

Winmostar - LAMMPS Tutorial 2 LAMMPS基礎編 _{V6.003}

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2015/12/09



Contents

- I. LAMMPSの入手と設定
- II. 1分子(C₈H₁₈)のモデリングとMOPAC計算
- III. 25分子系の作成
- Ⅳ. エネルギー最小化計算
- V. nvt(温度一定)計算 VI. npt(温度/圧力一定)計算



I. LAMMPSの入手と設定

- a. LAMMPSの入手
 - ① サイトにアクセスする。<u>http://rpm.lammps.org/windows.html</u>
 - OSに応じて[Latest version for 32-bit Windows] もしくは [Latest version for 64-bit Windows] をクリックしexeファイルを保存する。
 - ③ 保存したexeファイルをダブルクリックし指示に従う。
- b. MPICHの入手とインストール(LAMMPSの並列実行を行わない場合は不要)
 - ① サイトにアクセスする。<u>http://rpm.lammps.org/windows.html</u>
 - ② OSに応じて[mpich2-1.4.1p1-win-ia32.msi]もしくは[mpich2-1.4.1p1-win-x86-64.msi]をクリックしmsiファイルをダウンロードする(拡張子が変更された場合は.msiに戻す)。
 ※ LAMMPSが32-bitであれば、MPICHも32-bitを選択する(64-bitの場合は64-bitを選択する)。
 - ③ 保存したmsiファイルをダブルクリックし指示に従う。
 - ④ スタートメニューなどからコマンドプロンプトを管理者権限で立ち上げる。

MPICHをインストールしたdirectoryに移動する。 (32 bitの場合) c:¥> cd "c:¥Program Files (x86)¥MPICH¥bin" (64 bitの場合) c:¥> cd "c:¥Program Files¥MPICH¥bin"

⑤ MPICHのセットアップコマンド(smpd.exe)を実行する。



II. 1分子(C₈H₁₈)のモデリングとMOPAC計算

D# ■ •• • • • • • H
Add Del -OH3 -C2H5 -C6H5 -CH3 - Rep H - Chne BS1 @ BS2 1.15 Connect
C:¥winmos5¥temp.dat
Viiminostar 20 Centra 114.23 0 4.0/01 - 3.1993 0 Advin 025
ANT EF PREUZSE GRUBBEU.US RULNIEK GRUBPU.US RULNIEK GRUPPE MANK
T I I I I I I I I I I I I I I I I I I I
9
26 H 11 109 -120 23 20 24
w w
OM1(O)のメニューからMOPACを起動し雷荷を計算さ
644 Do LOUG - CAUE - CAUE - Caue U Change BS1 @ BS2 1.15 Connect
C:Wullhen VAII Atoms VMerk
Winnostar 26 C8H18 114/23 0 4.2418 -3.1546 0.0023 200m 22 26-1-55 Leng-9.6552 Andreg 2.3 Dided Legr=0 Charge=0.0716 Atom 0.25
WHI EF PRECISE ONORME0.05 NOINTER GRAPHF MHOX
Vinnostar
00.0715
0.0776
11 C 151351 111.557 12 - 21.236 1 8 2 9 11 C 151351 111.557 1 - 121.236 1 8 2 9 11 C 151351 111.5551 - 151.5558 - 15.6588 1 11 8 2 9
0.0786 13 H 1,12188 1 109,5881 1 117,2604 1 11 8 12 117,204 1 11 8 12
0.2104 23 0 1.308/8 1 11.3428 1 121.4/6 1 20 1/ 21
0.0776 0.0776
24 H 1:1189 1 10:377
24 11:16:371 11:0:371 1:0:371
V V 24 1 110 871 110.877 110.877 110.877 110.877 120.075 24 24 V 1 110.877 110.877 110.877 120.0057 23 20 24 V 1 110.877 110.877 120.0057 23 24 V 1 110.877 120.0057 123 24
V Z - x
V Z

RESP電荷やGAMESSなどのab-initio計算によって得られる電荷値を用いることが望ましい。



III. 25分子系の作成

Ctrl + 左クリックで分子全体を選択する



*ここでは、C8H18を8Åの間隔でY方向に5分子、Z方向に5分子複製し25分子系の初期構造を作成している。分子間隔を長めに取る のが異常終了を避けるコツである。

2015/12/09



Ⅳ. エネルギー最小化計算「計算条件の設定」





Ⅳ. エネルギー最小化計算「エネルギー変化の確認」

LAMMPS エネルギー変化画面を起動する





V. nvt(温度一定)計算「計算条件の設定1」

LAMMPS トラジェクトリ読み込み画面を起動する





V. nvt(温度一定)計算「計算条件の設定2」 (1) LAMMPSキーワード設定画面を記動する。 (2) 計算条件設定を行う 設定が反映される(必要に 応じて編集可) .in Fileをクリックする Winmostar(MD/NB/SPS) V6.003 LAMMPS ファイル(F) 編集1(E) 編集2 表示(V) QM1(Q) QM2 MD(M) 固体(S) その他 チュートリアル(T) ヘルプ(H) 😅 🔒 💀 🍪 🖌 H リモートジョブ投入 .data File .in File 1.15 Connect Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -CH3 - Rep Gromacs I Inits units real -¥winmos6¥tutorial¥LAMMPS_tutorial2_for_V6.003¥C8H18_ LAMMPS キーワード設定 atom_style full Winmostar 650 C200H450 2,855.77 0 8.0951 26.7377 Amber LAMMPS実行 boundary ррр 650-1-5-5 Leng=42.4809 Ang=75.6 Dihed=0 Lper=0 Charge Atom Style 6.0 tilt large box トラジェクトリ読み込み ポリマー pair style li/cut/coul/cut 10.0 Boundary X ▼ Y p ▼ Z p bond style harmonic 界面ビルダ エネルギー変化 angle style harmonic Pair Style lj/cut/coul/cut Winmostar 動径分布関数 charmm dihedral style 100ステップ improper_style umbrella 300 平均二垂空位 read data SDATAFTLES に変更する neigh_modify delay 0 Dump Interval 100 MPI並列計算条件設定を行う $(\mathbf{3})$ dump 1 all custom 100 %DUMPFILE% id type 10ステップ dump 2 all xtc 100 %XTCFILE% Dump Format dump & xtc+gro thermo_style custom step temp epair emol etotal press vol (MPI未設定の場合は不要) thermo に変更する Log Interval 10 velocity all create 300.0 12345 1 all nvt temp 300.0 300.0 100.0 fix .data Fileをクリックする nvtに変更 Ensemble nvt timester 2.0 10000 run する 300.0 Temperature [K] - • × Setun 1.0 data File .in File 2.0 Time Step [fs] 10000に変更 Simulation Box Charge 10000 f Time Steps X Low -5.3944 X High 13.1025 Atom Type Charge する Generate Velocity **v** box tilt large Y Low -10.2623 Y High 38.0469 н Z Low -5.9068 Z High 37.9069 OK Cancel Apply Load Setting Save Setting Save as Default

(4) LAMMPSを実行する。

Winmostar(MD/NB/SPS) V6.003		
ファイル(F) 編集1(E) 編集2 表示(V) QM1(Q) QM2	MD(M) 固体(S) その他	チュートリアル(T) ヘルプ(H)
🖙 🖬 👐 🌼 🎻 H	リモートジョブ投入	
Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -CH3 • Rep	Gromacs	2 1.15 Connect
-¥winmos6¥tutorial¥LAMMPS_tutorial2_for_V6.003¥C8H18_2 Winmostar 650 C200H450 2,855.77 0 8.0951 26.7377 3 650-1-55 Leng-42.4809 Ang=75.6 Dihed=0 Lper=0 Charges Vol=39,150.6273 Rho=0.1211	LAMMPS	▶ キーワード設定
	Amber	▶ LAMMPS実行
	ポリマー	トラジェクトリ読み込み 🗟
	界面ビルダ	エネルギー変化
	Winmostar	動径分布関数
₩.		平均二乗変位

OKをクリックする

Apply

Auto Generate

MPIにチェックを入れprocesses

Load Setting Save Setting Save as Default

にCPUのcore数を設定する

Cancel

XY 0.0000

XZ 0.0000

YZ 0.0000 Distance 5.0

Specify data file

MPI processes



V. nvt(温度一定)計算「温度変化の確認」

LAMMPS エネルギー変化画面を起動する





V. nvt(温度一定)計算 「トラジェクトリー表示」

LAMMPS トラジェクトリ読み込み画面を起動する





MPI processes 4

Cancel

2015/12/09

OKをクリックする

Apply

OK

npt(温度/圧カー定)計算「計算条件の設定」 VI. (1) LAMMPSキーワード設定画面を起動する。 (2) 計算条件設定を行う 設定が反映される(必要に 応じて編集可) .in Fileをクリック Winmostar(MD/NB/SPS) V6.003 ファイル(F) 編集1(E) 編集2 表示(V) QM1(Q) QM2 MD(M) 固体(S) その他 チュートリアル(T) ヘルプ(H) _ 🗆 📈 LAMMPS 😅 🖬 🕶 🍪 🖌 H リモートジョブ投入 1.15 Connect .data File .in File Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -CH3 ▼ Rep Gromacs -¥winmos6¥tutorial¥LAMMPS_tutorial2_for_V6.003¥C8H18_ LAMMPS キーワード設定 Units units real Winmostar 650 C200H450 2,855.77 0 8.0951 26.7377 full Amber LAMMPS実行 atom style 650-1-5-5 Leng=42.4809 Ang=75.6 Dihed=0 Lper=0 Charge Atom Style boundary ррр トラジェクトリ読み込み ポリマー tilt large box pair_style lj/cut/coul/cut 10.0 Boundary X p p 🔻 Z p 界面ビルダ エネルギー変化 bond style harmonic angle_style Winmostar 動径分布関数 harmonic Pair Style lj/cut/coul/cut dihedral style charmm 300 平均二垂空位 improper_style umbrella read data SDATAFTLES neigh_modify delay 0 Dump Interval 100 dump 1 all custom 100 %DUMPFILE% id type xs ys zs ix dump 2 all xtc 100 %XTCFILE% (3) MPI並列計算条件設定を行う(MPI未設定の場合は不要) Dump Format dump & xtc+gro thermo style custom step temp epair emol etotal press vol dens thermo Log Interval 10 .in Fileをクリックする velocity all create 300.0 12345 1 all npt temp 300.0 300.0 100.0 iso 1.0 1.0 100. fix nptに変 Ensemble npt timester 2 0 **7117** 30000 更する - • × Setup Temperature [K] 300.0 .data File .in File 1.0 Pressure [atm] 2.0 3000012 Time Step [fs] Simulation Box Charge 30000 X Low -5.3944 X High 13.1025 変更する of Time Steps Atom Type Charge Generate Velocity V box tilt large Y Low -10.2623 Y High 38.0469 Z Low -5,9068 Z High 37,9069 Cancel Apply Load Setting Save Setting Save as Default OK XY 0.0000 XZ 0.0000 (4) LAMMPSを実行する。 YZ 0.0000 Distance 5.0 Auto Generate Winmostar(MD/NB/SPS) V6.003 ファイル(F) 編集1(E) 編集2 表示(V) QM1(Q) QM2 MD(M) 固体(S) その他 チュートリアル(T) ヘルプ(H) Specify data file

🖼 🔚 👐 🌼 🖌 H

Vol=39,150.6273 Rho=0.1211

Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -CH3

-¥winmos6¥tutorial¥LAMMPS_tutorial2_for_V6.003¥C8H18_

Winmostar 650 C200H450 2,855.77 0 8.0951 26.7377 3

650-1-5-5 Leng=42.4809 Ang=75.6 Dihed=0 Lper=0 Charge:

3-2

Copyright (C)	2015 X-Ability	Co.,Ltd. A	All rights	reserved

Load Setting Save Setting Save as Default

MPIにチェックを入れprocesses

にCPUのcore数を設定する

1.15 Connect

キーワード設定

LAMMPS実行

エネルギー変化

動径分布関数

平均二乗変位

トラジェクトリ読み込み

リモートジョブ投入

Winmostar

Gromacs

LAMMPS

Amber

ポリマー 界面ビルダ

▼ Rep



Winmostar(MD/NB/SPS) V6.003 松理 -新しいフォルダ 8E • ファイル(F) 編集1(E) 編集2 表示(V) QM1(Q) QM2 MD(M) 固体(S) その他 チュートリアル(T) ヘルプ(H) ドキュメント 名前 更新日時 種等 0 🔛 ピクチャ 🗃 📮 👐 🌼 🧹 H 🎍 wm_stack_2 2015/03/17 10:31 77 リモートジョブ投入 ■ ビデオ C8H18_25chains.log 2015/03/17 12:43 1.15 Connect → ミュージック C8H18 25chains auto cell.log 2015/03/16 15:46 LOG 103 KB Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -CH3 ▼ Rep -Gromacs C8H18 25chains npt.log 2015/03/17 14:52 3 KE 🜏 ホームグルーフ C8H18 25chains nvt.log 2015/03/16 15:56 LOG LAMMPS -¥winmos6¥tutorial¥LAMMPS_tutorial2_for_V6.003¥C8H18_2 キーワード設定 302 KE 2015/02/10 17:58 LOG C40H82.log Winmostar 650 C200H450 2,855.77 0 8.0951 26.7377 3 3 KE C40H82 npt.log 2015/03/02 15:04 LOG Amber LAMMPS実行 周 コンピューター 650-1-5-5 Leng=42.4809 Ang=75.6 Dihed=0 Lper=0 H C40H82 npt ext.loc 2015/02/26 18:49 LOG 103 KB 🚢 ローカル ディスク (C 2015/03/02 15:28 LOG * 3 KE Vol=39,150.6273 Rho=0.1211 トラジェクトリ読み込み C40H82_npt_ext2.log 🕞 システムで予約済み (🖕 ポリマー ファイル名(N): Output file(*.log) 界面ドルグ エネルギー変化 La 関く(0) 🔻 キャンセル Winmostar 動径分布関数 平均二乗変位 ファイル名(N): C8H18 Output file(*.log) 開く(2) = キャンセル し [開く]をクリックする 温度変化 密度変化 Energy term ①[Temp]にチェックを入れる **IPS Energies** Energy terms Temp LAMMPS Energies 🔲 E_pair Temp E_mol 🔲 E_pair E_mol TotEng TotEng Press WARMAN WAR Press Volume 体積変化 0.6 Density Volume ①[Density]にチェックを入れる Energy term LAMMPS Energies Temp 温度が設定した300Kに E_pair E mol 40000 0.3 コントロールされている。 TotEng - Volume 密度が上昇している。 Press Volume ①[Volume]にチェックを入れる 0.2 Densit Draw ②Drawをクリックする 0.1 Autoscale 260 L 5000 10000 15000 2000 XMIN XMAX Time Steps 5000 10000 15000 20000 25000 30000 20000 Time Steps YMIN ΥΜΔΧ ②Drawをクリックする 体積が縮小している Redraw Save as CSV 10000 Close Draw ②Drawをクリックする Autoscale 5000 10000 15000 20000 25000 30000 XMIN XMAX Time Steps YMIN YMAX Redraw Save as CSV



VI. npt(温度/圧カー定)計算「トラジェクトリー表示」

LAMMPS トラジェクトリ読み込み画面を起動する





VI. npt(温度/圧カー定)計算「トラジェクトリー表示」

3Dを起動する

