

Основы МД: Термостатирование и баростатирование

Автор *armeev*

Создано 07/15/2011 - 15:13

Опубликовано *armeev* в Пт, 07/15/2011 - 15:13

Описание задачи

Данная задача посвящена рассмотрению поведения системы при различных режимах термостатирования и баростатирования.

Цель:

изучение работы базовых алгоритмов молекулярной динамики на примере моделирования инертного газа (аргона).

Расчеты осуществляются при помощи программного пакета *Gromacs*.

Подготовка к работе

Для выполнения задачи необходим компьютер, работающий под *OS Linux*, либо родственными ОС. Расчеты молекулярной динамики рекомендуется выполнять на высокопроизводительных компьютерных кластерах.

Необходимое ПО :

- *Gromacs* - осуществляет расчеты молекулярной динамики (в данной статье использована версия 4.5.4) как в обычной, так и в MPI версиях (для распределенных вычислений на кластере)
- *Gnuplot* - используется для построения графиков (в статье рассмотрена версия 5)
- *LAM-MPI* - драйвер, необходимый для распределенных вычислений

Для удобства работы рекомендуем использовать файловые менеджеры, например, *Midnight Commander*.

Система представляет собой 1000 атомов инертного газа Аргона в коробке 10x10x10 нм.

Описание и подготовка подробно описаны [в другой статье](#) [1].

Скачайте архив в интересующую вас директорию

```
wget ?????? ?? ??????
```

Распакуйте его

```
tar -xvf file.tar.gz
```

Режимы термостатирования

Мы будем использовать 4 различных термостата

- Berendsen
- Nose-Hoover
- Nose-Hoover with chains
- Velocity rescaling thermostat

Термостат Берендсена.

В данном термостате температура системы корректируется так, что отклонение экспоненциально затухает с некоторой постоянной времени τ .

Термостат Берендсена подавляет колебания кинетической энергии системы и, следовательно, не может воспроизводить траектории в соответствии с каноническим ансамблем.

Влияние времени релаксации на поведение системы при нагревании с нуля Кельвинов

Для этого необходимо рассмотреть скрипт *do.sh*

do.sh

```
#!/bin/bash
```

```
l="1 10 100 1000 5000";          #?????? ?????????????? ??????? ???????????

for a in $l;
do

cat << _EOF_ > NVTBER${a}ps.mdp #?????? ??? ? ??????????? ??
title                          = OPLS Ar NVT equilibration in berendsen thermostat
; Run parameters
integrator                    = md                ; leap-frog ???????????
nsteps                        = 5000000            ; ?????????????? ??????
dt                            = 0.002              ; ??? ? ??
; Output control
nstxout                       = 1000               ; ??????????? ?????????????? ??? ? 1000 ?????
nstvout                       = 0                  ; ?? ?????????????? ??????????
nstenergy                     = 1000               ; ?????????????? ?????????????? ??? ? 1000 ?????
nstlog                        = 1000               ; ??????????? ??? ??? ? 1000 ?????
; Neighborsearching
ns_type                       = grid               ; ??????? ??????????? ?? ??????
nstlist                       = 5                  ; ?????????????? ?????? ?? ?????????????? ??????? ?????????
rlist                         = 1.0                ; ??????? ?????????????? ?????????????? ??????? ?????????
rcoulomb                      = 1.0                ; ??????? ?????????????? ?????????????????????????? ?????????????????????
rvdw                          = 2.0                ; ??????? ?????????????? ???-???-????????????????? ?????????????????????
; Electrostatics
coulombtype                   = cut-off             ; ??????? ?????????????? ?????????????????????????? ?????????????????????
; Temperature coupling is on
tcoupl                        = berendsen           ; Berendsen thermostat
tc-grps                       = AR                  ; ??????? ??? ??????????????????????????
tau_t                         = $a                 ; ?????? ???????????????
ref_t                         = 300                 ; ?????????????????? ??????????????
; Pressure coupling is off
pcoupl                        = no                  ; ?? ?????????????????????????? ? NVT
; Periodic boundary conditions
pbc                           = xyz                ; ??????? ?????????????????? ?????????????????????? ?????????? ??????
```

```
; Dispersion correction
DispCorr          = EnerPres          ; ?????? ?????????? ? ????????? ?????????????????
; Velocity generation
gen_vel           = no                ; ?? ??????? ?????????? ?? ???????????
gen_temp          = 0                 ; ??????????? ??????????????
gen_seed          = 6                 ; ????? ????? ??? ?????????????????
_EOF_             #????????????????
grompp_4.5.4 -f NVTBER${a}ps.mdp -c em.gro -p topol.top -n indx.ndx -o NVTBER${a}ps.t
pr
### ???
cat << _EOF_ > NVTBER${a}ps.sh #????????? ??????? ?????????? ?????????????? ??????
#!/bin/sh
#PBS -N ARGON_BE
#PBS -l nodes=1:ppn=2             #????? ?????, 2 ?????????????
#PBS -q day
#PBS -V

lamboot -v -ssi boot tm
cd ${PWD}
mpirun C mdrun_4.5.4_MPI -v -deffnm NVTBER${a}ps
lamhalt -v $PBS_NODEFILE
_EOF_                             #????????????? ???
qsub NVTBER${a}ps.sh              #????????? ??????? ? ?????????
done
```

Точка с запятой обозначают комментарий в файле конфигурации, решетка - комментарий в скрипте, таким образом, параметры `vdwtype` и `rvdw_switch` изначально закомментированы.

У команды *grompp_4.5.4*, создающей бинарные файлы для запуска молекулярной динамики (*mdrun*), есть несколько ключей

- f файл на вход с параметрами МД (в данном случае файл конфигурации)
- c файл структуры системы
- p файл топологии
- o создаваемый бинарный файл

Если вы не используете систему постановки задач, закомментируйте с помощью `#` все после *grompp* и до *done*, далее запускайте каждую обработку по отдельности с помощью *mdrun*.

Запустите скрипт *do.sh*

```
./do.sh
```

Теперь в директории появится россыпь файлов вида *NVTBER(цифра)ps.расширение*.

Если вы не использовали систему постановки задач, то необходимо запустить их обработку вручную по очереди.

Например, для времени релаксации 100:

```
mdrun_4.5.4 -v -deffnm NVTBER100ps
```

В ином случае - проверьте с помощью команды *qstat*, запустились ли ваши задачи.

Если все хорошо - можно подождать или приступить к дальнейшему выполнению задачи.

После завершения расчетов запустите скрипт *energy.sh*

```
./energy.sh
```

Рассмотрим его подробно:

energy.sh

```
#!/bin/bash

l="1 10 100 1000 5000";  #????? ?? ?? ?????? ??????????

for a in $l;
do

g_energy_4.5.4 -f NVTBER${a}ps.edr -o energyNVT${a}ps.xvg < enter.txt
#????????? ?????? ?????????????, ??? txt ?????????? ????? ??????????
done
gnuplot5 gnuplotenergy1.scr #??????? eps ????, scr ??? ?????????? ??????????
```

Файл *enter.txt* содержит в себе одну цифру и два перехода на новую строку, что задает расчет температуры, если удалить файл или закомментировать его прикрепление, то можно задавать их вручную.

Скрипт *energy.sh* создаст файлы вида *energyNVT(время релаксации)ps.xvg*, их можно просмотреть в текстовом редакторе или с помощью *xmgrace*.
Например, для времени 1000:

```
xmgrace energyNVT1000ps.xvg
```

Скрипт *gnuplotenergy1.scr* обрабатывает только файлы вышеупомянутого вида с заданными шагами интегрирования и на выходе дает файл *energy1.eps*

Скрипт можно изменить, например, толщина линий задается ключом *lw 2* после каждого файла. Параметр *set key* задает положение легенды, например, *set key bottom right* поместит легенду в нижний правый угол.
Параметр *set xrange* задает масштаб оси абсцисс.

Далее, используя скрипт *eps_to_img.sh*, конвертируем eps файл в png

```
./eps_to_img.sh
```

(Так же можно изменить разрешение и формат файла, изменив *eps_to_img.sh*)

Теперь можно просмотреть получившийся график

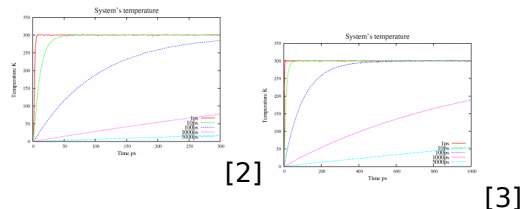
```
???? ?? ?????????? ? Linux ??? ? Windows ? ???????????? X ??????????:

display energy1.tif
```

????? ??????? ?????, ?????????, ??? ?????? ?????????? ????????? ?????? ?????? ???:

scp student@biosim.moldyn.org:/???? ?? ?????/energy1.tif /???? ?????????/

Должны получиться графики такого вида:



Как и ожидалось, температура возрастает экспоненциально, практически отсутствуют флуктуации.

Влияние времени релаксации на поведение системы при поддержании температуры 300 К

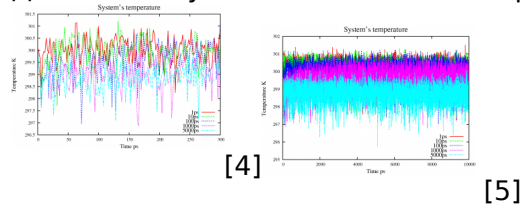
Для этого измените файл *do.sh* следующим образом:

do.sh

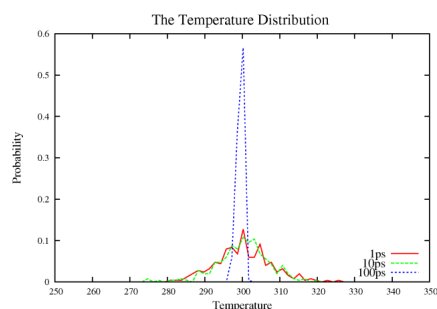
```
#!/bin/bash
...
...
...
; Velocity generation
gen_vel      = yes           ; ?????? ?????????? ?? ????????????
gen_temp     = 300           ; ?????????? ??????????????
gen_seed     = 6             ; ?????? ?????? ??? ??????????????
...
...
...
done
```

Постройте графики так же как и в случае разогрева системы.

Должны получиться аналогичные графики:



Гистограмма распределения температур:



[6]

Температура держится в очень узком интервале и флуктуации незначительны. Этот термостат хорошо поддерживает необходимую температуру, но не задает распределение энергии, нарушая канонический ансамбль.

Nose-Hoover

Алгоритм Берендсена удобен для приведения системы к равновесной температуре, но после ее достижения гораздо важнее моделировать корректный NVT ансамбль. Это невозможно при использовании термостата Берендсена.

Для корректного моделирования канонического ансамбля можно использовать алгоритм Nose-Hoover'a. Его суть заключается в том, что гамильтониан системы изменяется путем добавления к нему члена, описывающего тепловой резервуар, а сообщение с ним добавляется в уравнения движения.

В связи с тем что происходит постоянный периодический обмен энергии, возникают ее колебания, что лучше описывает канонический ансамбль

Перейдите в директорию */Nose-Hoover*

```
cd Nose-Hoover
```

Влияние времени релаксации на поведение системы при нагревании с нуля Кельвинов

Для запуска расчетов так же запускается скрипт *do.sh*, от предыдущих он отличается следующим:

do.sh

```
#!/bin/bash
```

```
l="1 10 100 1000 5000";          #?????? ???????????? ??????? ???????????
```

```
for a in $l;
do
```

```
cat << _EOF_ > NVTNH${a}ps.mdp #?????? ??? ???? ?????????? ??
```

```
...
```

```
...
```

```
...
```

```
; Temperature coupling is on
```

```
tcoupl          = nose-hoover      ; Nose-Hoover thermostat
```

```
tc-grps         = AR               ; ?????? ??? ???????????????????
```

```
...
```

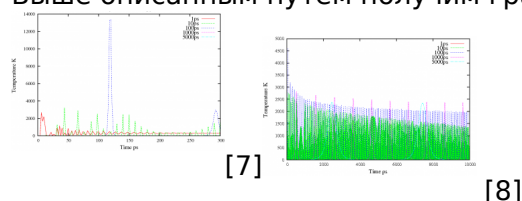
```
...
```

```
...
```

```
grompp_4.5.4 -f NVTNH${a}ps.mdp -c em.gro -p topol.top -n indx.ndx -o NVTNH${a}ps.tpr
### ???
cat << _EOF_ > NVTNH${a}ps.sh #??????? ?????? ??????? ??????????? ??????
#!/bin/sh
#PBS -N ARGON_NH
...
...
...
mpirun C mdrun_4.5.4_MPI -v -deffnm NVTNH${a}ps
...
...
...
done
```

То есть изменился лишь режим термостатирования и названия файлов.

Выше описанным путем получим графики:



Из графиков видно, что вместо того, чтобы поддерживать температуру на нужной отметке, алгоритм скачкообразно изменяет ее с 0K до некоторых очень высоких значений температуры. Средняя температура таких колебаний близка к 300K так что формально термостат работает. По-видимому, проблема заключается в большой разнице температур при малой теплоемкости исследуемой системы.

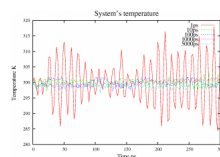
Влияние времени релаксации на поведение системы при поддержании температуры 300 K

Как и в случае термостата Берендсена, необходимо изменить скрипт *do.sh*:

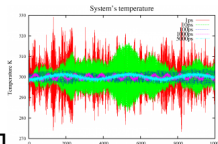
do.sh

```
#!/bin/bash
...
...
...
; Velocity generation
gen_vel      = yes          ; ?????? ?????????? ?? ???????????
gen_temp     = 300          ; ?????????? ??????????????
gen_seed     = 6            ; ?????? ?????? ??? ???????????????
...
...
...
done
```

Получите графики:

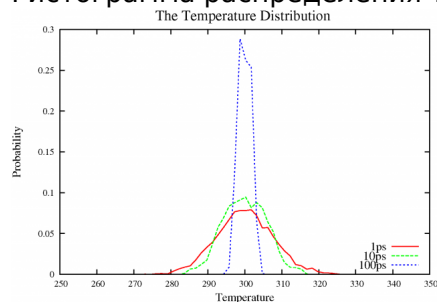


[9]



[10]

Гистограмма распределения температур:



[11]

Как видно из графиков, на всем временном промежутке температура близка к 300K, но ее изменение явно не соответствует хаотическому поведению.

Nose-Hoover with chains

Динамика Nose-Hoover'a неприменима для несложных систем, так как в этом случае с определенной вероятностью в энергообмене будет задействован только некоторый участок фазового пространства.

Для того, чтобы исправить этот недостаток применяются цепи Nose-Hoover'a, которые представляют собой набор термостатов, каждый из которых имеет свою температуру и способен обмениваться энергией с системой и другими термостатами. Если устремить количество термостатов к бесконечности, то система гарантировано будет эргодичной, так как каждый атом будет иметь одинаковую вероятность энергообмена с термостатом. На практике же было показано, что включение даже небольшого количества цепей сильно повышает качество термостатирования.

Перейдите в директорию */Nose-Hoover_with_chains*

```
cd Nose-Hoover_with_chains
```

Влияние времени релаксации на поведение системы при нагревании с нуля Кельвинов

Для запуска расчетов так же запускается скрипт *do.sh*, от предыдущих он отличается следующим:

do.sh

```
#!/bin/bash
```

```
l="1 10 100 1000 5000";          #?????? ???????????? ??????? ????????????
```

```
for a in $l;
do
```

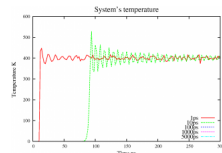
```
cat << _EOF_ > NVTNH${a}ps.mdp #???????? ???? ???????????? ??
```



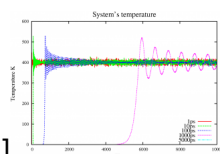
```
...
integrator      = md-vv          ; ?????????? velocity Verle
...
; Temperature coupling is on
tcoupl         = nose-hoover    ; Nose-Hoover thermostat
tc-grps        = AR            ; ?????? ??? ??????????????????
...
; Velocity generation
gen_vel        = no            ; ?? ?????? ?????????? ?? ??????????
gen_temp       = 0             ; ?????????? ??????????????
...
grompp_4.5.4 -f NVTNH${a}ps.mdp -c em.gro -p topol.top -n indx.ndx -o NVTNH${a}ps.tpr
#?? ???
cat << _EOF_ > NVTNH${a}ps.sh #??????? ?????? ???????? ?????????? ??????
#!/bin/sh
#PBS -N ARGON_NH
...
...
...
mpirun C mdrun_4.5.4_MPI -v -deffnm NVTNH${a}ps
...
...
...
done
```

То есть изменился режим термостатирования и интегратор, так как leap-frog не поддерживает режим цепей Nose-Hoover'a.

Выше описанным путем получим графики:



[12]



[13]

В отличие от обычного термостата Nose-Hoover'a, температура поднимается и колеблется вблизи необходимого уровня. 400K?

Влияние времени релаксации на поведение системы при поддержании температуры 300 K

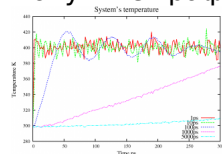
Как и в случае термостата Берендсена, необходимо изменить скрипт *do.sh*:

do.sh

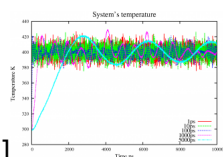
```
#!/bin/bash
...
...
...
; Velocity generation
gen_vel      = yes            ; ??????? ?????????? ?? ??????????
gen_temp     = 300           ; ?????????? ??????????????
...
...
```

...
done

Получите графики:

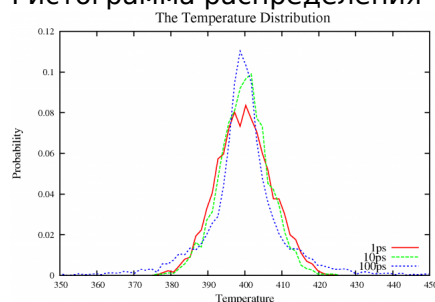


[14]



[15]

Гистограмма распределения температур:



[16]

Velocity rescaling thermostat

Данный термостат является модифицированным термостатом Берендсена со стохастической прибавкой к кинетической энергии, что обеспечивает ее верное распределение.

Перейдите в директорию `/v-resc`

```
cd v-resc
```

Влияние времени релаксации на поведение системы при нагревании с нуля Кельвинов

Для запуска расчетов так же запускается скрипт `do.sh`, от предыдущих он отличается следующим:

do.sh

```
#!/bin/bash
```

```
l="1 10 100 1000 5000";          #?????? ???????????? ??????? ????????????
```

```
for a in $l;
do
```

```
cat << _EOF_ > NVTVR${a}ps.mdp #?????? ???? ??????????? ??
```

```
...
...
...
```

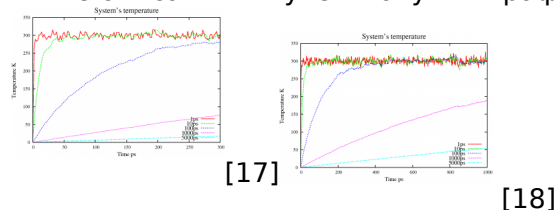
```
; Temperature coupling is on
```

```
tcoupl          = V-rescale      ; Nose-Hovver thermostat
```

```
tc-grps          = AR                ; ?????? ??? ??????????????????
...
...
...
grompp_4.5.4 -f NVTVR${a}ps.mdp -c em.gro -p topol.top -n indx.ndx -o NVTVR${a}ps.tpr
### ???
cat << _EOF_ > NVTVR${a}ps.sh #??????? ?????? ???????? ?????????? ?????
#!/bin/sh
#PBS -N ARGON_VR
...
...
...
mpirun C mdrun_4.5.4_MPI -v -deffnm NVTVR${a}ps
...
...
...
done
```

То есть изменился лишь режим термостатирования и названия файлов.

Выше описанным путем получим графики:



Из графиков видно, что температура поднимается до необходимого уровня по закону, близкому к экспоненциальному, и со временем изменяется хаотично. Таким образом данный термостат позволяет симулировать флуктуации температуры.

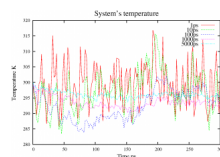
Влияние времени релаксации на поведение системы при поддержании температуры 300 К

Как и в случае термостата Берендсена, необходимо изменить скрипт *do.sh*:

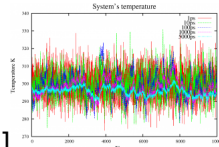
do.sh

```
#!/bin/bash
...
...
...
; Velocity generation
gen_vel          = yes                ; ?????? ?????????? ?? ??????????
gen_temp         = 300                ; ?????????? ??????????????
gen_seed         = 6                  ; ?????? ?????? ??? ??????????????
...
...
...
done
```

Получите графики:

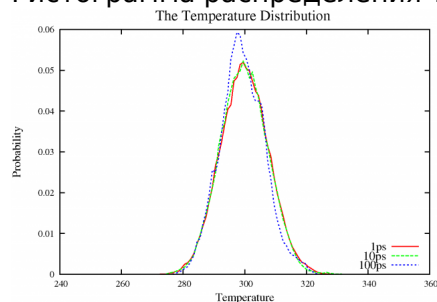


[19]



[20]

Гистограмма распределения температур:



[21]

Источник: http://www.molsim.org/ru/methods/MD_basics_2

Ссылки:

[1] http://molsim.org/ru/methods/MD_basics_0

[2] <http://www.molsim.org/node/176>

[3] <http://www.molsim.org/node/177>

[4] <http://www.molsim.org/node/174>

[5] <http://www.molsim.org/node/175>

[6] <http://www.molsim.org/node/199>

[7] <http://www.molsim.org/node/182>

[8] <http://www.molsim.org/node/183>

[9] <http://www.molsim.org/node/180>

[10] <http://www.molsim.org/node/181>

[11] <http://www.molsim.org/node/200>

[12] <http://www.molsim.org/node/184>

[13] <http://www.molsim.org/node/185>

[14] <http://www.molsim.org/node/186>

[15] <http://www.molsim.org/node/187>

[16] <http://www.molsim.org/node/201>

[17] <http://www.molsim.org/node/188>

[18] <http://www.molsim.org/node/189>

[19] <http://www.molsim.org/node/190>

[20] <http://www.molsim.org/node/191>

[21] <http://www.molsim.org/node/207>