

کارگاه لمپس

Visual Molecular Dynamics

VMD



دانشکده فیزیک، دانشگاه تهران

اسفند ۸۹

فرخ یوسفی

انجمن فیزیک ایران

عناوین

- ✓ اهمیت متصور ساختن (Visualize) در شبیه سازی
- ✓ معرفی کوتاه ابزارهای متصور ساختن (Visualize) در لمپس
- ✓ معرفی VMD و نصب آن در ویندوز و لینوکس ابونتو (Ubuntu)
- ✓ فرمت فایل‌هایی که VMD می شناسد
- ✓ دستور تولید فایل خروجی برای VMD در اسکریپت ورودی لمپس
- ✓ نمایش با VMD و تبدیل آن به فیلم
- ✓ تبدیل فرمت ها به یکدیگر در VMD
- ✓ تغییر رنگ زمینه و اتم ها
- ✓ ساخت نانولوله کربنی

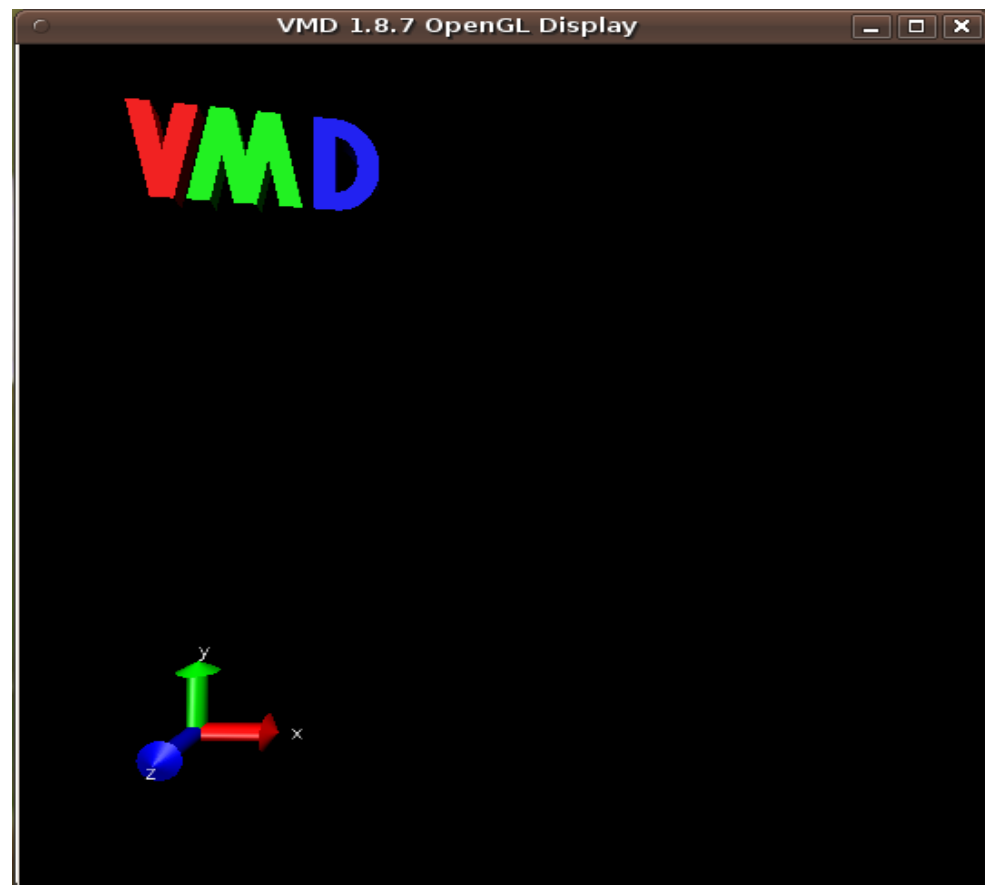
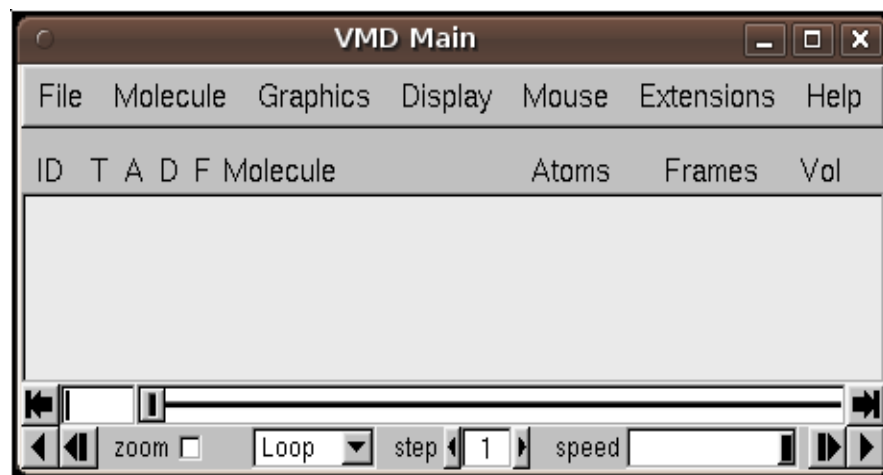
اهمیت متصور ساختن (Visualize) در شبیه سازی

- ❖ برای اشکال زدایی (Debugging) در سیستم
- ❖ برای درست کردن ابعاد و پیکربندی سیستم
- ❖ برای نمایش نتیجه کار

معرفی کوتاه ابزارهای متصور ساختن در لمپس

- ✓ **VMD**
- AtomEye
- PyMol
- Raster3d
- Rasmol

معرفی VMD (تصویری)



معرفی VMD (ادامه)

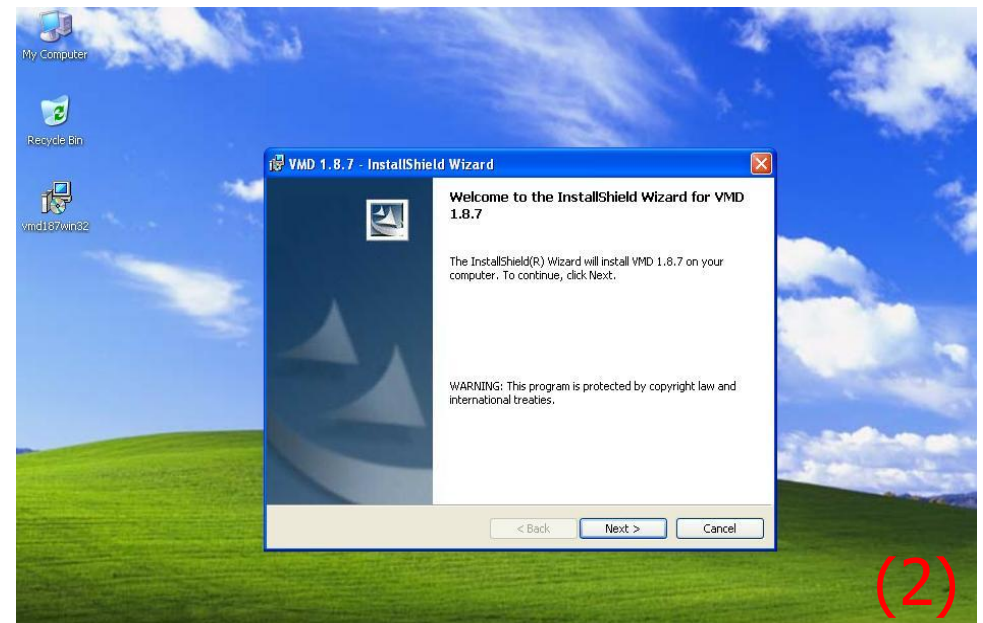
این نرم افزار:

- ❖ ویژه متصور ساختن اتمها در شبیه سازی است
- ❖ رایگان است
- ❖ هم نسخه ویندوز دارد هم لینوکس
- ❖ امکانات زیادی دارد
- ❖ در میلینگ لیست لمپس به سوالات این نرم افزار نیز پاسخ داده می شود

نصب VMD در سیستم عامل ویندوز

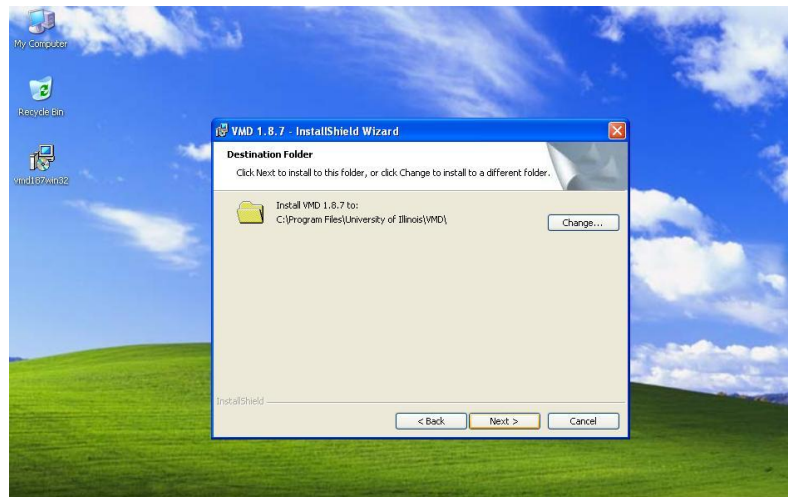
VMD نسخه های ۳۲ بیتی و ۶۴ بیتی دارد.
نکته : اگر برای کامپیوتر ۳۲ بیتی، نسخه ۶۴ بیتی VMD را نصب کنیم نصب می شود ولی کار نمی کند!
ابتدا آن را از سایت زیر دانلود کنید:

<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

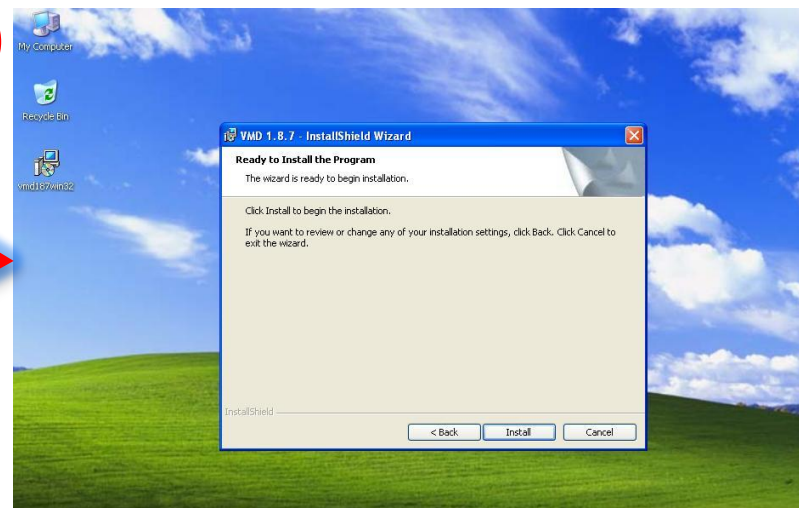


نصب VMD در سیستم عامل ویندوز (ادامه)

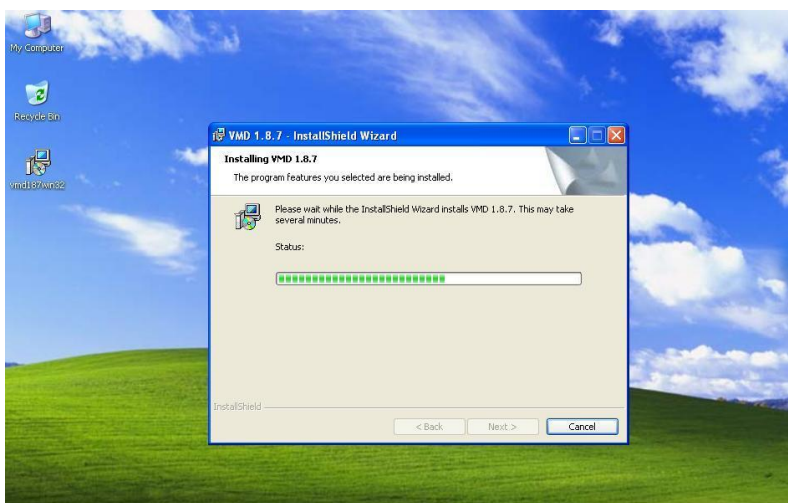
(3)



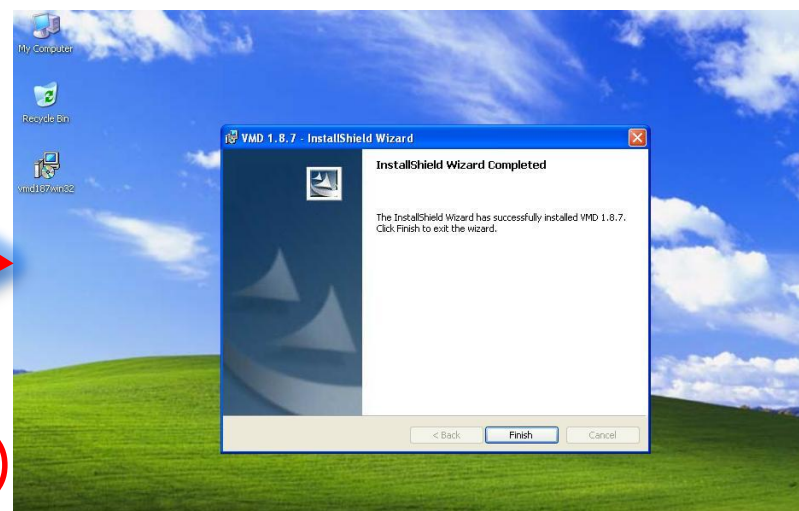
(4)



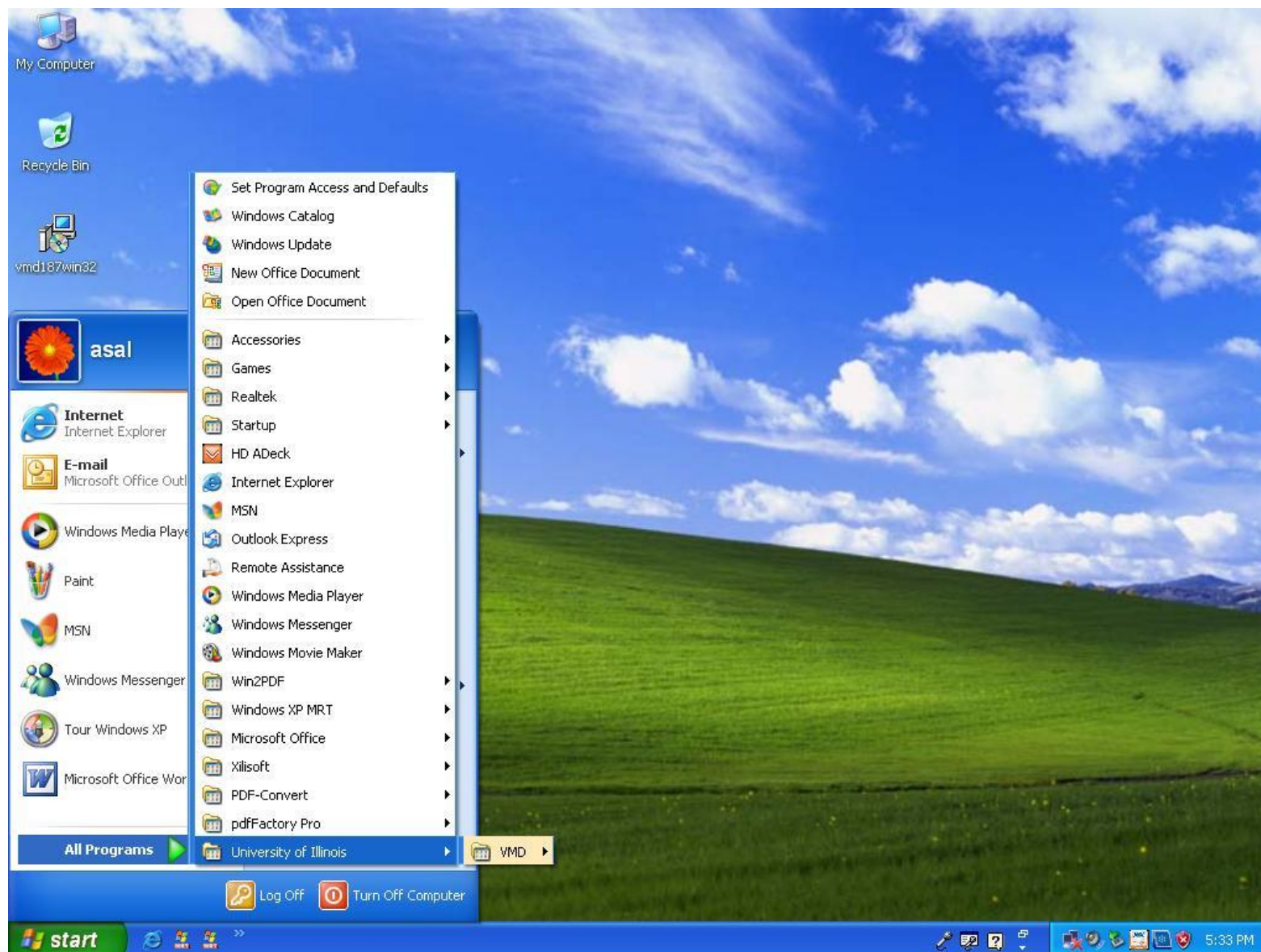
(5)



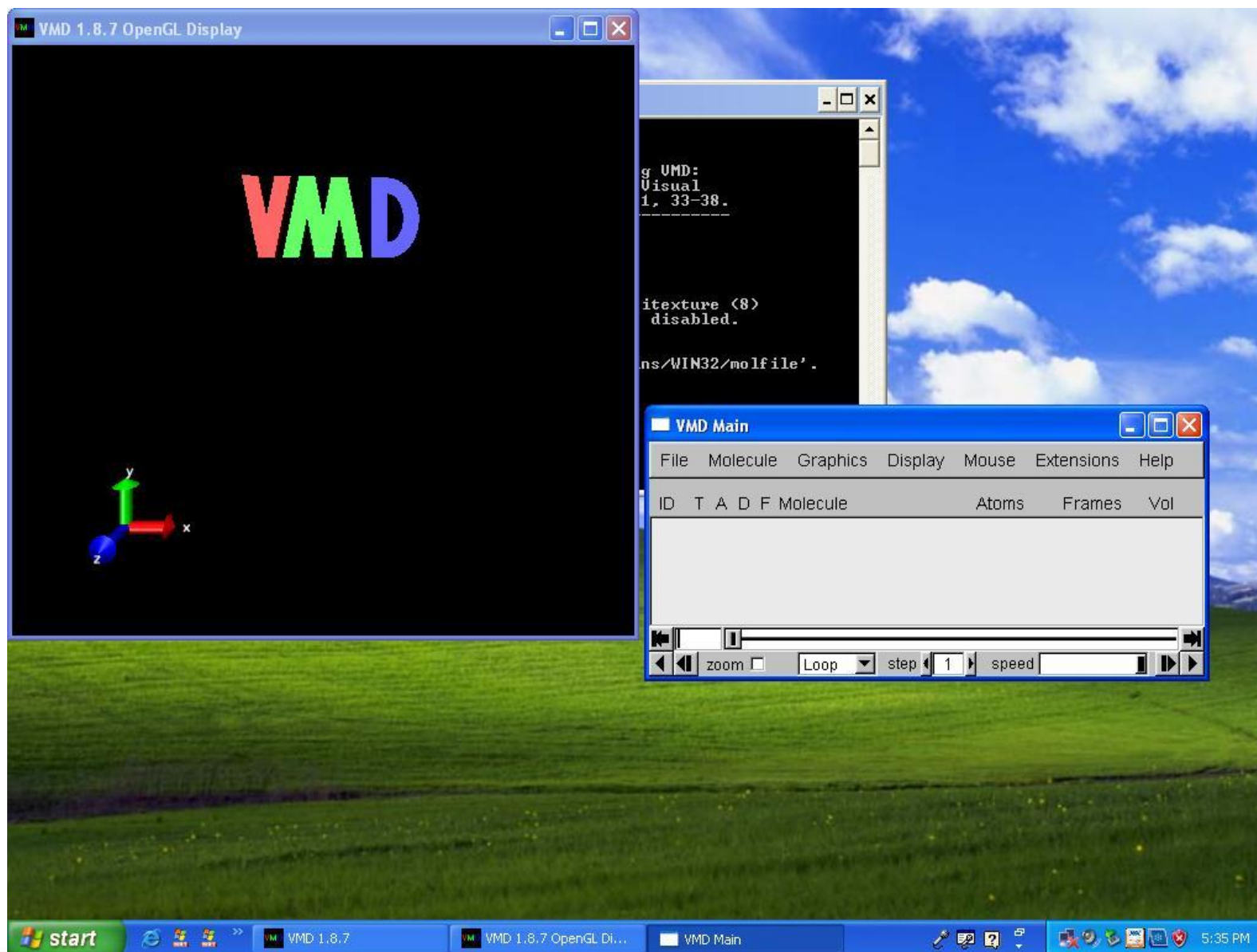
(6)



اجرای VMD در سیستم عامل ویندوز

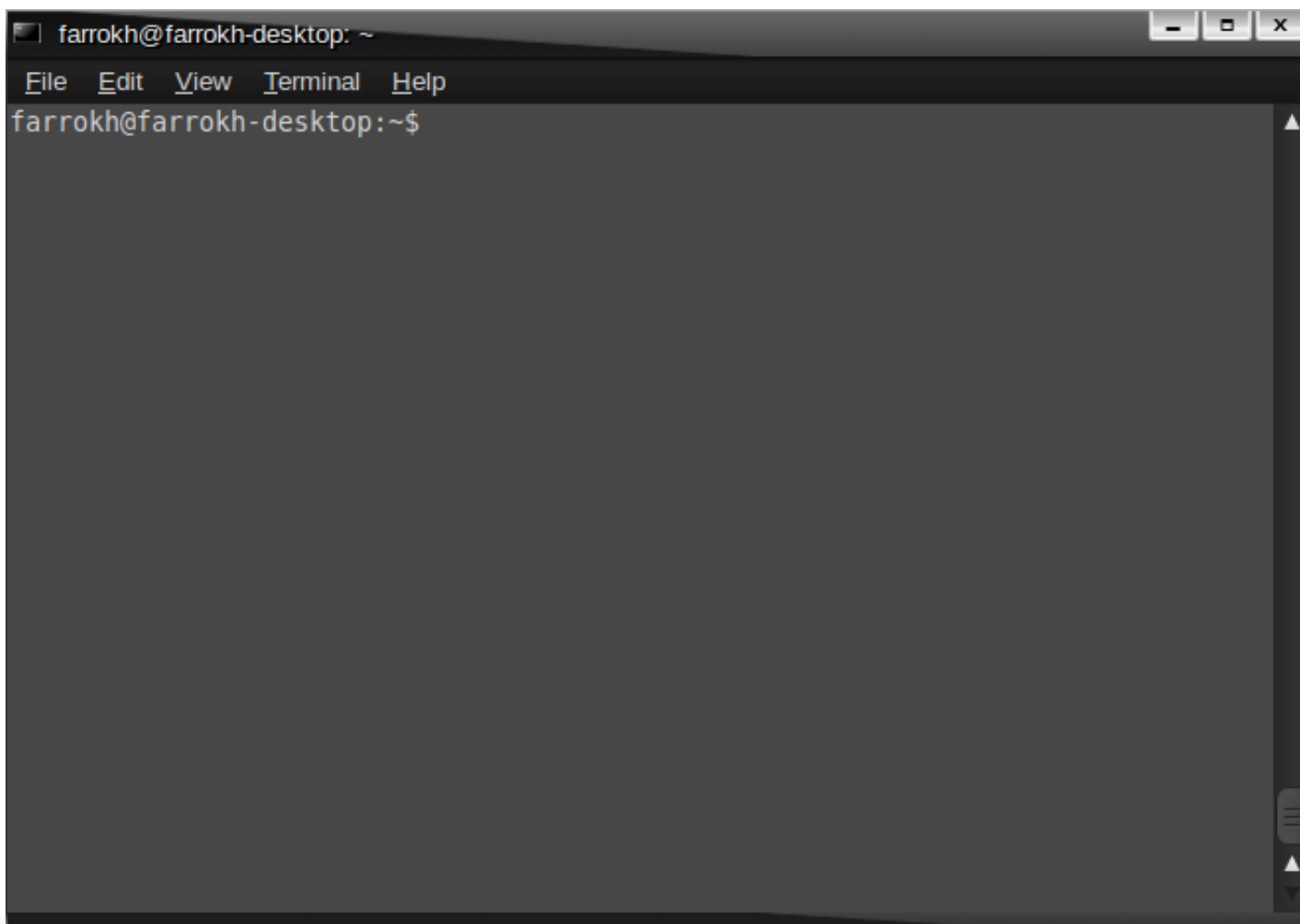


اجرای VMD در سیستم عامل ویندوز



نصب VMD در سیستم عامل لینوکس Ubuntu

ابتدا VMD را دانلود می کنیم.
برای نصب ابتدا ترمینال را طبق شکل زیر باز می کنیم.
فرض کنید سورس VMD را روی Desktop قرار می دهیم.



(1)

نصب VMD در سیستم عامل لینوکس Ubuntu (۱۵۱امه)

(2)

```
farrokh@farrokh-desktop: ~/Desktop
File Edit View Terminal Help
farrokh@farrokh-desktop:~$ cd Desktop/
farrokh@farrokh-desktop:~/Desktop$ tar -xvzf vmd-1.8.7.bin.LINUX.opengl.tar.gz
```

(3)

```
farrokh@farrokh-desktop: ~/Desktop
File Edit View Terminal Help
farrokh@farrokh-desktop:~/Desktop$ cd vmd-1.8.7/
```

(4)

```
farrokh@farrokh-desktop: ~/Desktop/vmd-1.8.7
File Edit View Terminal Help
farrokh@farrokh-desktop:~/Desktop/vmd-1.8.7$ ./configure LINUX
```

(5)

```
farrokh@farrokh-desktop: ~/Desktop/vmd-1.8.7
File Edit View Terminal Help
farrokh@farrokh-desktop:~/Desktop/vmd-1.8.7$ ./configure LINUX
farrokh@farrokh-desktop:~/Desktop/vmd-1.8.7$ ls
Announcement  configure.options  doc      LINUX    proteins  scripts
bin           data              lib      msvc     python    shaders
configure     distrib          LICENSE  plugins  README    src
farrokh@farrokh-desktop:~/Desktop/vmd-1.8.7$ cd src
```

نصب VMD در سیستم عامل لینوکس Ubuntu (۱۵امه)

(6) farrokh@farrokh-desktop: ~/Desktop/vmd-1.8.7/src
File Edit View Terminal Help
farrokh@farrokh-desktop:~/Desktop/vmd-1.8.7/src\$ sudo make install
[sudo] password for farrokh:

(7) Info: /bin/csh shell not found, installing Bourne shell startup script instead
echo Make sure "/usr/local/bin"/vmd is in your path.
Make sure /usr/local/bin/vmd is in your path.
echo "VMD installation complete. Enjoy!"
VMD installation complete. Enjoy!
farrokh@farrokh-desktop:~/Desktop/vmd-1.8.7/src\$

(8) farrokh@farrokh-desktop: ~/Desktop
File Edit View Terminal Help
farrokh@farrokh-desktop:~/Desktop\$ vmd

فرمت فایل‌هایی که VMD می‌شناسد

bgf
binpos
crd
crdbox
dcd
dtr
dtrv
trr
js
lammppstrj
mae
mol2
namdbin
pdb
pqr
rst7
POSCAR
xbgf
xyz

→ Protein data bank

فرمت pdb

ATOM	1	N	THR A	1	5.700	-9.286	-9.888	1.00	3.05	N
ATOM	2	CA	THR A	1	6.418	-9.657	-8.635	1.00	3.09	C
ATOM	3	C	THR A	1	5.549	-9.342	-7.415	1.00	2.89	C
ATOM	4	O	THR A	1	4.527	-8.693	-7.519	1.00	2.56	O
ATOM	5	CB	THR A	1	7.681	-8.796	-8.632	1.00	3.07	C
ATOM	6	OG1	THR A	1	7.316	-7.423	-8.632	1.00	2.71	O
ATOM	7	CG2	THR A	1	8.516	-9.104	-9.876	1.00	3.41	C
ATOM	8	H1	THR A	1	5.914	-8.298	-10.131	1.00	3.12	H
ATOM	9	H2	THR A	1	4.675	-9.395	-9.746	1.00	3.40	H
ATOM	10	H3	THR A	1	6.011	-9.905	-10.663	1.00	3.17	H
ATOM	11	HA	THR A	1	6.685	-10.702	-8.649	1.00	3.57	H
ATOM	12	HB	THR A	1	8.264	-9.013	-7.750	1.00	3.37	H
ATOM	13	HG1	THR A	1	8.100	-6.907	-8.835	1.00	2.79	H
ATOM	14	HG21	THR A	1	8.154	-8.517	-10.707	1.00	3.36	H
ATOM	15	HG22	THR A	1	8.432	-10.155	-10.113	1.00	3.79	H
ATOM	16	HG23	THR A	1	9.550	-8.859	-9.685	1.00	3.75	H

فرمت xyz

4

→ تعداد اتمها

Atoms

1	6.28748	0.0158469	-0.197615
1	6.12178	1.43457	-0.197593
1	5.91402	2.16248	1.02925
2	5.26635	3.45262	1.02929

4

Atoms

1	6.39697	-0.140508	-0.583044
1	6.3211	1.30526	-0.514325
1	6.03102	2.00236	0.688049
2	5.20754	3.19116	0.693601

دستور تولید فایل خروجی برای VMD در نمونه اسکرپت ورودی لمپس

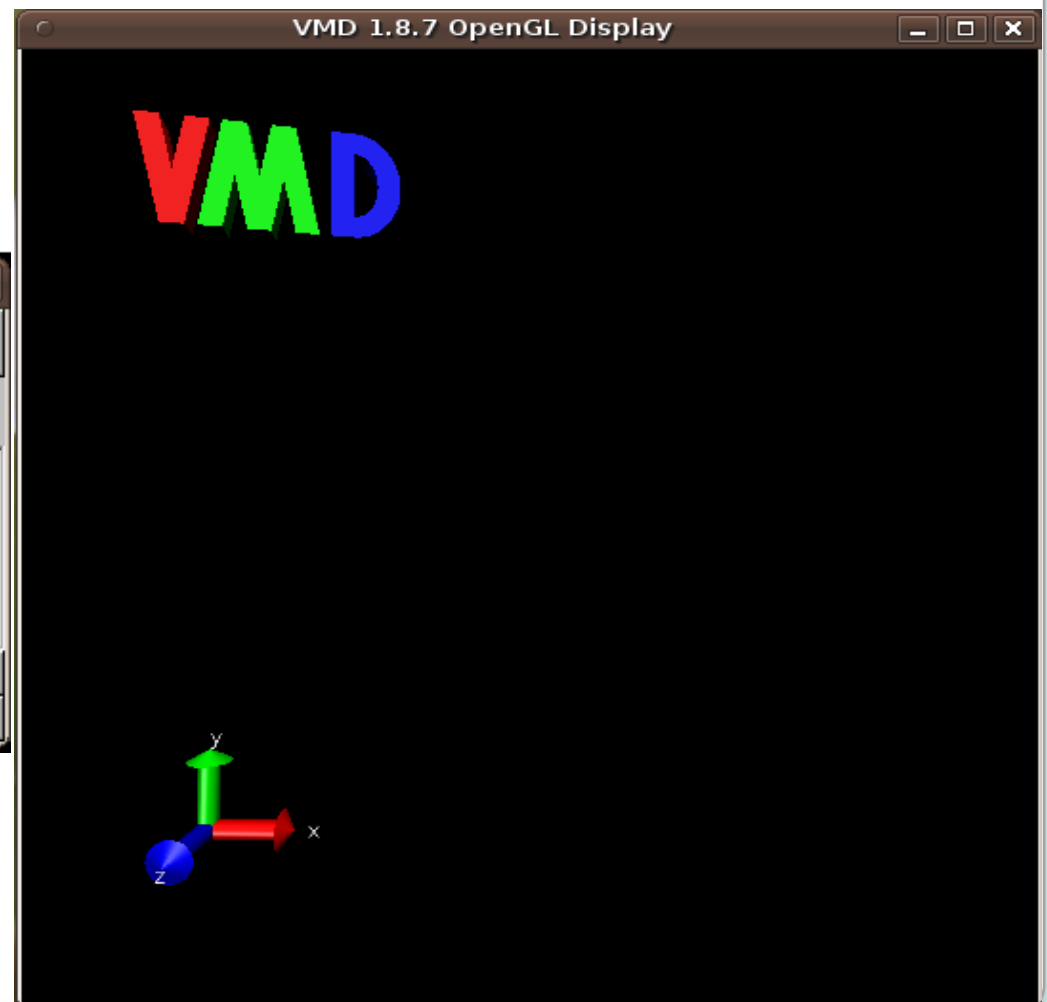
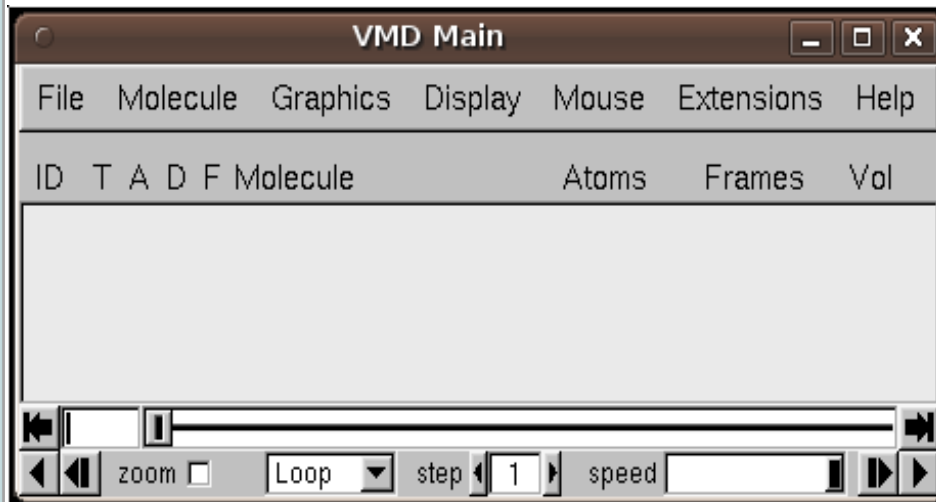
```
units          real
atom_style     full
bond_style     harmonic
angle_style    harmonic
pair_style     lj/charmm/coul/long 8 10
pair_modify    mix arithmetic
kspace_style   pppm 1e-4
read_data      myfile.data
fix            1 all nve
velocity       all create 300.0 12345678 dist uniform
thermo         1
thermo_style   multi
timestep       1
```

dump 1 all xyz 10 vmdfile.xyz

```
dump          2 all atom 100 dump.atom
run           20
```

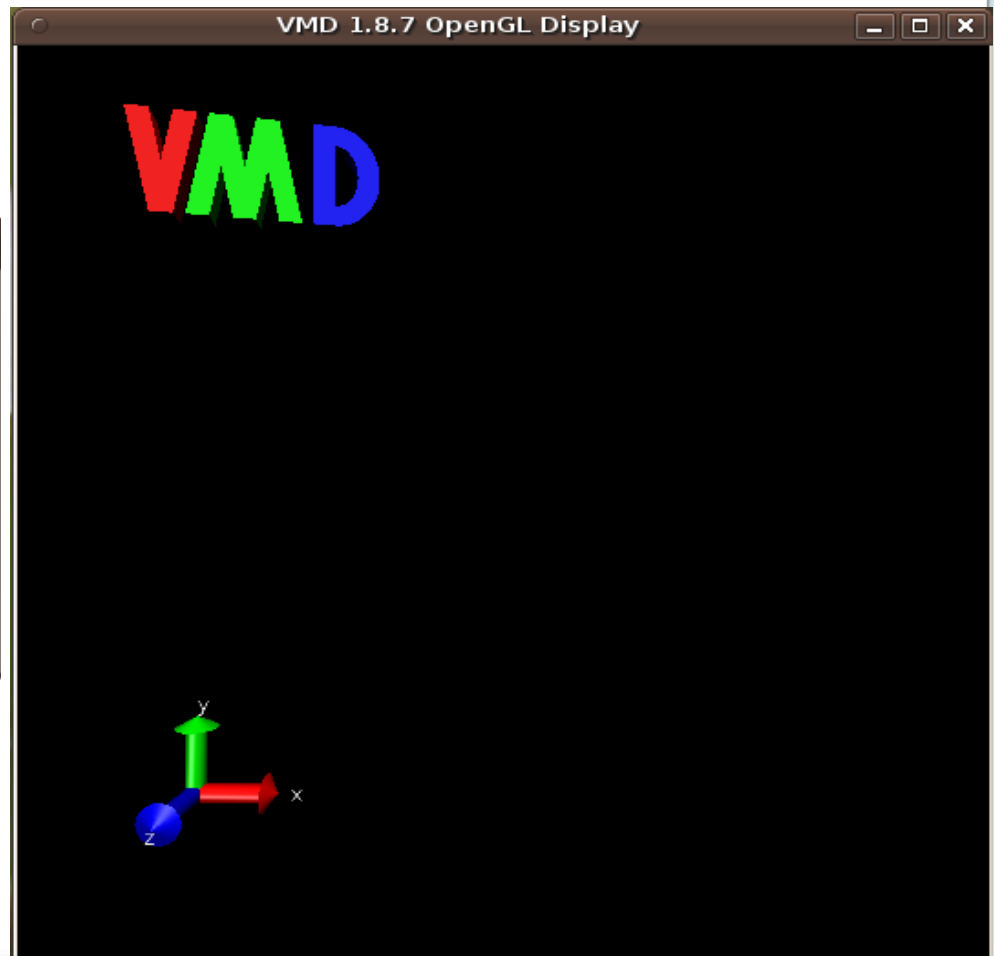
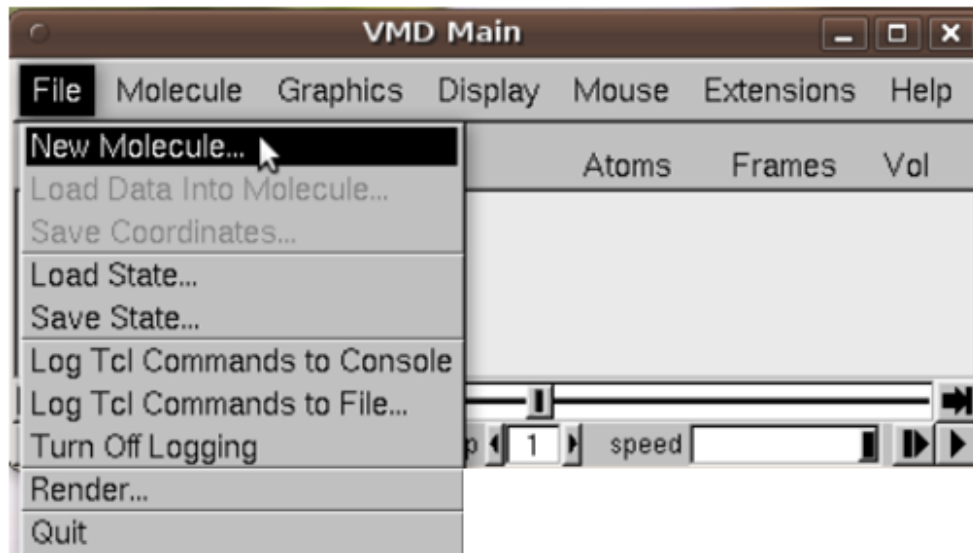
چگونگی نمایش با VMD

ابتدا VMD را باز کنید



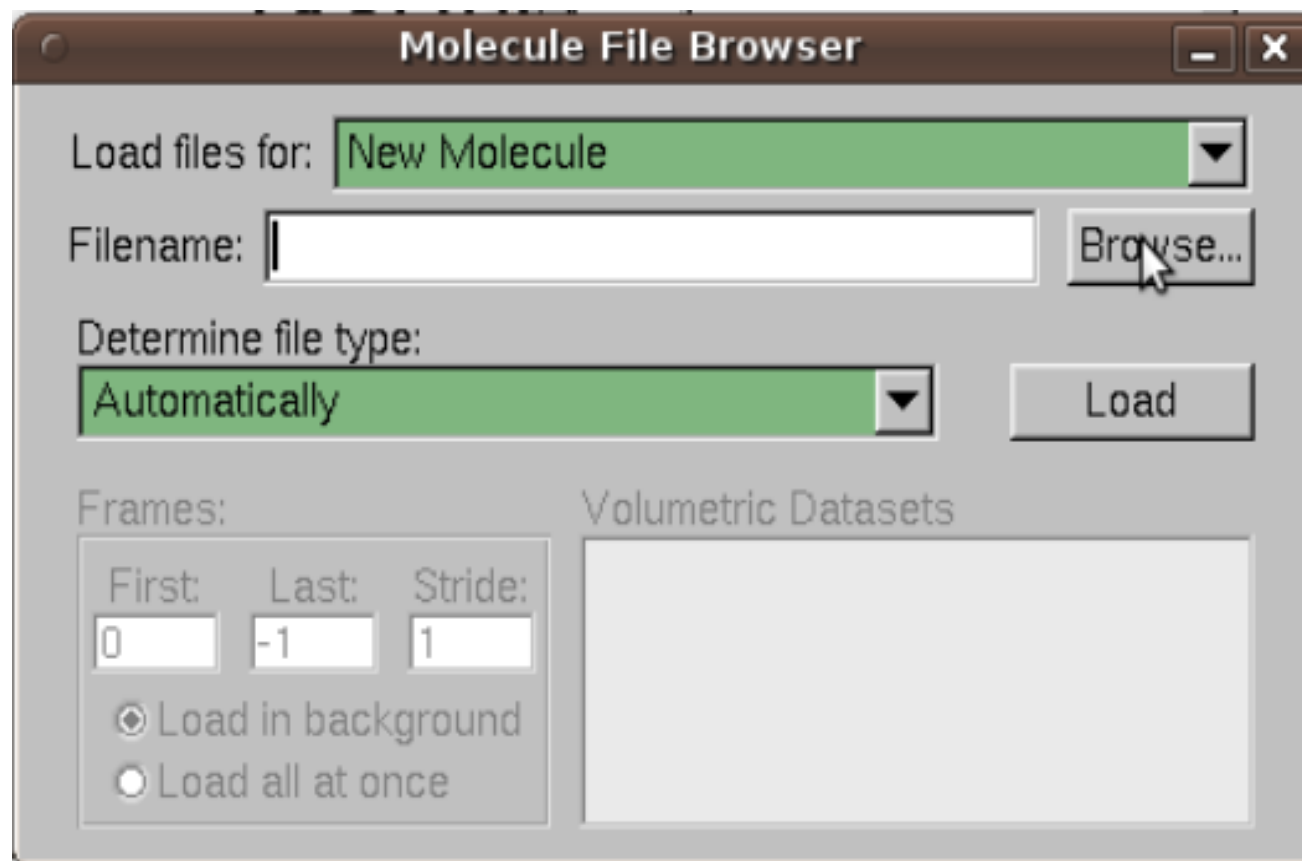
چگونگی نمایش با VMD (ادامه)

از منو گزینه File و سپس گزینه New Molecule را انتخاب کنید



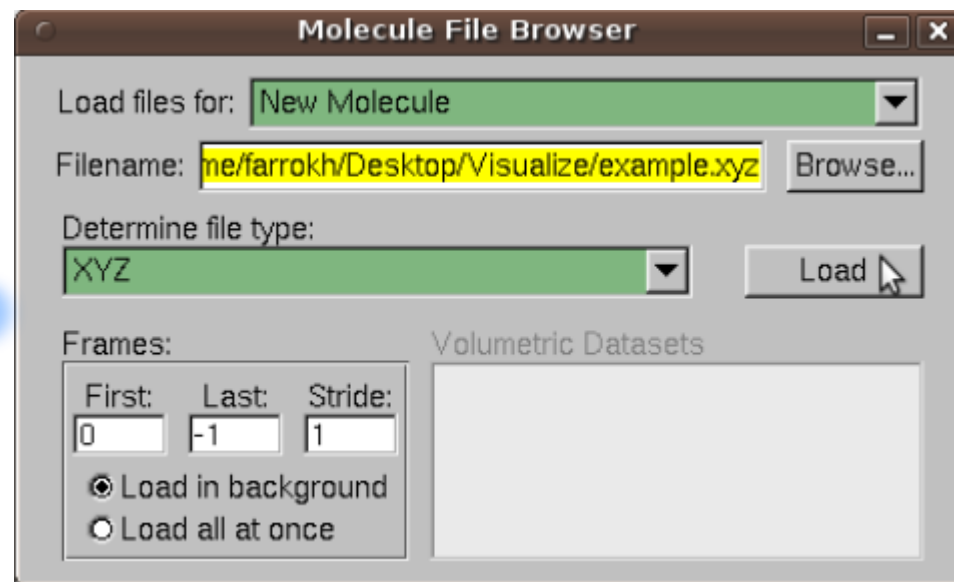
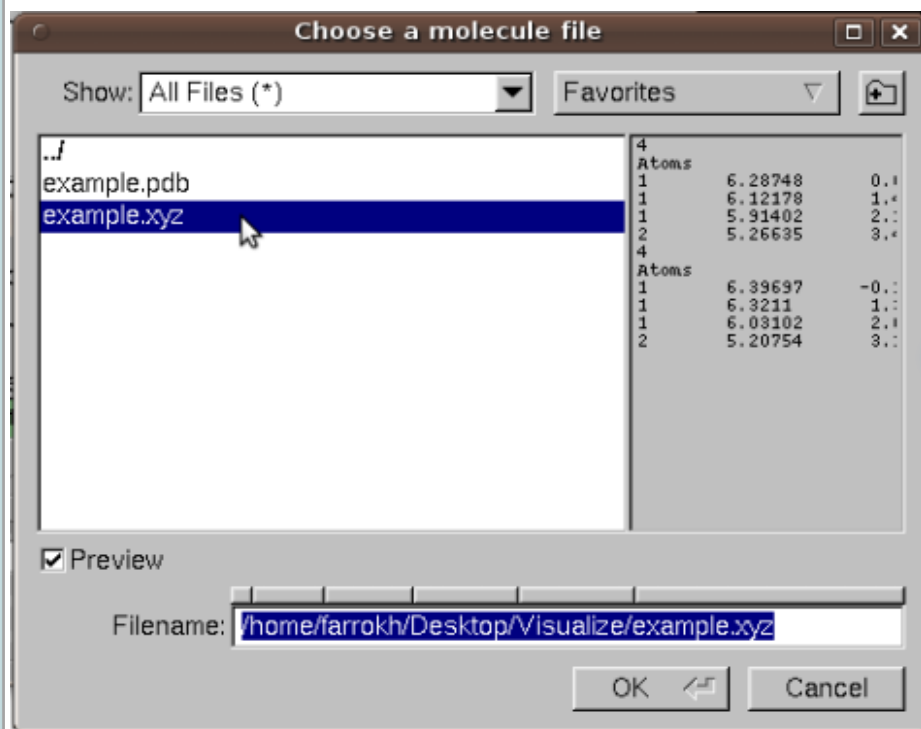
چگونگی نمایش با VMD (ادامه)

آنگاه پنجره ای بصورت زیر ظاهر می شود. گزینه Browse را انتخاب می کنیم

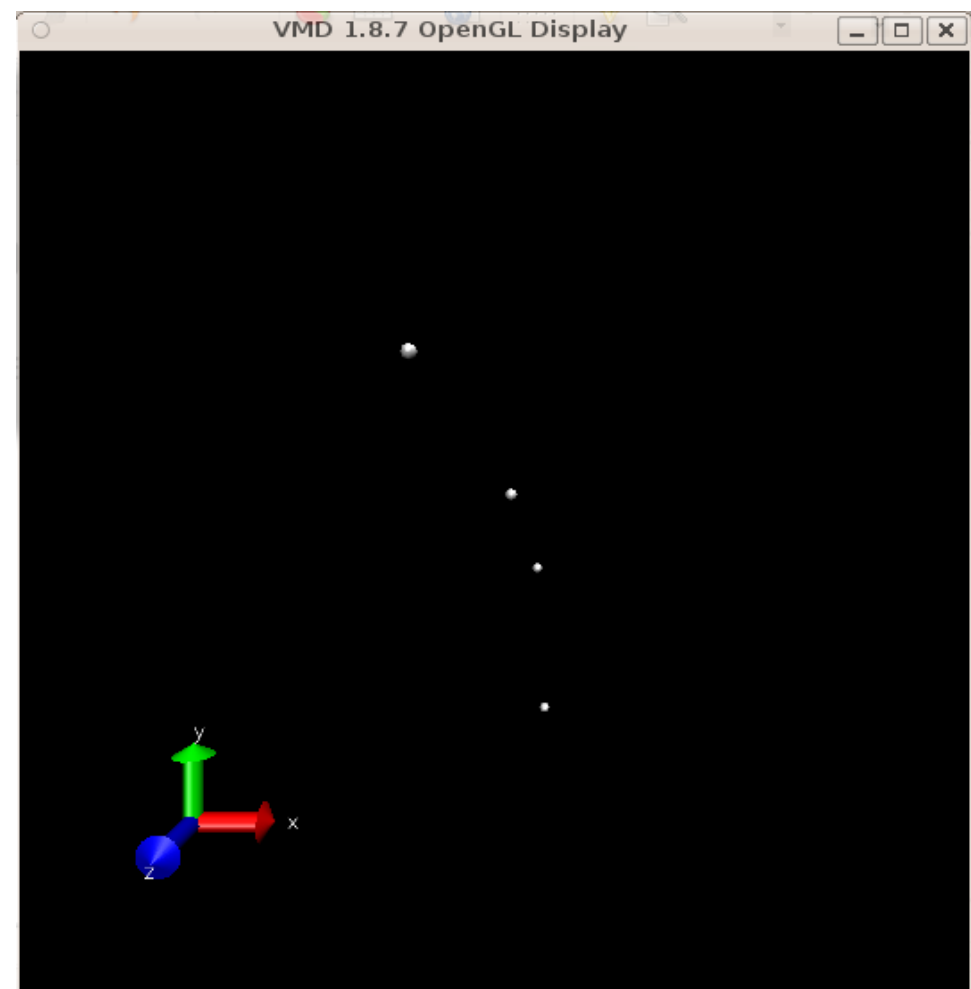
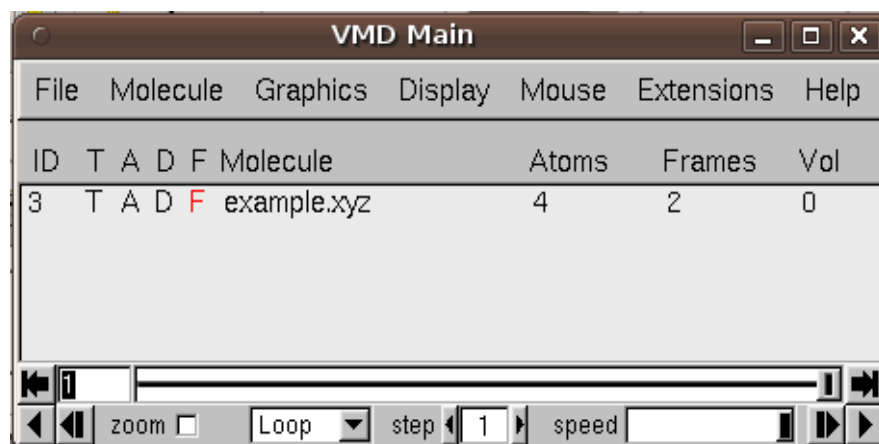


چگونگی نمایش با VMD (ادامه)

سپس فایل مورد نظر را انتخاب کرده و آن را Load می کنیم.

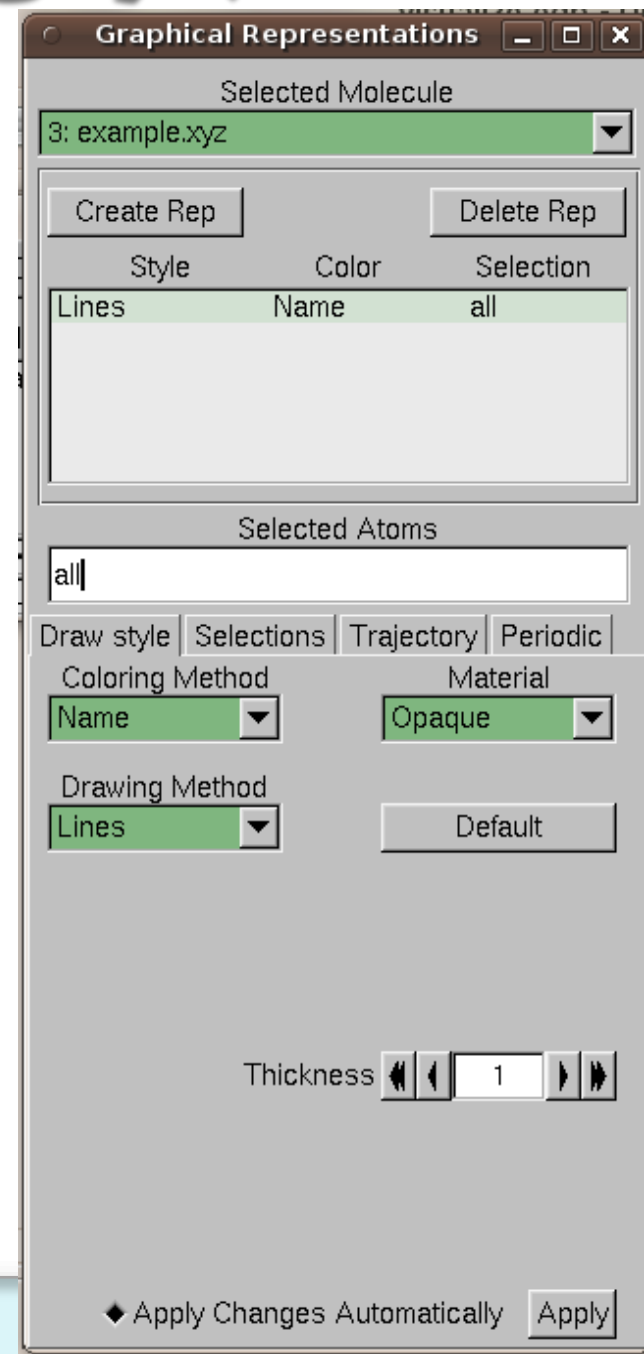
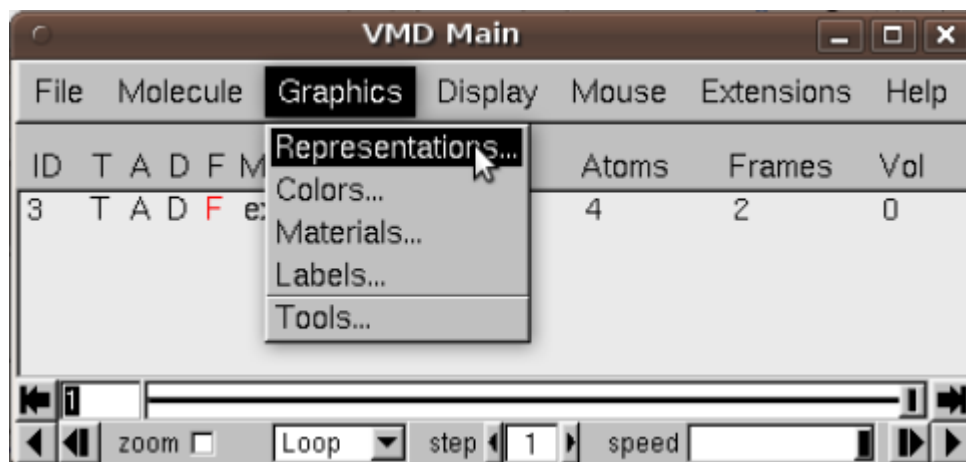


چگونگی نمایش با VMD (ادامه)

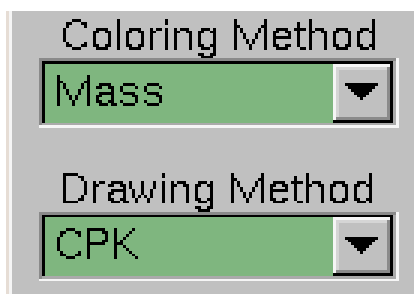


چگونگی نمایش با VMD (ادامه)

می توان آنها را در نمایشهای مختلف نشان داد.

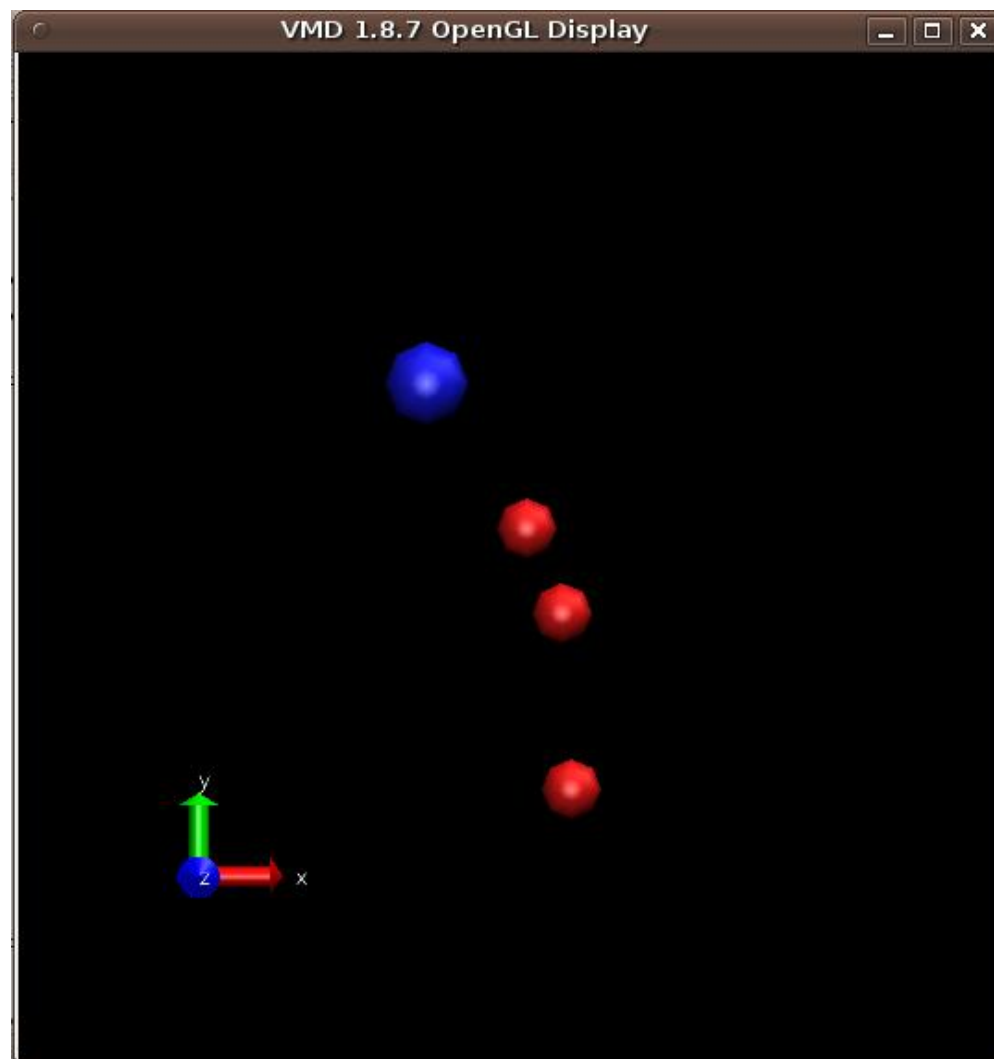


چگونگی نمایش با VMD (ادامه)



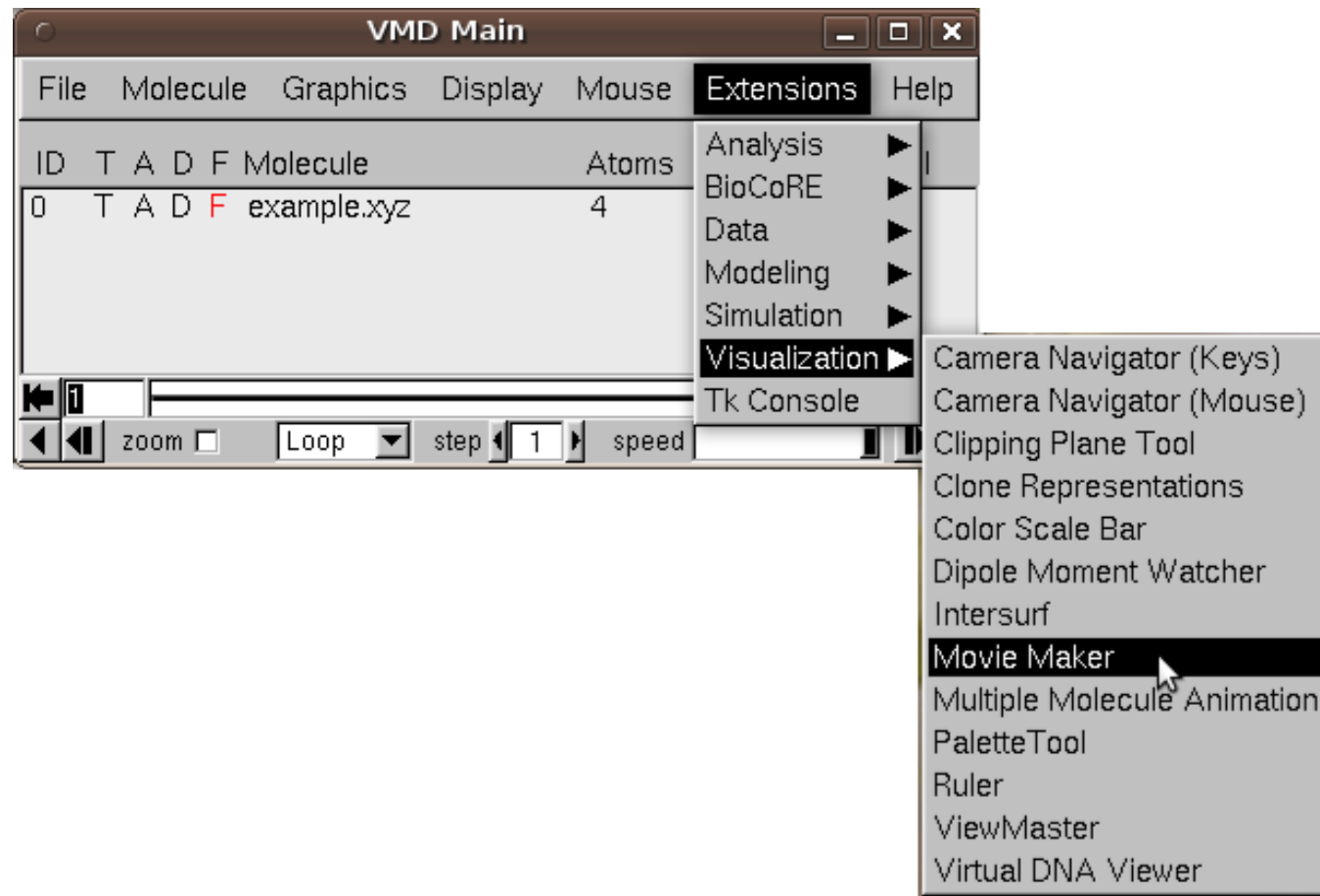
رنگها در نمایش CPK

- هیدروژن: سفید
- کربن: خاکستری روشن
- اکسیژن: قرمز
- نیتروژن: آبی
- گوگرد: زرد



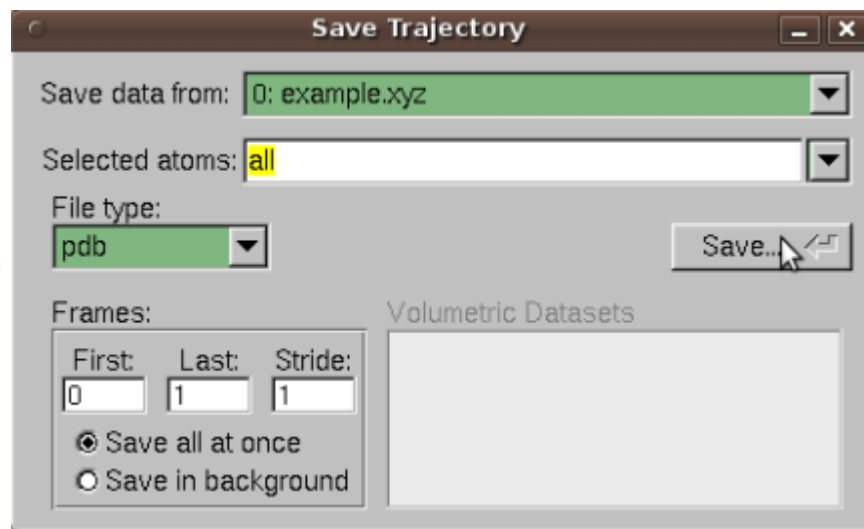
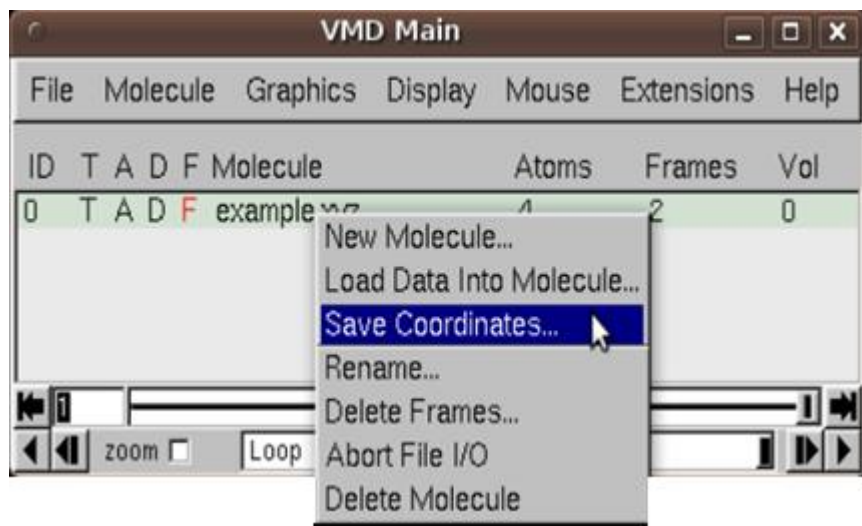
تبدیل نمایش VMD به فیلم

می توان نمایش فایل xyz را در VMD به فیلم با فرمت mpg تبدیل کرد.

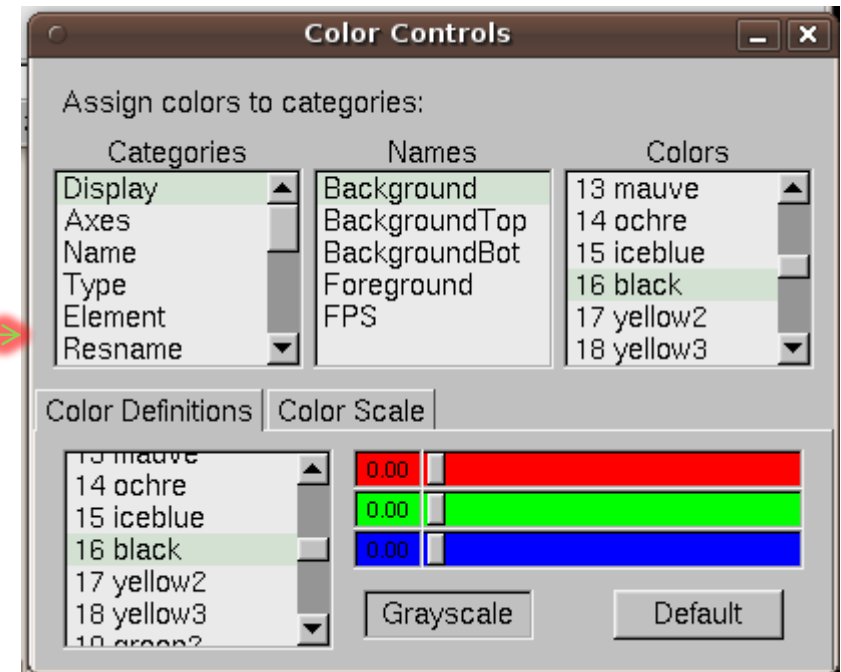
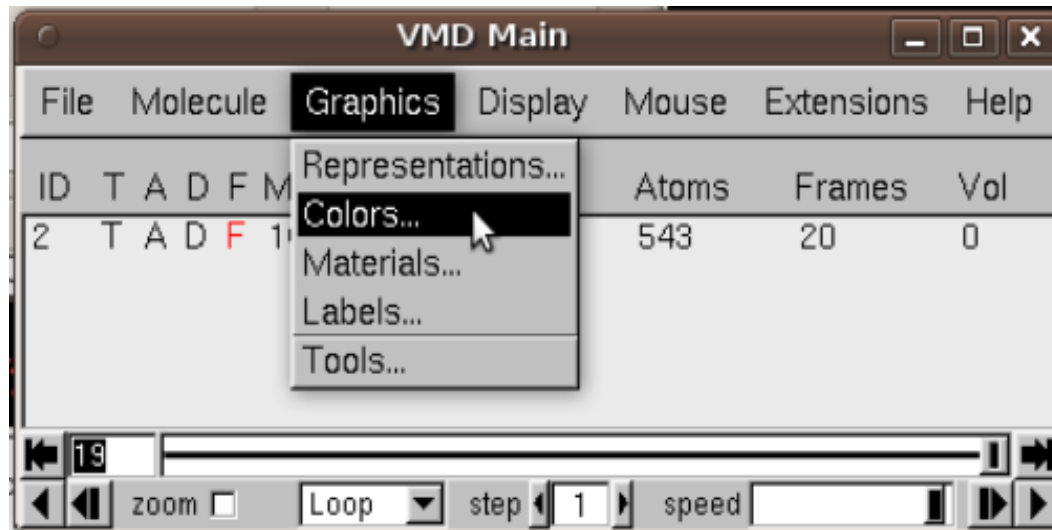


تبدیل فرمتها به یکدیگر در VMD

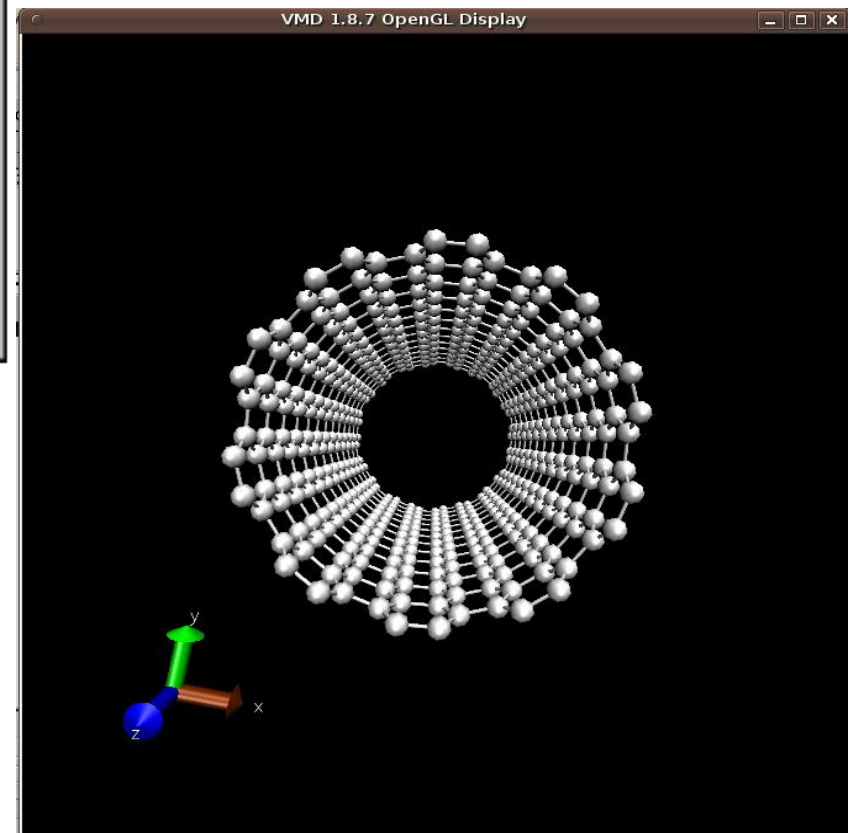
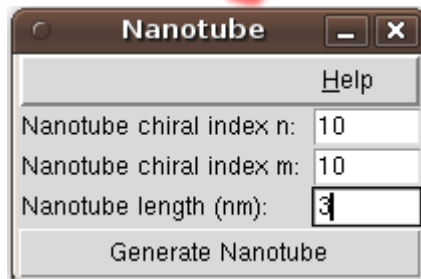
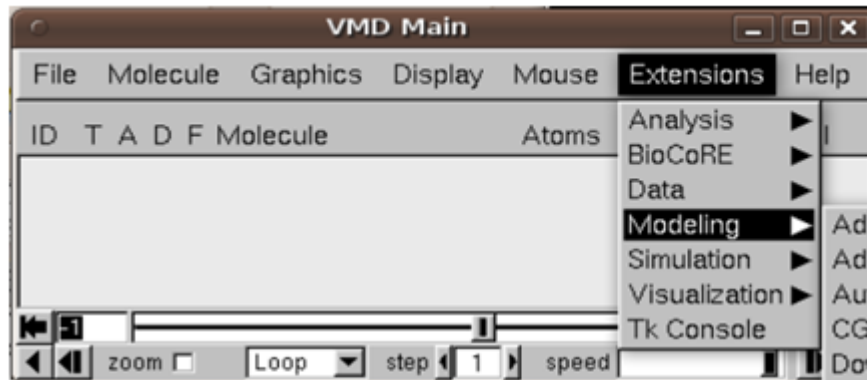
ابتدا با VMD یک فایل مثلا example.xyz را باز می کنیم سپس مطابق شکل آن را ذخیره می کنیم



تغییر رنگ زمینه و اتم ها



ساخت نانولوله کربنی



با تشکر

سوال ؟