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

ראשית תוכלו להמיר מ-DUMP ל-XYZ, ואז מ-XYZ לקובץ קלט ללמפס (במקרה האחרון נדרש להוסיף לקובץ המתקבל בחישוב המטלב HEADER מתאים, כמוסבר מטה). מצורפים קבצי המטלב הרלוונטיים + קבצי קלט ותוצאות 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

צרפתי לדוגמה קובץ קלט להמרה (קובץ DUMP מריצת למפס) בשם **dump.nvt.5000**.

הפעלת ההמרה מתבצעת במטלב ע"י הפקודה:

xyz\_from\_lammps\_dump('dump.nvt.5000', 117)

כאשר 117 הוא מספר האטומים בריצה, ובין הגרשיים רושמים את שם קובץ ה-dump במלואו.

לאחר הריצה מתקבל קובץ התוצאה: [dump.nvt.5000.xyz](http://dump.nvt.5000.xyz/) (מצורף). קובץ זה יכול להיות קלט להמרה הבאה, להכנה של קובץ קלט לריצת למפס.

**2. 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

באותה הספריה עם הקבצים הנ"ל צריך לשמור את קובץ הנתונים בפורמט XYZ. לדוגמה, אני מצרפת קובץ XYZ בשם: [**epon4\_detda2\_0\_1.xyz**](http://epon4_detda2_0_1.xyz/).

הפעלת ההמרה מתבצעת במטלב ע"י הפקודה:

lammps\_from\_xyz\_improved\_with\_X('epon4\_detda2\_0\_1', 234)

כאשר 234 הוא מספר האטומים בקובץ הקלט [epon4\_detda2\_0\_1.xyz](http://epon4_detda2_0_1.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: [epon4\_detda2\_0\_1\_lmps.in](http://epon4_detda2_0_1_lmps.in/) (מצורף).

כעת, בכדי להפוך את קובץ התוצאה לקובץ קלט (למשל כמו בריצת מינימיזציה, ראו את הקובץ detda.dat שצרפתי כאן כדוגמה לקובץ קלט מוכן לריצת למפס) צריך להוסיף HEADER המתאים לריצה הנוכחית שלכם.

הכוונה ב-HEADER היא ל-17 השורות המופיעות מעל השורה הראשונה עם הקואורדינטות בקובץ detda.dat.

ב-HEADER צריך לעדכן את **מספר האטומים**ל-234 בדוגמה שכאן (במקום 31 בקובץ detda.dat המצ"ב) ולעדכן **מהו גודל תא היחידה**הדרוש בריצה בכיוונים x, y, z. את הגודל הזה **תעתיקו מהריצה האחרונה שלכן** - 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 (בדומה למה שיש בקובץ in.min ששלחתי לכן בעבר עבור ריצות מינימיזציה):

read\_data               detda.dat

(כלומר נדרש להחליף את השם הכתוב באדום בשם הקובץ שהכנתן).