#### **M** winmostar チュートリアル

# LAMMPS 散逸粒子動力学(DPD)

V11.2.1

2022年8月2日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.



- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方はビギナーズマニュアルを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
  - Winmostar導入講習会:基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
  - <u>Winmostar基礎講習会</u>:理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
  - 個別講習会:ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず<u>よくある質問</u>を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の 再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾な く、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。



• ジブロックコポリマーの相分離構造を、DPD法により予測する手順を示します。構造の定量的 な評価方法の一つとしてここでは散乱関数を算出します。

参考文献: R. D. Groot and T. J. Madden, J. Chem. Phys, 108, 20, (1998), 8713.





初期構造

得られる構造

- ※ 全原子MDの構造にマッピングする方法を本資料最後で示しています。
- ※ DPDパラメータの算出方法はGromacsチュートリアルをご参照ください。 注意点:
- プロフェッショナル版エコノミー、学生版では本書で紹介する機能をご利用頂けません。



- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、CygwinWM 2023/04/05 バージョン以降をインストール、環境設定してください。
  - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版LAMMPSが同梱されています。
- 上記に該当しない場合、または<u>推奨バージョン</u>以外のLAMMPSを利用したい方は、別途 <u>Windows版LAMMPSのインストールと環境設定</u>が必要です。

#### Winmostar V11の動作モード

V11にはプロジェクトモードとファイルモードの2つの動作モードが用意されています。 本書ではプロジェクトモードでの操作方法を解説します。 ファイルモードの操作方法はV10のチュートリアルを参照してください。

#### Winmostar (PREMIUM) V11.0.1

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(D チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)



### I. 系のモデリング

基本的な操作方法はLAMMPS基礎編チュートリアルを参照してください。

- 1. ファイル | 新規プロジェクトをクリックし、プロジェクト名に「dpd」と入力して保存をクリックします。
- 2. MD | LAMMPS | 散逸粒子動力学法 | DPDセルビルダをクリックします。
- 3. Monomers AvailableのAを選択しAddをクリックします。
- **4. Enter Value**で「3」と入力し**OK**をクリックします。
- 5. 同様にBを選択しAddをクリックし、 Enter Valueで「3」と入力しOKをクリックします。



## I. 系のモデリング

- 1. Monomers Usedの右のAddをクリックします。
- **2. Enter Value**で「1440」と入力し**OK**をクリックします。



- I. 系のモデリング
- 1. BuildをクリックしEnter Valueに「5.0」と入力してOKをクリックするとメインウィンドウ にジブロックポリマー(A-A-A-B-B-Bという組成)がランダムに配置された構造が出現しま す。





#### 1. II. (周期境界条件の表現形式) | セルの内側に原子単位で再配置をクリックし、粒子AとBの 分布を見やすくします。





N= 8,640 M= 0 Marked Order: 1 - 2 - 0 - 0 Marked Atom: X= 4.850514 Y= -4.162341 Z= -5.255806 Length= 1 Angle= \* Dihedral= \* Lper= \* rho= 0.000000 q/cm^3 a= 12.000000 b= 12.000000 c= 12.000000 alpha= 90.00000 beta= 90.00000 gamma= 90.00000

temp.mol2編果)済み

## I. 系のモデリング

- 1. MD | LAMMPS | 散逸粒子動力学法 | ポテンシャル編集をクリックします。
- 2. NewをクリックしEnter nameに「groot」と入力しOKをクリックします。
- 3. Nonbond タブをクリックし2行目の「A B 15.00 1.000」の行をクリックします。
- その下の左側のテキストボックスの値を「15」から「21」に変更し、Setをクリックします。
   (Aij、Rcutともに単位は無次元)
- 5. OKをクリックし、DPD Potential Editorを閉じます。

DPD Potential Editor		_		×	DPD Potential Editor				_		×	🚧 DPD Potential Edito	r			_		×
	Mass Bond	Nonbond			groot	Mass	Bond	Nonbond				groot	Mass	Bond	Nonbond			
	Species	Mass				i A B	j A B B	Aij 15.00 15.00 15.00	Rcut 1.000 1.000 Select pair 1	r potenti	al to b		i A B	j A B B	Aij 15.00 21.00 15.00	Rcut 1.000 1.000 1.000	] Set	
New Delete Create new po	otential set	ОК	Cance		New Delete			(	Ж	Canc	el	ew Delete			0	K	Can	:el

任意のモノマーについて**Aij**を決める方法は何通りかあり、そのうちの一つは<u>Gromacsチュートリア</u> <u>ル 溶解度・x・DPDパラメータ</u>で紹介しています。

### II. 計算の実行(平衡化)

- **1. ソルバ**から「LAMMPS」を選択し、 (マ(ワークフロー設定)をクリックします。
- 2. 「電荷が設定されていない分子が含まれます。電荷を設定しますか?」と聞かれたら**いいえ**を クリックします。
- 3. パラメータファイルを使用(無機物系、ReaxFF、散逸粒子動力学法向け)をチェックしNext をクリックします。
- **4. 散逸粒子動力学法を使用して計算**をチェックし**Potential file**で「groot」を選択し**OK**をクリックします。
- 5. 「力場が設定されました」と出たら**OK**をクリックします。
- 6. Presetを「DPD NVT Equilibration」に変更します。
- 7. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は1st job、2nd jobのPrecisionを「Low」に変 更します。
- 8. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。



### II. 計算の実行(本計算)

- work1\_LMP\_MIN、work2\_LMP\_NVEの2つの作業フォルダの状態がENDまたはEND(-)に変化 したら、 (ワークフロー設定)をクリックします。
- 2. 「継続ジョブを実行しますか?…」と表示されたらはいをクリックします。
- 3. work2 LMP NVEを選択しOKをクリックします。
- 4. Presetを「DPD NVT Production」に変更します。
- 5. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は**1st job**のPrecisionを「Low」に変更します。
- 6. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。

≽	プロジェクト	
作講	美フォルダ (dpd)	Options ▼
	名前	状態
	work1_LMP_MIN	END
0	work2_LMP_NVE	END
	45	
<		>
77.15		

#### III. 結果解析

- 1. work3\_LMP\_NVEの**作業フォルダ**の状態がENDまたはEND(-)に変化したら、work3\_LMP\_NVE をクリックし、**アクション**のAnimationをクリックします。
- アニメーション操作エリアで ▶ (Play/pause)をクリックするとトラジェクトリが可視化され、ラメラ相に収束してく様子が分かります。



#### III. 結果解析

- 1. アクションのScattering Functionをクリックします。
- units = Ijにチェックを入れ、First Frameに1800と入力しDrawをクリックします。ラメラ構造の繰り返し単位に近い、波数q~1、長さl~6.42(I = 2⊓/q)程度のところにピークが確認できる。



## 補足1: 分岐の作成

#### StartおよびEndにより分子に分岐(Branch)を導入できる。



#### 補足2: 古典MDの座標への変換

DPDで取得した粒子配置から、古典(全原子)MDの座標を取得したい場合は、 MD | ポリマー | モノマー割り付けを選ぶ。 Monomer欄において、各粒子に対してどのモノマーを割り付けるか指定し、 Densityを指定した後、Buildする。 モノマーは、MD | ポリマー | モノマー登録にて登録されている必要がある。 (詳細は「Winmostar™ LAMMPSチュートリアル ガラス転移温度(ポリマー)」を参照) ただし、粒子数が多いほど変換に長い処理時間が必要となる。







• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>の受講をご検討ください。(詳細はP.2)
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず<u>よくある質問</u>を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の 再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上