

# Основы МД: Шаг интегрирования, радиусы обрезания, сохранение энергии

Автор *armeev*

Создано 07/15/2011 - 14:55

Опубликовано armeev в Пт, 07/15/2011 - 14:55

## Описание задачи

Данная задача посвящена рассмотрению влияния шага интегрирования и радиусов обрезания при расчете молекулярной динамики в микроканоническом ансамбле.

## 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 http://molsim.org/sites/default/files/tutor01.tar.gz [2]
```

Распакуйте его

```
tar -xvf tutor01.tar.gz
```

## Влияние шага интегрирования

Перейдите в директорию *istep*

```
cd tutorial/istep
```

Команда *ls* возвращает следующий список файлов

```
ls
do.sh          energy.sh  eps_to_img.sh  topol1000.top
em1000.gro     enter.txt  gnuplotenergy1.scr
```

Где

- *do.sh* - основной скрипт, варьирующий шаг интегрирования.
- *energy.sh*, *eps\_to\_img.sh*, *enter.txt*, *gnuplotenergy1.scr* - файлы, необходимые для обработки данных и построения графиков.
- *em1000.gro* и *topol1000.top* - файлы, описывающие систему из тысячи атомов аргона после минимизации энергии.

Рассмотрим подробно основной скрипт

### *do.sh*

```
#!/bin/bash

l="1 2 4 6 8";      #????????????? ?????????????? ??? ??? ? ?????????????????

for a in $l;
do
let "b = 500000 * 8 / a"      #??????????? ?????????????? ?????? ??? ???????????? ??????
cat << _EOF_ > NVE${a}ps.mdp  #????????? ?????? ?????????????????? ?????????? ? ?????????? ??????
title                        = OPLS ARGON NVE equilibration
; Run parameters
integrator      = md          ; leap-frog ??????????????
nsteps          = $b          ; ?????????????? ??????
dt              = 0.00$a      ; ??? ? ??????????????????
; 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             = 1.0 ; ???????? ?????????????? ???-???-????????????? ??????????????????????
;vdwtype = Switch          ; ???????? ?????????????? ?????????????????????? ???-???-?????????
;rvdw_switch = 0.7         ; ?????????????? ?? ?????????????? ?????????????? ? Switch
; Electrostatics
coulombtype      = cut-off     ; ???????? ?????????????? ?????????????????????????? ??????????????????????
```

```
; Temperature coupling is off
tcoupl          = no                ; ?? ?????????????? ? NVE ????????
; Pressure coupling is off
pcoupl          = no                ; ?? ?????????????? ???????? ? NVE ????????
; Periodic boundary conditions
pbc             = xyz               ; ?????? ???????????? ?????????????? ???????? ??????
; Dispersion correction
DispCorr        = EnerPres         ; ????? rvdw_switch ??????????????????
; Velocity generation
gen_vel         = yes               ; ?????? ???????????? ?????????? ???????? ?? ????????????
gen_temp        = 300               ; ?????? ???????????? ?????????????? ?????????
gen_seed        = 7                 ; ???????????????? ????? ?????? ??? ???????????????? ????????????
_EOF_           # ?????????? ???
grompp_4.5.4 -f NVE${a}ps.mdp -c em1000.gro -p topol1000.top -o NVE${a}ps.tpr # ?? ??
??
cat << _EOF_ > NVE${a}ps.sh        # ????????? ???????? ??? ?????????? ?????????????? ??????
#!/bin/sh
#PBS -N ARGON${a}
#PBS -l nodes=1:ppn=4              ; ????? ?????, ???????? ??????????????
#PBS -q day
#PBS -V

lamboot -v -ssi boot tm
cd ${PWD}
mpirun C mdrun_4.5.4_MPI -v -deffnm NVE${a}ps ;??????? ???????????????? ??????????
lamhalt -v $PBS_NODEFILE
_EOF_                               # ?????????????? ???
qsub NVE${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 скрип *do.sh*

```
./do.sh
```

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

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

Например, для шага интегрирования 2:

```
mdrun_4.5.4 -v -deffnm NVE2ps
```

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

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

После завершения расчетов запустите скрипт *energy.sh*

```
./energy.sh
```

Рассмотрим его подробно:

## ***energy.sh***

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

```
l="1 2 4 6 8"; #??? ??? ?? ????? ???????????????
```

```
for a in $l;
do
g_energy_4.5.4 -f NVE${a}ps.edr -o energyNVE${a}ps.xvg < enter.txt # ??????????
#?????????? ?????????? ?? ?????? enter.txt
done
```

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

Скрипт *energy.sh* создаст файлы вида *energyNVE(шаг интегр)ps.xvg*, их можно просмотреть в текстовом редакторе или с помощью *xmgrace*.  
Например, для шага 8:

```
xmgrace energyNVE8ps.xvg
```

Постройте один общий график, используя *gnuplot*

```
gnuplot5 gnuplotenergy1.scr
```

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

Далее, используя скрипт *eps\_to\_img.sh*, конвертируем eps файл в tif

```
./eps_to_img.sh
```

(Так же можно изменить разрешение и формат файла, изменив *eps\_to\_img.sh*)

Теперь можно просмотреть получившийся график

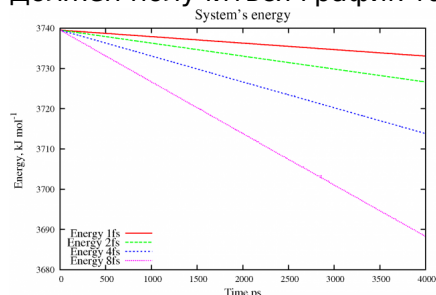
```
???? ?? ?????????? ? Linux ??? ? Windows ? ???????????? X ??????????:
```

```
display energy1.tif
```

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

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

Должен получиться график такого вида:



Откуда видно, что с ростом шага увеличивается и быстрее накапливается ошибка интегрирования.

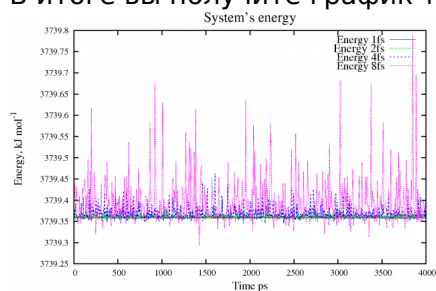
Но накопление ошибки и изменение энергии системы в симуляции микроканонического ансамбля связано не только с ошибкой интегрирования, но и с заведомо неверными параметрами конфигурации. Мы использовали простое обрезание Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий, что вызывает резкий скачок потенциала и бесконечный скачок силы взаимодействия на границе обрезания. Исправим этот недостаток, изменив файл `do.sh` и раскомментировав параметры `vdwtype` и `rvdw_switch`.

```
vi do.sh
...
vdwtype = Switch
rvdw_switch = 0.7
...
```

Для того чтобы выйти с сохранением из редактора `vi`, надо в командном режиме ввести `:x`

Далее сделайте все операции аналогично первому случаю.

В итоге вы получите график такого вида:



Откуда видно, что в целом энергия системы сохраняется при всех значениях шага интегрирования, но с увеличением шага увеличивается дисперсия энергии.

## Влияние радиуса обрезания взаимодействий

## Ван-дер-Ваальса

Перейдем в директорию *cutofffrange*

```
cd ../cutofffrange
```

Вторая часть задачи выполняется так же, как и первая, исключая изменение типа обрезания взаимодействий Ван-дер-Ваальса. По умолчанию используется Cut-off. В нашем случае это не критично, так как мы хотим наблюдать изменения в расчетах только за счет изменения радиуса обрезания.

Рассмотрим скрипт *do.sh*

### *do.sh*

```
#!/bin/bash

l="0.4 0.8 1 1.5 2";#   ??????????? ?????????????? ??? ??? ??????????????????

for a in $l;
do
cat << _EOF_ > NVE${a}coff.mdp   #????????? ??? ?????????????? ?????? ? ?????? ?????
title                          = OPLS ARGON NVE equilibration
; Run parameters
integrator                    = md                ; leap-frog ???????????
nsteps                        = 500000             ; ??????????? ??????
dt                            = 0.002             ; ??? ? ?????????????????
; Output control
nstxout                       = 100                ; ?????????? ??????????? ?????? 100 ?????
nstvout                       = 0                  ; ?? ??????????? ??????????
nstenergy                     = 100                ; ?????????? ?????????? ?????? 100 ?????
nstlog                        = 100                ; ?????????? ??? ?????? 100 ?????
; Neighborsearching
ns_type                       = grid              ; ?????? ?????????? ?? ??????
nstlist                       = 5                  ; ?????????????? ??????
rlist = $a ; ?????? ??????????? ?????????????? ?????????? ??????????
rcoulomb = 2.0 ; ?????? ?????????????? ?????????????????????????? ?????????????????????
rvdw = $a ; ?????? ?????????????? ???-???-?????????????? ?????????????????????
; Electrostatics
coulombtype                   = cut-off            ; ?????? ?????????????? ?????????????????????????? ?????????????????????
; Temperature coupling is off
tcoupl                        = no                 ; ?? ?????????????????????? ? NVE ??????????
; Pressure coupling is off
pcoupl                        = no                 ; ?? ?????????????????????? ?????????? ? NVE ??????????
; Periodic boundary conditions
pbc                           = xyz               ; ?????? ??????????????? ?????????????????????? ?????????? ??????
; Dispersion correction
DispCorr                      = EnerPres          ; ??? rvdw_switch ??????????????????????
; Velocity generation
gen_vel                       = yes               ; ?????? ??????????? ??????????? ?????? ?? ?????????????
gen_temp                      = 300               ; ?????? ?????????????? ?????????????????? ??????????
gen_seed                      = 7                 ; ?????????????????? ??? ???? ???? ?????????????????? ?????????????
_EOF_                         # ??????????? ???
grompp_4.5.4 -f NVE${a}coff.mdp -c em1000.gro -p topol1000.top -o NVE${a}coff.tpr -ma
xwarn 2
```

```
# ?? ???
cat << _EOF_ > NVE${a}coeff.sh # ?????? ?????? ??? ??????? ?????????? ?????
#!/bin/sh
#PBS -N ARGON_${a}_co
#PBS -l nodes=1:ppn=4      ; ????? ?????, ?????? ???????????
#PBS -q day
#PBS -V

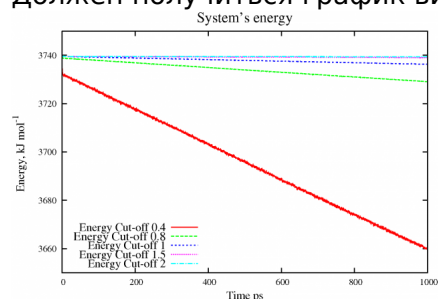
lamboot -v -ssi boot tm
cd ${PWD}
mpirun C mdrun_4.5.4_MPI -v -deffnm NVE${a}coeff ;?????? ?????????????? ?????????
lamhalt -v $PBS_NODEFILE
_EOF_                # ?????????? ???
qsub NVE${a}coeff.sh  # ?????? ?????? ? ???????
done
```

К команде *grompp\_4.5.4* добавился ключ *-maxwarn 2*, который позволяет программе игнорировать до 2х предупреждений.

После завершения вычислений, выполнять задачу так же как и ранее:

```
./energy.sh
...
gnuplot5 gnuplotenergy1.scr
...
./eps_to_img.sh
```

Должен получиться график вида:



Из которого видно, что с уменьшением радиуса обрезания взаимодействий энергия сильно изменяется. Это легко объяснить тем, что взаимодействия между атомами на меньших расстояниях довольно сильны, но мы ими пренебрегаем. При радиусе обрезания больше одного нанометра энергии неизменны и практически совпадают, это свидетельствует о том, что взаимодействия на этих расстояниях пренебрежительно малы.

Прикрепленный файл [tutor01.tar.gz](#) [2] Размер 27.36 кб

Источник: [http://molsim.org/ru/methods/md\\_basics\\_1](http://molsim.org/ru/methods/md_basics_1)

#### Ссылки:

- [1] [http://molsim.org/ru/methods/MD\\_basics\\_0](http://molsim.org/ru/methods/MD_basics_0)
- [2] <http://molsim.org/sites/default/files/tutor01.tar.gz>