**המרת קבצי dump\_nvt לקבצי קלט לריצת npt**

ההמרה מתבצעת ב-2 שלבים. ראשית, המרה מ-dump ל-xyz ואח"כ המרה מ-xyz לקובץ קלט ללאמפס (במקרה האחרון נדרש להוסיף לקובץ המתקבל HEADER מתאים, כפי שיוסבר מטה).

בתיקייה הנוכחית מצורפים קבצי המטלב הרלוונטיים לריצות המטלב הללו.

להלן הסבר לאופן ביצוע ההמרות לעיל במטלב:

1. המרה מקובץ בפורמט DUMP לקובץ בפורמט XYZ

מתבצע ע"י קובץ המטלב:

xyz\_from\_lammps\_dump.m

הפעלת ההמרה מתבצעת במטלב ע"י הפקודה: xyz\_from\_lammps\_dump('dump.nvt.5000', 936)

כאשר 936 הוא מספר האטומים בריצה, ובין הגרשיים רושמים את שם קובץ ה dump-במלואו (בדוגמא - dump.nvt.5000).

לאחר הריצה מתקבל קובץ התוצאה: [dump.nvt.5000.xyz](http://dump.nvt.5000.xyz/)

קובץ זה יכול להיות קלט להמרה הבאה, להכנה של קובץ קלט לריצת לאמפס.

1. המרה מקובץ בפורמט XYZ לקובץ בפורמט המתאים כקלט ללמפס

מתבצע ע"י שני קבצי המטלב:  
lammps\_from\_xyz\_improved\_with\_X.m

read\_data.m

הפעלת ההמרה מתבצעת במטלב ע"י הפקודה:

lammps\_from\_xyz\_improved\_with\_X('dump.nvt.5000', 936)

כאשר 936 הוא מספר האטומים בקובץ הקלט [dump.nvt.5000.xyz](http://dump.nvt.5000.xyz/)  ובין הגרשיים רושמים  את שם הקובץ ללא סיומת .xyz (בפועל, הקובץ חייב להיות עם סיומת .xyz כדי שקובץ המטלב יקרא אותו נכון).

לאחר הריצה מתקבל קובץ התוצאה: dump.nvt.5000\_lmps.in

כעת, בכדי להפוך את קובץ התוצאה לקובץ קלט, צריך להוסיף HEADER המתאים לריצה הנוכחית שלכם (ניתן להסתכל בקובץ קלט מוכן לריצת npt, הכוונה ב-HEADER היא ל-17 השורות).

ב - HEADER צריך לעדכן את **מספר האטומים**ל-936 (בדוגמה שכאן) ולעדכן **מהו גודל תא היחידה**הדרוש בריצה בכיוונים .x, y, z. את הגודל הזה **יש להעתיק מהריצה האחרונה שבוצעה** - זה חשוב מאד להקפיד **לא לשנותו**כדי לא לפגוע בתנאי השפה המחזוריים, מאחר ומדובר בריצת המשך.

הערה: במקרה בו מתחילים ריצה חדשה, כשהקלט איננו מתחשב בתנאי שפה מחזוריים, אז אפשר להגדיר את תא היחידה גדול יותר מהערכים הקיצוניים ביותר של מיקומי האטומים בתא היחידה ב-X, Y, Z בהתאמה.

לאחר הוספת ה - HEADER ניתן להשתמש בקובץ החדש כקלט, ע"י עדכון שם קובץ הקלט בשורה המגדירה אותו בסקריפט הריצה:

read\_data               dump.nvt.5000\_lmps.in

(לומר נדרש להחליף את השם הכתוב באדום בשם הקובץ שהכנתם).