

Exercícios – Simulação do CO₂ - roteiro

Condições iniciais

O que é necessário para a execução das simulações do CO₂?

- 1) Arquivo de topologia
- 2) Arquivo de input

Veremos que no arquivo de input definimos uma série de procedimentos necessários para a execução das simulações:

- Estamos utilizando unidades reais. (na figura abaixo temos quais são estas unidades)
- Condições periódicas de contorno.
- Potenciais intra e interatômicos.
- Replicação da caixa unitária.
- Lista de vizinhos.
- Propriedades termodinâmicas e critério para a realização da simulação!!!

For style *real*, these are the units:

- mass = grams/mole
- distance = Angstroms
- time = femtoseconds
- energy = Kcal/mole
- velocity = Angstroms/femtosecond
- force = Kcal/mole-Angstrom
- torque = Kcal/mole
- temperature = Kelvin
- pressure = atmospheres
- dynamic viscosity = Poise
- charge = multiple of electron charge (+1.0 is a proton)
- dipole = charge*Angstroms
- electric field = volts/Angstrom
- density = gram/cm³

Simulação

Equilibração das propriedades termodinâmicas (valores médios!!!)

- Com os arquivos de topologia e de input podemos realizar o cálculo de dinâmica molecular com o auxílio do executável `Imp_serial` compilado no início da aula.
- Vamos realizar 3 simulações iniciais – NVE, NVT e NPT

1) Executando `in.co2_E` – 1ª simulação feita em NVT

`lammps < in.CO2_E > saida_1.dat` ou
`Imp_daily < in.CO2_E > saida_1.dat`

- Serão criados alguns arquivos `CO2.restart` a cada 5000 passos de integração.
- Será criando um arquivo `NVE.dat`
- Ao término da simulação analisaremos os dados obtidos em `NVE.dat`
- Como iremos plotar alguns gráficos, vamos fazer uma cópia do arquivo `NVE.dat`, mantendo o arquivo original a salvo.

`cp saida_1.dat out_NVE.dat`

- Em `outNVE.dat` remover todo o texto desnecessário mantendo apenas os valores pedidos no termo_style.
- Deveremos obter algo assim....

#Step	Temp	TotEng	PotEng	KinEng	E_bond	E_angle	Press	Volume	dens
0	0	542.91793	542.91793	0	2.9185077e-25	0	6800.0055	25412.184	1.8635093
2	0	521.3472	521.3472	0	20.343943	0	13246.649	25412.184	1.8635093
100	364.33898	1105.3057	402.64732	702.65836	44.29135	48.568045	9591.601	25412.184	1.8635093
200	541.12816	1106.9077	63.296581	1043.6112	79.578227	129.36734	96.667184	25412.184	1.8635093
300	600.92584	1106.3541	-52.581872	1158.936	115.05242	43.49327	305.12182	25412.184	1.8635093
400	590.81158	1106.4195	-33.010306	1139.4298	125.8734	18.252581	1327.0398	25412.184	1.8635093
500	559.0602	1106.9492	28.754624	1078.1946	109.78835	119.3804	385.2625	25412.184	1.8635093

- Utilizando o `xmgrace` vamos plotar a 1ª coluna com a 3ª coluna!
- O que vocês estão plotando?
- Qual o significado do gráfico obtido?

Após a realização deste cálculo inicial, passamos as simulações em NVT

2) Executando `in.co2_T`

- Antes vamos verificar o input e observar o que foi modificado.
- Qual temperatura você foi designado a executar?
- Considerando o mesmo procedimento para o cálculo anterior...fazemos:

Lammps < in.CO2_T > saida_2.dat

- Serão criados arquivos CO2.restart também a cada 5000 passos de integração, sempre tomados em relação à última simulação realizada.
- Será criando um arquivo NVT.dat
- Ao término da simulação analisaremos os dados obtidos em NVT.dat
- Como iremos plotar alguns gráficos, vamos fazer uma cópia do arquivo NVT.dat, mantendo o arquivo original a salvo.

NVTmanipulado.dat ✕									
#Step	Temp	TotEng	PotEng	KinEng	E_bond	E_angle	Press	Volume	dens
20000		604.50102		1105.4149		-60.416152		1165.831	77.198334
20100		461.22504		797.98513		-91.526143		889.51127	71.432566
20200		355.91127		539.36568		-147.03913		686.40481	60.860363
20300		286.44902		394.96415		-157.47688		552.44103	53.72758
20400		271.43986		345.22561		-178.26899		523.4946	49.717451
20500		290.63769		373.4081		-187.11111		560.51922	48.208957
20600		315.26227		426.88887		-181.12092		608.00979	46.213214
20700		313.0938		429.6039		-174.22382		603.82772	41.206123
20800		301.34489		388.44152		-192.72743		581.16896	34.341299
20900		299.92751		364.62046		-213.81497		578.43543	29.364625
21000		302.5803		372.44923		-211.10234		583.55156	28.722609
21100		311.57406		387.96704		-212.92975		600.89678	34.194385
21200		300.60742		383.36699		-196.3797		579.74669	42.925328
21300		290.15781		382.67591		-176.91782		559.59374	52.184952
21400		301.5308		395.1116		-186.4159		581.5275	59.702068

- Utilizando o xmgrace vamos plotar a 1ª coluna com a 2ª coluna, e a 1ª coluna com a 3ª coluna!
- O que vocês estão plotando?
- Qual o significado dos gráficos obtidos?

Após a realização das duas primeiras simulações, passamos a simulação em NPT.

3) Executando in.co2_PT

Lammps < in.CO2_PT > saida_3.dat

- Antes vamos verificar o input e observar o que foi modificado. No caso qual é o valor de pressão e temperatura a ser simulada.
- Ao término da simulação analisaremos os dados obtidos em NPT.dat
- Como iremos plotar alguns gráficos, vamos fazer uma cópia do arquivo NPT.dat, mantendo o arquivo original a salvo.

-

- Utilizando o xmgrace vamos plotar a 1ª coluna com a 2ª coluna, e a 1ª coluna com a 3ª coluna e a 1ª coluna com a 8ª coluna.
- O que vocês estão plotando?
- Qual o significado dos gráficos obtidos?
- **O que percebemos ao final dos três cálculos com respeito à energia, a temperatura e a pressão?**
- De posse da última simulação podemos reproduzir uma pressão em específico no ensemble NVT mediante uma **média do volume** obtida no ensemble NPT.
- Este 4º passo será necessário a fim de utilizarmos o último input in.CO2_VT_Equi
- Utilizaremos o programa volume.f90 e assim obter o volume médio e também o comprimento de cada lado da caixa.
- Neste caso o volume médio foi de.... $V_m = \text{---} \text{Å}^3$.

4) Fase de Produção

- Nesta etapa utilizaremos o valor do volume médio em termos dos comprimentos Lx, Ly e Lz da caixa resultante a serem modificados no arquivo de input.
- O arquivo input é o in.CO2_VT_Equi

```
thermo          100
thermo_style custom step temp etotal pe ke ebond eangle press vol v_dens

fix             1 all nvt temp 300 300 50

fix             2 all deform 1 x final 0.0 60.9609 y final 0.0 60.9609 z final 0.0 60.9609 units box

run 20000
```

- Executando o arquivo input

Lammps < in.CO2_VT_Equi > saida_4.dat

- Ao término da simulação analisaremos os dados obtidos em NVTproducao.dat, criando um arquivo para ser manipulado onde podemos verificar o valor da densidade do CO₂ nas condições estudadas por cada um.
- Qual é o valor da densidade obtido?