

به نام خدا

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

به کمک نرم‌افزارهای

NAMD & VMD

مهندس مینا صدیقی و دکتر علی محبی (اسناد هندسی شیمی)

دانشگاه شهید باهنر کرمان



۱۳۹۶

سرشناسه: صدیقی، مینا، ۱۳۶۵ -

عنوان و نام پدیدآور: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به کمک نرم‌افزارهای NAMD & VMD

مینا صدیقی و علی محبی.

مشخصات نشر: تهران: اندیشه سرا، ۱۳۹۴.

مشخصات ظاهری: ۱۴۴ص: مصور، جدول، نمودار.

شابک: 978-600-332-020-8

وضعیت فهرست نویسی: فیپا

یادداشت: کتابنامه

موضوع: دینامیک مولکولی -- شبیه‌سازی کامپیوتری

موضوع: پروتئین -- ساختار -- شبیه‌سازی کامپیوتری

شناسه افزوده: محبی، علی، ۱۳۴۵ -

رده‌بندی کنگره: ۱۳۹۴ ص ۲ش / QD۴۵۵/۳

رده‌بندی دیویی: ۵۴۱/۰۱۱۳

شماره کتابخانه ملی: ۴۱۲۷۹۲۱

انتشارات اندیشه‌سرا

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

به کمک نرم‌افزارهای

NAMD & VMD

نوشته‌ی:

مهندس مینا صدیقی و دکتر علی محبی

چاپ اول، ۱۳۹۶، شمارگان ۲۰۰ نسخه، بها ۱۲۰۰۰ تومان

شابک ۹۷۸-۶۰۰-۳۳۲-۰۲۰-۸ ISBN 978-600-332-020-8

حق چاپ و نشر محفوظ و هرگونه استفاده از محتوای کتاب به هر شکل به اجازه‌ی کتبی نیازمند است.

تهران - میدان انقلاب - کوچه آبرو - پلاک ۲ - واحد ۴۲ (ساعت ۹ تا ۱۴)

اندیشه‌سرا از انتشار کتاب‌های ارزشمند حمایت می‌کند. ۰۹۱۲۳۱۶۱۶۸۷

مسئولیت نوشته‌های کتاب با نویسنده است.

www.andishehsara.org

فهرست مطالب

فصل اول: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

۱-۱	شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای	۱۱
۲-۱	شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به زبان ساده	۱۳
۳-۱	نیروهای بین مولکولی	۵
۳-۱-۱	پتانسیل‌های پیوندی بین اتم‌ها	۵
۳-۱-۲	همکنش‌های غیرپیوندی	۶
۴-۱	شرایط مرز و اولیه	۸
۵-۱	فاصله قطع	۹
۶-۱	الگوریتم انتگرالی	۱۰
۷-۱	انواع رشته‌ها در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی	۱۲
۸-۱	تعادل	۲۶
۹-۱	معرفی نرم‌افزار NAMD	۲۷
۱۰-۱	معرفی نرم‌افزار VMD	۲۷

فصل دوم: اصول کار NAMD

۱-۲	فایل PDB مختصات اولیه اتم‌ها در سیستم مولکولی (Protein Data Bank)	۳۰
۲-۲	فایل PSF توصیف ساختارهای مولکولی (Protein Structure File)	۳۲
۳-۲	فایل پارامتری میدان‌های نیرو (Parameter file)	۳۳
۴-۲	فایل پیکربندی NAMD	۳۸
۱-۴-۲	پارامترهای ورودی	۳۹
۲-۴-۲	پارامترهای خروجی	۳۹
۳-۴-۲	انتخاب شرایط مرزی	۴۰
۴-۴-۲	پارامترهای میدان نیرو	۴۱
۵-۴-۲	پارامترهای زمانی و انتگرالی	۴۲
۶-۴-۲	کنترل دما و فشار	۴۳
۷-۴-۲	خاصیت جفت دمایی	۴۴

۴۴ ۸-۴-۲ بهینه‌سازی و تعادل

۴۵ ۹-۴-۲ یک نمونه فایل پیکربندی ساده

۴۷ ۵-۲ اجرای برنامه شبیه‌سازی توسط NAMD

۴۸ ۶-۲ فایل خروجی استاندارد NAMD

فصل سوم: اصول کار با VMD

۵۵ ۱-۳ قابلیت‌های گرافیکی VMD

۵۵ ۱-۱-۳ با گذاری، مشاهده و حذف یک مولکول

۵۶ ۲-۱-۳ زبر ماوس

۵۷ ۳-۱-۳ ذخیره عکس

۵۷ ۴-۱-۳ مشاهده روند مدل

۵۸ ۵-۱-۳ ذخیره اطلاعات

۵۹ ۶-۱-۳ منوی Display

۶۰ ۷-۱-۳ منوی Graphics

۶۰ ۱-۷-۱-۳ تغییر رنگ صفحه زمینه و اتم‌ها

۶۱ ۲-۷-۱-۳ تغییر حالت نمایش

۶۳ ۳-۷-۱-۳ اصلاح یا حذف برجسب‌های اطلاعات

۶۳ ۴-۷-۱-۳ تنظیم ویژگی‌های ظاهری تصویر

۶۴ ۲-۳ برخی قابلیت‌های توسعه‌پذیر VMD

۶۵ ۱-۲-۳ مدلسازی

۶۵ ۱-۱-۲-۳ اضافه کردن یون به سیستم

۶۶ ۲-۱-۲-۳ حل کردن مولکول در جعبه آبی

۶۷ ۳-۱-۲-۳ ساخت اتوماتیک فایل PSF

۶۸ ۴-۱-۲-۳ ساخت مواد معدنی

۷۰ ۵-۱-۲-۳ ساخت غشاء

۷۱ ۶-۱-۲-۳ ساخت نانولوله‌های کربنی و گرافن‌ها

۷۲ ۷-۱-۲-۳ ادغام مختصات مولکولی

۷۳ ۸-۱-۲-۳ تعریف پارامترهای میدان نیرو برای اتم‌ها

۷۹.....	۹-۱-۲-۳ اصلاح ساختارهای مولکولی
۸۱.....	۲-۲-۳ شبیه‌سازی
۸۲.....	۳-۲-۳ آنالیز داده‌ها
۸۲.....	۱-۳-۲-۳ ارزیابی انرژی و مشاهده روند تغییرات آن با زمان
۸۳.....	۲-۳-۲-۳ محاسبه جذر میانگین مربعات خطا RMSD و بررسی مسیر تغییرات آن نسبت به زمان
۸۴.....	۳-۳-۲-۳ حل معادله Poisson-Boltzman
۸۸.....	۱-۳-۲-۳ محاسبه تعداد پیوندهای هیدروژنی
۸۹.....	۵-۳-۲-۳ ترسیم چگالی طیفی
۹۱.....	۶-۳-۲-۳ محاسبه تان توزیع شعاعی
۹۲.....	۷-۳-۲-۳ مقایسه ساختارهای پروتئین‌ها
۹۳.....	۸-۳-۲-۳ محاسبه نیروهای الکترواستاتیکی برد بلند و نمایش توزیع پتانسیل
۹۵.....	۹-۳-۲-۳ تشخیص و مشاهده اتصالات پروتئین
۹۷.....	۱۰-۳-۲-۳ جستجوی پل‌های نمک شکل گرفته برای یک پروتئین در طول مسیر
۹۷.....	۴-۲-۳ تصویرسازی
۹۸.....	۱-۴-۲-۳ مشاهده برش عرضی مولکول نمایش داده شده در جهات مختلف
۹۹.....	۲-۴-۲-۳ رسم نوار مقیاس رنگ در پنجره نمایش
۱۰۰.....	۳-۴-۲-۳ ساخت انیمیشن
۱۰۱.....	۴-۴-۲-۳ مدیریت نمایش ساختارهای مختلف
۱۰۲.....	۳-۳ استفاده از زبان متنی Tcl توسط VMD
۱۰۳.....	۱-۳-۳ دستور atomselect
۱۰۷.....	۲-۳-۳ دستور mol
۱۰۹.....	۳-۳-۳ دستور source (نوشتن یک برنامه برای محاسبه RDF)

فصل چهارم: چند مثال کاربردی

۱-۴	محاسبه ظرفیت حرارتی مخصوص آب با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی
۱۱۳.....	تعادلی

- ۲-۴ محاسبه ضریب نفوذ حرارتی آب با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیرتعادلی ۱۲۱
- ۳-۴ تهیه نانوسیال آب-سیلیکون دی‌اکسید ۱۲۶
- ۱-۳-۴ تهیه فایل PSF به صورت اتوماتیک ۱۳۱
- ۲-۳-۴ تهیه فایل PSF به صورت دستی توسط کاربر ۱۳۲
- ۴-۴ رسم نمودار تغییرات RMSD پروتئین کازئین بر حسب زمان ۱۳۵

www.ketab.ir

پیشگفتار

در سال‌های اخیر با گسترش مطالعات و کشف روش‌های نوین شبیه‌سازی از جمله شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD) دانشمندان همواره در پی یافتن راهی جهت تسهیل این فرآیند بوده‌اند. شبیه‌سازی مولکول‌های بزرگ با تعداد اتم‌های زیاد به توان محاسباتی بالایی نیاز دارد. به عنوان مثال ۱۰ سال قبل شبیه‌سازی سیستمی با ۳۶۰۰۰ اتم در زمان 10^1 ps امری بسیار پیشرفته محسوب می‌شد این در حالی است که امروزه شبیه‌سازی سیستم‌هایی با بیش از ۳۰۰/۰۰۰ اتم در زمان‌های بیشتر از 10^{-8} ns قابل انجام است. یک راه دستیابی به این قابلیت استفاده از کامپیوترهای موازی است. به منظور انجام شبیه‌سازی‌های MD برنامه‌های کامپیوتری موازی مختلف از جمله: CHARMM، X-PLOR، GROMOS و AMBER توسعه داده شده‌اند. در چند سال اخیر نرم افزار NAMD برای اجرای هرچه کارآمدتر برنامه‌های موازی برای شبیه‌سازی مولکول‌های بزرگ طراحی شده است.

هدف کتاب حاضر معرفی نرم‌افزار NAMD به عنوان یک نرم‌افزار معتبر و جدید در انجام شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی و آشنا کردن محققان با طرز کار، قابلیت‌ها و کاربردهای آن است. همچنین آشنایی با نرم‌افزار VMD به عنوان یک نرم‌افزار کمکی مفید در کنار NAMD ضروری می‌باشد. در ترتیب ارائه مطالب سعی بر این بوده است که ابتدا با تشریح و توضیح قسمت‌های مختلف نرم‌افزارها اصول اساسی و روش کار مشخص شود سپس با ارائه چند مثال کاربردی مطالب در ذهن خواننده تثبیت شود. به طوری که در فصل اول کتاب، مفاهیم و اصول روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به زبان ساده بیان داده شده است. فصول دوم و سوم به ترتیب به آشنایی با قابلیت‌ها، کاربردها و طرز کار با نرم‌افزارهای NAMD و VMD به منظور انجام شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی اختصاص داده شده است و در نهایت، در فصل چهارم مثال‌های عملی و کاربردی ارائه شده است که خواننده می‌تواند با دنبال کردن آن‌ها به صورت گام به گام با نحوه انجام شبیه‌سازی‌های MD به کمک نرم‌افزارهای NAMD و VMD به خوبی آشنا شود.

از آنجائیکه محتوای مطالب ارائه شده در کتاب حاضر ماهیتی بین رشته‌ای دارد، برای کلیه رشته‌های پزشکی، اکثر رشته‌های مهندسی از جمله: مهندسی شیمی، مهندسی پلیمر،

¹ 1ps=1 pico second= 10^{-12} seconds

² 1ns=1nano second= 10^{-9} seconds

مهندسی مکانیک، مهندسی مواد همچنین رشته‌های حوزه علوم پایه شامل شیمی، فیزیک، رشته‌های فناوری‌های نوین از جمله نانو و بایوتکنولوژی و سایر رشته‌های مربوط به علوم زیستی از جمله میکروبیولوژی و فیزیولوژی قابل استفاده است.

نرم‌افزارهای NAMD و VMD مانند هر نرم‌افزار دیگری پیوسته در حال توسعه می‌باشند و نسخه‌های جدید آن‌ها به مرور وارد بازار می‌شوند این کتاب بر اساس نسخه NAMD 2.8 و 1.9 VMD نوشته شده است که البته مباحث ارائه شده در آن تفاوت چندانی با نسخه‌های دیگر آن‌ها ندارند. مطالب بیان شده در این کتاب قابل استفاده برای سیستم عامل windows می‌باشد.

امید است اثر حاضر پاسخگوی نیازهای علاقمندان به کار شبیه‌سازی دینامیک مولکولی باشد. در انتها از خوانندگان محترم تقاضا داریم ما را از نظرات سازنده خود بهره‌مند سازند.

مهندس مینا صدیقی، دکتر علی محبی

زمستان ۹۴