



**PERHITUNGAN KAPASITAS PANAS MENGGUNAKAN
METODE DINAMIKA MOLEKUL DENGAN
KOMPUTER PARALEL**

SKRIPSI

**Oleh
Zainul Muzaki
NIM 121810201064**

**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS JEMBER
2017**



**PERHITUNGAN KAPASITAS PANAS MENGGUNAKAN
METODE DINAMIKA MOLEKUL DENGAN
KOMPUTER PARALEL**

SKRIPSI

diajukan guna melengkapi tugas akhir dan memenuhi salah satu syarat
untuk menyelesaikan Program Studi Fisika (S-1)
dan untuk mencapai gelar Sarjana Sains

Oleh
Zainul Muzaki
NIM 121810201064

**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS JEMBER
2017**

PERSEMBAHAN

Skripsi ini penulis persembahkan untuk:

1. Kedua orang tua, Alm. Bpk Saeroni dan Ibu Zaenab, atas kasih sayang, do'a serta seluruh dukungan yang telah diberikan.
2. Kakak saya, Siti Markumah dan Suroso yang telah banyak membantu secara finansial dalam penyelesaian studi saya.
3. Almamater Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

MOTTO

Doa menjadi sebuah kekuatan yang luar biasa bagi kita

(Ust. Yusuf Mansur)*

* Mansur, Y. 2011. *The Miracle of Doa: Meraih Kun Fayakun-Nya Allah dengan Kekuatan Doa*. Jakarta: Zikrul Hakim.

PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : Zainul Muzaki

NIM : 121810201064

Menyatakan dengan sesungguhnya bahwa karya ilmiah yang berjudul: “Perhitungan Kapasitas Panas Menggunakan Metode Dinamika Molekul dengan Komputer Paralel” adalah benar-benar hasil karya ilmiah sendiri, kecuali jika dalam pengutipan substansi disebutkan sumbernya, dan belum pernah diajukan pada institusi mana pun, serta bukan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

Penelitian ini merupakan bagian dari penelitian bersama dosen dan mahasiswa, dan hanya dapat dipublikasikan dengan mencantumkan nama dosen pembimbing.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya, tanpa adanya tekanan dan paksaan dari pihak mana pun serta bersedia mendapat sanksi akademik jika ternyata di kemudian hari pernyataan ini tidak benar.

Jember, Juni 2017

Yang menyatakan,

Zainul Muzaki

NIM 121810201064

SKRIPSI

**PERHITUNGAN KAPASITAS PANAS MENGGUNAKAN
METODE DINAMIKA MOLEKUL DENGAN
KOMPUTER PARALEL**

Oleh

**Zainul Muzaki
NIM 121810201064**

Pembimbing:

Dosen Pembimbing Utama : Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si.

Dosen Pembimbing Anggota : Endhah Purwandari, S.Si., M.Si.

PENGESAHAN

Skripsi berjudul “Perhitungan Kapasitas Panas Menggunakan Metode Dinamika Molekul dengan Komputer Paralel” karya Zainul Muzaki telah diuji dan disahkan secara akademis pada:

hari, tanggal :

tempat : FMIPA Universitas Jember

Tim Penguji:

Ketua

Anggota I

Dr.Artoto Arkundato, S.Si., M.Si.
NIP 19691225199901001

Endhah Purwandari S.Si., M.Si.
NIP 198111112005012001

Anggota II

Anggota III

Bowo Eko Cahyono, S.Si., M.Si., Ph.D
NIP 197202101998021001

Supriyadi, S.Si., M.Si.
NIP 198204242006041003

Mengesahkan
Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Drs. Sujito, Ph.D.
NIP 196102041987111001

RINGKASAN

Perhitungan Kapasitas Panas Menggunakan Metode Dinamika Molekul dengan Komputer Paralel; Zainul Muzaki, 121810201064; 2017; 36 halaman; Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Bahan logam pada umumnya memiliki karakteristik kuat dan memiliki titik leleh tinggi sehingga banyak dimanfaatkan dalam kehidupan sehari-hari seperti pada penguat bangunan gedung, jembatan, mesin kendaraan dan lain sebagainya. Salah satu karakteristik yang dapat membedakan antara satu jenis logam dengan logam lainnya adalah kapasitas panas. Kapasitas panas adalah besarnya energi yang diperlukan untuk mengubah suhu suatu unit massa tiap satu derajat. Kapasitas panas penting diketahui untuk berbagai kebutuhan seperti pada pendingin reaktor nuklir. Sebuah reaktor nuklir memerlukan bahan dengan kapasitas panas tinggi untuk dapat menyerap panas yang dihasilkan oleh reaksi fisi dalam reaktor nuklir untuk menghindari ledakan reaktor akibat panas yang sangat tinggi dari reaksi nuklir.

Kapasitas panas dapat diteliti baik secara eksperimen maupun simulasi komputer. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk menghitung nilai kapasitas panas bahan menggunakan simulasi komputer. Bahan yang disimulasikan adalah tembaga. Selain itu, dalam simulasi tersebut digunakan desain komputer paralel. Tujuan dari penggunaan komputer paralel tersebut adalah untuk mempercepat waktu yang diperlukan untuk menyelesaikan proses simulasi. Komputer paralel yang digunakan adalah komputer paralel *multi core* yang memiliki 4 buah *core* dan dapat dimanfaatkan untuk menyelesaikan problem simulasi secara bersamaan sehingga waktu simulasi menjadi lebih cepat.

Perhitungan kapasitas panas secara simulasi dilakukan dengan metode dinamika molekul. Simulasi dilakukan dengan memodelkan 64000 atom tembaga dalam sebuah sistem simulasi. Sistem tersebut kemudian disimulasikan dengan memberikan input temperatur 173 K hingga 1000 K. Berdasarkan perlakuan tersebut akan diketahui nilai energi total sistem sebagai fungsi temperatur. Nilai kapasitas panas bahan tembaga dapat dianalisis dari hubungan temperatur dan energi total yang diperoleh dari simulasi. Perhitungan kapasitas panas tersebut dilakukan dengan komputer paralel. Analisis kinerja komputer paralel dilakukan dengan melakukan variasi jumlah *core* yang digunakan dalam proses simulasi. Berdasarkan variasi tersebut akan diketahui pengaruh penggunaan komputer paralel terhadap waktu simulasi.

Nilai kapasitas panas bahan tembaga yang diperoleh menggunakan metode simulasi dinamika molekul menunjukkan kesesuaian yang baik dengan nilai referensi. Hal ini ditunjukkan oleh nilai diskrepansi kurang dari 5% pada rentang suhu 500 K hingga 1000 K. Nilai kapasitas panas yang paling bagus diperoleh pada temperatur 900 K dengan diskrepansi yang kecil yaitu 0,22 %, dimana nilai kapasitas panas yang diperoleh adalah 27,97 J/mol K, sedangkan nilai kapasitas panas dari referensi adalah 27,91. Namun perhitungan kapasitas panas

menggunakan metode dinamika molekul dalam penelitian ini kurang akurat untuk temperatur 300 K hingga 400 K dimana nilai diskrepansinya lebih dari 5%. Nilai yang diperoleh pada temperatur 300 K dan 400 K adalah 26,33 J/mol K dan 26,87 J/mol K sedangkan nilai kapasitas panas dari referensi adalah 24,49 J/mol K dan 25,29 J/mol K. Selain itu, analisis kinerja komputer paralel dapat dilakukan dengan menganalisis waktu yang dibutuhkan untuk menyelesaikan proses simulasi berdasarkan variasi jumlah *core* yang digunakan dalam proses simulasi. Berdasarkan analisis yang dilakukan dapat diketahui bahwa penggunaan komputer paralel dapat mempercepat waktu simulasi. Analisis peningkatan waktu simulasi dilakukan dengan membandingkan waktu simulasi pada penggunaan komputer serial dan penggunaan komputer paralel. Peningkatan waktu simulasi pada komputer paralel dengan menggunakan 2 *core*, 3 *core* dan 4 *core* secara berturut-turut adalah 1,91; 2,76; dan 3,45 kali lebih cepat dibandingkan dengan penggunaan komputer serial yang hanya menggunakan 1 *core* saja.

PRAKATA

Puji syukur kehadiran Allah SWT yang telah memberikan rahmat dan hidayah-Nya kepada penulis sehingga mampu menyelesaikan Skripsi berjudul “Perhitungan Kapasitas Panas Menggunakan Metode Dinamika Molekul dengan Komputer Paralel”. Skripsi ini disusun untuk memenuhi persyaratan untuk menyelesaikan pendidikan Strata Satu (S-1) pada Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Penyusunan ini tidak lepas dari bantuan dari berbagai pihak, oleh karena itu penulis ucapkan terima kasih kepada:

1. keluarga besar Alm. Bapak Saeroni dan Ibu Zaenab yang telah memberikan dukungan moral dan materi sehingga penulis mampu menyelesaikan skripsi ini;
2. Dr. Artoto Arkundato, S.Si. M.Si. dan Endhah Purwandari S.Si., M.Si. selaku Dosen Pembimbing yang telah memberikan bimbingan serta arahan sehingga penulis dapat menyelesaikan penelitian dan penulisan skripsi ini;
3. Bowo Eko Cahyono, S.Si., M.Si., Ph.D. dan Supriyadi, S.Si., M.Si selaku Dosen Penguji yang telah banyak memberikan kritik dan saran demi sempurnanya skripsi ini;
4. teman-teman mahasiswa khususnya mahasiswa Jurusan Fisika angkatan 2012 yang telah banyak membantu dalam penyelesaian skripsi ini.
5. seluruh civitas akademika FMIPA Universitas Jember, khususnya di Jurusan Fisika yang telah membantu proses selesainya skripsi ini.

Penulis berharap agar skripsi ini dapat memberikan manfaat kepada semua pihak. Penulis juga membuka kritik dan saran dari pembaca demi kesempurnaan skripsi ini.

Jember, 12 Juni 2017

Penulis

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL	i
PERSEMBAHAN	ii
MOTTO	iii
PERNYATAAN	iv
HALAMAN PEMBIMBING	v
PENGESAHAN	vi
RINGKASAN	vii
PRAKATA	ix
DAFTAR ISI	x
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR LAMPIRAN	xiv
BAB 1. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	4
1.3 Batasan Masalah	4
1.4 Tujuan	5
1.5 Manfaat	5
BAB 2. DASAR TEORI	6
2.1 Kapasitas Panas	6
2.2 Metode Dinamika Molekul	7
2.2.1 Dasar Metode Dinamika Molekul	7
2.2.2 Potensial Interatomik	8
2.2.3 Perangkat Lunak	9
2.2.4 Visualisasi Data	10
2.3 Komputer Paralel	10
BAB 3. METODE PENELITIAN	15
3.1 Rancangan Penelitian	15

3.2 Sumber Data	16
3.3 Kerangka Penyelesaian Masalah	16
3.4 Analisis Data	19
BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN	21
4.1 Pemodelan Sistem Simulasi	21
4.1.1 Inisiasi Sistem Simulasi	21
4.1.2 Ekuilibrasi Sistem Simulasi	21
4.2 Pengaruh Jumlah Atom terhadap Waktu Simulasi	23
4.2.1 Simulasi Menggunakan Komputer Serial	23
4.2.2 Simulasi Menggunakan Komputer Paralel	24
4.2.3 Analisis Kinerja Komputer Paralel	25
4.3 Pengaruh Jumlah Atom terhadap Akurasi	27
4.3 Perhitungan Kapasitas Panas Bahan	28
BAB 5. PENUTUP	30
5.1 Kesimpulan	30
5.2 Saran	30
DAFTAR PUSTAKA	32

DAFTAR GAMBAR

	Halaman
Gambar 2.1 Laman LAMMPS	10
Gambar 2.2 Proses komputasi pada komputer serial	11
Gambar 2.3 Proses komputasi pada komputer paralel	12
Gambar 2.4 Komputer paralel	12
Gambar 2.5 Distribusi kerja komputer paralel menggunakan MPI	13
Gambar 2.6 Negara-negara pengembang super komputer	14
Gambar 2.7 Laman komputer grid Indonesia	14
Gambar 3.1 Alur rancangan penelitian	15
Gambar 3.2 Diagram alir penelitian	17
Gambar 4.1 Visualisasi model bahan tembaga dalam dua dimensi dan tiga dimensi	21
Gambar 4.2 Grafik ekuilibrasi sistem pada temperatur 300 K	22
Gambar 4.3 Grafik hubungan jumlah atom dan waktu simulasi pada komputer serial	23
Gambar 4.4 Grafik hubungan penggunaan jumlah <i>core</i> terhadap waktu simulasi	25
Gambar 4.5 Grafik peningkatan kecepatan pada penggunaan komputer paralel	26
Gambar 4.6 Nilai kapasitas panas berdasarkan simulasi dinamika molekul dengan jumlah atom 500 atom , 2.000 atom, 8.000 atom dan 64.000 atom	27
Gambar 4.7 Nilai kapasitas panas bahan tembaga	29

DAFTAR TABEL

	Halaman
Tabel 2.1 Parameter potensial Morse beberapa bahan logam	9
Tabel 3.1 Spesifikasi komputer	18
Tabel 3.2 Kapasitas panas bahan tembaga	20
Tabel 4.1 Total waktu simulasi menggunakan komputer serial	23
Tabel 4.2 Total waktu simulasi menggunakan komputer paralel	24
Tabel 4.3 Peningkatan kecepatan pada penggunaan komputer paralel	26
Tabel 4.4 Nilai kapasitas panas bahan tembaga	28

DAFTAR LAMPIRAN

	Halaman
Lampiran 4.1 Data Keluaran Ekuilibrasi Sistem Simulasi	37
Lampiran 4.2 Instalasi Program MPI dan LAMMPS	38
Lampiran 4.3 Keluaran Waktu Simulasi	41
Lampiran 4.4 Data Keluaran Hasil Simulasi	47

BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Bahan logam merupakan salah satu jenis bahan yang memiliki banyak kelebihan. Logam memiliki kekuatan tinggi serta jumlah yang melimpah sehingga banyak dimanfaatkan dalam kehidupan sehari-hari seperti pada penguat bangunan gedung, jembatan dan lain sebagainya. Selain itu sebagian besar bahan logam memiliki titik leleh yang tinggi sehingga banyak dikembangkan dalam berbagai aplikasi yang bekerja pada suhu tinggi seperti pada mesin kendaraan, reaktor nuklir, dan lain sebagainya.

Setiap logam memiliki karakteristik berbeda-beda yang membedakan satu jenis logam dengan jenis logam lainnya, salah satunya karakteristik tersebut adalah kapasitas panas. Kapasitas panas adalah besarnya energi yang diperlukan untuk mengubah suhu suatu unit massa tiap satu derajat (Bueche dan Hecht, 2000). Kapasitas panas cukup penting diketahui untuk berbagai kebutuhan seperti pada pendingin reaktor nuklir. Sebuah reaktor nuklir memerlukan bahan dengan kapasitas panas tinggi untuk dapat menyerap panas yang dihasilkan oleh reaksi fisi dalam reaktor nuklir, sehingga dapat menghindari ledakan reaktor akibat panas yang sangat tinggi dari reaksi nuklir.

Kapasitas panas telah banyak diteliti baik secara eksperimen maupun simulasi komputer. Secara eksperimen perhitungan kapasitas panas dapat dilakukan dengan metode seperti *Thermal Radiation Calorimetry* (TRAC) (Hisano *et al.* 1998). Linstorm dan Mallard (1998) telah melakukan penelitian tentang perhitungan kapasitas panas tembaga. Hasil penelitian menunjukkan bahwa nilai kapasitas panas tembaga pada suhu 300 K hingga 1.000 K mengalami peningkatan ketika temperatur naik. Selain melalui eksperimen, perhitungan kapasitas panas juga dapat dilakukan melalui simulasi komputer. Yang *et al.* (2001) telah melakukan penelitian tentang kapasitas panas pada bahan perak dengan simulasi komputer menggunakan metode simulasi dinamika molekul. Selain itu, Rajabpour *et al.* (2013) telah meneliti perhitungan kapasitas panas pada bahan air-tembaga dengan metode simulasi dinamika molekul. Chen (2014) juga

telah meneliti perhitungan kapasitas panas dengan metode dinamika molekul pada bahan MgSiO_3 . Hasil perhitungan kapasitas yang dilakukan secara simulasi menggunakan metode simulasi dinamika molekul tersebut menunjukkan hasil yang bagus dan mendekati eksperimen. Penelitian tersebut menunjukkan bahwa metode simulasi dinamika molekul dapat digunakan untuk memprediksi nilai kapasitas panas bahan.

Metode dinamika molekul merupakan salah satu metode yang handal untuk memprediksi sifat-sifat fisis suatu bahan. Metode dinamika molekul adalah metode komputasi yang bekerja berdasarkan hukum fisika klasik yaitu hukum Newton (Arkundato *et al*, 2016). Metode dinamika molekul dapat digunakan untuk memprediksi karakteristik dari bahan berdasarkan pergerakan atom dalam sistem yang disimulasikan. Besarnya interaksi antar atom dalam simulasi didefinisikan oleh potensial interatomik. Potensial interatomik adalah fungsi matematis yang menggambarkan interaksi antar atom dalam sebuah sistem yang disimulasikan. Beberapa jenis potensial yang dapat digunakan dalam simulasi dinamika molekul antara lain potensial EAM, potensial Lennard-Jones, dan potensial Morse. Menurut Girifalco dan Weizer (1959), potensial interatomik yang bagus untuk menggambarkan interaksi antar atom dari bahan logam adalah potensial Morse.

Simulasi dinamika molekul dapat digunakan untuk simulasi bahan dalam skala kecil maupun besar. simulasi dengan skala besar dimana ukuran bahan mendekati ukuran bahan yang telah diaplikasikan dalam kehidupan sehari-hari dapat meningkatkan akurasi dari hasil simulasi, misalnya simulasi sebuah resistor yang terbuat dari bahan Ni dengan ukuran 10 mm x 1 mm x 1mm. Untuk pemodelan resistor ini maka jumlah atom yang disimulasikan akan besar yaitu $9,152 \times 10^{21}$ atom. Akan tetapi simulasi dengan jumlah atom yang besar akan mengakibatkan problem komputasi menjadi semakin besar. Hal ini disebabkan karena dalam metode simulasi dinamika molekul akan dihitung interaksi antar atom pada seluruh atom dalam sistem yang di simulasikan sehingga semakin besar jumlah atom yang disimulasikan maka semakin besar pula perhitungan interaksi antar atom yang harus diselesaikan (Bai *et al*, 2006). Besarnya problem

komputasi tersebut akan mempengaruhi waktu yang diperlukan untuk menyelesaikan simulasi. Semakin besar problem komputasi maka waktu yang diperlukan untuk menyelesaikan simulasi akan semakin lama. Untuk optimalisasi simulasi tersebut dapat dilakukan dengan menggunakan komputer paralel (Jimenez, 2009).

Komputer paralel merupakan teknik untuk mempercepat proses komputasi dengan komputer yang dirangkai secara paralel dan dapat bekerja secara simultan. Komputer paralel dapat berupa sebuah komputer yang memiliki *core* lebih dari satu atau beberapa komputer yang dirangkai secara paralel dalam satu jaringan. Keunggulan komputer paralel dibandingkan dengan komputer serial adalah dapat digunakan untuk memproses data dalam jumlah besar. Selain itu dengan memanfaatkan prosesor dalam komputer paralel dapat mempercepat proses komputasi sehingga dapat menghemat waktu pengerjaan. Di dalam komputer paralel sebuah problem komputasi dibagi menjadi beberapa bagian yang diselesaikan secara berurutan. Bagian-bagian tersebut kemudian dikerjakan secara bersamaan oleh beberapa *core* sehingga problem komputasi tersebut dapat diselesaikan secara lebih cepat (Blaise, 2012). Fashanu (2012) telah melakukan penelitian tentang analisis kinerja dari komputer paralel. Fashanu menyimpulkan bahwa penggunaan komputer paralel dapat meningkatkan kinerja dari komputer untuk menyelesaikan perhitungan simulasi dalam jumlah besar maupun dalam bentuk yang kompleks. Selain itu, Bai *et al* (2006) juga telah melakukan penelitian tentang komputer paralel dengan *OpenMP* untuk mempercepat simulasi dinamika molekul. Hasil penelitian tersebut menunjukkan penggunaan komputer paralel dapat meningkatkan kecepatan simulasi hingga 30% dibandingkan dengan simulasi sebelum diparalel. Peningkatan kecepatan waktu simulasi dapat mengurangi waktu yang diperlukan untuk menyelesaikan problem simulasi.

Penelitian tugas akhir tentang perhitungan kapasitas panas menggunakan metode dinamika molekul dengan komputer paralel ini dilakukan untuk mengetahui nilai kapasitas panas bahan dimana bahan yang disimulasikan adalah tembaga. Perhitungan kapasitas panas dilakukan secara simulasi menggunakan metode dinamika molekul. Perangkat lunak yang digunakan adalah *Large-scale*

Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS), sedangkan untuk visualisasi menggunakan *Open Visualization Tool* (OVITO). Selain itu dalam penelitian ini akan digunakan komputer paralel. Tujuan penggunaan komputer paralel adalah untuk mempercepat waktu simulasi, dimana komputer paralel yang digunakan adalah sebuah komputer dengan prosesor *multi core*.

1.2 Rumusan Masalah

Topik yang diangkat dalam kegiatan penelitian ini adalah perhitungan kapasitas panas bahan menggunakan metode dinamika molekul dengan mengaplikasikan sistem komputer paralel. Dalam hal ini, permasalahan yang dikaji dalam topik ini adalah:

1. Bagaimana pengaruh jumlah atom yang disimulasikan terhadap waktu yang diperlukan untuk menyelesaikan simulasi?
2. Bagaimana pengaruh penggunaan sistem komputasi paralel terhadap waktu yang diperlukan untuk menyelesaikan simulasi?
3. Bagaimana pengaruh jumlah atom yang disimulasikan terhadap akurasi perhitungan kapasitas panas?
4. Berapa nilai kapasitas panas bahan tembaga yang disimulasikan dengan menggunakan metode dinamika molekul?

1.3 Batasan Masalah

Batasan masalah yang digunakan dalam penelitian perhitungan kapasitas panas menggunakan metode dinamika molekul dengan komputer paralel ini adalah:

1. Perangkat lunak yang digunakan dalam penelitian ini adalah *Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator* (LAMMPS).
2. Perangkat keras yang digunakan adalah sebuah komputer dengan prosesor Core i5 yang memiliki 4 buah *core*. Masing-masing *core* memiliki kecepatan 3,0 GHz.
3. Bahan yang disimulasikan adalah tembaga.
4. Potensial interatomik yang digunakan adalah potensial Morse.

1.4 Tujuan

Berdasarkan perumusan masalah yang telah ditentukan, maka tujuan dari kegiatan penelitian ini adalah:

1. Mengetahui pengaruh jumlah atom yang disimulasikan terhadap waktu simulasi.
2. Mengetahui pengaruh penggunaan komputer paralel terhadap waktu simulasi.
3. Mengetahui pengaruh jumlah atom yang disimulasikan terhadap akurasi perhitungan kapasitas panas.
4. Mengetahui nilai kapasitas panas bahan tembaga yang disimulasikan dengan menggunakan metode dinamika molekul.

1.5 Manfaat

Manfaat yang diharapkan dari kegiatan penelitian ini adalah dapat mengetahui nilai kapasitas panas tembaga dengan menggunakan metode dinamika molekul, sehingga dapat digunakan sebagai acuan untuk penelitian lebih lanjut. Selain itu melalui kegiatan penelitian ini, akan dapat diketahui seberapa handal sistem komputer paralel dapat digunakan sebagai alternatif untuk mengoptimalkan kinerja komputer dalam proses simulasi dinamika molekul.

BAB 2. DASAR TEORI

2.1 Kapasitas Panas

Ketika dua buah benda yang memiliki perbedaan temperatur dicampur menjadi satu dalam sebuah sistem maka panas Q akan mengalir dari benda yang memiliki temperatur tinggi menuju benda yang memiliki temperatur lebih rendah. Di dalam sistem tersebut akan terjadi perubahan energi. Besarnya perubahan energi ΔE dapat dirumuskan sebagai

$$E = \quad (2.1)$$

dimana W adalah kerja yang diberikan ke dalam sistem dan Q adalah panas yang diterima oleh sistem dari lingkungan. Jika ditinjau pada sebuah bahan murni, kerja W dapat dianggap nol, sehingga persamaan 2.1 menjadi

$$E = \quad (2.2)$$

Energi, panas dan kerja memiliki satuan yang sama. Di dalam SI digunakan satuan Joule (J) (Hummel, 2012).

Energi yang diperlukan untuk meningkatkan temperatur dari satu benda dengan benda lain akan berbeda. Hal ini menjadi salah satu karakteristik bahan yang dikenal sebagai kapasitas panas. Kapasitas panas adalah besarnya energi yang diperlukan untuk mengubah suhu satu gram benda tiap satu derajat (Allen dan Tildesley, 1989). Hal ini dapat dirumuskan sebagai,

$$c = \frac{Q}{T m} \quad (2.3)$$

dimana c adalah kapasitas panas (J/Kg K), Q adalah energi (J), T adalah temperatur (K) dan m adalah massa atom (g). Secara simulasi besarnya energi dari suatu sistem atom dengan jumlah atom N dapat diketahui dari besarnya energi total dari bahan yang disimulasikan berdasarkan temperatur yang diinputkan. Sehingga, jika energi total adalah E (eV) dan temperatur adalah T , maka persamaan 2.1 menjadi:

dimana N adalah jumlah atom, m_r adalah massa relatif atom (g/mol) dan N_A adalah bilangan avogadro (mol^{-1}) (Fedorov, 2016).

2.2 Metode Dinamika Molekul

2.2.1 Dasar metode dinamika molekul

Metode dinamika molekul merupakan metode komputasi yang handal untuk memprediksi sifat-sifat fisis dari bahan cair, padat dan molekul. Metode dinamika molekul dapat memprediksi gerak atom dari sistem bahan yang disimulasikan sehingga dapat dianalisis sifat-sifat fisis bahan tersebut. Beberapa atom atau molekul dalam simulasi diperlakukan sebagai sebuah titik masa dan pergerakannya dihitung secara komputasi berdasarkan persamaan gerak Newton yang dapat menggambarkan trayektori atom-atom pada proses simulasi (Plimpton, 1995).

Metode dinamika molekul dapat memprediksi sifat-sifat bahan berdasarkan mekanika klasik. Bahan yang disimulasikan dalam sistem dapat dianalisis berdasarkan penyelesaian persamaan hukum gerak kedua Newton dalam sistem simulasi. Langkah awal yang dilakukan dalam metode dinamika molekul adalah menentukan kondisi awal dari sistem yang akan disimulasikan. Berdasarkan kondisi awal yang telah ditentukan akan dihitung gaya yang bekerja pada setiap atom berdasarkan persamaan

$$\mathbf{F}_i = m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} \quad (2.5)$$

dimana \mathbf{F} adalah gaya (N), m adalah massa atom (g), \vec{v} adalah kecepatan atom (m/s) dan t adalah waktu (s). Selain itu dalam penentuan kondisi awal pada sistem simulasi diberikan sebuah fungsi potensial interaksi antar atom untuk menentukan gaya-gaya yang bekerja pada setiap atom dalam sistem. Jika jumlah atom total dalam sistem yang disimulasikan adalah N , gaya yang bekerja pada atom ke i diperoleh dari fungsi potensial interatomik $U(r_1, r_2, r_3, \dots, r_N)$, maka secara umum fungsi posisi dari setiap atom dapat diperoleh dari persamaan:

$$\mathbf{F} = -\nabla U(r_1, r_2, r_3, \dots, r_N) \quad (2.6)$$

Penyelesaian persamaan diferensial dari persamaan gerak Newton dilakukan dengan metode beda hingga. Algoritma yang digunakan adalah algoritma Verlet. Algoritma Verlet sangat populer untuk metode dinamika molekul karena sederhana dan efektif untuk menyelesaikan perhitungan dalam metode dinamika molekul. Jika sistem disimulasikan dalam *time step* dt , dimana sebuah partikel memiliki fungsi $r(t)$ pada waktu t , maka fungsi dari partikel dapat dituliskan dalam dua deret Taylor

$$\dot{r}(t) = \dot{r}(t) + \frac{\ddot{r}(t) dt}{1!} + \frac{\dddot{r}(t) dt^2}{2!} + \dots$$

dengan menjumlahkan persamaan 2.7 dan 2.8, maka dapat diperoleh posisi partikel pada *time step* selanjutnya

$$\ddot{r}(t)$$

Selain itu, dari persamaan 2.7 dan 2.9 dapat dihitung kecepatan partikel, dengan melakukan eliminasi pada $\dot{r}(t)$ maka

$$\dot{r}(t) = \dot{r}(t) + \frac{\ddot{r}(t) dt}{1!} + \frac{\dddot{r}(t) dt^2}{2!} + \dots$$

Algoritma Verlet memiliki sifat *time-reversible*, artinya jika tanda penambahan waktu diubah maka algoritma ini akan kembali pada perhitungannya sebelumnya (Klosta, 2009).

2.2.2 Potensial Interatomik

Metode dinamika molekul dapat memprediksi sifat-sifat bahan berdasarkan pergerakan atom dalam simulasi. Pergerakan atom tersebut dapat dihitung berdasarkan perlakuan yang diinputkan ke dalam sistem yang dipengaruhi oleh potensial interatomik. Potensial interatomik adalah sebuah fungsi matematis yang dapat digunakan untuk menghitung energi total dari sebuah sistem atom dalam simulasi. Potensial interatomik yang digunakan dalam penelitian ini adalah potensial Morse. Potensial Morse merupakan sebuah fungsi matematis untuk menghitung energi dari sebuah sistem atom. Energi potensial $\varphi(r_{ij})$ dari dua buah

atom i dan j yang dipisahkan dengan jarak r_{ij} dapat dirumuskan dengan fungsi berikut,

$$\varphi(r_{ij}) = D [e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)}] \quad (2.11)$$

dimana D adalah kesetimbangan energi ikat (eV) dan r_0 adalah pendekatan jarak kesetimbangan antara dua atom (Å). Potensial Morse merupakan salah satu jenis potensial yang baik untuk menggambarkan interaksi antar atom pada bahan padat khususnya pada bahan logam (Girifalco dan Weizer, 1959). Parameter untuk potensial Morse dari beberapa jenis bahan ditunjukkan dalam tabel 2.1.

Tabel 2.1 Parameter potensial Morse beberapa bahan logam

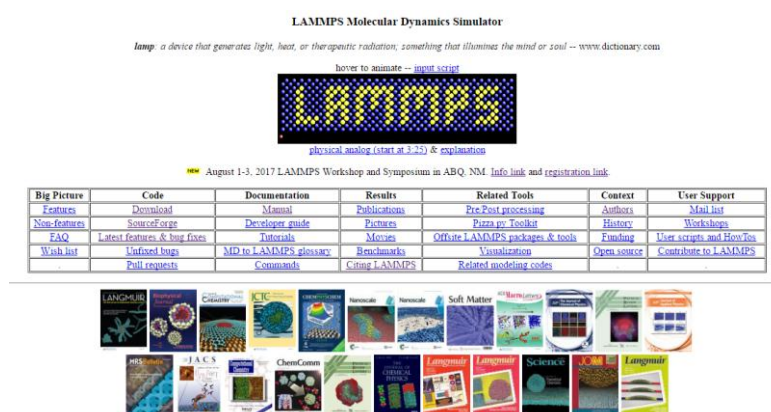
Logam	$\alpha = \text{Å}^{-1}$	$r_0 = \text{Å}$	$D(\text{eV})$
Pb	2,921	3,733	0,2348
Ag	2,788	3,115	0,3323
Ni	2,500	2,780	0,4205
Cu	2,450	2,866	0,3429
Al	2,347	3,253	0,2703
Ca	2,238	4,569	0,1623
Sr	2,238	4,988	0,1513
Fe	1,988	2,845	0,4174

Sumber: Girifalco dan Weizer, 1959.

2.2.3 Perangkat lunak

Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) adalah perangkat lunak yang berisi kode dinamika molekul klasik. LAMMPS dikembangkan oleh *Sandia National Laboratories* dan didistribusikan sebagai perangkat lunak berbasis *open source* di bawah *GNU General Public Licence* dan dapat diakses secara gratis di laman <http://lammps.sandia.gov/>. LAMMPS dapat digunakan untuk memodelkan atom, polimer dan logam berdasarkan metode dinamika molekul. LAMMPS dapat memodelkan sebuah sistem kecil dengan hanya beberapa partikel hingga sistem besar yang berisi milyaran partikel

(Lukinov, 2016). LAMMPS telah menjadi salah satu perangkat lunak untuk simulasi dinamika molekuler yang diakui secara internasional dan telah menghasilkan publikasi ilmiah yang diterbitkan oleh berbagai jurnal internasional. Gambar 2.1 merupakan tampilan LAMMPS pada laman resminya <http://lammmps.sandia.gov>.



Gambar 2.1 Laman LAMMPS (Sumber: <http://lammmps.sandia.gov>)

2.2.4 Visualisasi Data

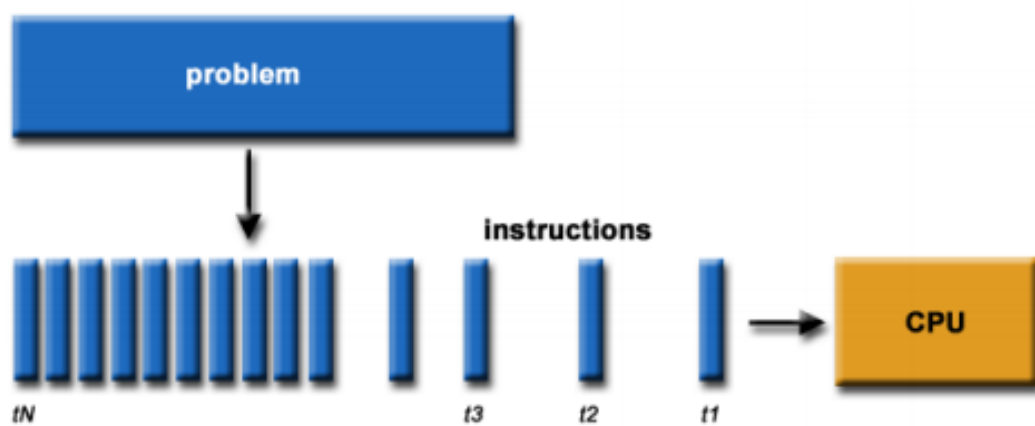
Untuk keperluan visualisasi data dari hasil simulasi, digunakan program *Open Visualization Tool* (OVITO). OVITO merupakan perangkat lunak yang tersedia secara gratis. OVITO digunakan untuk visualisasi dan analisis data dari keluaran yang dihasilkan oleh LAMMPS. OVITO berfungsi untuk menerjemahkan koordinat dari atom-atom yang telah dimodelkan menjadi grafik tiga dimensi yang dapat diinterpretasi oleh peneliti. OVITO dapat menghasilkan gambar dengan kualitas tinggi yang dapat digunakan untuk publikasi. Program ini dibangun dengan operasi C++ dan bersifat *open source* di bawah GNU *General Public License* (Stukowski, 2009).

2.3 Komputer Paralel

Komputer paralel merupakan teknik yang digunakan untuk melakukan komputasi secara bersama-sama menggunakan beberapa komputer. Komputer paralel diperlukan untuk mengolah data dengan jumlah yang besar. Komputer

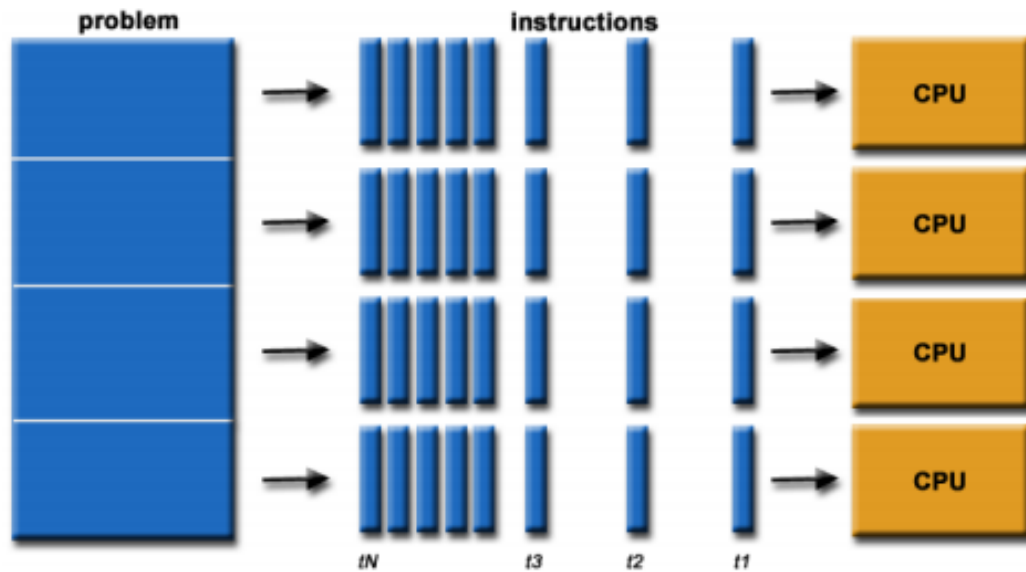
paralel mampu mengoptimalkan proses perhitungan persamaan-persamaan matematis dalam simulasi dinamika molekul.

Pada dasarnya, banyak perangkat lunak yang dibuat untuk komputer serial. Perintah dalam perangkat lunak tersebut dieksekusi secara berurutan dari satu tahap ke tahap yang lain. Perintah akan dieksekusi oleh satu buah *core* saja meskipun dalam komputer tersebut terdapat prosesor yang memiliki beberapa *core*. Komputer *serial* hanya bisa menjalankan satu perintah dalam satu waktu.



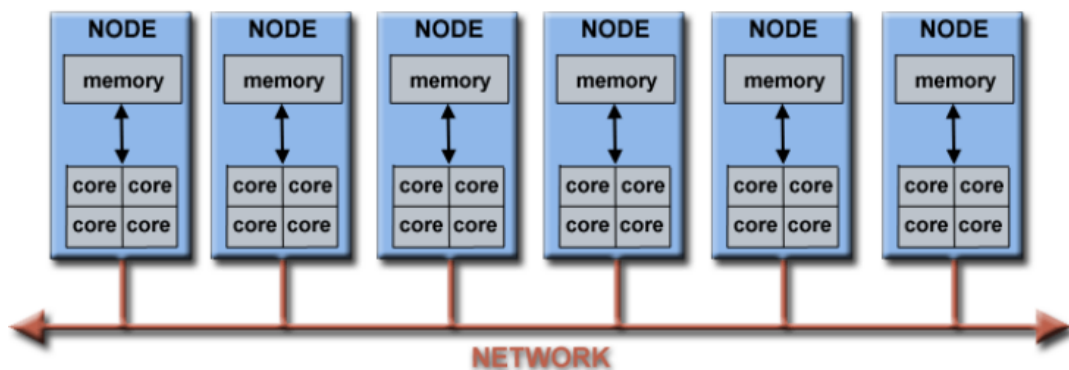
Gambar 2.2 Proses komputasi pada komputer serial (Sumber:Blaise, 2012)

Komputer paralel adalah perangkat komputer yang terdiri dari beberapa komputer dan dapat bekerja secara simultan untuk menyelesaikan problem komputasi. Komputer paralel dapat menjalankan beberapa perintah dalam waktu yang bersamaan. Komputer paralel dapat memanfaatkan beberapa *core* yang ada dalam komputer paralel untuk menjalankan perintah. Keunggulan dari komputer paralel adalah dapat mempercepat proses komputasi sehingga dapat menghemat waktu pengerjaan. Selain itu komputer paralel dapat digunakan untuk menyelesaikan problem komputasi dalam skala besar dan dapat mengerjakan beberapa perintah dalam waktu yang bersamaan (Blaise, 2012).



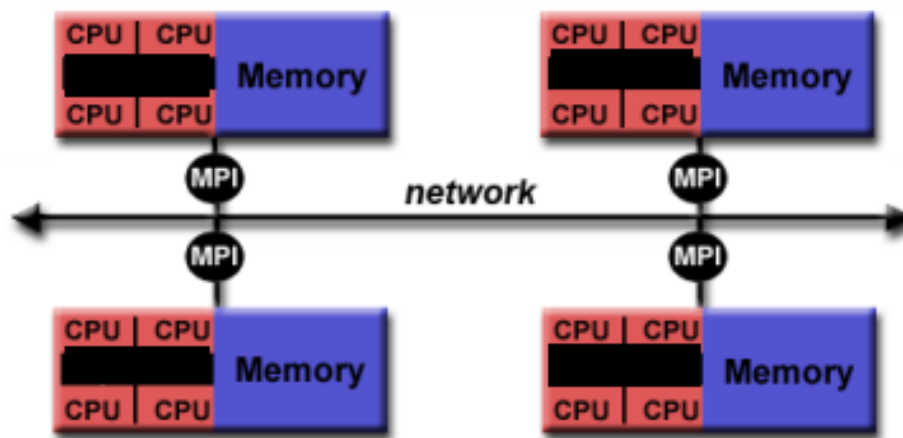
Gambar 2.3 Proses komputasi pada komputer paralel (Sumber:Blaise, 2012)

Komputer paralel dapat berupa sebuah komputer atau beberapa komputer. Komputer paralel yang hanya terdiri dari sebuah komputer dapat dilakukan jika komputer tersebut memiliki beberapa *core* dalam sebuah prosesor. Komputer Paralel ini biasa disebut sebagai paralel *multi core*. Selain itu komputer paralel juga dapat dibangun dari beberapa komputer yang terhubung dalam sebuah jaringan. Komputer paralel ini pada umumnya terdiri dari sebuah komputer server dan beberapa komputer *client*. Setiap komputer terhubung dengan sebuah jaringan dan dapat bekerja secara paralel (Jimenez, 2009).



Gambar 2.4 Komputer paralel (Sumber:Blaise, 2012)

Pembagian kerja dalam komputer paralel dapat dilakukan dengan menggunakan program *Message Passing Interface* (MPI). MPI berfungsi untuk mendistribusikan perintah-perintah dalam komputasi sehingga dapat dikerjakan secara paralel oleh beberapa *core* dalam waktu yang bersamaan. Penelitian ini menggunakan MPICH yang berfungsi untuk mendistribusikan pekerjaan antar node dalam komputer paralel.



Gambar 2.5 Distribusi kerja komputer paralel menggunakan MPI (Sumber:Blaise, 2012)

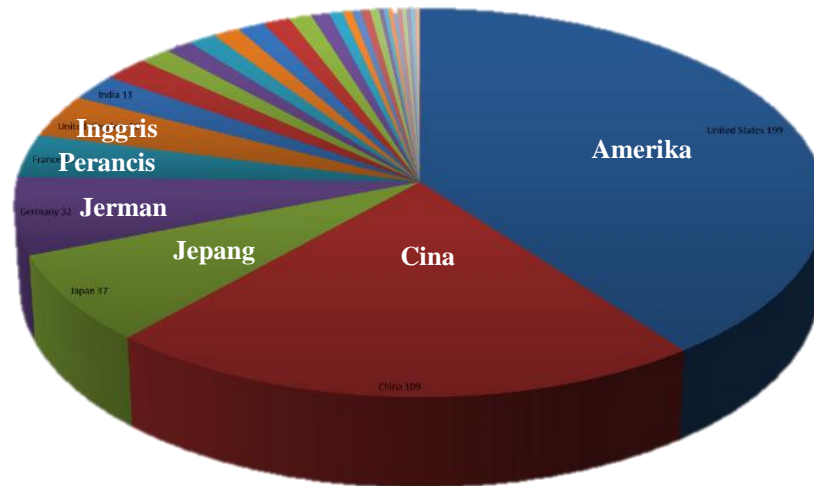
Komputer paralel dapat digunakan untuk mempercepat proses perhitungan dalam komputasi. Besarnya peningkatan kecepatan diformulasikan sebagai

—

dimana T_s adalah waktu yang diperlukan untuk menyelesaikan pekerjaan dalam satu *core* (s) dan T_p adalah waktu yang dibutuhkan untuk menyelesaikan proses komputasi menggunakan sejumlah *core* (s) (Mathew dan Vijayakumar, 2011).

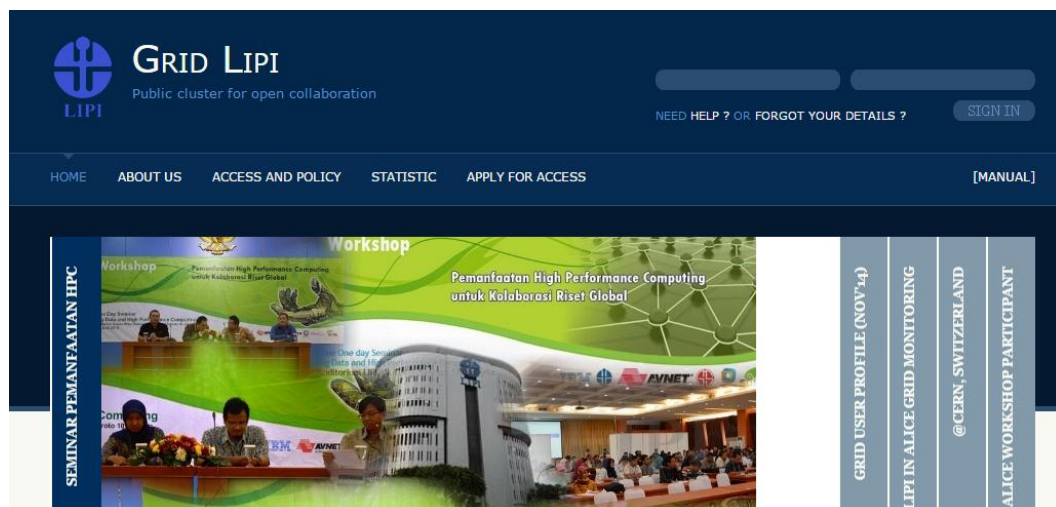
Komputer paralel dalam skala besar dikenal dengan istilah super komputer. Super komputer merupakan *cluster* dari beberapa *hardware*. Super komputer telah banyak dikembangkan di berbagai negara seperti Amerika, Cina, Jepang, Jerman, Perancis dan beberapa negara lainnya. Super komputer telah dikembangkan untuk berbagai pemodelan, simulasi dan pemecahan masalah komputasi yang kompleks dari fenomena-fenomena yang terjadi di dunia ini. Beberapa contoh penggunaan

komputer paralel adalah untuk pemodelan galaksi, pergerakan planet, perubahan iklim, dan lain sebagainya.



Gambar 2.6 Negara-negara pengembang super komputer (Sumber: top500.org)

Indonesia telah mengembangkan super komputer berupa komputer grid. Komputer grid adalah penggunaan banyak komputer yang terpisah secara geografis untuk menyelesaikan masalah komputasi dalam skala besar. Komputer grid dikembangkan oleh Lembaga Ilmu Pengetahuan Indonesia (LIPI) sebagai *cluster* komputer yang dapat diakses secara terbuka oleh publik melalui laman resminya <http://grid.lipi.go.id/>.

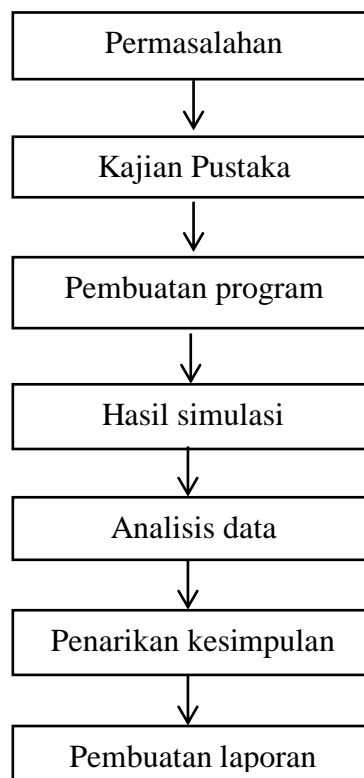


Gambar 2.7 Laman komputer grid Indonesia (Sumber: <http://grid.lipi.co.id>)

BAB 3. METODE PENELITIAN

3.1 Rancangan Penelitian

Penelitian merupakan sebuah kegiatan yang memerlukan sebuah rancangan yang jelas untuk mendapatkan hasil yang baik. Rancangan penelitian diperlukan untuk memperjelas langkah-langkah yang akan dilakukan dalam sebuah penelitian sehingga pelaksanaan penelitian dapat berjalan sesuai dengan tujuan penelitian. Oleh karena itu dalam penelitian ini digunakan sebuah alur rancangan penelitian agar penelitian dapat berjalan dengan baik dan dapat diperoleh hasil penelitian yang baik. Alur dari rancangan penelitian yang dilakukan dalam penelitian ini ditunjukkan pada Gambar 3.1.



Gambar 3.1 Alur rancangan penelitian

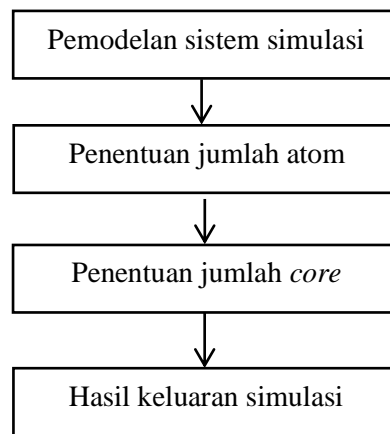
Penelitian ini membahas tentang kapasitas panas bahan. Langkah awal yang dilakukan untuk memecahkan permasalahan tersebut dilakukan melalui kajian pustaka. Di dalam kajian pustaka akan dicari berbagai acuan yang mendasari permasalahan tersebut. Kajian pustaka tersebut meliputi teori dasar, penelitian-penelitian sebelumnya yang terkait dengan permasalahan, metode dan berbagai parameter lain yang dapat digunakan untuk mendukung penelitian. Berdasarkan kajian pustaka akan dilakukan pembuatan program untuk memecahkan permasalahan yang telah ditentukan. Berdasarkan program yang dibuat akan diperoleh hasil simulasi yang kemudian diolah dan dianalisis lebih lanjut. Kemudian seluruh kegiatan penelitian yang telah dilakukan disusun secara sistematis dalam sebuah laporan tugas akhir.

3.2 Sumber Data

Simulasi dinamika molekul merupakan metode yang digunakan untuk perhitungan kapasitas panas bahan dalam penelitian ini. Perhitungan nilai kapasitas panas diperoleh dari data sekunder, berupa massa tembaga, dan konstanta kisi tembaga. Oleh karena data yang dihasilkan berbentuk angka, maka penelitian ini dikategorikan ke dalam penelitian kuantitatif.

3.3 Kerangka Penyelesaian Masalah

Parameter yang dihitung dalam penelitian ini adalah kapasistas panas tembaga. Untuk menghitung kapasitas panas, dibutuhkan parameter massa tembaga, temperatur dan energi total sistem sebagai fungsi temperatur. Energi total sistem diperoleh dengan mengaplikasikan potensial Morse sebagai potensial interaksi antar atom. Nilai kapasitas panas selanjutnya akan dianalisis berdasarkan variasi temperatur pada proses simulasi. Pembuatan program simulasi ditunjukkan dalam tahapan pembuatan program pada Gambar 3.2.



Gambar 3.2 Tahapan pembuatan program

Perhitungan kapasitas panas dilakukan dengan memodelkan sistem simulasi bahan tembaga. Pemodelan sistem simulasi dilakukan dengan memberikan parameter-parameter dari bahan tembaga yaitu struktur kristal FCC dengan konstanta kisi 0,3597 nm dan massa atom 63,546 g/mol. Di dalam sistem simulasi juga diberikan parameter potensial interatomik untuk menghitung interaksi antar atom dalam sistem. Potensial interatomik yang digunakan dalam penelitian ini adalah potensial Morse dengan parameter $D = 0,3429$ eV, $a = 2,450 \text{ \AA}^{-1}$ dan $r_0 = 2,866 \text{ \AA}$. Selain itu juga diberikan masukan berupa variasi temperatur dengan nilai 173 K hingga 1000 K untuk menghitung nilai kapasitas panas dari bahan tembaga yang disimulasikan.

Setelah pemodelan sistem simulasi telah selesai, dilakukan variasi jumlah atom. Variasi jumlah atom dalam simulasi dilakukan untuk mengetahui pengaruh jumlah atom terhadap waktu yang diperlukan untuk menyelesaikan proses simulasi. Selain itu, variasi jumlah atom juga dilakukan untuk mengetahui pengaruh jumlah atom terhadap akurasi perhitungan nilai kapasitas panas bahan tembaga. Variasi jumlah atom yang digunakan dalam simulasi adalah 500, 1.000, 2.000, 4.000, 8.000, 16.000, 32.000, dan 64.000 atom.

Proses selanjutnya adalah penentuan jumlah *core* untuk menjalankan proses simulasi. Simulasi dilakukan dengan menggunakan komputer paralel *multi core*

yang memiliki 4 buah *core*. Spesifikasi dari komputer yang digunakan ditunjukkan pada Tabel 3.1.

Tabel 3.1 Spesifikasi komputer

Model	MSI MS-7758
Prosesor	Intel(R) Core(TM) i5-3330
<i>Speed</i>	@ 3.0 GHz (4 CPUs)
<i>Memory</i>	8192 MB RAM

Tujuan dari penggunaan komputer paralel adalah untuk mempercepat waktu pengerjaan dalam proses simulasi. Penggunaan komputer paralel bertujuan untuk mengoptimalkan proses simulasi, sehingga dapat dilakukan secara lebih cepat dan efisien. Komputer paralel yang digunakan berbasis *Message Passing Interface* (MPI) dimana simulasi dapat dijalankan secara bersamaan oleh n -buah *core* dalam komputer paralel. Peningkatan kecepatan proses simulasi kemudian dianalisis dari perbandingan waktu yang diperlukan untuk menyelesaikan simulasi menggunakan komputer paralel dengan waktu yang diperlukan untuk menyelesaikan simulasi menggunakan komputer serial.

Berdasarkan program tersebut akan didapatkan keluaran yaitu nilai energi total dan temperatur dari sistem atom yang disimulasikan berdasarkan variasi jumlah atom dan variasi jumlah *core* dalam simulasi. Kemudian data tersebut dianalisis lebih lanjut untuk perhitungan nilai kapasitas panas bahan tembaga. Kemudian hasil yang diperoleh dari perhitungan kapasitas panas menggunakan simulasi dinamika molekul kemudian dibandingkan dengan data referensi.

3.4 Analisis Data

Perhitungan kapasitas panas tembaga dengan metode dinamika molekul dilakukan dengan melakukan simulasi pada bahan tembaga. Bahan disimulasikan dengan input temperatur 173 K hingga 1000 K. Berdasarkan simulasi tersebut akan diperoleh data besarnya energi total E pada setiap temperatur T .

Besarnya energi yang diperoleh dalam satuan eV sedangkan temperatur dalam satuan K . Satuan dari besarnya energi dapat diubah menjadi satuan joule dengan konversi

$$J = (eV) \times (1,602 \times 10^{-18}) \quad (3.1)$$

Dari besarnya energi total E pada tiap temperatur T maka dapat diperoleh nilai kapasitas bahan berdasarkan persamaan 2.5. Nilai ΔT diperoleh dari $T_f - T_i$, dan ΔE diperoleh dari $E_{T_f} - E_{T_i}$, dimana T_f adalah temperatur akhir (K) T_i adalah temperatur awal (K), E_{T_f} adalah energi akhir (J) dan E_{T_i} adalah energi awal (J), sehingga persamaan 2.2 menjadi

$$c(T_f) = \frac{(E_{T_f} - E_{T_i}) N_A}{(T_f - T_i) N} \quad (3.2)$$

Perkiraan kesalahan yang didapatkan dihitung berdasarkan

$$D = \left| \frac{c_{sim} - c_{Ref}}{c_{Ref}} \right| \times 100\% \quad (3.3)$$

dimana c_{sim} adalah nilai kapasitas panas yang diperoleh dari simulasi dan c_{Ref} adalah nilai kapasitas panas dari referensi yang ada. Besarnya kapasitas panas dapat diketahui berdasarkan persamaan 3.2, kemudian nilai kapasitas panas yang diperoleh dari simulasi dibandingkan dengan data referensi yang ada (Linstrom dan Mallard, 2001).

Tabel 3.2 Kapasitas panas bahan tembaga

T (K)	c (J/mol K)
300	24,49
400	25,29
500	25,99
600	26,55
700	27,02
800	27,47
900	27,97
1.000	28,62

Sumber: Linstrom dan Mallard, 2001

Data yang diperoleh ditampilkan dalam tabel dan grafik hubungan antara kapasitas panas terhadap temperatur.

Analisis kinerja dari komputer paralel dilakukan dengan melakukan analisis pada waktu yang diperlukan untuk menyelesaikan simulasi dengan variasi jumlah *core* pada komputer paralel. Besarnya peningkatan kecepatan proses simulasi dapat diketahui berdasarkan persamaan 2.11. Berdasarkan persamaan tersebut dapat diketahui peningkatan kecepatan penggunaan komputer paralel yang dibandingkan dengan penggunaan komputer serial. Data tersebut ditampilkan dalam grafik hubungan antara waktu yang diperlukan untuk menyelesaikan proses komputasi terhadap jumlah *core* yang digunakan pada setiap *core*.

BAB 5. PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan penelitian perhitungan kapasitas panas menggunakan metode dinamika molekul dengan komputer paralel yang telah dilakukan, dapat ditarik beberapa kesimpulan sebagai berikut:

1. Semakin banyak atom yang disimulasikan maka semakin lama waktu yang diperlukan untuk menyelesaikan simulasi.
2. Penggunaan komputer paralel dapat mempercepat proses simulasi. Peningkatan kecepatan simulasi dengan menggunakan 2 *core*, 3 *core* dan 4 *core* secara berturut-turut adalah 1,91; 2,76; dan 3,45 kali lebih cepat dibandingkan dengan penggunaan komputer serial yang hanya menggunakan 1 *core* saja.
3. Semakin banyak atom yang disimulasikan maka semakin kecil rentang nilai kapasitas panas yang didapatkan sehingga data yang diperoleh menjadi lebih akurat.
4. Nilai kapasitas panas tembaga yang diperoleh dari perhitungan menggunakan metode simulasi dinamika molekul menunjukkan kesesuaian yang baik dengan nilai referensi, pada temperatur 500 K hingga 1000 K. Hal ini didasarkan pada diskrepansi yang diperoleh, yang bernilai di bawah 5 % pada *range* interval temperatur tersebut.

5.2 Saran

Berdasarkan hasil penelitian, dapat diketahui bahwa komputer paralel yang digunakan dapat meningkatkan kecepatan simulasi sehingga waktu yang diperlukan untuk melakukan simulasi menjadi lebih singkat. Namun berdasarkan analisis yang dilakukan efisiensi dari penambahan *core* terhadap waktu simulasi mengalami penurunan dimana pada penambahan jumlah *core* tertentu tidak akan mempengaruhi waktu simulasi. Untuk itu perlu dilakukan penelitian lebih lanjut dengan menggunakan desain komputer paralel yang memiliki jumlah *core* lebih banyak untuk mengetahui batas maksimum dimana penambahan *core* tersebut

tidak lagi berpengaruh terhadap waktu simulasi. Selain itu, perlu dikaji lebih lanjut tentang penggunaan potensial Morse yang digunakan. Hal ini dapat dilakukan dengan *fitting* parameter potensial Morse dengan memodifikasi parameter potensial Morse yang digunakan sehingga dapat diperoleh hasil yang lebih akurat.

DAFTAR PUSTAKA

- Allen, M. P. dan Tildesley, D. J. 1989. *Computer Simulation of Liquid*. Oxford University Press.
- Arkundato, A., Hasan, M. dan Su'ud, Z. 2016. *Fisika Komputasi: Metode Simulasi Dinamika Molekul dan Aplikasinya*. Universitas Jember.
- Bai, S.R., Ran, L.P. dan Lu, K.L. 2006. Parallelization and performance tuning of molecular dynamics code with OpenMP. *Journal of Central South University of Technology*. 13(3), 260-264.
- Blaise, B., 2012. *Introduction to Parallel Computing*. Lawrence Livermore National.
- Bueche, F. J., dan Hecht, E. 2000. *Schaum's Easy Outline: College Physics*. USA: McGraw-Hill.
- Chen, Q. 2014. Molecular Dynamic Simulation for Heat Capacity of MgSiO₃ Perovskite. *Bio-Inspired Computing-Theories and Applications*, 24-28. Springer Berlin Heidelberg.
- Fashanu, T. A., Ale, F., Agboola, O. A., dan Ibidapo-Obe, O. 2012. Performance Analysis of a Parallel Computing Algorithm Developed for Space Weather Simulation. *International Journal of Advancements in Reaserch & Technology*. 1(7): 46-55.
- Fedorov, A. V., Shulgin, A. V., dan Lavruk, S. A. 2016. Study of Nanoparticle Melting. *AIP Conference Proceedings 1770. 27 Juni – 3 Juli 2016*. AIP Publishing: 1-5.
- Girifalco, L. A. dan Weizer, V.G. 1959. Application of the Morse Potential Function to Cubic Metals. *Physical Review*. 114(3), 687.
- Grid Computing. 2017. *Komputer Grid LIPI*. [online]. <http://grid.lipi.go.id> [29 Mei 2017]
- Hisano, K., S. Sawai, dan K. Morimoto. 1998. Conventional Simultaneous Measurement of Specific Heat Capacity and Thermal Conductivity by Thermal Radiation Calorimetry. *International Journal of Thermophysics*. 19(1): 291-304.
- Hummel, R.E. 2012. *Electronic Properties of Materials*. Springer.

- Jimenez, M. A. Z. 2009. Performance Analysis and Tuning in Multicore Environments. *Tesis*. Barcelona: Universitat Autònoma de Barcelona.
- Klosta, K.D. 2009. The Dynamics of Spheres in Oscillatory Fluid Flow. *Disertasi*. University of Nottingham.
- LAMMPS. 2017. *Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*. [online]. <http://lammps.sandia.gov> [30 Mei 2017].
- Linstrom, P.J. dan Mallard, W.G., 2001. *NIST Chemistry Webbook; NIST Standard Reference Database No. 69*.
- Lukinov, T. 2016. Computer Simulation of Materials Under Extreme Conditions. *Disertasi*. Stockholm: KTH AlbaNova University Center.
- Mathew, J., dan Vijayakumar, R. 2011. The Performance of Parallel Algorithms by Amdahl's Law, Gustafson's Trend. *International Journal of Computer Science and Information Technologies (IJCSIT)*. 2(6): 2796-2799.
- Plimpton, S. 1995. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*. 117(1): 1-19.
- Rajabpour, A., Akizi, F. Y., Heyhat, M. M., dan Gordiz, K. 2013. Molecular dynamics simulation of the specific heat capacity of water-Cu nanofluids. *International Nano Letters*. 3(1): 1-6.
- Stukowski, A. 2009. Visualization and Analysis of Atomistic Simulation Data with OVITO—the Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 18(1): 15012.
- Top500 Supercomputer. 2016. *Statistic Supercomputers by Countries*. [online]. <https://www.top500.org/statistics/list/> [29 Mei 2017].
- Yang, C., Chen, M. dan Guo, Z. 2001. Molecular Dynamics Simulations on Specific Heat Capacity and Glass Transition Temperature of Liquid Silver. *Chinese Science Bulletin*. 46(12), 1051-1053.

Lampiran 4.1 Data Keluaran Ekuilibrasi Sistem Simulasi

Step	Temperatur (K)	Energi Total (eV)	Step	Temperatur (K)	Energi Total (eV)
0	300	-221268	56000	299.7269	-218865
1000	271.18	-219368	57000	299.4087	-218865
2000	293.2086	-218961	58000	299.8038	-218865
3000	297.4462	-218880	59000	299.6015	-218866
4000	299.8207	-218866	60000	300.7872	-218864
5000	301.3077	-218864	61000	299.9555	-218865
6000	299.7124	-218862	61000	299.9555	-218865
7000	300.0702	-218864	62000	299.9786	-218864
8000	300.2775	-218863	63000	299.5379	-218864
9000	300.02	-218864	64000	299.9358	-218864
10000	299.8745	-218864	65000	299.5152	-218863
11000	299.8719	-218863	66000	298.3988	-218864
12000	300.8799	-218864	67000	301.8228	-218866
13000	300.788	-218863	68000	301.0114	-218865
14000	299.5401	-218863	68200	300.8313	-218866
15000	298.3988	-218863	68400	299.3537	-218865
16000	299.8252	-218865	68600	299.2135	-218864
17000	299.6986	-218865	68800	299.1201	-218863
18000	300.8768	-218865	69000	300.1666	-218866
19000	298.8229	-218863	70000	299.173	-218863
20000	300.135	-218865	71000	299.8271	-218864
21000	300.2697	-218865	72000	299.9732	-218863
22000	299.5406	-218865	73000	299.3089	-218864
23000	301.5841	-218866	74000	299.2787	-218865
24000	300.1848	-218865	75000	300.2471	-218864
25000	300.5737	-218866	76000	299.455	-218863
26000	299.3956	-218864	76000	299.455	-218863
27000	300.4903	-218865	77000	300.699	-218864
28000	299.696	-218863	78000	300.2052	-218865
29000	301.4295	-218866	79000	299.5456	-218863
30000	298.5368	-218864	80000	299.5455	-218864
31000	299.4955	-218865	82000	301.9415	-218866
32000	300.1523	-218865	83000	300.2992	-218865
33000	299.785	-218865	84000	299.9815	-218864
34000	300.8716	-218865	85000	300.5488	-218863
35000	300.9775	-218865	86000	301.2495	-218866
36000	300.97	-218865	87000	299.3288	-218865
37000	300.2295	-218865	88000	300.5663	-218865
38000	300.6651	-218864	89000	300.3696	-218865
39000	298.838	-218864	90000	300.5556	-218865
40000	299.7852	-218863	91000	300.5086	-218865
41000	299.0652	-218864	92000	299.5981	-218864
42000	299.5759	-218866	93000	299.7058	-218865
43000	300.2855	-218866	94000	300.2769	-218864
44000	300.5698	-218865	95000	299.4861	-218863
46000	300.5268	-218864	96000	299.4454	-218863
47000	300.092	-218865	97000	298.5623	-218863
48000	299.7931	-218865	98000	299.1288	-218863
49000	299.8418	-218865	99000	299.5818	-218863
50000	299.0353	-218865	100000	298.5498	-218863
51000	299.8136	-218865			
52000	300.6456	-218864			
53000	300.1995	-218864			
54000	299.3731	-218865			
55000	299.5262	-218864			

Lampiran 4.2 Instalasi Program MPI dan LAMMPS

A. Pendahuluan

Pada penelitian ini, sistem operasi yang digunakan adalah *Linux Ubuntu 14.04 LTS*. Sebelum instalasi program paralel, diperlukan beberapa program atau *library* yang harus diinstal terlebih dahulu diantaranya: `g++`, `gcc`, `gfortran`, `libopenmpi-dev`. Program tersebut dapat diinstal melalui terminal dengan perintah

```
sudo apt-get install build-essential gfortran libopenmpi-dev
```

B. Instalasi MPI

Program MPI yang digunakan adalah MPICH2 yang merupakan program *open source* sehingga dapat diperoleh secara gratis. MPICH2 yang digunakan dalam tutorial ini adalah versi 3.0. Adapun langkah-langkah untuk melakukan instalasi adalah sebagai berikut.

- Download program MPICH2 yang dapat diunduh melalui laman

<http://www.mpich.org/static/downloads/3.3a2/mpich-3.3a2.tar.gz>

- Ekstrak file yang telah berhasil diunduh

```
tar -zxvf mpich-3.3a2.tar.gz
```

- Masuk ke dalam folder hasil ekstrakan

```
cd mpich-3.3a2
```

- Lakukan konfigurasi pada program

```
./configure --prefix=/usr/local/src/mpich
```

- Instalasi MPICH2

```
sudo make install
```

Setelah proses instalasi selesai maka program mpi telah terinstal pada prefix yang telah atur.

C. Instalasi Program LAMMPS

Program LAMMPS dapat diunduh melalui laman resminya

<http://lammps.sandia.gov/download.html>

sedangkan untuk *user manual* dapat diunduh di

<http://lammps.sandia.gov/doc/Manual.html>

- Ekstrak file yang telah berhasil diunduh

```
tar -zxvf lammops-stable.tar.gz
```

- Masuk ke dalam folder SRC hasil ekstrak tersebut untuk melakukan instalasi

```
cd lammops/SRC
```

- Instalasi program LAMMPS

Untuk melakukan instalasi program LAMMPS agar dapat dijalankan secara paralel dapat dilakukan dengan perintah

```
sudo make mpi
```

Setelah proses instalasi selesai maka program LAMMPS dan dapat dijalankan secara paralel menggunakan MPI.

D. Running Program

Perintah yang digunakan untuk menjalankan program LAMMPS secara paralel adalah sebagai berikut:

```
mpiexec -np # lmp_mpi -in input
```

mpiexec adalah perintah dari program MPI yang digunakan untuk menjalankan proses simulasi secara paralel.

-np (number of processor) adalah perintah untuk penggunaan jumlah prosesor dan diikuti dengan jumlah prosesor yang akan digunakan, dimana tanda # dapat diganti dengan jumlah prosesor yang ingin digunakan dalam simulasi.

lmp_mpi adalah program LAMMPS yang akan dijalankan secara paralel.

-in adalah perintah untuk memasukkan input.

input adalah file input yang akan disimulasikan.

Contoh perintah yang dapat digunakan:

```
mpiexec -np 2 lmp_mpi -in in.txt
```

E. Input Script

```

# Zainul Muzaki. 2017. Perhitungan Kapasitas Panas Bahan Tembaga.
# zn_zaki@yahoo.com

log          heating.log

units        metal
atom_style   atomic
boundary     p p p
lattice      fcc 3.597

region       mycube block 0 20 0 20 0 20
create_box   1 mycube
create_atoms 1 box
mass         1 63.546

pair_style    morse 7
pair_coeff    * * 0.3429 1.3588 2.866

neighbor      0.3 bin
neigh_modify  every 20 delay 0 check yes

compute       ep all pe/atom
dump          mydump all custom 20000 heating.dump type x y z c_ep
dump_modify   mydump append yes

dump          1 all cfg 10000 dump.deform_*.cfg mass type xs ys zs

thermo        200
thermo_style  custom step temp etotal
thermo_modify line one flush yes format 1 "%8lu" format float "%20.10g"

velocity      all create 173 87287

#####
# Berendsen
fix           myfix all nve
fix           mytfix all temp/berendsen 173 1350 0.3
fix           mypfix all press/berendsen iso 0.0 0.0 100.0
#####

run           100000

```

Lampiran 4.3 Keluaran waktu simulasi

1. Keluaran waktu simulasi (jumlah atom = 500, jumlah *core* = 1)

Loop time of 173.292 on 1 procs for 100000 steps with 500 atoms
 Performance: 49.858 ns/day, 0.481 hours/ns, 577.062 timesteps/s
 99.8% CPU use with 1 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	164.25	164.25	164.25	0.0	94.78
Neigh	5.8338	5.8338	5.8338	0.0	3.37
Comm	1.3775	1.3775	1.3775	0.0	0.79
Output	0.028097	0.028097	0.028097	0.0	0.02
Modify	1.5016	1.5016	1.5016	0.0	0.87
Other		0.2998			0.17

Nlocal: 500 ave 500 max 500 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0
 Nghost: 2254 ave 2254 max 2254 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0
 Neighs: 33669 ave 33669 max 33669 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 33669
 Ave neighs/atom = 67.338
 Neighbor list builds = 4696
 Dangerous builds = 4396
 Total wall time: 0:02:53

2. Keluaran waktu simulasi (jumlah atom = 500, jumlah *core* = 2)

Loop time of 92.7939 on 2 procs for 100000 steps with 500 atoms
 Performance: 93.110 ns/day, 0.258 hours/ns, 1077.657 timesteps/s
 99.8% CPU use with 2 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	80.668	82.772	84.876	23.1	89.20
Neigh	2.9941	3.0188	3.0435	1.4	3.25
Comm	3.5061	5.625	7.7439	89.3	6.06
Output	0.013298	0.021001	0.028703	5.3	0.02
Modify	1.1229	1.125	1.1271	0.2	1.21
Other		0.2319			0.25

Nlocal: 250 ave 260 max 240 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 1
 Nghost: 1719.5 ave 1744 max 1695 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 1
 Neighs: 16812 ave 18016 max 15608 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 1

Total # of neighbors = 33624
 Ave neighs/atom = 67.248
 Neighbor list builds = 4718
 Dangerous builds = 4438
 Total wall time: 0:01:32

3. Keluaran waktu simulasi (jumlah atom = 500, jumlah *core* = 3)

Loop time of 67.8733 on 3 procs for 100000 steps with 500 atoms
 Performance: 127.296 ns/day, 0.189 hours/ns, 1473.334 timesteps/s
 99.8% CPU use with 3 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	50.235	55.466	61.134	59.9	81.72
Neigh	1.8324	2.0357	2.1835	10.4	3.00
Comm	3.2264	9.0429	14.478	153.0	13.32
Output	0.012325	0.01785	0.028769	5.8	0.03
Modify	1.095	1.1049	1.1133	0.7	1.63
Other		0.2058			0.30

Nlocal: 166.667 ave 177 max 150 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 1 1
 Nghost: 1558.67 ave 1567 max 1543 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 2
 Neighs: 11202.3 ave 12501 max 10026 min
 Histogram: 1 0 0 0 1 0 0 0 1

Total # of neighbors = 33607
 Ave neighs/atom = 67.214
 Neighbor list builds = 4704
 Dangerous builds = 4409
 Total wall time: 0:01:07

4. Keluaran waktu simulasi (jumlah atom = 500, jumlah *core* = 4)

Loop time of 53.5159 on 4 procs for 100000 steps with 500 atoms
 Performance: 161.447 ns/day, 0.149 hours/ns, 1868.602 timesteps/s
 98.9% CPU use with 4 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	41.9	43.427	45.749	22.5	81.15
Neigh	1.5573	1.5977	1.6826	4.0	2.99
Comm	4.8585	7.283	8.8456	57.0	13.61
Output	0.013471	0.01676	0.026502	4.3	0.03
Modify	1.0059	1.0137	1.0285	0.9	1.89
Other		0.1778			0.33

Nlocal: 125 ave 129 max 122 min
 Histogram: 1 0 1 0 1 0 0 0 1
 Nghost: 1275.5 ave 1285 max 1262 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 1 0 1 0 1
 Neighs: 8418.75 ave 9159 max 8034 min
 Histogram: 2 0 0 1 0 0 0 0 0 1

Total # of neighbors = 33675
 Ave neighs/atom = 67.35
 Neighbor list builds = 4705
 Dangerous builds = 4412
 Total wall time: 0:00:53

5. Keluaran waktu simulasi (jumlah atom = 16000, jumlah *core* = 1)

Loop time of 5217.29 on 1 procs for 100000 steps with 16000 atoms
 Performance: 1.656 ns/day, 14.492 hours/ns, 19.167 timesteps/s
 99.9% CPU use with 1 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	4982	4982	4982	0.0	95.49
Neigh	175.23	175.23	175.23	0.0	3.36
Comm	12.724	12.724	12.724	0.0	0.24
Output	0.41165	0.41165	0.41165	0.0	0.01
Modify	41.977	41.977	41.977	0.0	0.80
Other		4.934			0.09

Nlocal: 16000 ave 16000 max 16000 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
 Nghost: 15238 ave 15238 max 15238 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
 Neighs: 1.0763e+06 ave 1.0763e+06 max 1.0763e+06 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 1076304
 Ave neighs/atom = 67.269
 Neighbor list builds = 4911
 Dangerous builds = 4823
 Total wall time: 1:26:57

6. Keluaran waktu simulasi (jumlah atom = 16000, jumlah *core* = 2)

Loop time of 2724.11 on 2 procs for 100000 steps with 16000 atoms
 Performance: 3.172 ns/day, 7.567 hours/ns, 36.709 timesteps/s
 99.8% CPU use with 2 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	2573.1	2580.5	2587.8	14.5	94.73
Neigh	91.048	91.055	91.063	0.1	3.34
Comm	19.461	26.82	34.18	142.1	0.98
Output	0.21369	0.22251	0.23132	1.9	0.01
Modify	22.694	22.706	22.718	0.3	0.83
Other		2.852			0.10

Nlocal: 8000 ave 8001 max 7999 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 1
 Nghost: 10107 ave 10148 max 10066 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 1
 Neighs: 538000 ave 538093 max 537907 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 1

Total # of neighbors = 1076000
 Ave neighs/atom = 67.25
 Neighbor list builds = 4915
 Dangerous builds = 4831
 Total wall time: 0:45:24

7. Keluaran waktu simulasi (jumlah atom = 16000, jumlah *core* = 3)

Loop time of 1893.77 on 3 procs for 100000 steps with 16000 atoms
 Performance: 4.562 ns/day, 5.260 hours/ns, 52.805 timesteps/s
 99.8% CPU use with 3 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	varavg	%total
Pair	1706.7	1762.8	1797.7	95.5	93.09
Neigh	59.329	60.944	62.217	15.4	3.22
Comm	14.974	51.321	109.21	577.6	2.71
Output	0.15256	0.15874	0.17075	2.1	0.01
Modify	16.169	16.291	16.445	2.9	0.86
Other		2.227			0.12

Nlocal: 5333.33 ave 5402 max 5201 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 2

Nghost: 8584.67 ave 8634 max 8550 min

Histogram: 1 0 1 0 0 0 0 0 1

Neighs: 358486 ave 365429 max 349747 min

Histogram: 1 0 0 0 0 1 0 0 1

Total # of neighbors = 1075458

Ave neighs/atom = 67.2161

Neighbor list builds = 4917

Dangerous builds = 4835

Total wall time: 0:31:33

8. Keluaran waktu simulasi (jumlah atom = 16000, jumlah *core* = 4)

Loop time of 1484.42 on 4 procs for 100000 steps with 16000 atoms
 Performance: 5.820 ns/day, 4.123 hours/ns, 67.367 timesteps/s
 99.7% CPU use with 4 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	varavg	%total
Pair	1388.6	1390.4	1394.1	5.9	93.67
Neigh	47.931	48.114	48.242	1.6	3.24
Comm	26.993	30.806	32.515	40.2	2.08
Output	0.12536	0.13591	0.16733	4.9	0.01
Modify	13.124	13.145	13.163	0.4	0.89
Other		1.784			0.12

Nlocal: 4000 ave 4025 max 3984 min

Histogram: 2 0 0 0 1 0 0 0 1

Nghost: 6528.25 ave 6563 max 6503 min

Histogram: 1 1 0 0 0 1 0 0 1

Neighs: 269018 ave 271141 max 267597 min

Histogram: 2 0 0 0 0 1 0 0 1

Total # of neighbors = 1076072

Ave neighs/atom = 67.2545

Neighbor list builds = 4914

Dangerous builds = 4829

Total wall time: 0:24:44

9. Keluaran waktu simulasi (jumlah atom = 64000, jumlah *core* = 1)

Loop time of 21123 on 1 procs for 100000 steps with 64000 atoms

Performance: 0.409 ns/day, 58.675 hours/ns, 4.734 timesteps/s
99.9% CPU use with 1 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	20203	20203	20203	0.0	95.64
Neigh	683.22	683.22	683.22	0.0	3.23
Comm	38.553	38.553	38.553	0.0	0.18
Output	1.6069	1.6069	1.6069	0.0	0.01
Modify	173.06	173.06	173.06	0.0	0.82
Other		23.69			0.11

Nlocal: 64000 ave 64000 max 64000 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Nghost: 35162 ave 35162 max 35162 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Neighs: 4.3034e+06 ave 4.3034e+06 max 4.3034e+06 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 4303395

Ave neighs/atom = 67.2405

Neighbor list builds = 4959

Dangerous builds = 4919

Total wall time: 5:52:03

10. Keluaran waktu simulasi (jumlah atom = 64000, jumlah *core* = 2)

Loop time of 10704.1 on 2 procs for 100000 steps with 64000 atoms

Performance: 0.807 ns/day, 29.733 hours/ns, 9.342 timesteps/s
99.9% CPU use with 2 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	10167	10171	10175	4.2	95.02
Neigh	348.87	349.44	350.02	3.1	3.26
Comm	65.413	69.995	74.578	54.8	0.65
Output	0.82246	0.83505	0.84764	1.4	0.01
Modify	93.84	93.932	94.023	0.9	0.88
Other		18.55			0.17

Nlocal: 32000 ave 32081 max 31919 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 1

Nghost: 21894 ave 21907 max 21881 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 1

Neighs: 2.15199e+06 ave 2.15884e+06 max 2.14514e+06 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 1

Total # of neighbors = 4303981

Ave neighs/atom = 67.2497

Neighbor list builds = 4955

Dangerous builds = 4911

Total wall time: 2:58:24

11. Keluaran waktu simulasi (jumlah atom = 64000, jumlah *core* = 3)

Loop time of 7262.22 on 3 procs for 100000 steps with 64000 atoms
 Performance: 1.190 ns/day, 20.173 hours/ns, 13.770 timesteps/s
 99.8% CPU use with 3 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	varavg	%total
Pair	6864.8	6868	6871.9	3.6	94.57
Neigh	234.8	236.58	239.84	15.0	3.26
Comm	59.054	62.607	68.108	49.9	0.86
Output	0.5838	0.59457	0.614	1.8	0.01
Modify	74.753	75.176	76.017	6.9	1.04
Other		19.28			0.27

Nlocal: 21333.3 ave 21600 max 21194 min
 Histogram: 2 0 0 0 0 0 0 0 1
 Nghost: 17843.7 ave 18212 max 17604 min
 Histogram: 1 1 0 0 0 0 0 0 1
 Neighs: 1.43472e+06 ave 1.45315e+06 max 1.42521e+06 min
 Histogram: 2 0 0 0 0 0 0 0 1

Total # of neighbors = 4304175
 Ave neighs/atom = 67.2527
 Neighbor list builds = 4953
 Dangerous builds = 4907
 Total wall time: 2:01:02

12. Keluaran waktu simulasi (jumlah atom = 64000, jumlah *core* = 4)

Loop time of 6075.42 on 4 procs for 100000 steps with 64000 atoms
 Performance: 1.422 ns/day, 16.876 hours/ns, 16.460 timesteps/s
 99.1% CPU use with 4 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	varavg	%total
Pair	5586.9	5604.2	5617	15.6	92.24
Neigh	192.16	193.12	193.51	4.0	3.18
Comm	168.15	180.93	198.28	90.3	2.98
Output	0.48703	0.50229	0.5153	1.4	0.01
Modify	74.395	75.059	76.104	7.4	1.24
Other		21.62			0.36

Nlocal : 16000 ave 16094 max 15918 min
 Histogram : 1 0 0 1 0 1 0 0 1
 Nghost : 15346 ave 15398 max 15290 min
 Histogram : 1 0 0 0 1 0 1 0 0 1
 Neighs : 1.07593e+06 ave 1.08311e+06 max 1.06921e+06 min
 Histogram : 1 0 0 1 0 1 0 0 0 1

Total # of neighbors = 4303736
 Ave neighs/atom = 67.2459
 Neighbor list builds = 4955
 Dangerous builds = 4911
 Total wall time: 1:41:15

Lampiran 4.4 Data Keluaran Hasil Simulasi

1. Keluaran hasil simulasi dengan jumlah atom 500.

Step	Temperatur (K)	Energi Total (eV)	Step	Temperatur (K)	Energi Total (eV)
0	173.0000	-1736.89	53000	757.3671	-1638.78
1000	147.6593	-1728.35	54000	833.9259	-1637.62
2000	186.1621	-1725.32	55000	778.5502	-1635.78
3000	193.4997	-1723.26	56000	790.0688	-1633.87
4000	206.3031	-1721.75	57000	851.8953	-1632.37
5000	227.4164	-1720.14	58000	812.3730	-1630.59
6000	244.0530	-1718.58	59000	866.7801	-1629.12
7000	237.7391	-1716.90	60000	870.0902	-1627.43
8000	253.4736	-1715.39	61000	924.8775	-1626.03
9000	269.2934	-1713.96	62000	887.0011	-1623.53
10000	282.7827	-1712.23	63000	884.7794	-1622.23
11000	308.1682	-1710.61	64000	914.7693	-1620.23
12000	301.2687	-1708.92	65000	873.0359	-1618.70
13000	327.6851	-1707.26	65200	968.4527	-1618.62
14000	324.9392	-1705.71	65400	943.8105	-1618.20
15000	360.0421	-1704.22	65600	928.9513	-1617.58
16000	355.1094	-1702.39	65800	907.1158	-1617.30
17000	359.4270	-1700.70	66000	941.9858	-1617.03
18000	363.8844	-1698.93	66200	904.9107	-1616.36
19000	387.6858	-1697.40	66400	902.9189	-1615.54
20000	411.4194	-1696.01	66600	932.6662	-1615.61
21000	400.7416	-1693.92	66800	987.3424	-1615.53
22000	408.3378	-1692.48	67000	967.3563	-1614.98
23000	421.4810	-1690.87	67200	985.6725	-1615.31
24000	438.5292	-1688.92	67400	1001.1358	-1614.77
25000	469.1255	-1687.45	67600	930.4236	-1613.85
26000	483.0058	-1686.26	67800	962.7513	-1613.65
27000	466.3097	-1684.05	68000	951.5838	-1613.54
28000	502.9498	-1682.34	68200	936.7418	-1612.42
29000	522.9631	-1680.80	68400	969.7119	-1612.80
30000	504.4361	-1678.99	68600	1001.4532	-1612.30
31000	518.1979	-1676.94	68800	979.5005	-1612.11
32000	516.3542	-1675.21	69000	935.5800	-1611.63
33000	509.6755	-1673.42	69200	991.5204	-1611.84
34000	576.7065	-1672.54	69400	1008.6443	-1611.03
35000	569.1975	-1670.60	69600	988.6663	-1611.20
36000	603.1497	-1668.79	69800	997.5198	-1610.57
37000	601.0586	-1667.18	70000	975.9282	-1610.14
38000	600.7897	-1665.03	71000	968.4648	-1607.86
39000	602.0537	-1663.19	72000	1034.1783	-1605.97
40000	628.8130	-1661.86	73000	1006.1741	-1604.40
41000	634.4018	-1659.80	74000	1000.5687	-1602.46
42000	676.9712	-1658.86	75000	1033.4454	-1600.73
43000	732.2321	-1657.23	76000	1073.7566	-1599.51
44000	688.4726	-1654.94	77000	1066.0940	-1597.98
45000	708.3568	-1653.44	78000	1097.0696	-1595.43
46000	713.9035	-1651.58	79000	1090.9321	-1594.45
47000	739.6301	-1650.26	80000	1095.2695	-1592.44
48000	741.8435	-1648.28	81000	1164.5392	-1591.33
49000	736.8741	-1646.33	82000	1135.8254	-1588.87
50000	773.6009	-1644.56	83000	1163.9588	-1587.20
51000	743.5700	-1642.59	84000	1209.5722	-1585.62
52000	779.0523	-1641.10	85000	1185.1681	-1583.78
53000	757.3671	-1638.78			

Step	Temperatur (K)	Energi Total (eV)
86000	1193.210888	-1581.71
87000	1183.301285	-1579.97
88000	1171.757476	-1577.92
89000	1257.810554	-1576.61
90000	1236.369754	-1574.53
91000	1250.762324	-1572.85
92000	1275.10053	-1571.54
93000	1291.159745	-1569.69

Step	Temperatur (K)	Energi Total (eV)
94000	1280.557675	-1568.05
95000	1324.457738	-1566.77
96000	1326.303754	-1564.53
97000	1281.848262	-1562.60
98000	1299.508857	-1560.71
99000	1311.548987	-1558.75
94000	1280.557675	-1568.05

2. Keluaran hasil simulasi dengan jumlah atom 64000.

Step	Temperatur (K)	Energi Total (eV)
0	173	-222319.04
1000	162.6353	-221231.37
2000	186.0413	-220826.68
3000	201.3889	-220586.23
4000	212.8235	-220379.19
5000	224.8467	-220176.83
6000	237.0557	-219972.82
7000	248.6043	-219768.20
8000	259.1466	-219561.56
9000	271.5854	-219359.33
10000	282.6878	-219152.70
11000	295.0843	-218947.13
12000	308.0531	-218738.04
13000	316.9605	-218528.16
14000	332.6996	-218322.86
15000	342.1459	-218111.04
16000	353.9898	-217900.95
17000	366.3695	-217689.28
18000	378.2661	-217479.37
19000	389.9536	-217265.16
20000	400.2221	-217049.63
21000	412.4834	-216838.18
22000	424.4016	-216623.31
23000	436.8872	-216410.10
24000	447.3101	-216192.41
25000	460.218	-215974.93
26000	470.2012	-215758.69
27000	483.9896	-215546.84
28000	495.8552	-215328.41
29000	506.8845	-215111.03
30000	519.1448	-214890.80
31000	531.9151	-214679.52
32000	542.4888	-214456.78
33000	553.7564	-214236.79
34000	565.7522	-214015.30
35000	575.1985	-213795.91
36000	588.6716	-213582.91
37000	600.407	-213358.87
38000	613.2183	-213143.71
39000	624.5199	-212917.42
40000	632.8331	-212698.39
41000	649.9139	-212483.50
42000	657.8805	-212258.28

Step	Temperatur (K)	Energi Total (eV)
43000	672.4757	-212037.47
44000	685.1858	-211820.81
45000	695.6087	-211596.02
46000	707.135	-211374.14
47000	717.2043	-211154.72
48000	729.996	-210930.22
49000	738.3616	-210704.59
50000	756.3435	-210489.87
51000	768.5267	-210270.18
52000	777.5805	-210044.55
53000	788.1435	-209821.14
54000	800.0279	-209599.50
55000	810.0653	-209374.78
56000	830.1193	-209164.63
57000	835.0352	-208935.65
58000	846.4527	-208707.85
59000	860.5803	-208485.07
60000	874.6092	-208269.02
61000	879.9152	-208040.12
62000	893.2259	-207826.15
63000	909.0464	-207600.57
64000	921.4276	-207377.96
65000	931.9217	-207153.78
66000	941.85	-206930.96
67000	956.0733	-206708.21
68000	963.0455	-206480.88
69000	979.5979	-206261.70
70000	989.9087	-206033.87
71000	1003.701	-205812.17
72000	1014.065	-205587.56
73000	1025.291	-205365.00
74000	1038.567	-205141.63
75000	1049.654	-204917.21
76000	1061.336	-204691.86
77000	1071.317	-204470.38
78000	1081.934	-204242.06
79000	1089.252	-204010.15
80000	1108.482	-203798.24
81000	1122.312	-203573.43
82000	1128.352	-203342.36
83000	1143.153	-203123.66
84000	1152.483	-202891.63
85000	1169.459	-202668.63

Step	Temperatur (K)	Energi Total (eV)
86000	1179.278	-202439.42
87000	1188.093	-202208.59
88000	1202.239	-201982.08
89000	1214.887	-201764.66
90000	1225.537	-201541.67
91000	1237.48	-201312.03
92000	1247.999	-201087.68
93000	1259.23	-200858.27
94000	1268.918	-200623.75
95000	1282.701	-200403.07
96000	1297.58	-200182.34
97000	1315.864	-199964.55
98000	1325.775	-199734.82
99000	1330.38	-199488.39
100000	1348.129	-199274.75