilizados . . . . .	6
Resultados . . . . .	7
Conclusão . . . . .	12
Referências Bibliográficas . . . . .	13
Cronograma Executado . . . . .	15

## Resumo

O objetivo da simulação computacional é resolver os modelos teóricos em sua total complexidade, mediante a resolução numérica das equações envolvidas utilizando os computadores. A Mecânica Estatística usa a matemática como ferramenta para descrever grandes sistemas. No campo da Mecânica Clássica usamos a Dinâmica Molecular (DM) com o interesse em descrever o movimento das partículas quando sujeitas a uma força, fornecendo uma estrutura que relaciona as propriedades microscópicas dos átomos e de moléculas individuais às propriedades macroscópicas dos materiais, explicando a termodinâmica como resultado natural da Estatística e da Mecânica Clássica. Um bom modelo do sistema físico pode reproduzir experimentos de laboratório, uma vez que pode-se variar livremente os parâmetros usados as vezes impossíveis de serem alcançados, como condições termodinâmicas extremas. Um papel fundamental é ter também uma visualização dos resultados obtidos. Através da função de correlação de pares é possível realizar análises a respeito do tipo de rede cristalina que um sólido líquido ou amorfo se encontra. A função  $g(r)$  dá a probabilidade de encontrar uma partícula a uma dada distância  $r$  em relação a outra colocada na origem. Este tipo de função é um exemplo de correlação de pares que descreve como, em média, os átomos em um sistema são radialmente localizados ao redor de um outro átomo. Por outro lado, tendo uma visualização do sistema como um todo, ou até mesmo podendo passear por dentro da cadeia cristalina ou amorfa nos daria um melhor entendimento, facilitando dessa forma na compreensão do fenômeno em estudo. No objetivo de gerar via simulação computacional a visualização da cadeia de átomos ou moléculas em estudo, se fez necessário um estudo sobre programação em linguagem Fortran para o entendimento do código fonte do programa elaborado.

# Introdução

O método de Simulação Computacional as vezes chamada de "terceira metodologia", possui caráter complementar e alternativo aos modos convencionais e tem exercido um forte impacto em praticamente todos os campos da ciência. Este método procura resolver os modelos teóricos em sua total complexidade, mediante a resolução numérica das equações envolvidas, fazendo uso da computação de alto desempenho.

Para descrever grandes sistemas, no campo da mecânica, onde há um grande interesse no movimento das partículas quando sujeitas a uma força faremos uso da Dinâmica Molecular (DM). Esta fornece uma estrutura que relaciona às propriedades macroscópicas dos materiais que podem ser observados, explicando a termodinâmica como um resultado natural da estatística e da mecânica (clássica e quântica).

Mediante um bom modelo do sistema físico, não só podemos reproduzir experimentos de laboratório, como podemos variar livremente os parâmetros usados nos permitindo provar ou não modelos teóricos existentes dentro de um alcance de parâmetros impossíveis de serem alcançados até o momento, como condições termodinâmicas extremas, resolvendo assim o elo entre explicações teóricas e observações.

O estudo da visualização de sistemas através do programa *atomeye*, gerado via DM, vem colaborar com o entendimento e com o maior detalhes que a simulação nos trás, uma vez que visualizando o comportamento das partículas podemos entender a causa de determinadas consequências que através de um simples gráfico fica, as vezes, subtraída.

## Revisão Bibliográfica

A visualização desempenha um papel fundamental na modelagem de materiais. Isto é particularmente verdadeiro para modelos atômicos, em que há um grande número discretos de graus de liberdade (GL): as posições dos átomos. Resolução atômica é, portanto, a característica que define a visualização atomística. Isso, no entanto, não exclui a possibilidade de "subir" na escala - visualizar os campos de granulação que temos no contínuo, ou ir para "baixo", visualizando a estrutura eletrônica em torno de um átomo em particular ou de um grupo de átomos cuja configuração estrutural se tem a necessidade de olhar.

Estes GL discreta em uma simulação atomística não satisfazem necessariamente qualquer condição de suavidade, como os campos contínuos. Por exemplo a estrutura atômica reconstruída de um núcleo de deslocamento de Silício, Si, não é susceptível de ser descrito por uma fórmula ou uma expansão em série. No entanto, isso não significa que não há nenhuma ordem nesses GL. Em nível atômico ordem é onipresente em materiais, mesmo em materiais amorfos ou desordenados, mesmo em líquidos. Encontrar estas ordens, quantificá-los, e depois representá-los na melhor luz são as tarefas de visualização atomística. Visualização atomística não é meramente um problema de engenharia de software, também é inerentemente um problema físico-química e mecânico.

Para apreciar a importância da visualização atomista, é preciso reconhecer que em uma configuração de grande escala como a simulação de dinâmica molecular (MD), não é raro que o GL se auto organizem de maneira que o investigador não teria esperado antes da simulação ser realizada. Assim, a principal função da simulação atomística está em descobrir novas estruturas, novas vias cinética de micro-mecânico, com resolução atômica. Mesmo que essas descobertas muitas vezes são vistas em pequenas amostras, devido à precisão empírica atual de potenciais interatômicas, em larga escala de simulação não deixa de ser uma ferramenta única e tremendamente poderosa de identificar as estruturas e processos. Uma vez que uma estrutura ou um processo claramente descrito e entendido, que muitas vezes podem ser isolados e modelado com um número muito menor de átomos no nível de primeiros princípios, permitindo que se possa, eventualmente, selecionar a estrutura mais provável ou o processo a partir de um catálogo de possíveis estruturas de energia ou processos. Esta missão de levantamento de grande escala de simulação seria impossível sem visualização eficiente, para a quantidade de dados a partir de uma simulação em grande escala.

Em 1994 o estado-da-arte em visualização atomística foi descrita em um filme que Farid Abraão *et al* (IBM) fez em uma simulação de DM de um bilhão de átomos [1]. A simulação foi realizada usando 200000 passos de tempo sobre 12 teraflop com 4096 nó ASCII em um supercomputador em LLNL, durante quatro dias, o que gerou 25 terabytes de dados brutos. Eles foram compactados com eficiência de  $30\times$  para menos de 1 terabyte, que ainda levaria cerca de 10 discos rígidos para armazenar na época. O filme foi feito na fase de pós-processamento por Mark Duchaineau, um cientista da computação do LLNL. O filme tem uma resolução de  $640 \times 480$ , um tamanho de arquivo de 66 megabytes, e dura 46 s. Em termos de tamanho do arquivo, o filme é menos de um  $1/100$  dos dados brutos. Assistir o filme leva apenas um  $1/100$  do tempo que leva o computador mais rápido do mundo para executar a simulação. No entanto, para ficar com uma visão melhor do que se passou na simulação, que implicam uma infinidade de interação deslocamento de nucleação e dinâmica, fica bem mais prático apenas assistir o filme. Assim, a finalidade principal da visualização é a condensação de informação. Um truque fundamental que permite a taxa de condensação de tais informações elevadas ou dados é a representação seletiva de átomos. Isto é, caso seja de interesse visualizar apenas átomos perto de defeitos na configuração atomista, neste caso, deslocamentos e fissuras.

## Métodos Utilizados

Estudo dirigido tem sido o método utilizado neste projeto de Pibic, bem como apresentações mensais ao grupo de estudo. Esta pesquisa está sendo realizada no âmbito do Departamento de Física da Universidade Federal do Amazonas, iniciou-se com o levantamento bibliográfico dos diversos software existente sobre visualização com as traduções de artigos encontrados, onde percebemos que existe pouca literatura a respeito desse visualizador (Atomeye). Em seguida, estudamos Mecânica Estatística, Dinâmica Molecular e Linguagem de Programação Fortran.

Após esta etapa analisaremos o programa de Dinâmica Molecular, no qual fornecerá os dados de saída para serem introduzidas como arquivo de entrada para o software Atomeye.



## Resultados e discussões

A partir dos estudos sobre Dinâmica Molecular e Linguagem de Programação Fortran, elaboramos um programa em Fortran, uma sub-rotina apresentada na tabela 1, a qual utiliza os dados de saída da DM como os dados de entrada do programa, e este transformará esses dados em um arquivo de extensão .cfg para que possa ser visualizado pelo software Atomeye. Abaixo segue a subrotina que foi elaborada durante este projeto de PIBIC, mostrando dessa forma o alcance do objetivo do projeto.

```
subroutine atomeye (kfilme, temp)
use parametros
use comuns
implicit real*8(a - h, o - z)
character*27 fileav
c Abre um diretório para armazenar os arquivos cfgs do AtomEye
CALL SYSTEM('sh -c "if [ ! -d cfg ]; then mkdir cfg ; fi"')
c
c write(fileav(1:27),'(A27)')'file-av-0000-0000-00000.cfg'
write(fileav(1:21),'(A21)')'file-av-0000-0000.cfg'
write(fileav(14:17),'(i4.4)')kfilme
c write(fileav(14:17),'(i4.4)')int(apress)
write(fileav(9:12),'(i4.4)')int(treq) !int(temp)
c write(fileav(19:23),'(i5.5)')istep
open(30,file=fileav,form='formatted',status='unknown')
c NSIZE=LOG10(DBLE(nptot))+1
c write(form,"(A27,I1,A1)")( 'Number of particles = ',I',NSIZE,")"
c WRITE(30,form)nptot
a0 = sqrt(ax*ax + bx*bx + cx*cx )/ang
b0 = sqrt(ay*ay + by*by + cy*cy )/ang
c0 = sqrt(az*az + bz*bz + cz*cz )/ang
ax0 = ax/ang
ay0 = ay/ang
az0 = az/ang
bx0 = bx/ang
```

```

by0 = by/ang
bz0 = bz/ang
cx0 = cx/ang
cy0 = cy/ang
cz0 = cz/ang
WRITE(30,('Number of particles =',I4))nptot
WRITE(30,('A = 1.0 Angstrom (basic length-scale)'))
WRITE(30,('Atomeye has H0(col,row), but we have HH(row,col)'))
WRITE(30,('Tansposed HH for display correctly here'))
WRITE(30,(A3,I1,A1,I1,A3,F8.3,A3)' )H0(",1,",",1,") =",ax0,"A"
WRITE(30,(A3,I1,A1,I1,A3,F8.3,A3)' )H0(",2,",",1,") =",ay0,"A"
WRITE(30,(A3,I1,A1,I1,A3,F8.3,A3)' )H0(",3,",",1,") =",az0,"A"
WRITE(30,(A3,I1,A1,I1,A3,F8.3,A3)' )H0(",1,",",2,") =",bx0,"A"
WRITE(30,(A3,I1,A1,I1,A3,F8.3,A3)' )H0(",2,",",2,") =",by0,"A"
WRITE(30,(A3,I1,A1,I1,A3,F8.3,A3)' )H0(",3,",",2,") =",bz0,"A"
WRITE(30,(A3,I1,A1,I1,A3,F8.3,A3)' )H0(",1,",",3,") =",cx0,"A"
WRITE(30,(A3,I1,A1,I1,A3,F8.3,A3)' )H0(",2,",",3,") =",cy0,"A"
WRITE(30,(A3,I1,A1,I1,A3,F8.3,A3)' )H0(",3,",",3,") =",cz0,"A"
WRITE(30,('.NO VELOCITY.'))
WRITE(30,('entry count = ",i1 )')6
WRITE(30,('auxiliary[0] = press [GPa]'))
WRITE(30,('auxiliary[1] = Energiacinetica [ergs]'))
WRITE(30,('auxiliary[2] = Tipodeatomo [adimensional]'))
c WRITE(30,('auxiliary[3] = cnps'))
n2a = 0
do ia = 1,nmass
n1a=n2a + 1
n2a = n2a + nn(ia)
write(30,(f10.5)' )awt(ia)
write(30,(2a)' )elem(ia)
do 13 i=n1a,n2a
ib = 1

```

```

nb = nn(1)

830 if (i.le.nb) go to 1111
ib = ib + 1
nb = nb + nn(ib)
go to 830
1111 lint=intind(ia,ib)
idex = 3*i-2
idey = 3*i-1
idez = 3*i
xi = z0(idex) !*a0
yi = z0(idey) !*b0
zi = z0(idex) !*c0
energiacinetica = ekinatom(idex)
iatomo = is(idex)
write(30,12)xi,yi,zi,pressao,energiacinetica,iatomo
12 format (1x,5(f9.6,4x),1x,I1)
13 continue
end do
CALL SYSTEM('sh -c "mv file* cfg/ "')

return
end

```

A figura 1, mostra a configuração de 424601 átomos de Cu, este trabalho foi feito em DM e visualizado usando o software Atomeye.

Na figura 2, mostramos o resultado usando a nossa subrotina em fortran, os dados de DM foram fornecidos pelo grupo de simulação computacional do Departamento de Física, o material é um semicondutor, ZnTe. Para a visualização temos como distinguir um átomo do outro, sendo o átomo em verde o Zn e os cinzas os Te.

Na figura 3, com o uso do atomeye, podemos "entrar" dentro da estrutura e dessa forma passeamos por toda a estrutura, possibilitando assim compreender e analisar com

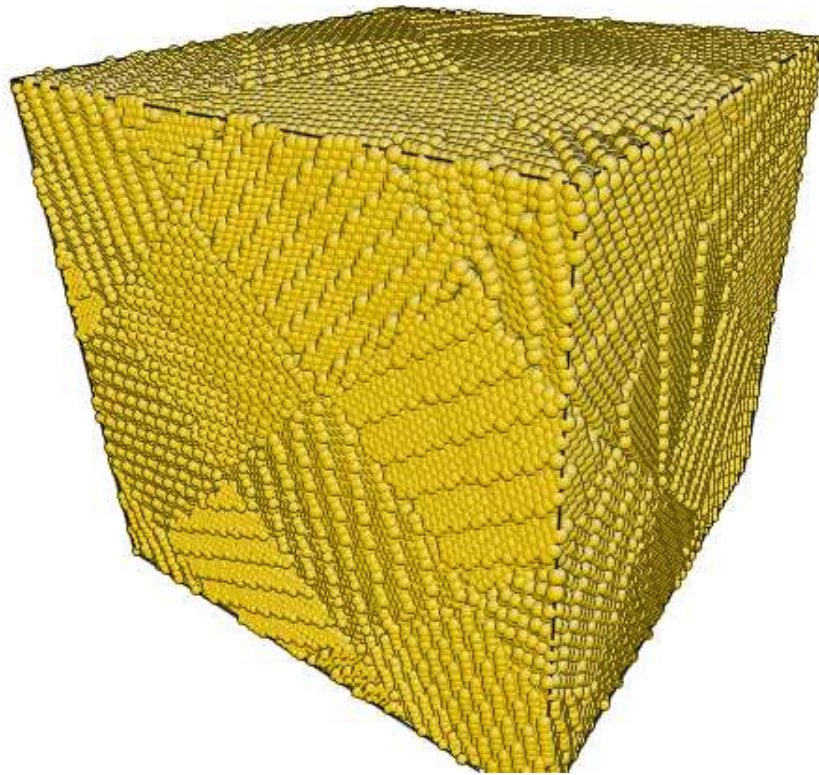


Figura 1: Configuração de uma estrutura de átomos de cobre, Cu, contendo 424601 átomos.

uma simples visualização, ver, o que acontece com o material em estudo.

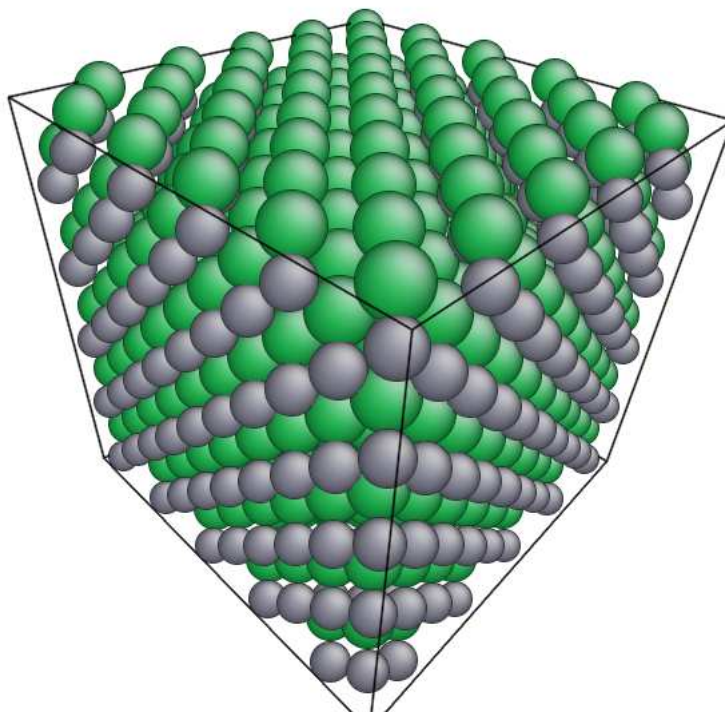


Figura 2: Estrutura Blenda de Zinco do composto ZnTe, contendo um total de 1000 átomos.

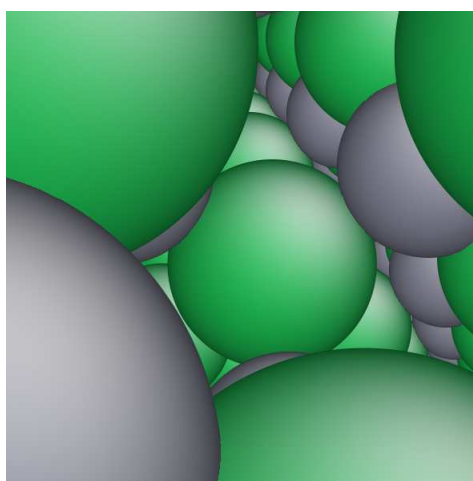


Figura 3: Estrutura Blenda de Zinco do composto ZnTe, contendo um total de 1000 átomos. Um simples passeio por dentro da estrutura.

## Conclusão

Neste projeto foi elaborada uma subrotina na linguagem de programação fortran para ser inserida num programa de Dinâmica Molecular (DM), a função primordial desta subrotina é transformar os arquivos de saída do programa em DM para que seja criado um arquivo (input) para que o programa Atomeye possa lê. Após essa etapa concluída foi possível visualizar uma estrutura através de um banco de dados já pré-determinado pelo grupo de simulação do Departamento de Física, feito no âmbito do Laboratório de Física Computacional da UFAM. Podemos observar então que a utilização da visualização atômica é bastante útil, já que ela pode simular experimentos de laboratório com grande precisão, o que a torna uma grande ferramenta, pois através de métodos computacionais podemos fazer experiências que ainda não podem ser realizadas no mundo real.

# Referências Bibliográficas

- [1] K. Sato, Y. Seki, Y. Matsuda, O. Oda, *J. Cryst. Growth* 197 413 (1999).
- [2] D. Ferrand, J. Cibert, A. Wasiela, C. Bourgonon, S. Tatarenko, G. Fishman, T. Andrearczyk, J. Jaroszynski, S. Kolesnik, T. Dietl, B. Barbara, D. Dufeu,
- [3] J.C. Phillips, *Rev. Mod. Phys.* 42 317 (1970).
- [4] J. Haase, J.M. DePuydt, H. Cheng, *Appl. Phys. Lett.* 59, 1272 (1991).
- [5] R.J. Nelmes, M.I. McMahon, N.G. Wright, and D.R. Allan, *J. Phys. Chem. Solids* 56, 545 (1995).
- [6] G.-D. Lee, and J. Ihm, *Phys. Rev. B* 53, R7622 (1996).
- [7] A. Mujica, A. Rubio, A. Muñoz, and R.J. Needs, *Rev. Mod. Phys.* 75, 863 (2003)
- [8] C. C Laranjeiras, J. R. N. Chiappin, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v.30, n. 1, 1601 (2008)
- [9] Charles Kittel , *Introdução a Física do Estado Sólido*, LTC, 2006.
- [10] Salinas, Silvio R. A. *Introdução à física estatística*, EDUSP, 2005.
- [11] Rino, José Pedro, *Notas sobre Simulação Computacional*, 2001.
- [12] Rino, José Pedro, *Tese de Doutorado. "Estudo das correlações em líquidos clássicos"*, IFQSC, 1983.
- [13] Oliveira, Rita de Cássia M. T. *Dissertação de Mestrado. "Transformação estrutural induzida por pressão: Um estudo por Dinâmica Molecular"*, UFAM, 2002
- [14] S. Berend, F. Daan, *Understanding Molecular Simulation from Algorithms to Applications*, Academic Press, 1996.

- [15] G. Mohammed, Structure and Dynamics of Molecular-Dynamics Simulated Under-cooled Ni-Zr-Al Melts, Gottingen, 2000.
- [16] M. P. Allen, D. J. Tildesley, Computer Simulations of Liquids, Oxford University Press, 1987.



## Cronograma Executado

Nº	Descrição	Ago 2011	Set	Out	Nov	Dez	Jan 2012	Fev	Mar	Abr	Mai	Jun	Jul
1	Levantamento bibliográfico	x	x										
2	Estudo sobre o Sistema Operacional LINUX			x	x	x							
3	Linguagem de programação						x	x	x				
4	Estudo do Software Atomeye									x	x	x	
5	- - Elaboração do Resumo e Relatório Final (atividade obrigatória)											x	
6	- - Preparação da Apresentação Final para o Congresso (atividade obrigatória)												x

Figura 4: Cronograma de Atividades