

Создание структуры и топологии системы для моделирования (газ аргон)

Автор *gorkovets*

Создано 07/21/2011 - 11:22

Опубликовано gorkovets в Чт, 07/21/2011 - 11:22

Описание задачи

Данная задача посвящена созданию и минимизации системы для моделирования на примере газа аргона.

Цель.

Создание структуры и топологии системы для моделирования, а затем минимизация системы и расчет молекулярной динамики в микроканоническом ансамбле. 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 :

1 *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)

2 *Gnuplot* - используется для построения графиков (в статье рассмотрена версия 5)

3 *LAM-MPI* - драйвер, необходимый для распределенных вычислений

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

Описание системы и ее подготовка.

Система представляет собой инертный газ аргон в коробке 10x10x10 нм. Скачайте архив в интересующую Вас директорию

```
wget http://molsim.org/sites/default/files/tutor01.tar\_0.gz [1]
```

Распакуйте его

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

Создаем систему с помощью файла *argongen.pl*, в качестве аргумента выступает необходимое количество атомов. *Argongen.pl* создает .gro-файл и файл топологии (*.top). Например, мы вводим

```
./argongen.pl 1000
```

На выходе мы получим файлы *argon1000.gro* и *topol1000.top*

Рассмотрим скрипт *Argongen.pl*, создающий эти файлы.

```
#!/usr/bin/perl
$number=$ARGV[0];      #?????????? ??????????, ? ?????? ?????? ??? 1000
use POSIX;             #???????????? ??????? ??????? ? ?????????

#????????? ?????? ????? ? ???????????????, ????? ??????? ?? ??????:
$box_size=POSIX::ceil($number**(1/3));
printf ("The size of the cub's edge = $box_size\n");

#????????? ??????????????? ????????????? ??????? ??? ?????????????????? ??????:
$num=($box_size**3);
printf ("corrected number of atoms = $num\n");

#????????? ? ?????????? gro-????? ?? ??????? ? ?????? ??????????????? ???????
{open(TE,">argon$num.gro") || die "Can't create the main file";
$i=1;$h=0;$r=1;
print(TE "ARGON\n");
print(TE "$num\n");

#????????? ?????? ?????????????? ?? ??????? ? ?????? ?????????????????? ???????
open(TT,">topol$num.top") || die "I can't create topology file";#?????????
print TT ("\#include \"oplsaa.ff/forcefield.itp\" \n");
print TT (" \n");
print TT ("[ moleculetype ]\n");
print TT ("; Name          nrexcl\n");
print TT ("ARGON          5 \n");
print TT (" \n");
print TT (" \n");

#????? ??? ?????????????? ?????????????
for ($xi=0; $xi<=($box_size-1); $xi++)
{for ($yi=0; $yi<=($box_size-1); $yi++)
{for ($zi=0; $zi<=($box_size-1); $zi++)
{
$l="GRO";          #??? ?????????
$ar="Ar";          #??? ???????
$c=0;              #??????
$m=40;             #??????
$x=($xi/$box_size*10); #?????????????? ? ?????????????????? ? ??????????????????
$y=($yi/$box_size*10);
$z=($zi/$box_size*10);
if ($r==10){$h=$h+1;$r=1}else{$r=$r+1}

#????????? ??????? ? ?????? ? ??????? ??????????
print TE sprintf "%5u%5s%5s%5u%8.3f%8.3f%8.3f\n", $h,$l,$ar,$i,$x,$y,$z;
print TT sprintf "%5u%5s%5u%6s%5s%6u%5u%5u\n", $i,$ar,$h,$l,$ar,$i,$c,$m;
$i=$i+1}}}}

#????????? ?????????????????? ??????? ? ?????? ?????????????????
print TT ("[ system ]\n");
print TT ("; Name\n");
print TT ("ARGON\n");
print TT (" \n");
print TT ("[ molecules ]\n");
print TT ("; Compound          #mols\n");
print TT ("ARGON          1\n");
close(TT);          #????????????? ?????????
```

```
close(TE);  
}
```

Формат gro-файла:

```
?????_????????? ??????????_????????? ???_????? ?????_????? ??????????_x_y_z
```

Формат файла топологии:

```
?????_????? ???_????? ?????_????????? ??????????_????????? ??? ? ??????????_????????? ????  
? ??????
```

Поместите наш газ в необходимую коробку:

```
editconf -f argon1000.gro -o argon1000_newbox.gro -c -box 10 10 10 -bt cubic
```

Будет использован файл *argon1000.gro*, запись данных пойдет в *argon1000_newbox.gro*, опция -c говорит, что система будет помещена в центр коробки, -box позволяет установить размеры коробки, -bt cubic задает форму коробки, в данном случае — куб.

Затем необходимо подготовить систему, а именно — минимизировать ее энергию. Для этого используйте следующую команду:

```
grompp -f en_minim.mdp -c argon1000_newbox.gro -p topol1000.top -o em1000.tpr
```

Опция -f указывает на файл, в котором прописаны параметры действия, совершаемого над системой, -c входной файл системы, -p файл топологии, -o выходной файл.
Для запуска МД используется:

```
mddrun -v -deffnm em1000
```

Опция -v принуждает печатать всю возможную информацию в лог, -deffnm общее имя группы файлов, которые мы используем.

Далее запустите МД в NVE-ансамбле, то есть сохраняется количество вещества, объем и энергия системы. Делается это аналогично минимизации энергии системы.

```
grompp -f nve_conf.mdp -c em1000.gro -p topol1000.top -o nve1000.tpr  
mddrun -deffnm nve1000
```

Источник: http://www.molsim.org/ru/methods/md_basics_0

Ссылки:

[1] http://molsim.org/sites/default/files/tutor01.tar_0.gz