

המחלקה להנדסת תוכנה

פרויקט גמר – תשע"ט

סימולטור מטה-דינמיקה מולקולרית

Molecular Meta Dynamics Simulator for composed materials

מאת:

מיכל גבאי

שירה ירושלמי

תאריך:

אישור:

מנחה אקדמי: דר' יהודה חסין

תאריך:

אישור:

רכז הפרויקטים: דר' אסף שפיינר



מערכות ניהול הפרויקט:

#	מערכת	מיקום
1	מאגר קוד	https://github.com/shirayr/Simulation-Of-Atoms
2	יומן	https://trello.com/b/MZtniPvh/atoms-simulation
3	סרטון גרסת אלפא	https://drive.google.com/file/d/15cFfXLNfcF5kyCsNlaG5qCuZIJTgn87-/view?usp=sharing

תוכן עניינים:

3.....	מילון מונחים, סימנים וקיצורים
4.....	מבוא
7.....	תיאור הבעיה
8.....	תיאור הפתרון
9.....	סקירת עבודות דומות / בספרות והשוואה / סקר שוק
11.....	סיכום / מסקנות
11.....	נספחים

מילון מונחים, סימנים וקיצורים:

מונח	פירוש
אטום	האטום הוא החלקיק הקטן ביותר של יסוד כימי שבו נשמרות תכונות היסוד. נתמקד באטומים: פחמן (Carbon), מימן (Hydrogenous), חמצן (Oxygen), חנקן (Nitrogen)
מולקולה	מונח בכימיה המתאר מבנה (חומר) הבנוי משני אטומים או יותר, המחוברים ביניהם בקשר כימי.
קשר כימי bond	קשר כימי הוא אינטראקציה בין מטענים חשמליים של מרכיבי אטומים, של אטומים שלמים או של מולקולות הגורמת לזיקה בין אטומים או מולקולות. קשרים אלו הם המעניקים לחומרים שונים את מגוון תכונותיהם, ובלעדיהם לא היו בעולם תרכובות.
סדר קשר bond order	מושג המגדיר את מספר הקשרים הכימיים נטו במולקולה.
מונומר	אבן הבניין של הפולימר. זוהי מולקולה אשר חוזרת במחזוריות קבועה בפולימר. בנוי מאטומי פחמן הקשורים לאטומים כגון מימן, חמצן וחנקן.
פולימר	מולקולה ענקית שמורכבת מיחידות חוזרות של מולקולה מסוימת. השרשרת או המולקולה הארוכה נקראת פולימר ואילו המולקולה הקטנה שחוזרת בה שוב ושוב נקראת מונומר.
ריאקציה כימית	תהליך שבו משתנה מבנה המולקולות המרכיבות את החומר. תרכובות המוצא נקראות מגיבים ואלה הנוצרות בסופה של התגובה קרויות תוצרים.
EPON862, DETDA	הפולימרים עליהם נרצה להריץ את הסימולציה
תהליך צילוב	תהליך בו נוצרים קשרים כימיים מסוג קשר צולב המקשרים בין שרשראות פולימרים.
דינמיקה מולקולרית	סימולציה של דינמיקה מולקולרית (MD) נועדה לדמות מודל תנועה והתנהגות של אטומים בודדים במולקולה או מולקולות לפי בחירה על ידי החלת חוקים של מכניקה קלאסית למציאת פרמטרים כגון מהירות, מטען חשמלי, מיקום ויצירת מולקולות חדשות.
מטה דינמיקה	שיטת סימולציה ממוחשבת המשמשת להערכת האנרגיה החופשית ופונקציות אחרות של המערכת בסימולציות מסוג דינמיקה מולקולרית.
פוטנציאל כימי	כמות האנרגיה שיש להשקיע על מנת להוסיף חלקיק למערכת קיימת בטמפרטורה כלשהי.
שדה כוח FORCE FIELD	בהקשר של מודלים מולקולריים, שדה כוח מתייחס לפונקציונליות ולמערכי הפרמטרים המשמשים לחישוב האנרגיה הפוטנציאלית של מערכת של אטומים במכניקה מולקולרית וסימולציות דינמיות מולקולריות.

LAMMPS	התוכנה מבוססת קוד פתוח להרצת סימולציות מטה-דינמיות של MD (דינמיקה מולקולרית) על אטומים ומולקולות בזמן ריצה יעיל בעיקר על מחשבים התומכים בחישוב מקבילי.
REAXFF	שדה כוח מבוסס על סדר-קשר בין אטומים. אחד מהמימושים שלו הינו סימולציות של דינמיקה מולקולרית. בעוד ששדות כוח אחרים לא יכולים למדל ריאקציות כימיות בגלל דרישות לשביר/יצירת קשרים (הפונקציונליות שלהם תלויה בהגדרה, מדויקת של כל הקשרים). REAXFF נמנע מהגדרה מדויקת של הקשרים הכימיים ובמקום משתמש בערכי הסדר קשר של כל אטום ומתיימר להיות כללי ככל האפשר, בעל כמות מסיבית של פרמטרים.
קובץ dat	קובץ טקסט קלט להרצת סימולציה ב LAMMPS בעל פורמט מוגדר המכיל את המצב ההתחלתי של האטומים בסימולציה- סיווג מספר סידורי לכל אטום, סוג האטום, ווקטור מיקום. סיווג מספר סידורי לכל סוג אטום, הגדרת מסה לכל סוג אטום וכמו כן הגדרת גבולות תלת ממדיים של ה-box של הסימולציה בהם רצים האטומים.
קובץ Extra_Potential_Parameters	קובץ טקסט-קלט להרצת סימולציה ב LAMMPS וכן קלט לקוד שכתבנו למציאת פרמטרים אופטימליים, בעל פורמט מוגדר. בין היתר, הקובץ מכיל את טווח הערכים של F1, F2 ואת מספר צעד הזמן בו מייצאים את מצב המערכת.
קובץ resultCSV	קובץ טקסט- פלט שאנו יצרנו שמנתח קבצי species.out השומרים תוצאות של מספר ריצות. עבור כל ריצה, נבדק צעד הזמן האחרון- ספירה של מספר מולקולות רצויות שהתקבלו ומספר המולקולות האחרות. קובץ זה נקרא ע"י תוכנית פייתון ומייצר קובץ csv המציג ניתוח בפורמט מסודר.

1. מבוא

סימולציה הינה חיקוי של מציאות מורכבת, באמצעות מודל מתאים. המטרה היא לייצג מאפיינים מסוימים בהתנהגות מערכת.

בכימיה החישובית, סימולציה של דינמיקה מולקולרית (MD) נועדה לדמות מודל תנועה והתנהגות של אטומים בודדים במולקולה/מולקולות, לפי בחירה, על ידי החלת חוקים של מכניקה קלאסית למציאת פרמטרים כגון מיקום, מהירות, טמפרטורה, כוחות ויצירת מולקולות חדשות. השימוש במכניקה הקלאסית לתיאור האטומים מסתמך על פרמטרי forcefields שחושבו או נמדדו מראש (פרמטרים ידועים מראש/ מדידות מניסוי קודם/ לקוחים מהספרות).

מטה-דינמיקה (Metadynamics) הינה שיטת סימולציה ממוחשבת המשמשת להערכת האנרגיה החופשית ופונקציות אחרות של המערכת בסימולציות מסוג דינמיקה מולקולרית.

הרצת סימולציה מסוג מטה-דינמיקה של דינאמיקה מולקולרית מאפשרת חיקוי תנאי מעבדה אמיתיים ומטרתה לייצג מאפיינים בהתנהגותה של מערכת אטומית בעת הפעלת מניפולציות כימיות על המערכת כדי לקבל תחזית על התנהגות המערכת בהשפעת אותן מניפולציות. מחלקים את הסימולציה למספר מוגדר מראש של צעדי זמן, בגודל מוגדר מראש. בכל צעד זמן מתבצע חישוב של וקטורי המיקום והמהירות של כל אטום בהשפעת הכוחות הפיזיקליים הפועלים על המערכת. צעד זמן בסימולציה הינו בסדר גודל של 10^{-15} שניות ואורך כולל של סימולציה הינו בסדר גודל של 10^{-9} שניות מה שהופך הרצת סימולציה של תהליכים כימיים הקורים בטבע בסדרי גודל של שניות (כגון ערבוב 2 חומרים במשך חצי דקה ליצירת חומר חדש) בלתי אפשרי.

LAMMPS הינה תוכנה מבוססת קוד פתוח להרצת סימולציות מטה-דינמיות של MD (דינמיקה מולקולרית) על אטומים ומולקולות בזמן ריצה יעיל, בעיקר על מחשבים התומכים בחישוב מקבילי. נרצה להשתמש בתוכנה זאת על מנת להריץ סימולציות של ריאקציה כימית. ריאקציה כימית (תגובה כימית) היא תהליך שבו משתנה מבנה המולקולות המרכיבות את החומר. תרכובות המוצא נקראות מגיבים ואלה הנוצרות בסופה של התגובה קרויות תוצרים. הבחירה ב LAMMPS נעשתה מהמניעים הבאים: המניע המרכזי הינו תמיכה בהרצת הפוטנציאל REAXFF בו אנו משתמשים בהרצת הסימולציה, פוטנציאל רחב המסביר המון תופעות טבע ומאפשר התרחשות ריאקציות כימיות. REAXFF הינו פוטנציאל מסורבל שלקח שנים לכתוב אותו ולכן מסובך מכדי לכתוב לבד. בנוסף לכך, בעבר ניסו לפתח מערכת לסימולציות על אטומים במכללה, אך הפיתוח צרך המון זמן ותהליך דבוג ארוך. לבסוף הוחלט להיצמד לחבילת תוכנה קיימת ולהרחיב אותה מתוך כוונה להוסיף בעתיד יכולות שונות לחיזוק המערכת. LAMMPS הינה מערכת יציבה והעיקרון המנחה אותה- זמני ריצה יעילים מבוססים חישוב מקבילי, מאפשרת הרצת סימולציות ביעילות מקסימלית.

הפרויקט שלנו מהווה פרויקט המשך למחקר שהתחילה סטודנטית מהמכללה – אופק ברזני. אופק הוסיפה קוד למערכת ה-LAMMPS. הרצון היה לקחת את LAMMPS בתור כלי להרצת סימולציות ולתת לו יכולת להתמודד עם הרצת תהליכים של ריאקציות כימיות המתרחשות בטבע בטווחי זמן הגדולים משמעותית מ- 10^{-9} שניות ובפרט עבור ריאקציה ספציפית בין 2 מולקולות גדולות של פולימרים.

אורך סימולציה ב- LAMMPS הינו ברזולוציה של 10^{-9} שניות ולכן לא ניתן להריץ סימולציה של תהליכים וריאקציות כימיות שאורכן גדול מזה, או בכלל באורך של שניות, דקות ואף שעות, לכן תחום השימוש ב- LAMMPS הינו מצומצם בהתאם.

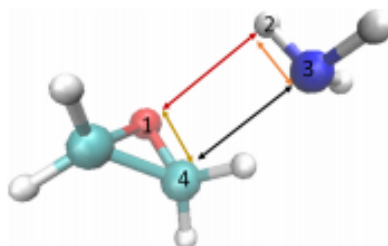
במאמר עליו מתבסס הפרויקט (מתואר בפירוט בסקר הספרות), Accelerated ReaxFF, Simulations for Describing the Reactive CrossLinking of Polymers Aniruddh, מתואר אלגוריתם הנועד להוביל לזירוז תהליך צילוב בין שני סוגים של מולקולות לשם יצירת חומר חדש ע"י הפעלת פוטנציאל נוסף על המערכת במקביל להפעלת הפוטנציאל REAXFF. תהליך זה מתרחש בטבע בסדרי גודל של דקות, ואילו אנו נרצה לאפשר הרצתו כסימולציה ב-LAMMPS בסדר גודל של עד כ- 10^{-9} שניות. על פי הפתרון המוצע במאמר כאשר אנו מזהים את ארבעת האטומים המגיבים במיקומים קרובים המאפשרים נקודת התחלת לריאקציה, הפעלת הפוטנציאל הנוסף תוסיף את האנרגיה הדרושה למערכת במטרה להאיץ את התרחשות תהליך הצילוב.

הטריגר להפעלת הפוטנציאל הנוסף:

התקרבות אטומים מסוימים במולקולה אחת לאטומים מסוימים אחרים במולקולה השנייה. נרצה לאתר רביעייה חשודה בין האטומים H, C, O, N, הנמצאים במרחקים הבאים:

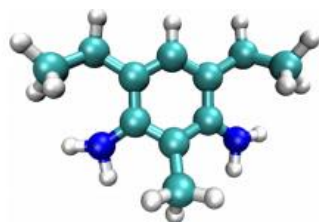
PAIR	O-H	H-N	N-C	C-O
min dist- max dist (angstrom units)	1.5-8.0	0.9-1.2	3.0-8.0	1.3-1.6

(מקרא לתמונה: 1. אדום=חמצן=O, 2. אפור=מימן=H, 3. כחול=חנקן=N, 4. תכלת=פחמן=C)
כמו כן H, N שייכים למולקולה אחת ו-C, O שייכים למולקולה השנייה.

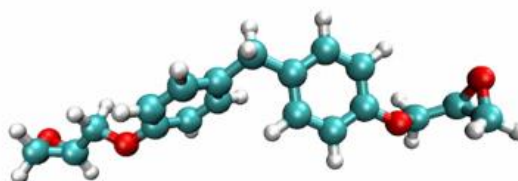


עד כה אופק התמקדה בניסיון לאפשר הרצת סימולציה של תהליך ריאקציה בין המולקולות *DETDA*, *EPON862*, האורך כחצי שעה. היא הוסיפה קוד בתוך REAXFF, שם מתבצע תהליך זיהוי של רביעיית אטומים והוספת הפוטנציאל הנוסף לזירוז הצילוב. (לאחר מכן יתבצע חקירת תוצאות הריאקציה ומאפייני החומר החדש שנוצר ע"י אנשי כימיה.)

המולקולות *DETDA(a)*, *EPON862(b)* עליהן אנו עובדים:



(a)



(b)

2. תיאור הבעיה

מצב הפרויקט כרגע:

הצליחו לזהות רביעיות חשודות לריאקציה, להפעיל אנרגיה נוספת במערכת ולקבל מולקולות חדשות. לאחר הכנסת קוד ה-MetaDynamics לקוד ה-Reax, התגלו שתי בעיות:

1. אנו מריצים סימולציה המפעילה כוחות/פוטנציאל. פוטנציאל זה תלוי בפרמטרים שונים – כוחות

F1, F2 המופעלים על כל זוג אטומים (ע"פ הנוסחה שנלקחה מן המאמר עליו מתבסס

הפרויקט) ומספר צעדי הזמן שבהם מופעל הפוטנציאל.

כרגע, לא ברור מהם הפרמטרים האופטימליים המתאימים לנוסחה להוספת הפוטנציאל והם נבחרו באופן שרירותי.

הפעלת כוח חזק מידי על האטומים עלולה לגרום לתלישת האטומים זה מזה בצורה לא

הגיונית. הפעלת כוח חלש מידי - לא תגרום לשום שינוי במולקולות.

בנוסף, יש לדעת למשך כמה צעדי זמן כדאי להפעיל את הפוטנציאל הנוסף כך שישפיע על

המערכת, מצד אחד, שהצילוב יספיק להתבצע ומנגד, לא יגרום ל"קרעים".

כמו כן, סימולציות שונות מכילות סדרי גודל שונים של מולקולות, מה שמשפיע על פרמטרים אלו.

המטרה היא למצוא את הפרמטרים שיביאו לאחוז הצילוב הגבוה ביותר באופן שיטתי שיפעל עבור סדרי גודל שונים של המולקולות.

2. ההרצות מבצעות חישובים עם נתונים על אלפי חלקיקי אטומים.

לבצע הרצות על נתונים כה רבים אורך זמן רב ודורש הרבה משאבים.

הרצות שבוצעו ביחס של 2:4 מולקולות או 4:8 מולקולות ארכו בזמן סביר, אך בהרצות גדולות

יותר - על 8:16 או 16:32 מולקולות – זמני הריצה גדלו משמעותית. אלו הרצות על עשרות

אלפי אטומים, הדורשות מיליוני צעדי זמן ויכולות להגיע לשבוע של הרצה, ואף יותר.

אופק, כחלק מעבודתה על הפרויקט, התחילה להפוך את הקוד ל-multy-threading, כלומר-

תמיכה בריצה על מספר מעבדים. היא ביצעה זאת בעזרת כלים מוכנים מתוך המערכת של

LAMMPS.

אך, לריצות גדולות וכבדות זה עדיין לא מספיק. אפשר לשפר פלאים את כל התהליך ע"י

שימוש בכרטיס מסך - gpu.

3. תיאור הפתרון

1. בפרויקט זה התחלנו בפיתוח כלים אוטומטיים לבחירת הפרמטרים האופטימליים לנוסחה, באופן שיטתי. עבור כל סימולציה שנרצה לבצע נוכל להפעיל קוד זה כדי לקבל את הפרמטרים האופטימליים איתם נגיע לאחוז צילוב מקסימלי.

הפרמטרים המעניינים אותנו בנוסחה הם הכוחות F_1 ו- F_2 המופעלים על כל זוג אטומים ברבעיה שנמצאה (מצורפת הנוסחה) ומספר צעדי הזמן שבהם מופעל הפוטנציאל.

חישוב הפוטנציאל:

$$E_{rest} = F_1 \cdot (1 - e^{-F_2(r_{ij}-r_{12})^2})$$

נוסחת לחישוב האנרגיה שמוסיף הפוטנציאל:
חישוב וקטור הכוחות \vec{F} לכל זוג אטומים i, j

טווח הערכים האפשריים לפרמטרים אלו:

F_1 - נע בין 50 ל-300

F_2 - נע בין 0.5 ל-1

כחלק מהקוד הבודק זאת, ביצענו מעבר על הערכים האפשריים של הכוחות F_1, F_2 להוספת הפוטנציאל כדי למצוא את הערכים האופטימליים.

כל שילוב של בחירת כוחות מהווה ריצה המכילה 3 שלבים של הסימולציה:

- הבאת המערכת למינימום אנרגיה
- חימום המערכת לטמפרטורת חדר.
- חיפוש אחר רביעיות חשודות והפעלת הפוטנציאל על רביעייה כזו.

הפלט של כל ריצה הוא סוגי המולקולות שנוצרו בצעד הזמן האחרון. את התוצאות שמרנו בקובץ טקסט.

כתבנו תוכנית נוספת העוברת על קובץ הטקסט ומייצרת קובץ נוסף - CSV - המייצג את "המולקולות הטובות" מכל ריצה. על פי קובץ זה ניתן לראות אלו שילובי כוחות נתנו אחוזי צילוב גבוה ועל פיהם נוכל לקבוע על הפרמטרים האופטימליים.

פרמטר חשוב נוסף הוא מספר צעדי הזמן של הוספת הפוטנציאל. כרגע, ההרצות מתבצעות כשפרמטר זה שווה ל-10,000 צעדי זמן. בהמשך, נבדוק גם אותו כדי להגיע למסקנה על ערך אופטימלי שיביא לזירוז הצילוב.

כמו כן, נרצה לפתח כלים אוטומטיים לטיפול בתוצאות - הצגת הנתונים המתקבלים מהתהליך בפורמט מסודר וקבוע (קבצי csv ואיורי גרפים באמצעות python). ויזואליזציה נוחה למערכת תעזור להבנה ושיפור.

דוגמא לפרמטרים טובים שנמצאו מהקוד: (תוצאות ראשוניות מצורפות בנספחים)

pair	O-C	O-H	C-N
F_1	100	50	50
F_2	0.75	0.75	0.75
r_{12}	3.0	1.0	1.5

2. ייעול זמני הריצה מהווה מטרה חשובה לפרויקט.

העבודה העיקרית שלנו - הוספת קוד לשימוש בכרטיס מסך (gpu) שאמור להפחית את זמני הריצה באופן משמעותי.

כרטיס מסך מורכב מאלפי מעבדים קטנים שמריצים קוד המשותף לכולם. השימוש בו מתאים מאוד למקרה שלנו - בו כל אטום מריץ את אותו הקוד.

מקבול זה יכול לייעל משמעותית את זמן הריצה, בסדר גודל של אחד לאלף.

נרצה לבנות gpu שירץ על קוד ה-Meta-Dynamic שאופק הוסיפה ל-REAXFF.

יש לדאוג שהקוד שנוסיף יתממשק עם ה-LAMMPS בצורה טובה.

יהיה צורך קודם לנסות להריץ את ה-gpu על קוד ה-REAXFF של LAMMPS לבד ולראות

שעובד טוב, ואח"כ להוסיף שירץ יחד עם הקוד הנוסף של ה-Meta-Dynamic.

תרשים המערכת מצורף בנספחים.

4. סקירת עבודות דומות \ בספרות והשוואה \ סקר שוק

❖ המאמר עליו מתבסס הפרויקט:

Accelerated ReaxFF Simulations for Describing the Reactive CrossLinking of Polymers

Aniruddh Vashisth, Chowdhury Ashraf, Weiwei Zhang, Charles E. Bakis,

and Adri C. T. van Duin

Publication Date (Web): July 11, 2018

ישנן שיטות שונות שפותחו כדי לבצע סימולציות בקנה מידה אטומי עבור צילוב של פולימרים

(הרצת סימולציות ברזולוציית אורך כולל של 10^{-9} שניות כמו ב-LAMMPS למרות שהתהליך

אותו מסמלים אורכו ברזולוציית דקות-שעות), אך רובן לא סימלצו את כל שלבי ומצבי

הריאקציה כולה באופן איכותי. ניסויים למדידת תגובות בקישור בין פולימרים נעשים בד"כ

בטווח של דקות-שעות, טווח שלא מאפשר הרצה בסימולציות בקנה מידה אטומי (כגון

LAMMPS (וכיוון שביצוע ניסויים אלו בזמן אמת דורש עלות גבוהה, פותחו שיטות המבוססות ReaxFF reactive force field).

בשיטה המתוארת במאמר, האטומים המגיבים נמצאים במעקב עד שהם מגיעים לתצורה מסוימת המספקת נקודת התחלה טובה להתחלת ריאקציה. כדי "לעודד" אותם מוסיפים כמות אנרגיה גדולה יותר או שווה למינימום אנרגיה הדרוש להם לצורך תגובה ובכך להתגבר על המכשול המונע את תהליך הצילוב שיוצר את החומר הרצוי- כלומר זירוז תהליך הצילוב בין החומרים ע"י זיהוי מצב לתחילת הריאקציה והוספת אנרגיה כדי לגרום לתהליך הצילוב להתרחש במידי, אך תוך כדי נשים לב כי לא כל פעם שנפעיל את פוטנציאל האנרגיה הנוסף נקבל את התוצאה רצויה.

בכך אנו מאפשרים הדמיה אמיתית של תהליך צילוב בין חומרים בטמפרטורות נמוכות באופן המחקה תגובות כימיות מבלי לאפשר תגובות לא רצויות כתוצאה מטמפרטורה גבוהה. במאמר מתוארת הפעלת השיטה הנ"ל בחקירת תהליך הצילוב בין המולקולות bisphenol F ו- DETDA. התוצאה שהתקבלה הינה שיעור צילוב גבוה יחסית של 82% בין שני המולקולות הללו, ולכן המסקנה הנובעת מהמאמר וכתוצאה מתוצאות ניסויים נוספים המתוארים בו שבוצעו באותה שיטה היא כי שיטה זו היוצרת סימולציות מואצות ב-REAXFF מהווה כלי שימושי לביצוע סימולציות בקנה מידה אטומי על תהליכים פולימרים שקורים בפועל בזמנים גדולים בהרבה (דקות-שעות). בהסתמכות על תוצאות המאמר ומסקנותיו, לאחר שחזור המאמר נרצה להכליל את עקרונותיו כך שנוכל להשתמש בשיטה המתוארת בו לבדיקת בעיות ספציפיות נוספות שמעניינות אותנו עם מולקולות שונות ליצירת חומרים שונים. כלומר, נרצה לבצע סימולציה באופן דומה על תהליכי צילוב בין מולקולות אחרות ליצירת חומרים אחרים רצויים וחקר החומרים שנוצרו- תכונות מסוימות כגון מסה, עמידות, חוזק, טמפ' פירוק, וכו'...

❖ מאמר שני העוסק בפיתוח REAXFF

ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons

Adri C. T. van Duin¹, Siddharth Dasgupta, Francois Lorant, and William A. Goddard.

Publication Date: 2011

כדי לאפשר הרצת סימולציית מולקולריות דינאמיות במערכות כימיות תגובתיות בקנה מידה גדול (1000 אטומים או יותר) פותח ReacFF Force Field שדה כוח למערכות ריאקציה כימיות. ReaxFF משתמשים ביחסים הקשורים לתכונות של קשרים כימיים (bonds) בין אטומים- היחס בין bond distance לבין bond order, והיחס בין bond order לבין bond energy והשפעתם על ניתוק הקשר הכימי (bond) בין אטומים לכדי אטומים נפרדים. כמו כן,

ReaxFF מכיל את Coulomb and Morse potentials לשימוש לתיאור אינטרקציות nonbond בין כל האטומים, כלומר אינטרקציות בין אטומים שאינם מחוברים בקשר כימי. הפרמטרים לפוטנציאלים הנ"ל נגזרים מחישובים כימיים קוונטים הנעשים על ניתוקי קשרים כימיים וריאקציות בין מולקולות קטנות.

5. סיכום / מסקנות

התחלנו לטפל בפתרון הבעיה הראשונה- מערכת אוטומטית למציאת פרמטרים אופטימליים. עד כה, הקוד שכתבנו עובר על כל השילובים האפשריים של ערכי הכוחות F_1 , F_2 , על כל אחד מזוגות האטומים הרלוונטיים ברביעייה. את הערכים הנבחרים הכנסנו לתוך הקובץ Extra_Potential_Parameters משם הם נקראים ע"י הקוד שרץ ב-REAXFF. פלט הקוד: קובץ csv, הסופר לכל ריצה את מספר סוגי המולקולות השונים שנוצרו/התווספו/השתנו במהלך הריצה. קובץ זה מהווה אינדיקציה לריצות טובות יותר או פחות ולפיו נוכל בהמשך להחליט על הכוחות האופטימליים, בהתייעצות עם אנשי הכימיה (פרו' תמר רז, ד"ר נעמי רום).

6. נספחים

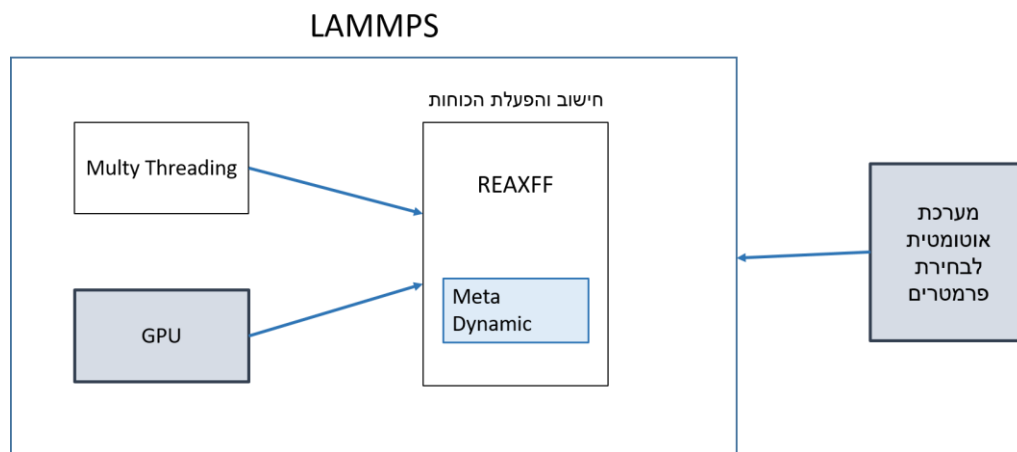
א. רשימת ספרות \ ביבליוגרפיה

- Accelerated ReaxFF Simulations for Describing the Reactive CrossLinking of Polymers Aniruddh Vashisth, Chowdhury Ashraf, Weiwei Zhang, Charles E. Bakis, and Adri C. T. van Duin
Publication Date (Web): July 11, 2018
- ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons
Adri C. T. van Duin¹, Siddharth Dasgupta, Francois Lorant, and William A. Goddard.
Publication Date: 2011

ב. תרשימים ונוסחאות

תרשים מערכת:

בתרשים ניתן לראות את מערכת LAMMPS. לתוך המחלקה ReaxFF במערכת ה-LAMMPS הוסיפה אופק את הקוד של MetaDynamic – הפעלת הפוטנציאל הנוסף, וכן- ביצעה שימוש במערכת ה- Multy Threading שקיימת ב-LAMMPS. את השימוש בחישוב מקבילי בעזרת GPU אנו נוסיף לקוד. מחוץ למערכת LAMMPS ניתן לראות את המערכת החיצונית של מערכת אוטומטית לבחירת פרמטרים אופטימליים שאנו כתבנו.



תוצאות הריצה הראשוניות DETDA2:EPON4 אליהן הגענו:

מקרא:

לא התרחש צילוב
ריצה טובה
המולקולה שנוצרה מהצילוב
ריצה לא טובה - נוצרו מולקולות לא רצויות

תוצאות ריצה בהפעלת המערכת למשך 154,000 צעדי זמן

D0E0	D2E3	DE3	DE2	D2E	DE	E	D	f14	f13	f12	f11
0	0	0	0	0	0	0	4	2	50	0	50
0	0	0	0	0	0	0	4	2	100	0	50
0	0	0	0	0	0	0	4	2	150	0	50
0	0	0	0	0	0	0	4	2	50	0	100
0	0	0	0	0	0	0	4	2	100	0	100
0	0	0	0	0	2	2	0	150	0	100	50
0	0	0	0	0	0	4	2	50	0	150	50
0	0	0	0	0	0	4	2	100	0	150	50
0	0	0	0	0	1	3	1	150	0	150	50
0	0	0	0	0	0	4	2	50	0	50	100
0	0	0	0	0	0	4	2	100	0	50	100
0	0	0	0	0	0	4	2	150	0	50	100
0	0	0	0	0	0	4	2	50	0	100	100
0	0	0	0	0	0	4	2	100	0	100	100
0	0	0	0	0	2	2	0	150	0	100	100
0	0	0	0	0	2	2	0	50	0	150	100
0	0	0	0	0	1	3	1	100	0	150	100
0	0	0	1	0	0	2	1	150	0	150	100
2	0	0	0	0	0	0	3	1	50	0	50
2	0	0	0	0	0	0	2	1	100	0	50
5	0	0	0	0	0	0	0	150	0	50	150
4	0	0	0	0	0	0	2	0	50	0	100
2	0	0	0	0	0	0	2	0	100	0	100
5	0	0	0	0	0	0	2	0	150	0	100
5	0	0	0	0	0	0	1	0	50	0	150
4	0	0	0	0	0	0	1	0	100	0	150
3	0	0	0	0	1	2	0	150	0	150	150

תוצאות ריצה בהפעלת המערכת למשך 506,000 צעדי זמן

D0E0	D2E3	DE3	DE2	D2E	DE	E	D	f14	f13	f12	f11
0	0	0	0	0	0	0	4	2	50	0	50
0	0	0	0	0	0	0	4	2	100	0	50
0	0	0	0	0	1	3	1	150	0	50	50
0	0	0	0	0	0	4	2	50	0	100	50
0	0	0	0	0	0	4	2	100	0	100	50
0	0	0	0	0	2	2	0	150	0	100	50
0	0	0	0	0	0	4	2	50	0	150	50
0	0	0	0	0	0	4	2	100	0	150	50
0	0	0	1	0	1	1	0	150	0	150	50
0	0	0	0	0	0	4	2	50	0	50	100
0	0	0	0	0	0	4	2	100	0	50	100
3	0	0	0	0	0	0	2	0	150	0	50
0	0	0	0	0	0	0	4	2	50	0	100
2	0	0	0	0	0	0	2	1	100	0	100
2	0	0	0	0	0	0	0	150	0	100	100
0	0	0	1	0	1	1	0	50	0	150	100
2	0	0	0	0	0	0	1	0	100	0	150
6	0	0	0	0	0	0	0	150	0	150	100
5	0	0	0	0	0	0	3	0	50	0	150
3	0	0	0	0	0	0	1	0	100	0	50
6	0	0	0	0	0	0	0	150	0	50	150
4	0	0	0	0	1	1	0	50	0	100	150
0	1	0	0	0	0	1	0	100	0	100	150
7	0	0	0	0	0	0	0	150	0	100	150
7	0	0	0	0	0	0	0	50	0	150	150
4	0	0	0	0	0	0	0	100	0	150	150
7	0	0	0	0	0	0	0	150	0	150	150

ג. תכנון הפרויקט

פגישת היכרות, רקע מקדים והכרת הפרויקט	05.05
הבנת מבנה התוכנה LAMMPS, מבנה קבצי הקלט לריצות. הבנת המבנה ההיררכי של המחלקות ב source code של LAMMPS	20.05 – 06.05
פגישה עם פרופ' תמר רז, ד"ר נעמי רום וד"ר רוני לתכנון המשך עבודה	16.06
פגישה עם אופק, הסטודנטית שהתחילה את הפרויקט, קבלת הסבר על המצב הקיים	19.06
(לאחר חופשת סמסטר...) הרצת סימולציות. כתיבת תוכנית למציאת פרמטרים אופטימליים להתרחשות צילוב.	19.09
המשך כתיבת הקוד והוספת קבצי output לניתוח התוצאות. הרצת ריצות לשחזור תוצאות קודמות.	10.10-11.11
כתיבת דו"ח אלפא	17.11-30.11

ד. טבלת סיכונים

#	הסיכון	חומרה	מענה אפשרי
1	אי הצלחה בשיפור זמני ריצה ע"י תמיכה בריצה באופן מקבילי	בינוני	במקום שימוש במבני הנתונים הקיימים ב LAMMPS לריצה באופן מקבילי, כתיבת מבני נתונים המאפשרים זאת. פנייה לעזרה ממפתחי LAMMPS
2	אי הגעה לתוצאות מספקות ביצירת קשרי bonds בין אטומים	גבוה	חקירת פרמטרים אופטימליים לנוסחה להוספת הפוטנציאל
3			

ה. רשימת/טבלת דרישות – אין, פרויקט מחקרי.