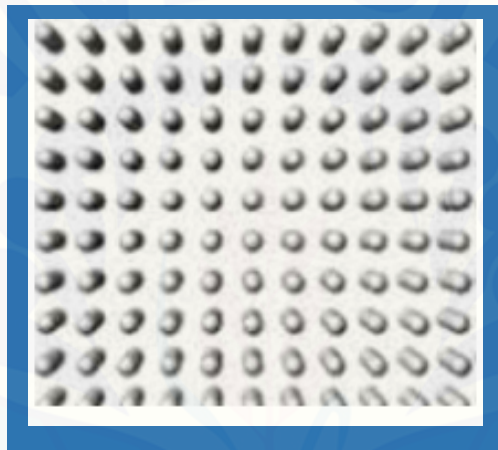


## Instalasi Program Moldy Untuk Simulasi Dinamika Molekul



Artoto Arkundato

**Instalasi Program Moldy  
Untuk Simulasi Dinamika Molekul**

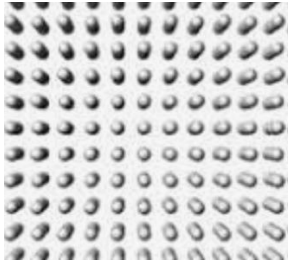
Artoto Arkundato

2021



Sitasi:

arkundato, artoto (2021): Prosedur Instalasi PP Moldy. figshare. Presentation.  
<https://doi.org/10.6084/m9.figshare.13604720.v1>



## Instalasi Program Moldy Untuk Simulasi Dinamika Molekul

Artoto Arkundato  
Fisika FMIPA Universitas Jember  
19 Januari 2021

---

### Deskripsi Singkat Program:

Paket program simulasi dinamika molekul yang akan kita gunakan adalah yang dikembangkan oleh Prof. Keith Refson. Program ini sudah lama tidak dikembangkan namun berdasarkan pengalaman dan pengetahuan kami Paket Program (PP) Moldy ini mempunyai beberapa catatan:

1. Mempunyai akurasi hasil perhitungan yang termasuk sangat baik
2. Dapat digunakan untuk simulasi MD pada banyak sistem material baik padat, cair
3. Dapat di install pada OS Linux maupun Windows
4. Dapat diunduh gratis
5. Sudah lama tidak dilakukan pengembangan lagi program oleh pembuatnya untuk menambah utilities yang disediakan seperti dapat di lihat di manual user

### Unduh Paket Program Moldy:

Sebelum Anda mengunduh PP Moldy ini ada baiknya mengetahui bahwa diinternet ada 2 program MD dengan nama yang sama "Moldy". Kedua program tersebut adalah:

1. Program Moldy yang dibuat oleh Prof. Keith refson  
(Keith Refson, Moldy: a portable molecular dynamics simulation program for serial and parallel computers, CPC, Volume 126, Issue 3, 11 April 2000, Pages 310-329, [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(99\)00496-8](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(99)00496-8))
2. Program Moldy yang dibuat oleh Prof. G.J. Ackland dkk

Pada project ini kita akan menggunakan **PP Moldy dari Prof. Keith Refson** yang dapat kita unduh melalui beberapa link:

1. <https://www.jiscmail.ac.uk/cgi-bin/filearea.cgi?LMGT1=MOLDY&a=get&f=/index.html>
2. <ftp://ftp.dl.ac.uk/ccp5/MOLDY/>
3. <https://data.mendeley.com/datasets/rgnh52j3st/1>
4. [https://mendeley.figshare.com/articles/dataset/Moldy\\_a\\_portable\\_molecular\\_dynamics\\_simulasi\\_on\\_program\\_for\\_serial\\_and\\_parallel\\_computers/8972474/1](https://mendeley.figshare.com/articles/dataset/Moldy_a_portable_molecular_dynamics_simulasi_on_program_for_serial_and_parallel_computers/8972474/1)
5. <http://www.ccl.net/cca/software/SOURCES/C/moldy/index.shtml>

Sedikit catatan dengan PP Moldy Prof. G.J. Ackland dkk

Program ini release pada 2011 di <https://arxiv.org/abs/1107.2619>. Program Moldy ini menyediakan fasilitas untuk simulasi MD dengan potensial EAM yang mana ini tidak disediakan dalam PP Moldy Keith Refson. Namun demikian dalam hal instalasinya bagi pemula mungkin akan lebih mudah menggunakan program Moldy prof. Keith Refson seperti yang akan kita gunakan dalam project ini.

Instalasi PP Moldy sangat mudah sebenarnya. Bagi yang sudah terbiasa bekerja dengan Linux sebenarnya cukup dengan 3 baris perintah dari terminal:

1. Untar atau unzip file installer
2. Configure
3. Make

## **Prosedur Instalasi Paket Program Moldy:**

### **A. Jika Anda bekerja dengan komputer sistem Unix/Linux**

1. Unduh file program [moldy-2.16e.tgz](ftp://ftp.dl.ac.uk/ccp5/MOLDY/) dari <ftp://ftp.dl.ac.uk/ccp5/MOLDY/>

Index of <ftp://ftp.dl.ac.uk/ccp5/MOLDY/>

[^ Up to higher level directory](#)

Name	Size	Last Modified	
<a href="#">File: README</a>	8 KB	2/2/01	7:00:00 AM GMT+7
<a href="#">File: history.notes</a>	11 KB	2/2/01	7:00:00 AM GMT+7
<a href="#">File: moldy-2.16c.gcc-x86</a>	333 KB	11/4/02	7:00:00 AM GMT+7
<a href="#">File: moldy-2.16c.tru64</a>	224 KB	11/4/02	7:00:00 AM GMT+7
<a href="#">File: moldy-2.16e.com</a>	2043 KB	11/4/02	7:00:00 AM GMT+7
<a href="#">File: <u>moldy-2.16e.tgz</u></a>	477 KB	11/4/02	7:00:00 AM GMT+7
<a href="#">File: moldy-2.16e.zip</a>	591 KB	11/4/02	7:00:00 AM GMT+7
<a href="#">File: moldy.com</a>	2020 KB	2/2/01	7:00:00 AM GMT+7
<a href="#">File: moldy.pdf</a>	847 KB	11/4/02	7:00:00 AM GMT+7
<a href="#">File: moldy.ps</a>	1118 KB	11/4/02	7:00:00 AM GMT+7
<a href="#">File: moldy.ps.gz</a>	456 KB	11/4/02	7:00:00 AM GMT+7

2. Buka manual moldy dari <ftp://ftp.dl.ac.uk/ccp5/MOLDY/moldy.pdf>
3. Baca bagian “Compiling and Modifying Moldy” untuk proses instalasi,

atau jika Anda belum berpengalaman dengan instalasi program dalam Linux dapat mengikuti langkah langkah berikut (Catatan: kita menggunakan **OS Linux Ubuntu LTS** meskipun Anda bebas memilih linux apapun seperti Fedora atau Suse. Barangkali recommended jika menggunakan Ubuntu 16.04 LTS atau versi lebih baru 20.04 LTS):

4. Dari directory atau folder dimana Anda menyimpan file [moldy-2.16e.tgz](#) unduhan Anda masuklah ke terminal linux kemudian lakukan langkah langkah berikut:

```
$ ls      (enter)                                #memastikan file installer moldy ada
moldy-2.16e.tgz                                  #muncul teks ini di layar komputer
$ tar -zxvf moldy-2.16e.tgz  (enter)             #jika berhasil akan muncul file file berikut
```

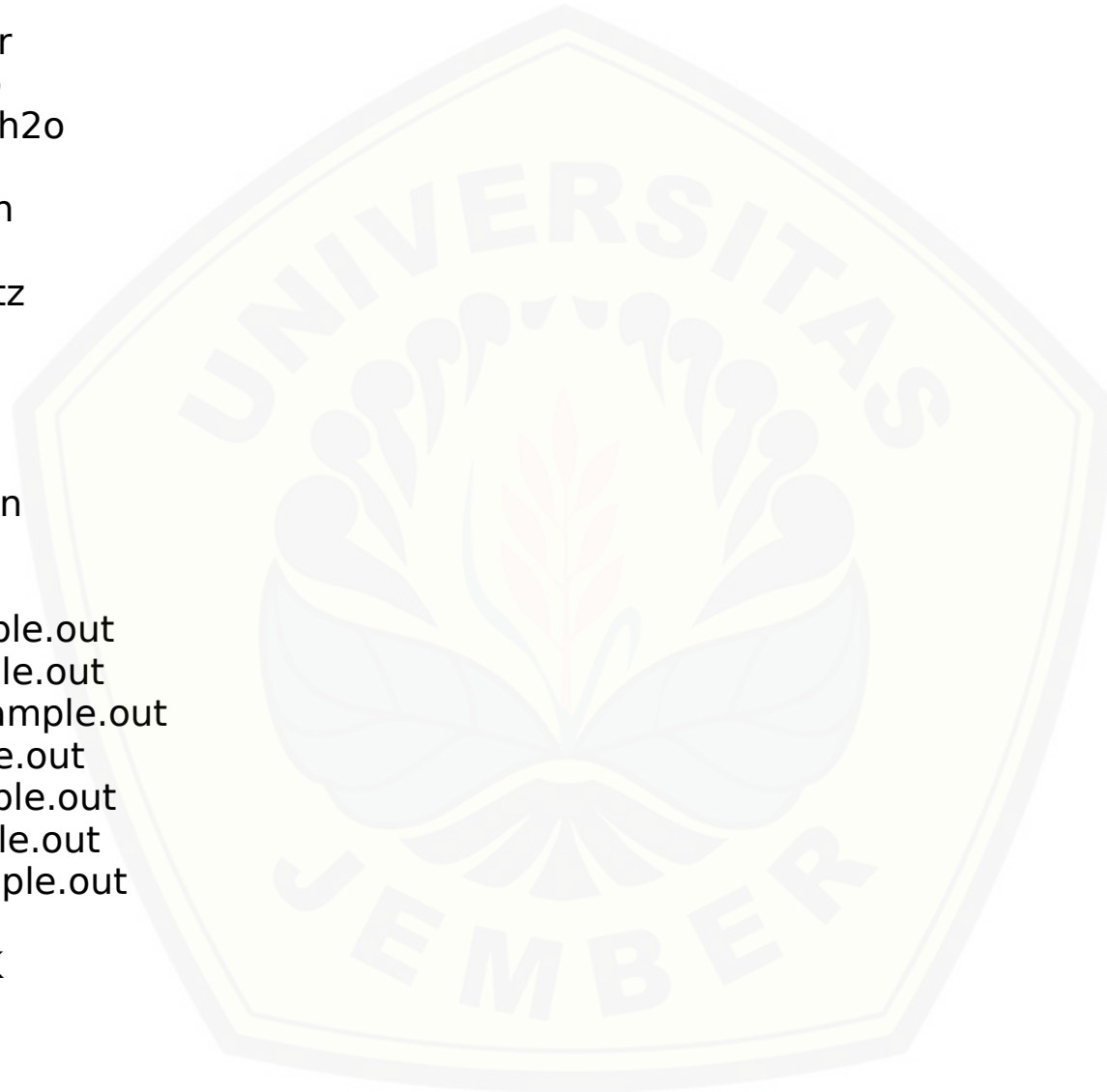
accel.c  
algorithm.c  
alloc.c  
ansi.c  
auxil.c  
beeman.c  
convert.c  
dump.c  
ewald.c  
force.c  
input.c  
eigens.c  
kernel.c  
main.c  
matrix.c  
output.c  
quaterns.c  
rdf.c  
restart.c  
startup.c  
values.c  
xdr.c  
parallel.c  
structs.h  
defs.h  
messages.h  
xdr.h  
string-subst.h  
time-subst.h  
stddef-subst.h



stdlib-subst.h  
moldyext.c  
dumpanal.c  
dumpconv.c  
dumpext.c  
manalyze.c  
bdist.c  
mdshak.c  
msd.c  
mdavpos.c  
mdbond.c  
ransub.c  
mdvaf.c  
getopt.c  
ReadDCD.c  
ReadDCD.h  
configure.in  
config.h.in  
defconf.h  
aclocal.m4  
config.guess  
config.sub  
list.h  
plotrdf  
utlsup.c  
utlsup.h  
molout.c  
elem.h  
ewald-RIL.c  
configure

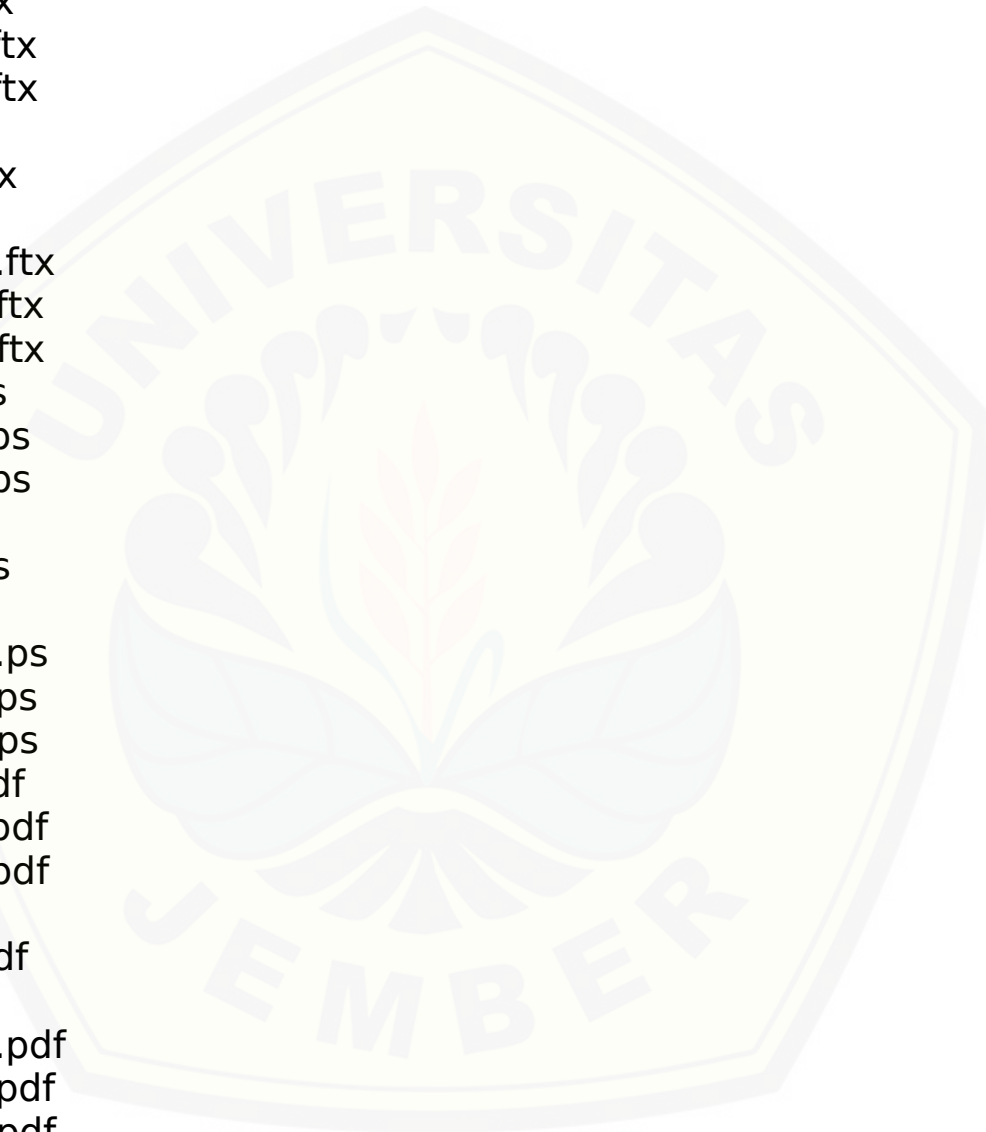


Makefile.in  
install-sh  
control.water  
control.tip4p  
control.mgclh2o  
control.clay  
control.argon  
control.tips2  
control.quartz  
tips2.in  
tip4p.in  
mgclh2o.in  
argon.in  
quartz-vbst.in  
methane.in  
mcy.in  
water-example.out  
tip4p-example.out  
mgclh2o-example.out  
clay-example.out  
argon-example.out  
tips2-example.out  
quartz-example.out  
READ.ME  
BENCHMARK  
COPYING  
RELNOTES  
moldy.tex  
moldy.sty  
moldy.perl





moldy.bbl  
figures/fig\_arralloc.ftx  
figures/fig\_dostep-a.ftx  
figures/fig\_dostep-b.ftx  
figures/fig\_ewald.ftx  
figures/fig\_link-cell.ftx  
figures/fig\_main.ftx  
figures/fig\_skewstart.ftx  
figures/fig\_startup-a.ftx  
figures/fig\_startup-b.ftx  
figures/fig\_arralloc.ps  
figures/fig\_dostep-a.ps  
figures/fig\_dostep-b.ps  
figures/fig\_ewald.ps  
figures/fig\_link-cell.ps  
figures/fig\_main.ps  
figures/fig\_skewstart.ps  
figures/fig\_startup-a.ps  
figures/fig\_startup-b.ps  
figures/fig\_arralloc.pdf  
figures/fig\_dostep-a.pdf  
figures/fig\_dostep-b.pdf  
figures/fig\_ewald.pdf  
figures/fig\_link-cell.pdf  
figures/fig\_main.pdf  
figures/fig\_skewstart.pdf  
figures/fig\_startup-a.pdf  
figures/fig\_startup-b.pdf  
figures/fig\_arralloc-eepic.ftx  
figures/fig\_dostep-a-eepic.ftx



figures/fig\_dostep-b-eePIC.ftx  
figures/fig\_ewald-eePIC.ftx  
figures/fig\_link-cell-eePIC.ftx  
figures/fig\_main-eePIC.ftx  
figures/fig\_skewstart-eePIC.ftx  
figures/fig\_startup-a-eePIC.ftx  
figures/fig\_startup-b-eePIC.ftx  
compile\_moldy.com  
link\_moldy.com  
defcomm.com  
compile\_utils.com  
link\_utils.com  
compile.com  
Makefile.mak  
OFILES.RSP  
SHAKOBS.RSP  
Makefile.w32



```
$ ls (enter) #akan tampil di layar berikut ini
accel.c      control.water  Makefile.w32    quaterns.c
aclocal.m4   convert.c      manalyze.c      ransub.c
algorithm.c  COPYING       matrix.c        rdf.c
alloc.c      defcomm.com    mcy.in          ReadDCD.c
ansi.c       defconf.h     mdavpos.c       ReadDCD.h
argon-example.out  defs.h        mdbond.c        READ.ME
argon.in     dumpanal.c    mdshak.c        RELNOTES
auxil.c      dump.c         mdvaf.c         restart.c
bdist.c      dumpconv.c    messages.h      SHAKOBSJS.RSP
beeman.c     dumpext.c     methane.in      startup.c
BENCHMARK   eigens.c      mgclh2o-example.out  stddef-subst.h
clay-example.out  elem.h        mgclh2o.in      stdlib-subst.h
compile.com  ewald.c       moldy-2.16e.tgz string-subst.h
compile_moldy.com  ewald-RIL.c  moldy.bbl       structs.h
compile_utils.com  figures      moldyext.c      time-subst.h
config.guess  force.c       moldy.perl      tip4p-example.out
config.h.in   getopt.c     moldy.sty       tip4p.in
config.sub    input.c      moldy.tex       tips2-example.out
configure     install-sh    molout.c        tips2.in
configure.in  kernel.c     msd.c           utlsup.c
control.argon  link_moldy.com  OFILES.RSP     utlsup.h
control.clay  link_utils.com  output.c        values.c
control.mgclh2o  list.h       parallel.c      water-example.out
control.quartz  main.c       plotrdf         xdr.c
control.tip4p  Makefile.in   quartz-example.out  xdr.h
control.tips2  Makefile.mak  quartz-vbst.in
```

Selanjutnya Anda harus memastikan mempunyai file **configure** seperti gambar SS di atas. Sebelumnya pastikan di dalam Linux anda sudah terinstall bahasa Fortran dan C/C++. Anda juga

perlu memastikan dalam linux Anda sudah terinstall program grafik GnuPlot. Jika belum punya, Anda dapat menginstall via terminal linux (jangan lupa terhubung ke internet) seperti berikut ini:

```
$ sudo apt-get update (enter)      #masukkan password linux Anda, tunggu proses
$ sudo apt-get install gfortran (enter)  #tunggu proses, mungkin Anda perlu klik Yes/Y
$ sudo apt-get install g++ (enter)      #tunggu proses, mungkin Anda perlu klik Yes/Y
$ sudo apt-get install gnuplot (enter)   #tunggu proses, mungkin Anda perlu klik Yes/Y
```

Kita memerlukan install program Gnuplot karena Moldy mempunyai fasilitas plot kurva RDF dengan gnuplot (lebih jelasnya lihat manual Moldy).

Jika sudah siap, maka kita lanjutkan proses instalasi Moldy sebagai berikut. Masih di folder dimana file-file yang berhasil kita ekstrak tadi berada, dari terminal linux kita ketikkan:

```
$ ./configure (enter)                #jika berhasil akan muncul di layar catatan2 sbb:
creating cache ./config.cache
checking host system type... x86_64-unknown-linux-gnu
checking target system type... x86_64-unknown-linux-gnu
checking build system type... x86_64-unknown-linux-gnu
checking for pgcc... no
checking for cc... cc
checking for c89... (cached) cc
checking for gcc... (cached) cc
checking whether the C compiler (cc ) works... yes
checking whether the C compiler (cc ) is a cross-compiler... no
checking whether we are using GNU C... yes
checking whether cc accepts -g... yes
checking for cpp... /lib/cpp
checking how to run the C preprocessor... cc -E
checking for a BSD compatible install... /usr/bin/install -c
```

checking whether ln -s works... yes  
checking for AIX... no  
checking for library containing sin... -lm  
checking for ANSI C header files... yes  
checking for sys/param.h... yes  
checking for sys/resource.h... yes  
checking for sys/time.h... yes  
checking for sys/times.h... yes  
checking for sys/types.h... yes  
checking for rpc/xdr.h... yes  
checking whether time.h and sys/time.h may both be included... yes  
checking for working const... yes  
checking whether cc supports pointers to void... yes  
checking whether cc supports stdarg.h with function prototypes... yes  
checking size of float... 4  
checking size of int... 4  
checking for size\_t... yes  
checking for time\_t... yes  
checking for clock\_t... yes  
checking return type of signal handlers... void  
checking for strftime... yes  
checking for vprintf... yes  
checking for library containing xdr\_int... none required  
checking for gettimeofday... yes  
checking for getrusage... yes  
checking for strdup... yes  
checking for strerror... yes  
checking for strstr... yes  
checking for strchr... yes  
checking for memcpy... yes

```
checking for memset... yes
checking for remove... yes
checking for strtol... yes
checking for popen... yes
checking for raise... yes
checking for times... yes
checking for getopt... yes
checking whether times returns the wall-clock time... yes
updating cache ./config.cache
creating ./config.status
creating Makefile
creating config.h
```

Selanjutnya dari terminal ketikkan “make” untuk menyelesaikan instalasi Moldy

```
$ make (enter)           #jika berhasil maka akan muncul di bagian akhir layar
```

```
cc -o mdvaf  mdvaf.o algorithm.o alloc.o auxil.o ansi.o convert.o eigens.o kernel.o input.o
matrix.o quaterns.o restart.o startup.o values.o xdr.o ReadDCD.o utlsup.o molout.o      -lm
```

Selanjutnya sempurnakan instalasi Moldy anda dengan perintah:

```
$ sudo make install (enter)   #akan muncul di bagian akhir layar informasi berikut
```

```
for file in moldy moldyext dumpanal dumpconv dumpext manalyze bdist mdshak msd
mdavpos mdbond ransub mdvaf plotrdf; do /usr/bin/install -c $file /usr/local/bin; done
```

Jika hasil instalasi Anda seperti yang tampak dalam panduan ini maka anda sudah mempunyai program Moldy yang siap digunakan untuk simulasi dinamika molekul. “[selamat menggunakan Moldy](#)”. Untuk meyakinkan apakah program moldy sudah benar-benar terinstal di komputer Anda,

Anda dapat mengujinya misalnya dari layar Dekstop komputer Anda atau dari titik manapun dari terminal kita ketikkan seperti berikut:

```
aarkundato@aarkundato:~/Desktop$ moldy test test (enter)
```

Maka akan muncul tampilan di layar sebagai berikut:

```
*F* Failed to open file "test" for reading control info
```

Ini artinya Moldy sudah terinstall di komputer Anda namun moldy gagal menemukan file input “test” karena memang kita belum membuat file “test” tersebut.

Anda dapat mencoba terlebih dahulu running simulasi. Pada intinya moldy memerlukan dua file input untuk menjalankan. Yaitu file kontrol jalannya simulasi dan file spesifikasi material yang ingin diteliti. Dari hasil ekstrak file tar.gz atau .zip di atas Anda dapat melihat beberapa contoh yang dapat dicoba. Ambil contoh berikut, copy saja file control.argon dan argon.in masukkan ke folder baru misalnya folder diberi nama Coba. Masuk ke folder coba yang sudah Anda isi 2 file copy tersebut kemudian dari terminal ketik:

```
$moldy control.argon output.txt (enter)
```

Tentunya jika berhasil akan muncul di layar Anda seperti berikut:

```
$ moldy control.argon output.txt  
*I* control file read in successfully  
Tue Jan 19 08:12:44 2021 Test Simulation Page 1  
*I* reading system specification file  
*I* system specification file successfully read in
```

## B. Jika Anda bekerja dengan komputer sistem WINDOWS

Untuk Moldy Versi Windows (moldy.zip) sebelumnya dapat di Download dari link

<https://www.jiscmail.ac.uk/cgi-bin/filearea.cgi?LMGT1=MOLDY&a=get&f=/index.html>

Namun untuk memudahkan pemanfaatan utilities yang dimiliki Moldy secara maksimal ada baiknya tetap menggunakan moldy versi linux. Anda dapat menginstal VirtualBox di Windows Anda agar dapat menginstall OS Linux di Komputer Windows Anda. Kemudian setelah Linux terinstall di Windows Anda, baru kemudian Anda menginstall Moldy di dalamnya.



**VirtualBox**

**Welcome to VirtualBox.org!**

VirtualBox is a powerful x86 and AMD64/Intel64 [virtualization](#) product for enterprise as well as home use. Not only is VirtualBox an extremely feature rich, high performance product for enterprise customers, it is also the only professional solution that is freely available as Open Source Software under the terms of the GNU General Public License (GPL) version 2. See "[About VirtualBox](#)" for an introduction.

Presently, VirtualBox runs on Windows, Linux, Macintosh, and Solaris hosts and supports a large number of [guest operating systems](#) including but not limited to Windows (NT 4.0, 2000, XP, Server 2003, Vista, Windows 7, Windows 8, Windows 10), DOS/Windows 3.x, Linux (2.4, 2.6, 3.x and 4.x), Solaris and OpenSolaris, OS/2, and OpenBSD.

VirtualBox is being actively developed with frequent releases and has an ever growing list of features, supported guest operating systems and platforms it runs on. VirtualBox is a community effort backed by a dedicated company: everyone is encouraged to contribute while Oracle ensures the product always meets professional quality criteria.

- About
- Screenshots
- Downloads
- Documentation
  - End-user docs
  - Technical docs
- Contribute
- Community

## C. Install Moldy Mode Paralel

PP Moldy juga menyediakan instalasi mode komputasi paralel. Langkah-langkah yang kita bahas di atas adalah untuk mode serial. Untuk mode paralel Anda dapat membacanya lebih detail pada Manual Moldy.

Demikian ulasan instalasi Moldy, selamat mencoba dan bereksprimen.