

Skriptsammlung

Handbuch / Documentation

Jim Bachmann

j_bach04@uni-muenster.de

30.07.2013

Inhaltsverzeichnis

1	analysis_per_frame	3
1.1	die .fcf-datei / the .fcf-file	4
1.2	die Stichwörter / the keywords	4
1.2.1	Stichwörter / Keywords	5
1.3	Auswertung der Dateien / evaluation of calculated data	5
1.4	Beispiel einer .fcf Datei / Example of a .fcf file	7

1 analysis_per_frame

Dieses Skript ermöglicht diverse Auswertungen an einer Trajektorie im .gro Format. Der Aufruf ist direkt aus der Shell möglich über:

```
analysis_per_frame input.gro input.fcf input.top startzeit endzeit
```

Dabei benennt *input.gro* die Trajektorie welche ausgewertet werden soll und *input.fcf* eine Steuerdatei, welche angibt welche Auswertungen wie durchgeführt werden sollen. Optional muss eine Topologiedatei *input.top* für die Massenschwerpunktsberechnung angegeben werden. Ebenfalls optional sind ein Startzeitpunkt und ein Endzeitpunkt für die Auswertung, im gegenwärtigen Zustand muss für die Start-endzeit Eingabe immer eine Topologiedatei angegeben werden! Dies kann, wenn keine Massenschwerpunktsberechnung durchgeführt wird, eine beliebige dummy-datei sein.

Anschliessend beginnt das Skript mit der Arbeit, dies kann je nach Länge der Trajektorie und bei allen Auswertungsverfahren gleichzeitig lange dauern. Für eine Trajektorie mit 2000 Schritten benötigt das Skript für alle Auswertungen 10 Stunden.

Die Ausgabedateien werden erzeugt und falls diese bereits vorhanden sind, wird die Ausgabe an diese Standarddateien angehängt.

This Script enables to calculate different quantaties for a .gro trajectory file. You can use the script out of the shell by:

```
analysis_per_frame input.gro input.fcf input.top starting_time ending_time
```

input.gro is the .gro trajectory, *input.fcf* a file which contains information which and how the calculations are done. Optional you can use a *input.top*, which is a topology-file, which is needed for center-of-mass calculations. You can also define start and ending times for which the calculations are done, note that in the current state you need a topology file to use start and ending times. you can use any dummy file for this.

After specifying this you are good to go and can start the calculation. For a trajectory with 2000 steps the script takes about 10 hours.

The output is appended onto the output files.

1.1 die .fcf-datei / the .fcf-file

Die .fcf Datei gibt an, welche Auswertungen durchgeführt werden sollen. Dabei gibt es verschiedene Stichwörter für die einzelnen Auswertungen. Kommentare werden mit einer # am Anfang der Zeile gekennzeichnet. Leerzeilen werden ebenfalls unterstützt.

The .fcf file defines which calculations are done. There are different keyword for different calculations. If you want to use comments, use a # at the beginning of the line. You can use empty lines as well.

1.2 die Stichwörter / the keywords

Dieses Auswertungsskript arbeitet mit der Voraussetzung, dass die zu untersuchende Struktur aus „Cluster“, sich Wiederholenden Strukturen, aufgebaut ist. So ein „Cluster“ wäre zum Beispiel 1 P3HT-Molekül, gefolgt von 3 DiPBI-Molekülen. Die gesamte .gro Datei müsste in diesem Fall für eine Auswertung aus 1 P3HT, 3 DiPBI, 1 P3HT, 3 DiPBI,... usw. bestehen.

This script works on the basis, that there is a repetitive structure in your .gro file, the so called „cluster“. For example 1 P3HT-molecule followed by 3 DiPBI-molecules. In this case you would need a .gro file which contains 1 P3HT, 3 DiPBI, 1 P3HT, 3 DiPBI,... and so on.

1.2.1 Stichwörter / Keywords

Vektoren auf einer Ebene, wobei der Vektor von der Krümmung weg zeigt: DPIVEC

Massenschwerpunkte, xyz-Trajektorie: COM_COL

Korrelation zwischen Vektoren und Abstand: VEC_CORRELATION

Planarität einer Kette: C5_PLANARITAET

Winkel zwischen Vektoren von C5-Ring $i \rightarrow i+1$ und $i+1 \rightarrow i+2$: C5_P3HT_ANGLES

Alle Stichwörter enden mit „END“ nach der Eingabe der Parameter.

Vectors on a surface, where the vector is in the opposite direction as bending: DPIVEC

Center of Masses, xyz-trajectory: COM_MOL

Correlation between vectors and distance: VEC_CORRELATION

See how planar a chain of C5 is: C5_PLANARITAET

Angle between C5-ring $i \rightarrow i+1$ and $i+1 \rightarrow i+2$: C5_P3HT_ANGLES

All keywords must be ended with „END“ after definition of parameters.

1.3 Auswertung der Dateien / evaluation of calculated data

Für die Auswertung der berechneten Dateien stehen weitere Skripte bereit. So berechnet *get_contour* einen Contourplot, wobei der Wertebereich in der Eingabedatei in ein Raster eingeteilt wird und gezählt wird, wie viele Punkte jeweils in einer Rasterzelle liegen. Für C5_PLANARITAET bietet sich diese Auswertung an.

planare_reihe2 kann verwendet werden, um aus der Ausgabe von C5_PLANARITAET die Kettenlängen ($\pm 15^\circ$) zu berechnen. *pl_kette_percentage* berechnet die Anteile der jeweiligen gefundenen Kettenlängen durch *planare_reihe2* in %, als Mittel über die gesamte Trajektorie.

For the evaluation of the calculated data, there are different scripts. *get_contour* calculates a contour-plot, where the data-range is divided into grid-cells and then the script counts how many data points are in which grid cell. this is a nice method of evaluation

for C5_PLANARITAET.

planare_reihe2 is a script which calculates, how many chains there are in the file generated by C5_PLANARITAET, where a tolerance of $\pm 15^\circ$ is allowed. *pl_kette_percentage* then can be used to calculate the percentage of the different length, found by *planare_reihe2*.

1.4 Beispiel einer .fcf Datei / Example of a .fcf file

#format control file for analysis_per_frame

COM_MOL

#calculates the center of mass for a molecule-type and writes

#it to xyz trajectory

#input: timestep, index of first atom in mol, atoms per mol,

#number of mol per cluster, atoms per repetitive structure

#i.e. 1 386 118 3 740 :for 1 P3HT (386 atoms) followed by 3 DIPBI (118 atoms)

#and so on every 1 timesteps (unit i.e. ps from .gro file)

1 386 118 3 740

END

#calculates the vector correlation for 2 vectors

#, which are defined by reference vectors

#input: timestep, id1, id2, id3, id4, id5, id6, atoms_in_clust,

#num_mol1_per_clust, atms_per_mol_1, startatom_mol_1, atms_to_skip_between_vec_calc,

#id_2_1, id_2_2, id_2_3, id_2_4, id_2_5, atms_to_skip_between_vec_calc,

#vectors_per_clust, atms_per_clust

vectors are: id1 and id2, between them is the middle of the molecule.

#for the vectors see the bachelor thesis - chapter dipbi-vectors.

#for id2 see chapter about C5-vectors.

VEC_CORRELATION

1 23 53 43 28 19 54 740 3 118 386 0 1 2 4 5 6 12 32 740

END

C5_PLANARITAET

1 1 2 4 5 6 12 740 32

END

```
#calculates the normal vectors on a molecule surface based on 4 reference vectors
#then gives them a direction according to molecule bending
#after this a "vorzugsvector" is calculated, as a sum over all normal vectors
#input: timestep, indx1, indx2, indx3, indx4, indx5,
#indx6, direction_indx1, direction_indx2, direction_indx3, direction_indx4,
#number_of_atoms_per_mol, number_of_mol_per_cluster, atoms_per_cluster,
#atoms_to_skip_until_next_mol_in_cluster
#see the bachelor thesis for the definition of vectors. vectos are
#from middle of id1 and id2 to the id's as named in the thesis.
DPIVEC
1 23 53 43 28 19 54 69 42 31 4 118 3 740 386 0
END

#P3HT_SIDECHAINS
#1 4 12 12 740 32
#END

C5_P3HT_ANGLES
#frame to print data (units are the same as in the initial .gro file),
#first atom index in c5 ring, 2., 3., 4., 5., number of atoms to skip
#until next c5 ring, number of atoms in one repetative structure, number
#of c5 rings in one repetative structure
#i.e. for 1 P3HT followed by 3 DIPBI and so on. print data every 3
#(here it's picoseconds), first c5 ring with idizes 1 2 4 5 6. then skip 12
#atoms for next c5 ring. P3HT has 386 and 3 DIPBI have 3*118=354 atoms
#so 740 atoms per structure, 32 c5 rings per P3HT
#see the bachelor thesis for the definition of vectors. vectos are
#from middle of all id's to the id's as named in the thesis.
#3 1 2 4 5 6 12 740 32

3 1 2 4 5 6 12 740 32
END
```