

第一性原理分子动力学(AIMD)结果分析教程

转载

普通网友

于 2020-05-09 15:39:01 发布

31216

收藏 66

版权

分类专栏:

分子模拟

分子动力学

第一性原理



分子模拟

同时被 3 个专栏收录

6 订阅

4 篇文章

订阅专栏

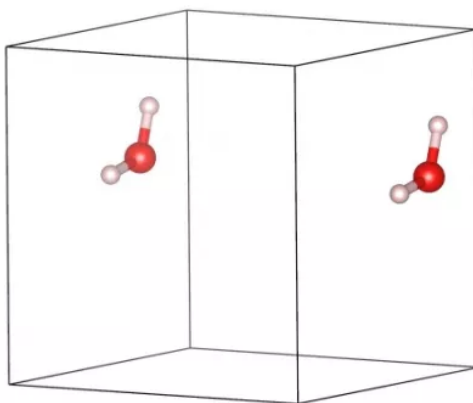
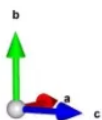
与经典分子动力学不同，第一性原理分子动力学不需要提供力场参数，只需要提供原子初始结构，就能根据电子波函数正交化产生的虚拟力，求解牛顿运动方程。在运行优化任务时，VASP生成的XDATCAR记录的是优化步骤的离子构型；在运行AIMD任务时，记录的就是运动轨迹。而现阶段读取XDATCAR轨迹分析性质的后处理软件并不多，能读取的兼容性也并不好。VASPKIT0.72版本之后支持了将XDATCAR转换成通用的多帧PDB文件的功能（504）以便可视化并进行后处理分析。但是并没有提供后处理分析接口，因此我们开发了一个Python脚本XDATCAR_toolkit.py，除了实现了选择一定范围内的帧数转换成PDB文件的功能，还可以提取分子动力学模拟过程中的能量，温度并做出变化趋势图。这对判断动力学是否平衡很有帮助。另外本脚本预留了接口，可以调用读取每一帧的晶格信息和原子坐标，以便进行后续扩展编程。此脚本需要安装了numpy包的python环境，以及matplotlib包以便于画图。

在得到通用轨迹PDB文件后，就可以利用现用的分子动力学后处理软件进行处理分析，比如VMD，MDtraj，MD Analysis，Pymol等。本教程将演示通过VMD和MD Analysis软件包分析RDF（径向分布函数）和RMSD（均方根偏差），前者可以用来分析结构性质，后者对判断结构是否稳定以及模拟是否平衡很有帮助。

将XDATCAR转换成PDB文件

以VASP官网中单个水分子的AIMD模拟为例。模拟的输入文件如下，模拟的步长是0.5 fs，模拟步数1000步，模拟时间500 fs。脚本和测试例子可以在我的Github仓库下载：

https://github.com/tamaswells/VASP_script/tree/master/XDATCAR_toolkit



<https://blog.csdn.net/aa74159>

图1. 模拟的盒子

INCAR

PREC = Normal ! standard precision

ENMAX = 400 ! cutoff should be set manually

ISMEAR = 0 ; SIGMA = 0.1

ISYM = 0 ! strongly recommended for MD

IBRION = 0 ! molecular dynamics

NSW = 1000 ! 1000 steps

POTIM = 0.5 ! timestep 0.5 fs

SMASS = -3 ! Nose Hoover thermostat

TEBEG = 2000 ; TEEND = 2000 ! temperature

NBANDS = 8

POSCAR

H2O_2

0.52918 ! scaling parameter

```

12 0 0
0 12 0
0 0 12
1 2
select
cart
0.00 0.00 0.00 T T F
1.10 -1.43 0.00 T T F
1.10 1.43 0.00 T T F
KPOINTS

```

Gamma-point only

1 ! one k-point

rec ! in units of the reciprocal lattice vector

0 0 0 1 ! 3 coordinates and weight

模拟完成后将XDATCAR_toolkit.py上传到文件夹中（或者置于环境变量的路径文件夹中并赋予可执行权限即可直接调用命令XDATCAR_toolkit.py运行脚本），在shell环境中运行以下命令：

```
python XDATCAR_toolkit.py -p -t 0.5 --pbc
```

即可将XDATCAR的全部帧也就是0~499.5 fs的轨迹转化成PDB格式。其中-p用于开启PDB转换功能，-t 0.5用于指定时间步为0.5 fs，-pbc用于获取基于第一帧演变的连续轨迹。

Now reading vasp MD energies and temperature.

Now reading vasp XDATCAR.

Total frames 1000, NpT is False

Finish reading XDATCAR.

Selected time-range:0.0~499.5fs

[debug] Now entering function plotfigure...

运行完成后，将会在文件夹内生成Temperature.dat，Energy.dat，ENERGY.png和XDATCAR.pdb四个文件，前面两个分别为温度和能量随着模拟时间的变化数据，第三个是使用matplotlib绘制的趋势图（如下图），最后一个是转换得到的轨迹PDB文件，可以用于可视化轨迹，亦可用于后处理分析。-b参数用于指定转换从哪一帧开始，-e参数用于指定转换到哪一帧结束。经刘锦程博士建议，增加一个-pbc的选项，用于处理周期性获取连续的轨迹。当分子穿过盒子边界时，记录真实的位置坐标（尽管它出了边界）而不是从盒子另一边穿入的ghost原子的坐标。这对于分析与时间相关性的量(比如RMSD)很有帮助。所谓连续指的是后面的轨迹都是从第一帧演变得到的真实坐标，但是并不能保证第一帧的分子是完整的，由于周期性的缘故，第一帧内摆放的分子可能分处于盒子两侧。李继存老师有篇博文(见下面链接)讲的很明白，可以参考。如果发现第一帧内分子不完整，可以通过添加-i 1参数将分子向第一个原子靠近平移以获得完整的分子。如果发现不理想，可以通过调整-i的参数获得完整的分子。

<http://jerkwin.github.io/2016/05/31/GROMACS%E8%BD%A8%E8%BF%B9%E5%91%A8%E6%9C%9F%E6%80%A7%E8%BE%B9%E7%95%8C%E6%9D%A1%E4%BB%B6%E7%9A%84%E5%A4%84%E7%90%86/>

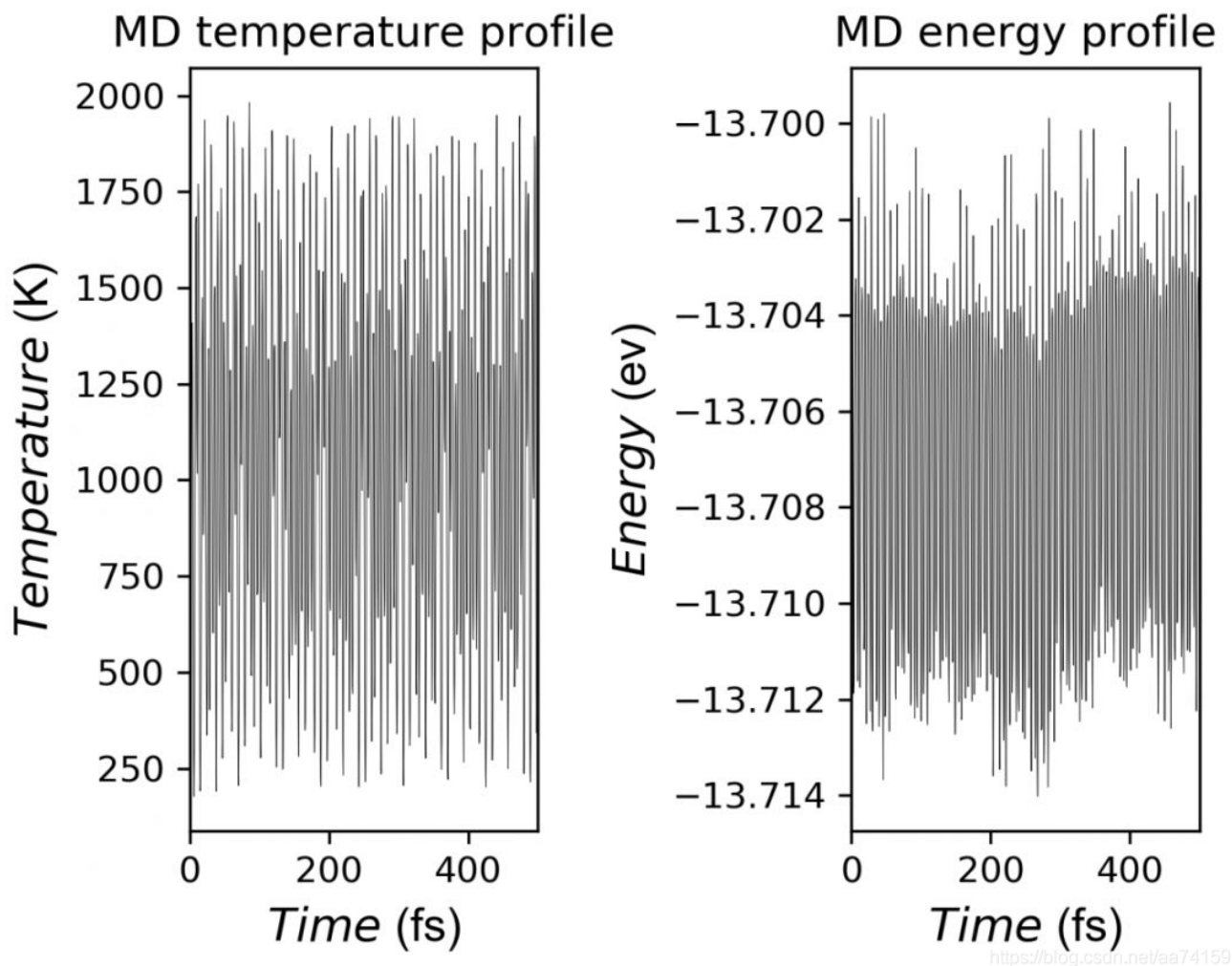


图2. 温度和系统能量的变化趋势图

RDF径向分布函数分析

得到PDB文件后，可以使用VMD，MD Analysis等分子动力学后处理软件进行分析。

1、使用VMD分析工具分析

打开VMD，将PDB文件拖入显示窗口，在主菜单VMD Main中选择Extensions-Analysis-Radial Pair Distribution Function g@，选择分析H(type H)在O(type O)周围的概率分布。值得注意的是分析RDF时,横坐标也就是max r不能超过盒子最小边长的一半，也就是得满足最小映像约定。如图4所示，在计算RDF时，如果max r的取值大于盒子最小边长的一半，就有可能重复算到一个粒子和它的映像粒子，这使得程序的周期性判断失准。将生成的dat文件的第一列和第二列作图即可得到RDF图。

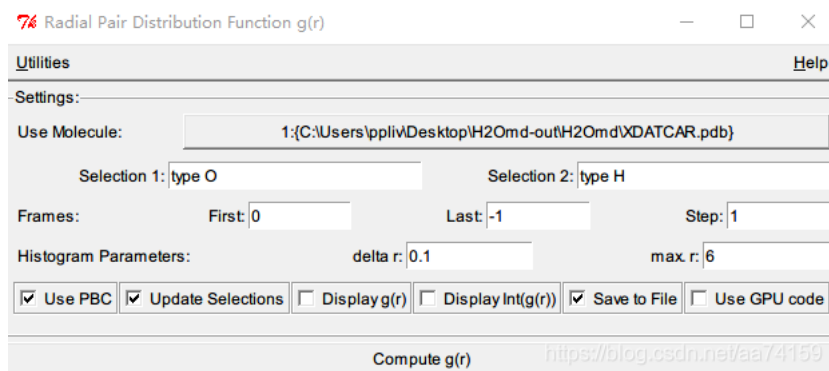


图3. VMD中计算RDF

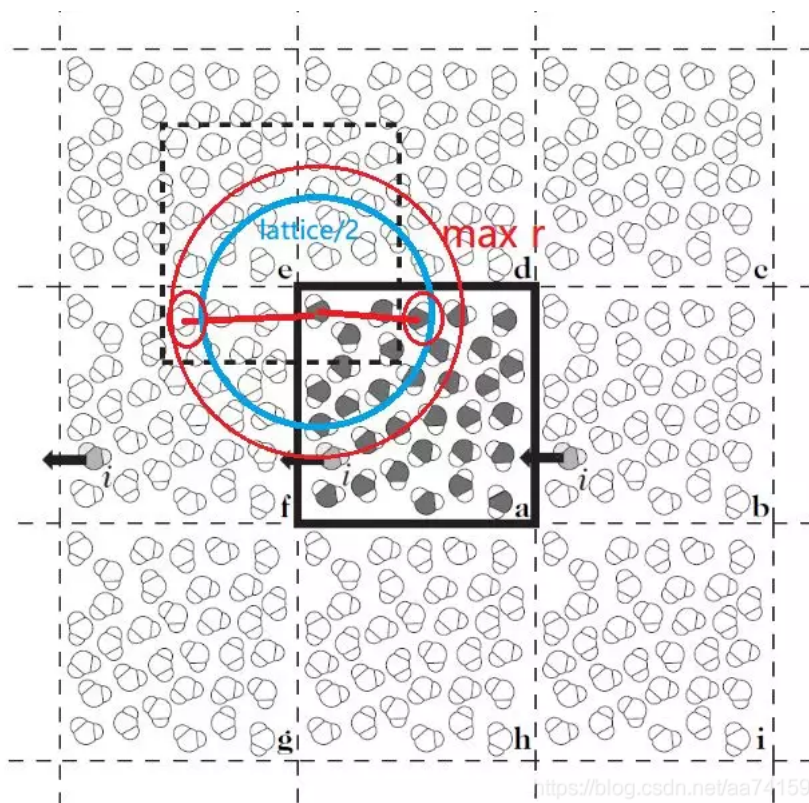


图4. 最小映像约定示意图

2、使用 MD Analysis分析 RDF

MD Analysis是一个成熟的分子动力学后处理软件，使用Python编写，开源。其教程不仅步骤详细还会给出背景理论知识。可以通过conda或者pip工具在线安装。

```
conda config --add channels conda-forge
```

```
conda install mdanalysis
```

#or

```
pip install --upgrade MDAnalysis
```

RDF分析的介绍和使用方法在网页(见下面链接)上查看。使用以下的脚本得到在O原子周围找到H原子的概率，并调用matplotlib绘制RDF图。在1.0

Å

处出现一个尖峰，也就是对应了O-H键的平衡键长(0.96

Å

)。

https://www.mdanalysis.org/docs/documentation_pages/analysis/rdf.html#radial-distribution-functions-mdanalysis-analysis-rdf

```
import MDAnalysis
```

```
import MDAnalysis.analysis.rdf
```

```
import matplotlib.pyplot as plt
```

```
u = MDAnalysis.Universe('XDATCAR.pdb', permissive=True)
```

```
g1= u.select_atoms('type O')
```

```
g2= u.select_atoms('type H')
```

```
rdf = MDAnalysis.analysis.rdf.InterRDF(g1,g2,nbins=75, range=(0.0, min(u.dimensions[:3])/2.0))
```

```
rdf.run()
```

```
fig = plt.figure(figsize=(5,4))
```

```
ax = fig.add_subplot(111)
```

```
ax.plot(rdf.bins, rdf.rdf, 'k-', label="rdf")
```

```
ax.legend(loc="best")
```

```
ax.set_xlabel(r"Distance (KaTeX parse error: Can't use function '\r' in math mode at position 1: \r A)")
```

```
ax.set_ylabel(r"RDF")
```

```
fig.savefig("RDF_all.png")
```

```
#plt.show()
```

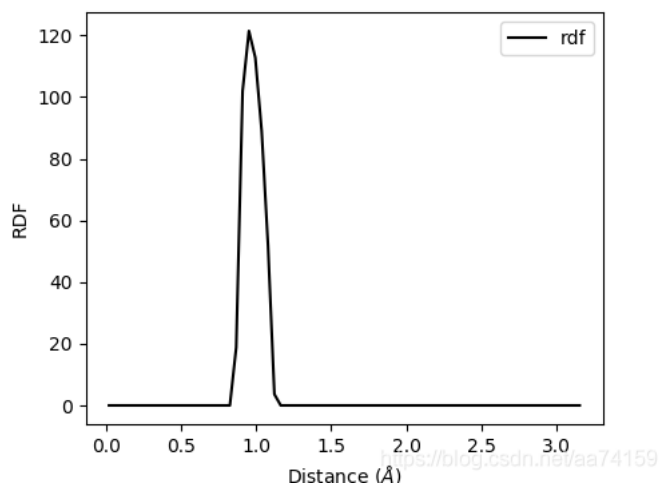


图5. RDF_O_H

RMSD均方根偏差分析

1、VMD分析RMSD

确保使用了-`pb`参数以获取连续的轨迹，将生成的XDATCAR.pdb文件拖入显示窗口。如图6右所示，第一帧内水的三个原子不在同一个镜像内，分子不完整。在进行RMSD分析时，尽管轨迹是连续的，但是在对齐分子时就会出现这个问题。因此在本例中需要选择第一个原子作为中心将分子平移完整，在图6左中，分子已经在同一个镜像中了。

```
python XDATCAR_toolkit.py -p -t 0.5 --pb -i 1
```

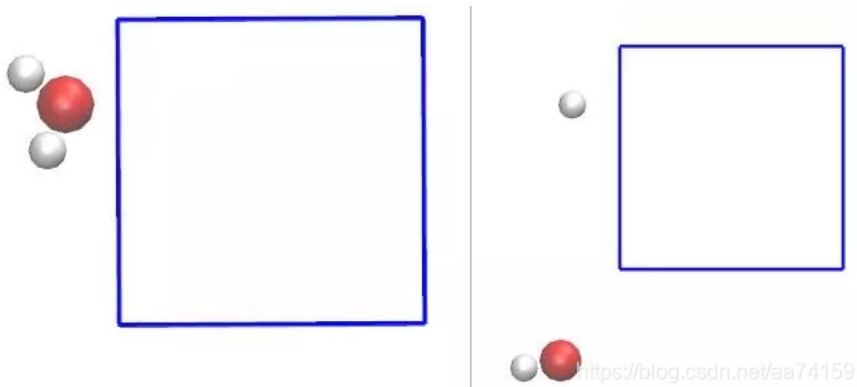


图6. 完整和不完整的水分子

将重新生成的PDB文件拖入显示窗口，在主菜单VMD Main中选择Extensions-Analysis-Analysis-RMSD Trajectory Tool，在计算RMSD前必须先做Align（对齐），这会使得每一帧结构进行平移、旋转来与参考帧的结构尽可能贴近，从而使得RMSD最小化。刘锦程提到研究生物大分子的RMSD时需要对齐操作，而研究小分子时不需要对齐分子。

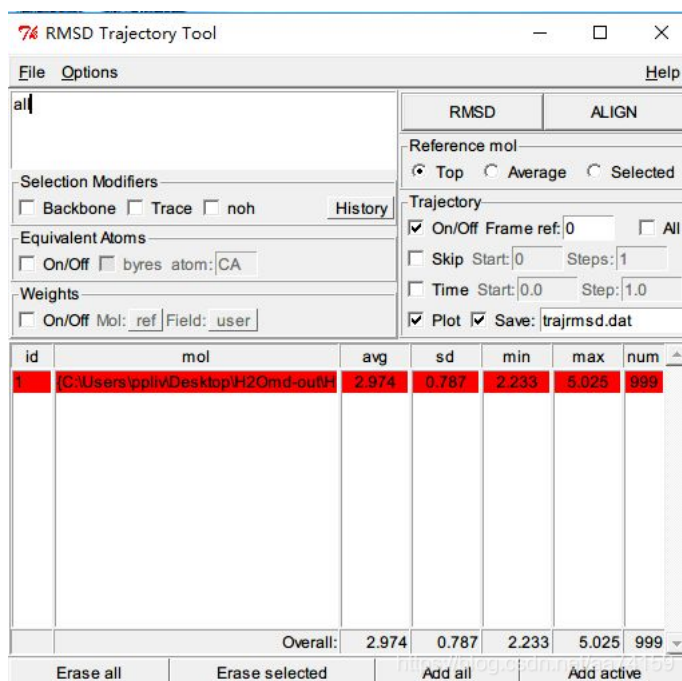


图7. VMD中计算RMSD

把左上角文本框里的默认的Protein改成all（代表所有原子都纳入考虑），然后把noh复选框的勾去掉（否则将忽略氢原子）。然后点右上角的ALIGN按钮，此时所有帧的结构就已经对齐了。本例中演示以模拟的第一帧为参考，分析氧原子位置的均方根偏差。因此在Reference mol那里选top作为参考结构，左上角文本框由all改为type O（代表计算O原子的RMSD），然后勾上Plot复选框，最后点击RMSD按钮即可得到O原子的RMSD图。在File菜单栏可以选择导出dat数据。

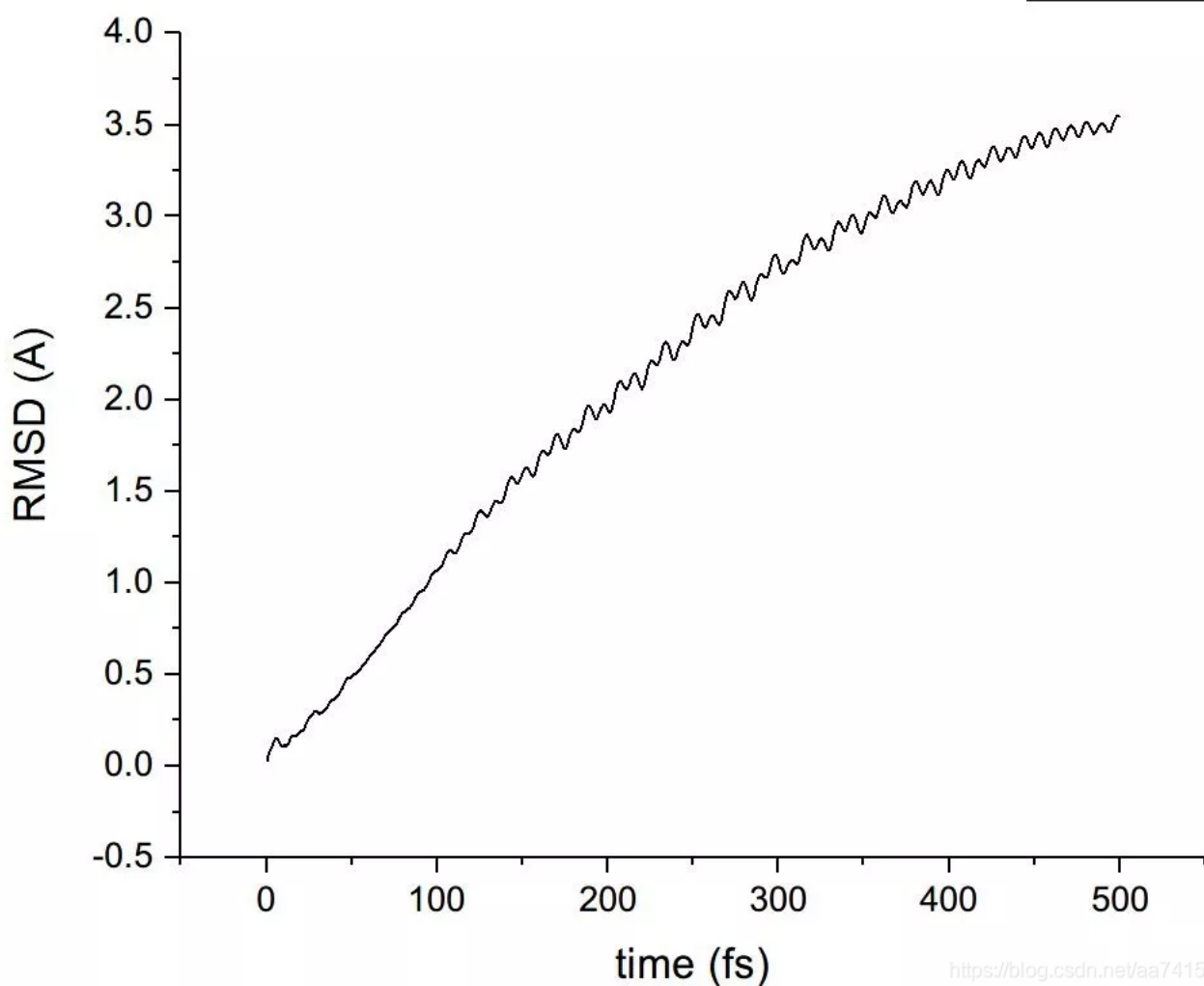
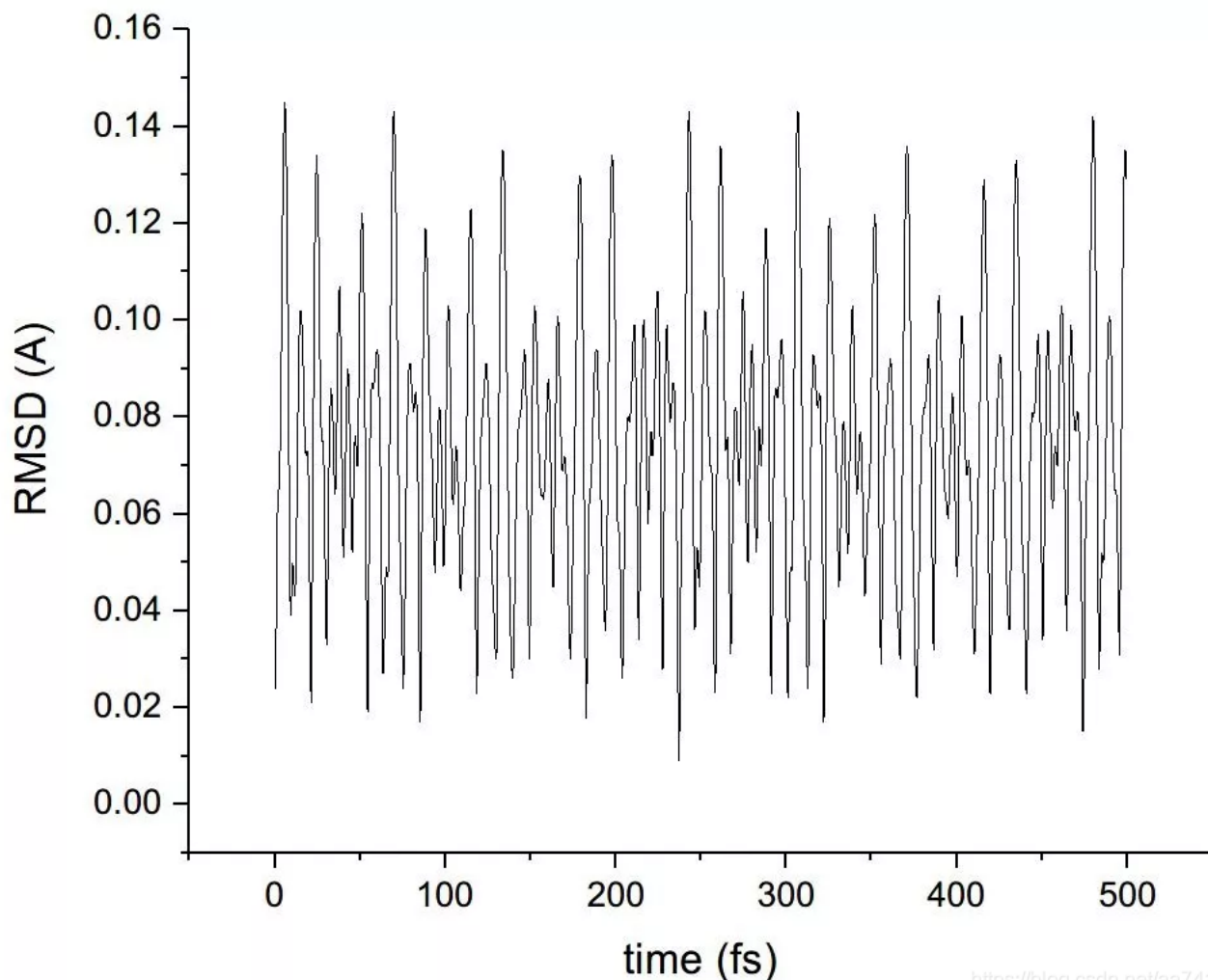


图8. VMD中未对齐轨迹计算的RMSD



<https://blog.csdn.net/aa74159>

图9. VMD中对齐了轨迹后计算的RMSD

2、使用 MD Analysis分析 RMSD

RMSD分析的介绍和使用方法在网页(见下面链接)上查看。使用以下的脚本可以分别得到所有原子，氢原子，氧原子的RMSD，并调用matplotlib绘制RMSD图。网页中有一段话(Note If you use trajectory data from simulations performed under periodic boundary conditions then you must make your molecules whole before performing RMSD calculations so that the centers of mass of the selected and reference structure are properly superimposed)也就是在计算RMSD的时候选择的分子必须是完整的，不能分处于盒子的两边。这与我们之前的描述是一致的。MD Analysis默认对齐了分子。

https://www.mdanalysis.org/docs/documentation_pages/analysis/rms.html?highlight=average

使用以下脚本可以绘制对齐了轨迹后所有原子，氧原子和氢原子的RMSD。

```
import MDAnalysis
import MDAnalysis.analysis.rms
import matplotlib.pyplot as plt
u = MDAnalysis.Universe('XDATCAR.pdb', permissive=True)
ref = MDAnalysis.Universe('XDATCAR.pdb', permissive=True) # reference (with the default ref_frame=0)
ref.trajectory[0] #use first frame as reference
R = MDAnalysis.analysis.rms.RMSD(u, ref,
select="all", # superimpose on whole backbone of all atoms # align based on all atoms
groupselections=["type H","type O"],
filename="rmsd_all.dat",center=True)#, # CORE
timestep=0.0005 #0.5fs from fs to ps as Reader has no dt information, set to 1.0 ps
R.run()
rmsd = R.rmsd.T # transpose makes it easier for plotting
time = rmsd[1]*timestep
```

```
fig = plt.figure(figsize=(5,4))
ax = fig.add_subplot(111)
ax.plot(time, rmsd[2], 'k-', label="all")
ax.plot(time, rmsd[3], 'r-', label="type H")
ax.plot(time, rmsd[4], 'b-', label="type O")
ax.legend(loc="best")
ax.set_xlabel("time (ps)")
ax.set_ylabel(r"RMSD (KaTeX parse error: Can't use function 'r' in math mode at position 1: \r A)")
fig.savefig("rmsd_md_analysis.png")
```

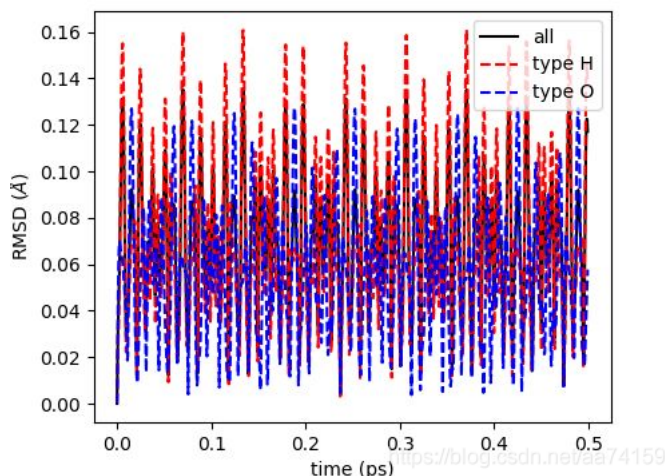


图10. MD Analysis计算的对齐了轨迹后计算的所有原子，H原子和O原子的RMSD



普通网友

关注

11



66

1



专栏目录

"分子动力学模拟及第一性原理计算方法与应用".pdf

10-28

lammps分子动力学、gromacs分子动力学、与第一性原理vasp

第一原理分子动力学新书 - Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods

06-26

Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods By Dominik Marx, Jürg Hutter Publisher: Cambridge University Press Ab initio molecula...

如何熟练掌握分子动力学LAMMPS软件模拟

最新发布

zmjia111的博客 203

随着理论化学及计算机技术的发展，分子模拟技术被越来越多地用来加快科学研究与开发过程。分子动力学模拟方法以统计热力学、分子力学及牛顿时力学为基...

【CP2K教程（一）】元动力学（metadynamics）与增强采样技术

qq_45659165的博客 1107

对于本教程，给出了一些输入和输出文件，以提供解决给定问题的完整过程。还给出了一些提示以帮助分析结果。为了能够运行这些示例，需要在输入文件中...

分子动力学aimd_锂电池计算模拟--AIMD算扩散系数、扩散能垒

weixin_42162171的博客 4483

前情提要无论是锂电池电极材料，还是固态电解质，锂离子的迁移速率都直接决定了其倍率性能，而倍率性能又决定了手机/汽车是1小时充满电还是1分钟冲...

分子动力学aimd_CP2K教程系列之第一性原理分子动力学(Pymatflow篇)

weixin_39814454的博客 1037

本系列CP2K教程是《CP2K菜根谭》的升级版，在旧版基础上添加了如何结合Pymatflow工具简化计算流程的内容。话不多说，本文将为您带来CP2K系列教...

用Python实现径向分布函数（RDF）的计算

weixin_43740665的博客 5744

什么是RDF？其实什么是径向分布函数（Radial distribution function）并不需要我去赘述，毕竟百度一搜一大堆。这里给出一个我第一接触RDF时看到的定义...

ubuntu安装vasp_用强大的GROMACS分析工具分析VASP的动力学结果

weixin_39625305的博客 278

之前的教程里我们介绍了一个XDATCAR_toolkit.py工具，将VASP的AIMD的轨迹转成PDB的格式，再借用VMD和MD Analysis软件包分析RDF(径向分布函数)...

AIMD

anjuenz87013的博客 1468

网络控制，基于控制论的角度，分成开环控制和闭环控制。开环控制，即预防式控制，事先规划一个网络，确保它不会发送拥塞，当网络运行起来，则就不...

分子动力学开源分析软件MDAnalysis安装介绍及使用

qq_31637761的博客 2340

MD AnalysisMD Analysis 安装 MD Analysis (以下简称mda) 是一款分子动力学后处理代码，具有优秀的后处理函数库，高效的处理速度，可并行的计算功能...

mdanalysis, MDAnalysis是用于分析分子动力学轨迹的python 库.zip

09-18

mdanalysis, MDAnalysis是用于分析分子动力学轨迹的python 库 MDAnalysis存储库自述文件 [*] 美国的 MDAnalysis是一个用于分析各种流行的模拟软件包的...

u010643777的专栏

UDT[1]是建立在udp之上的可靠传输协议，主要思想就是，按照速率，调整速率的增长因子。

分子动力学aimd_《Acta Mater》从头算分子动力学方法为热力学模型提供新证据！...

weixin_39762348的博客 355

采用从头算分子动力学(AIMD)方法，研究了在现有热力学模型中假设存在缔合物的Ba-Bi液体的性质，避免了由经验势引起的误差。计算结果与文献中CALPH...

计算机第一性原理局限性,第一性原理分子动力学

weixin_39517560的博客 612

分子动力学假定原子的运动是由牛顿运动方程决定的。这意味着原子的运动是与特定的轨道联系在一起的。当核运动的量子效应可以忽略，以及绝热近似严格...

计算材料学与第一性原理、分子动力学、蒙特卡洛计算方法

hdpai2018的博客 5439

计算材料学(Computational Materials Science)是近年来飞速发展的一门新兴交叉学科。它综合了凝聚物理、材料物理学、理论化学、材料力学和工程力学、...

固体与表面-从零学习vasp计算(1) 热门推荐

liujc_THU的博客 1万+

固体与表面-从零学习vasp计算1固体与表面-从零学习vasp计算(1)理论催化计算实战教学目的和理念课程用到的程序课程准备工作：固体与表面-从零学习vas...

分子动力学aimd_成果 | 我院博士生郭见青等揭示氨根离子的水合结构及其动力学行为...

weixin_31437175的博客 710

北京大学物理学院博士生郭见青与合作导师王恩哥、徐莉梅、陈基以及合作者在《物理评论快报》发表研究论文，利用量子蒙特卡洛(QMC)计算和第一性原理...

MDAnalysis 安装及使用

Jasonkun 1943

MDAnalysis 不作介绍。 上官网链接：https://www.mdanalysis.org/pages/installation_quick_start/ conda 安装及使用 安装前注意： matplotlib库版本问题，需...

vasp计算之输入输出文件

weixin_44484230的博客 6374

一、vasp文件： INCAR in ** STOPCAR in stout out POTCAR in ** KPOINTS in ** IBZKPT out POSCAR in ** CONTCAR out EXHCAR in (should not be use...

【mediasoup 带宽估计】aimd算法1： AimdRateControl

突围 323

E:\ADDEV\RTCTrans\mediasoup\worker\deps\libwebRTC\libwebRTC\modules\remote_bitrate_estimator\aimd_rate_control.h rtcp_bitrate 最多为current_bitrat...

“相关推荐”对你有帮助么？



非常没帮助



没帮助



一般



有帮助



非常有帮助

©2022 CSDN 皮肤主题：深蓝海洋 设计师：CSDN官方博客 返回首页

关于我们 招贤纳士 商务合作 寻求报道 400-660-0108 kefu@csdn.net 在线客服 工作时间 8:30-22:00

公安备案号11010502030143 京ICP备19004658号 京网文〔2020〕1039-165号 经营性网站备案信息 北京互联网违法和不良信息举报中心

家长监护 网络110报警服务 中国互联网举报中心 Chrome商店下载 账号管理规范 版权与免责声明 版权申诉 出版物许可证 营业执照

©1999-2022北京创新乐知网络技术有限公司