

# 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](mailto:question@winmostar.com)

2015/12/09

# Contents

- I. LAMMPSの入手と設定
- II. 1分子( $C_8H_{18}$ )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

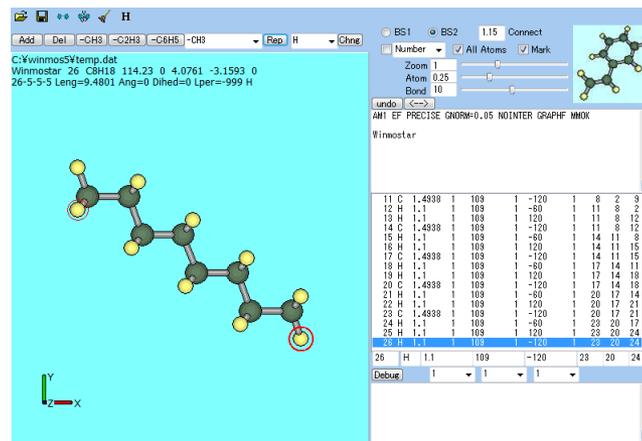
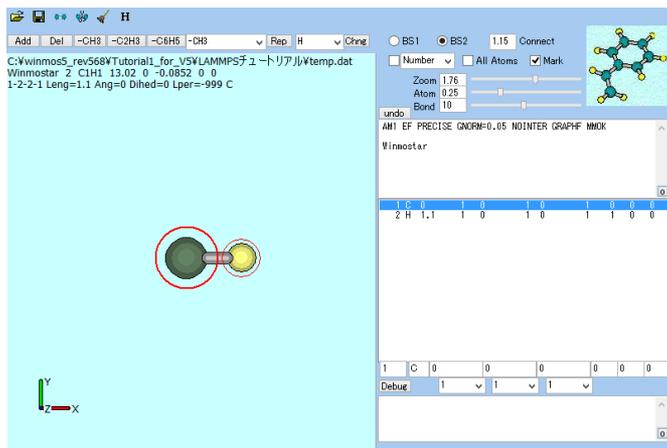
- ① サイトにアクセスする。<http://rpm.lammps.org/windows.html>
- ② OSに応じて[Latest version for 32-bit Windows] もしくは [Latest version for 64-bit Windows] をクリックしexeファイルを保存する。
- ③ 保存したexeファイルをダブルクリックし指示に従う。

## 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)

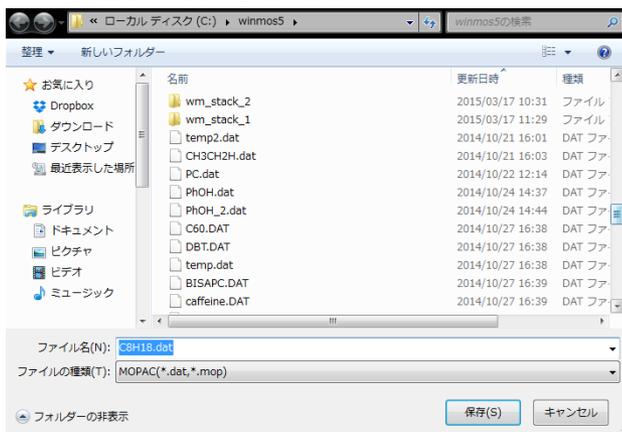
- ① サイトにアクセスする。<http://rpm.lammps.org/windows.html>
- ② OSに応じて[[mpich2-1.4.1p1-win-ia32.msi](#)]もしくは[[mpich2-1.4.1p1-win-x86-64.msi](#)]をクリックしmsiファイルをダウンロードする(拡張子の変更された場合は .msiに戻す)。  
※ LAMMPSが32-bitであれば、MPICHも32-bitを選択する(64-bitの場合は64-bitを選択する)。
- ③ 保存したmsiファイルをダブルクリックし指示に従う。
- ④ スタートメニューなどから**コマンド 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(C<sub>8</sub>H<sub>18</sub>)のモデリングとMOPAC計算

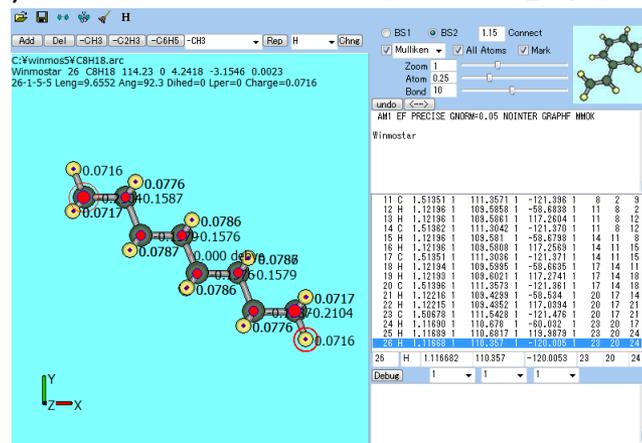
- CH<sub>3</sub>を8回追加する



C<sub>8</sub>H<sub>18</sub> として保存する。



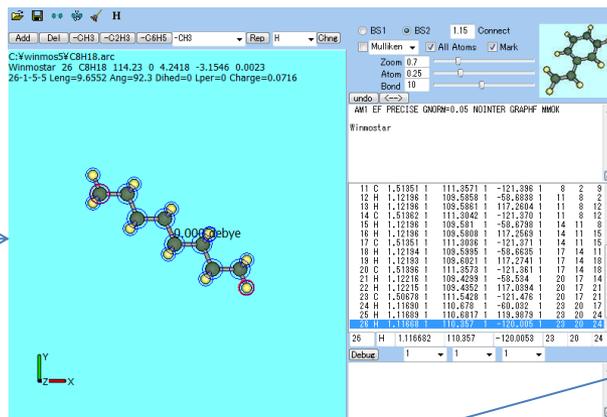
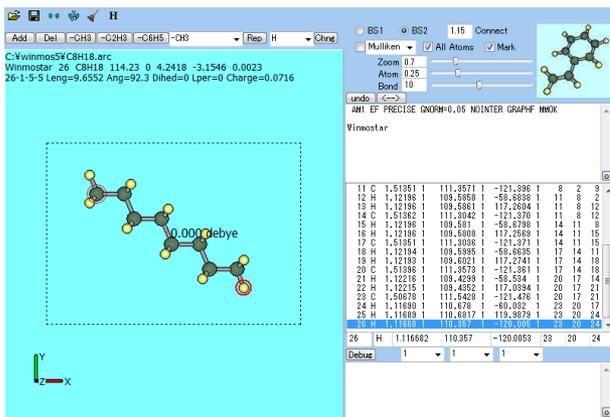
QM1(Q)のメニューからMOPACを起動し電荷を計算させる。\*



\* 本チュートリアルでは原子電荷として、簡易的にMOPAC計算によって得られるMulliken電荷を用いているが、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

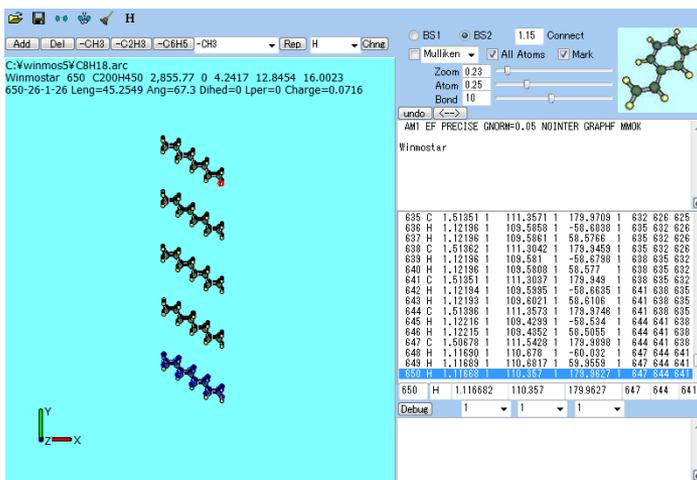
Ctrl + 左クリックで分子全体を選択する



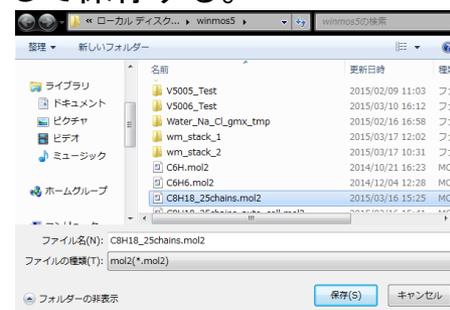
[編集1]->[部分複製]で下記の条件設定により25分子系を作成する。\*

	X	Y	Z
Difference	5.0	8.0	8.0
Number	1	5	5

OK Cancel



[ファイル]->[名前を付けて保存]画面でファイルの種類として mol2(\*.mol2)を選択した後、C8H18\_25chains.mol2として保存する。



mol2に変更する

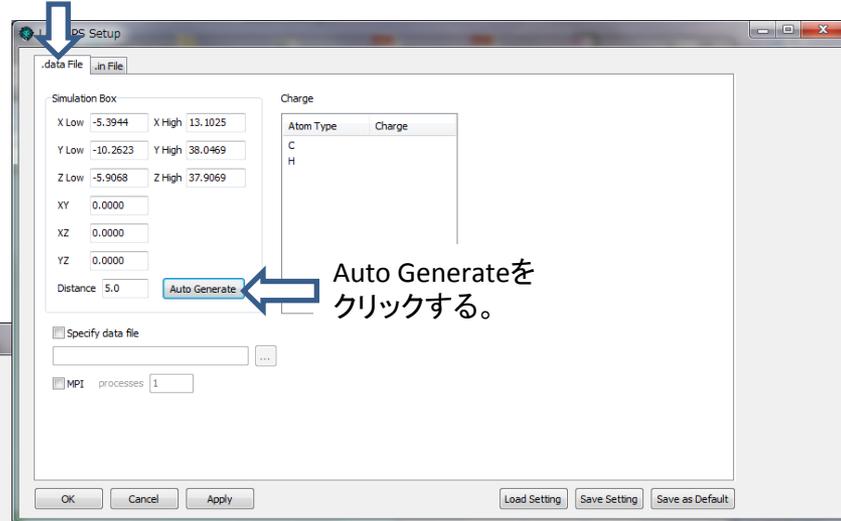
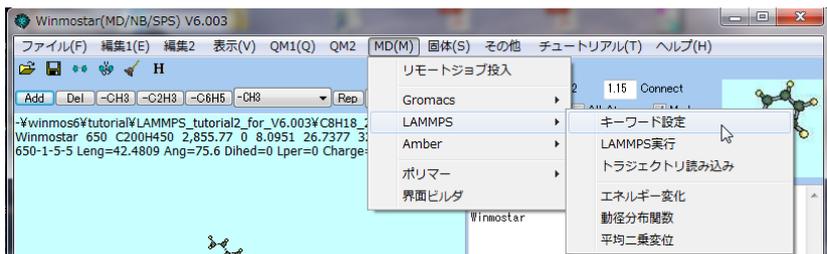
\* ここでは、 $C_8H_{18}$ を $8\text{\AA}$ の間隔でY方向に5分子、Z方向に5分子複製し25分子系の初期構造を作成している。分子間隔を長めにするのが異常終了を避けるコツである。

# IV. エネルギー最小化計算 「計算条件の設定」

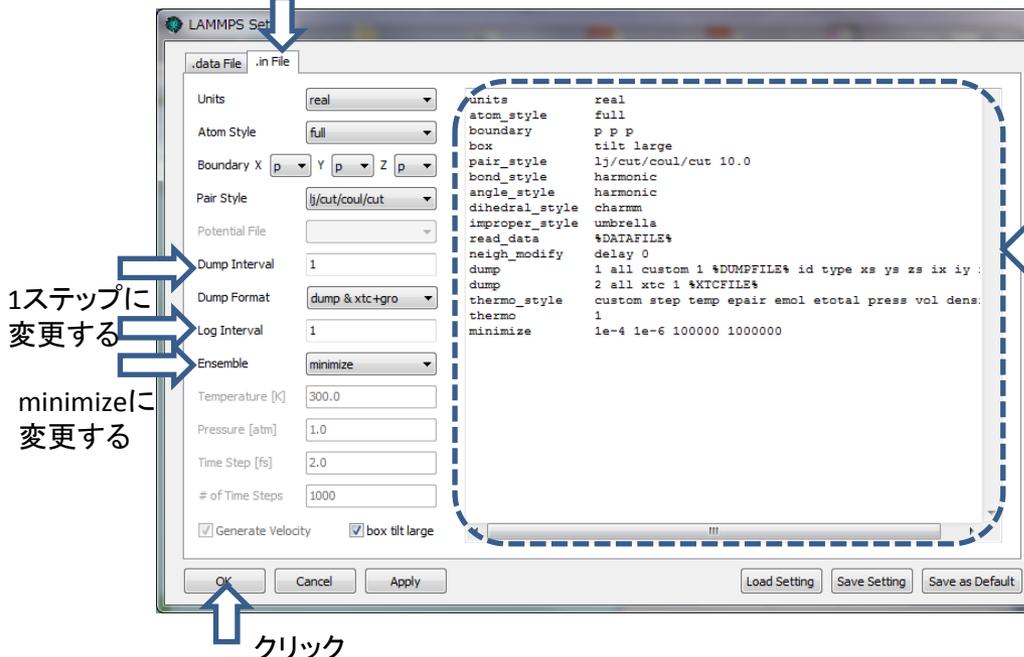
(1) LAMMPSキーワード設定画面を起動する。

(2) MDセルを設定する。

.data Fileタブをクリックする

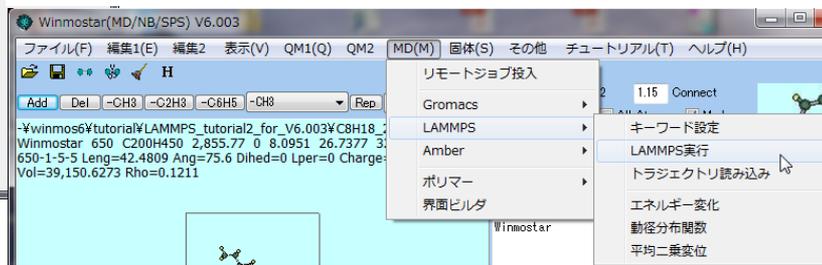


(3) 計算条件を設定する。  
.in Fileタブをクリックする



設定が反映される(必要に応じて編集可)

(4) LAMMPSを実行する。



# IV. エネルギー最小化計算 「エネルギー変化の確認」

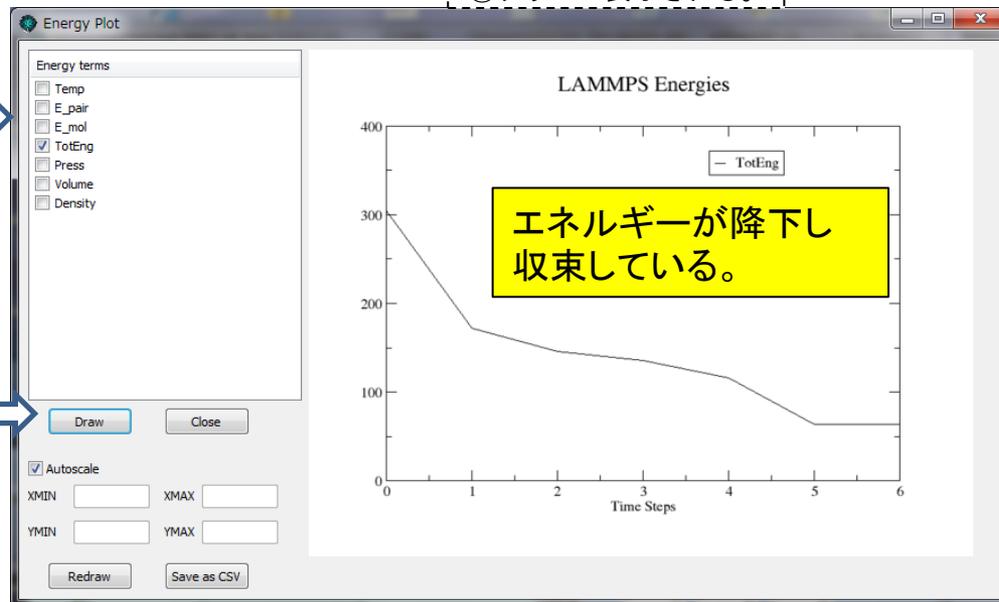
LAMMPS エネルギー変化画面を起動する



[開く]をクリックする

③グラフが表示される。

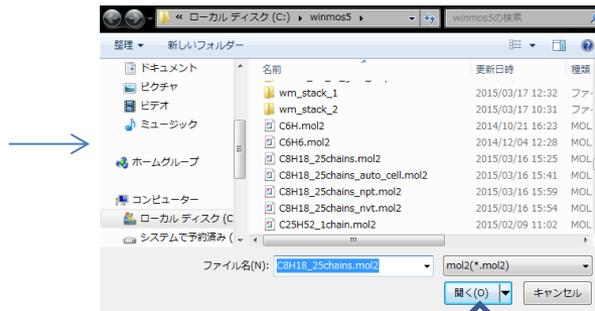
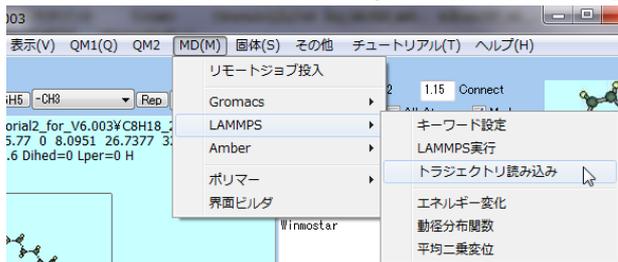
① [TotEng]にチェックを入れる



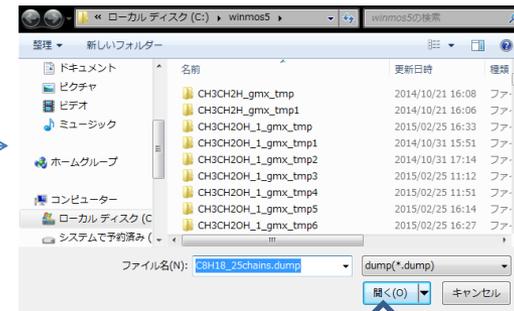
② Drawをクリックする

# V. nvt(温度一定)計算 「計算条件の設定1」

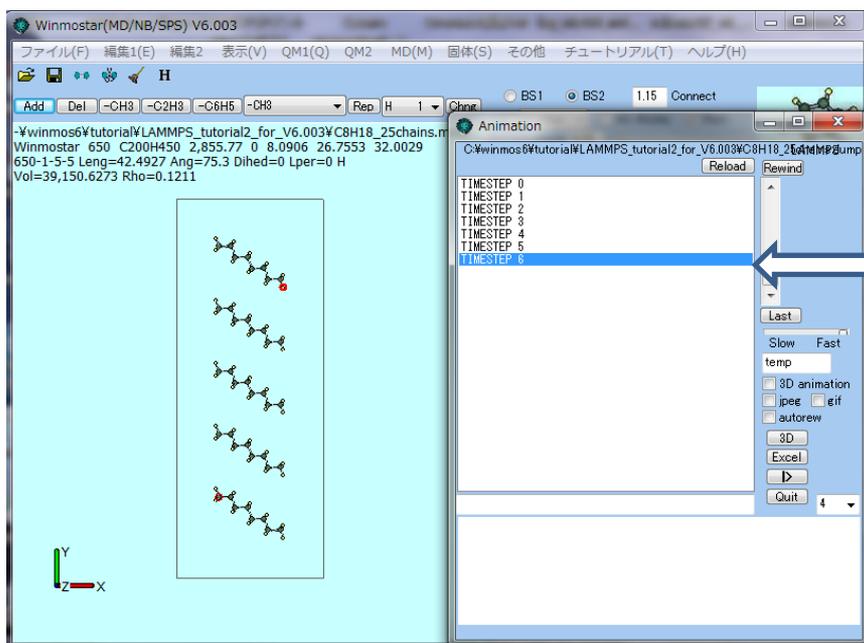
LAMMPS トrajectory読み込み画面を起動する



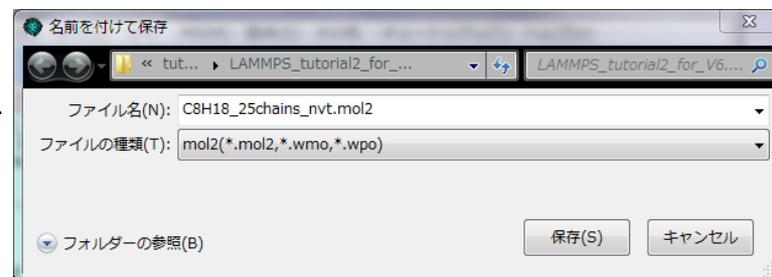
「開く」をクリックする



「開く」をクリックする



最終ステップをクリックする

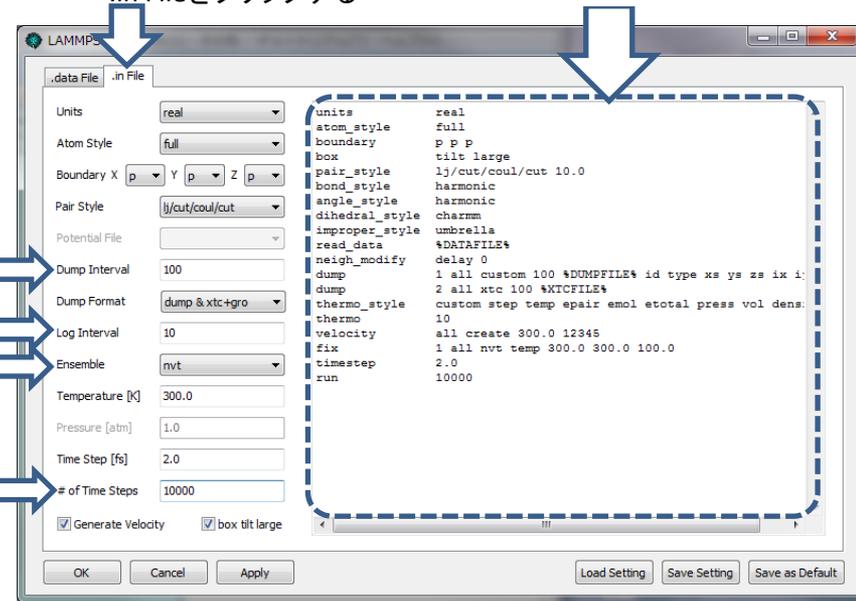
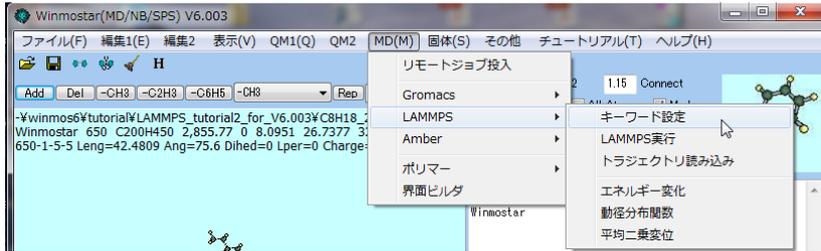


エネルギー極小化で得られた構造を  
[ファイル]->[名前を付けて保存]画面で、  
「C8H18\_25chains\_nvt.mol2」として  
保存する。

# 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起動する。

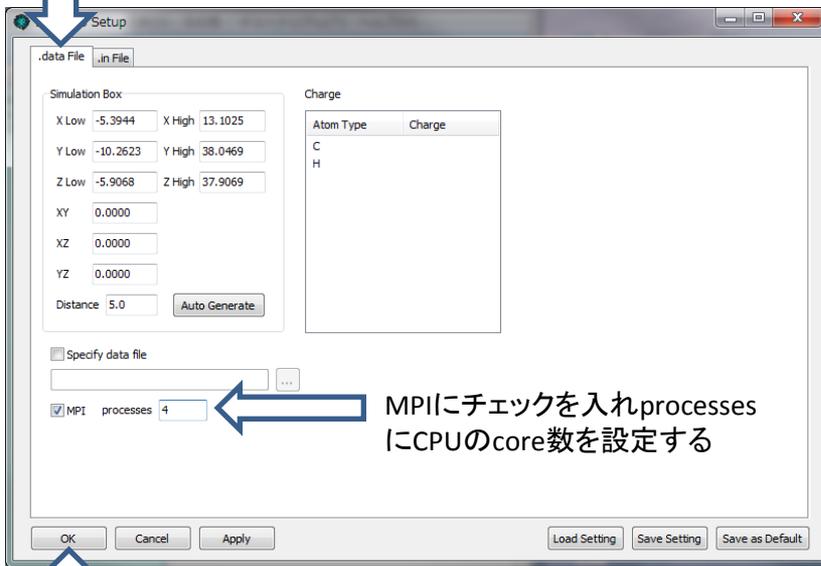
(2) 計算条件設定を行う  
 .in Fileをクリックする  
 設定が反映される(必要に応じて編集可)



(3) MPI並列計算条件設定を行う  
 (MPI未設定の場合は不要)  
 .data Fileをクリックする

100ステップ  
に  
変更する  
10ステップ  
に  
変更する  
nvtに変更  
する

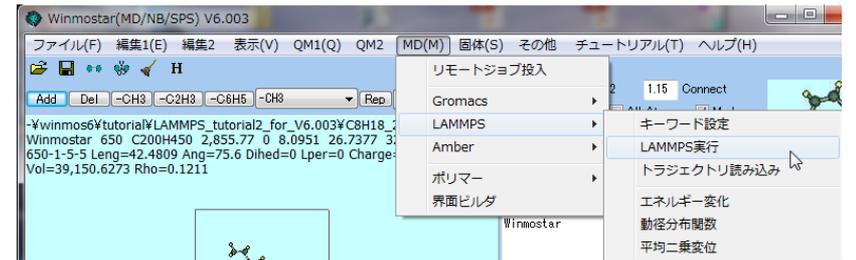
10000に変更  
する



MPIにチェックを入れprocesses  
にCPUのcore数を設定する

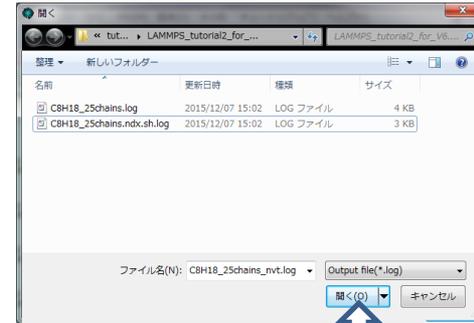
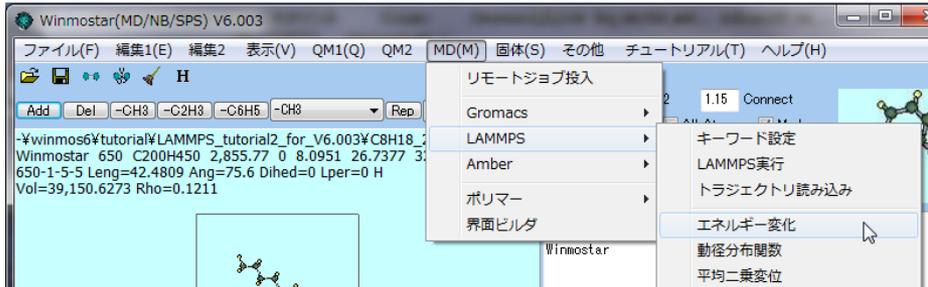
OKをクリックする

(4) LAMMPSを実行する。



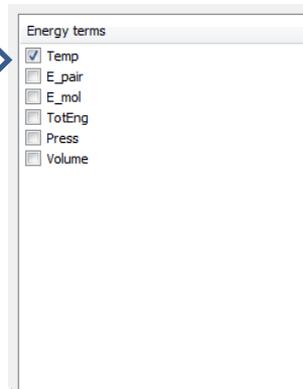
# V. nvt(温度一定)計算 「温度変化の確認」

LAMMPS エネルギー変化画面を起動する

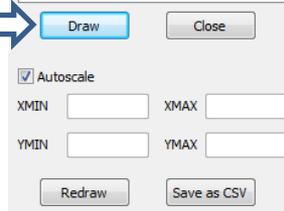


[開く]をクリックする

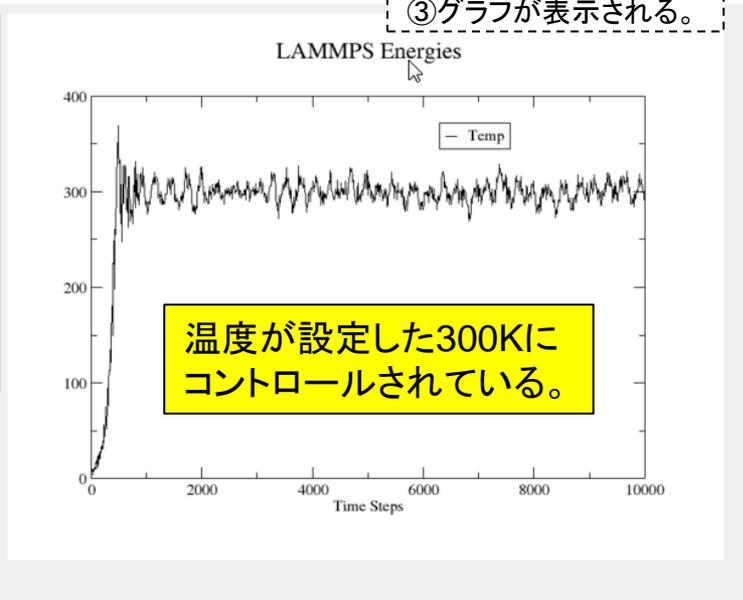
① [Temp]にチェックを入れる



② Drawをクリックする

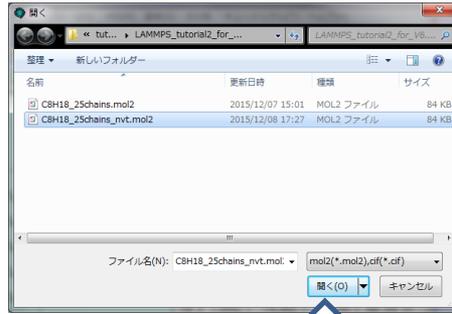
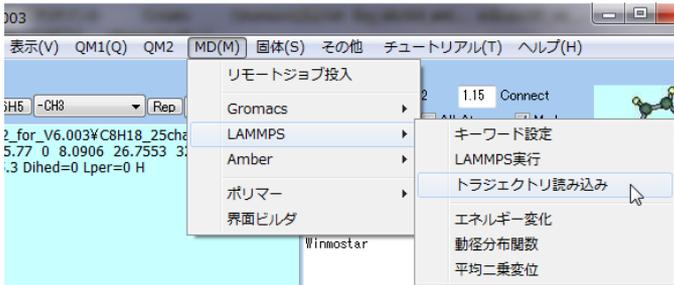


③ グラフが表示される。

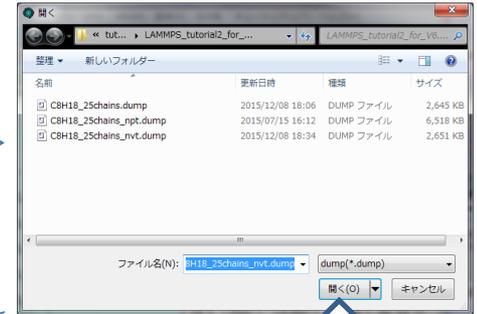


# V. nvt(温度一定)計算 「トラジェクトリー表示」

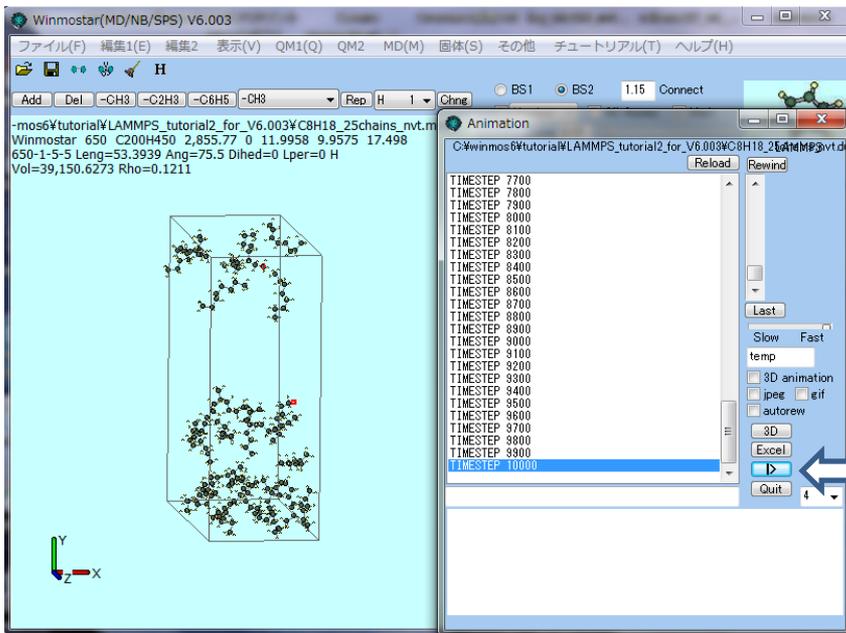
LAMMPS トラジェクトリ読み込み画面を起動する



[開く]をクリックする

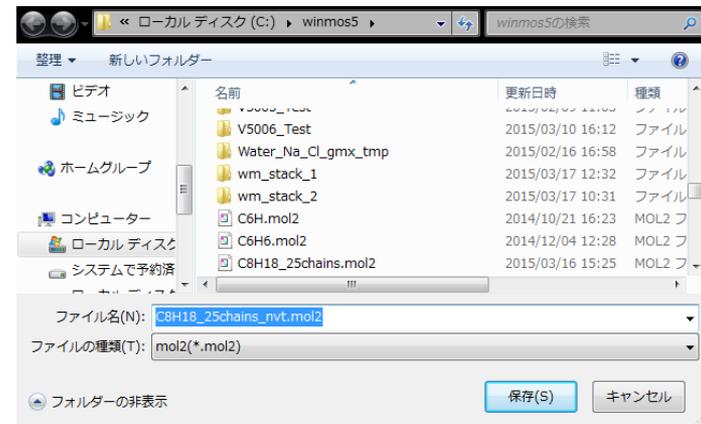


[開く]をクリックする



② 最終ステップ (TIMESTEP 10000) の構造を表示させる

① アニメーションが始まる

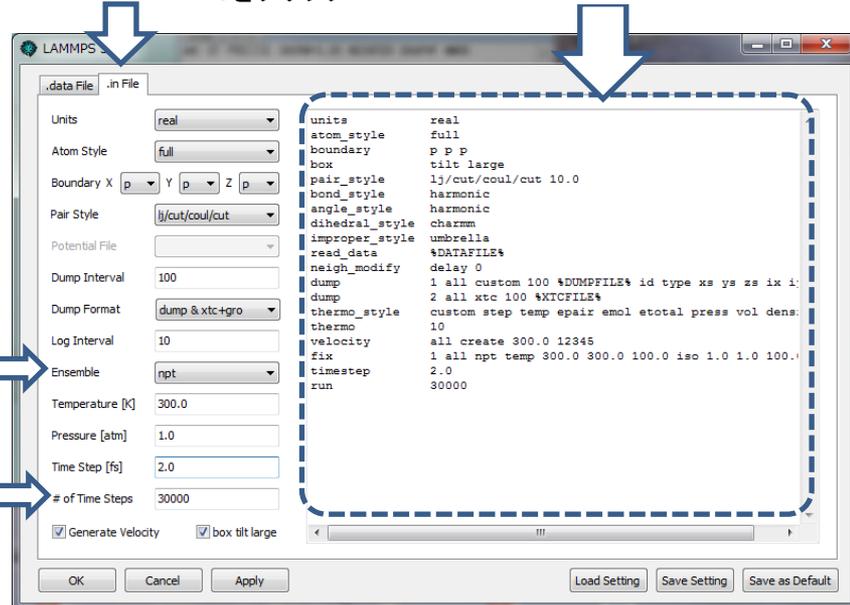
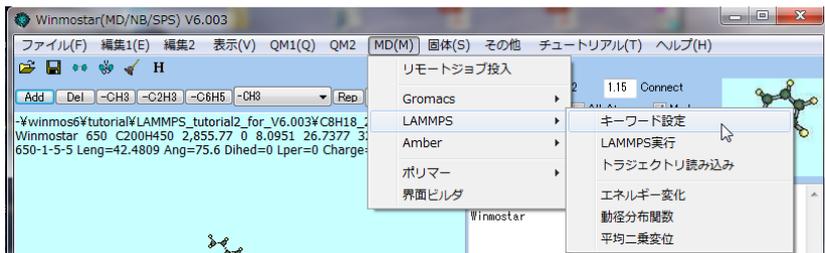


nvtで得られた構造を[ファイル]->[名前を付けて保存]画面で、「C8H18\_25chains\_npt.mol2」として保存する。

# VI. npt(温度／圧力一定)計算 「計算条件の設定」

(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 .in Fileをクリック  
設定が反映される(必要に応じて編集可)

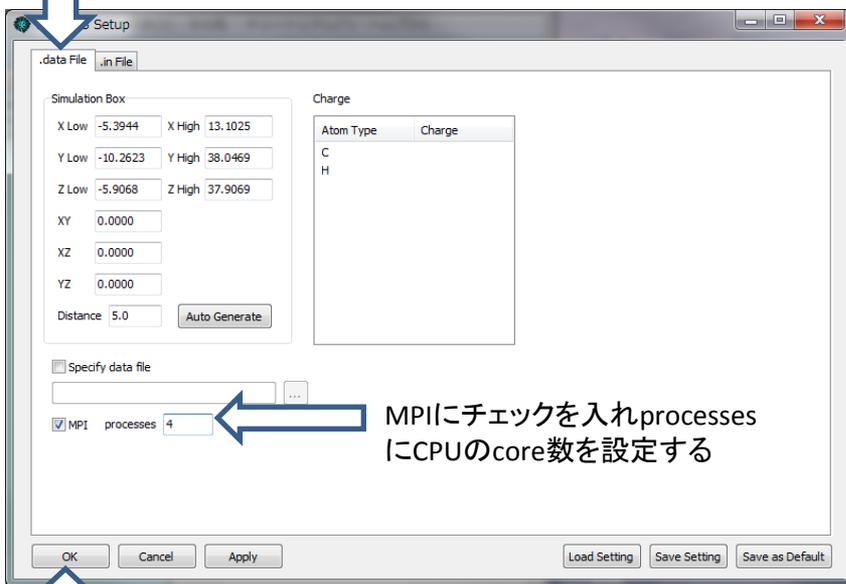


(3) MPI並列計算条件設定を行う(MPI未設定の場合は不要)

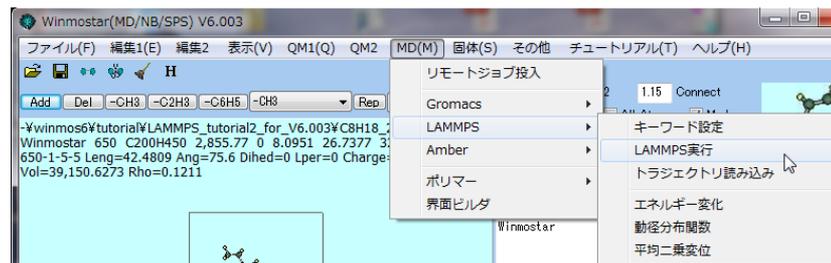
.in Fileをクリックする

nptに変更する

30000に変更する



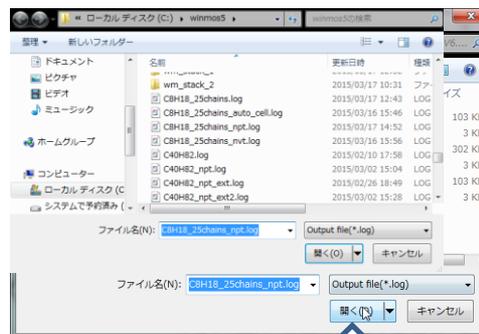
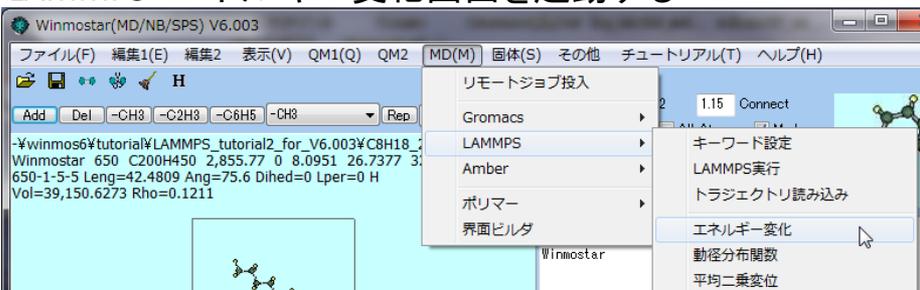
(4) LAMMPSを実行する。



OKをクリックする

# VI. npt(温度/圧力一定)計算 「温度、体積、密度変化の確認」

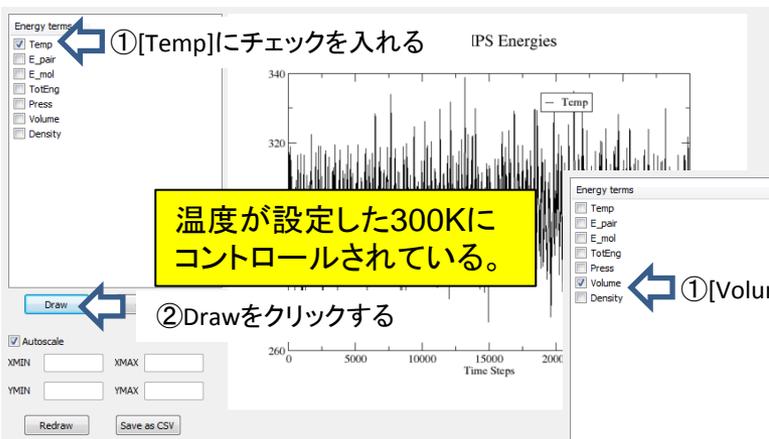
LAMMPS エネルギー変化画面を起動する



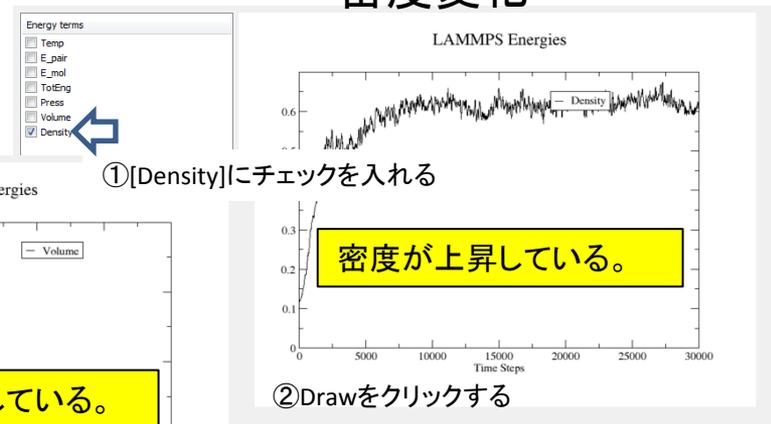
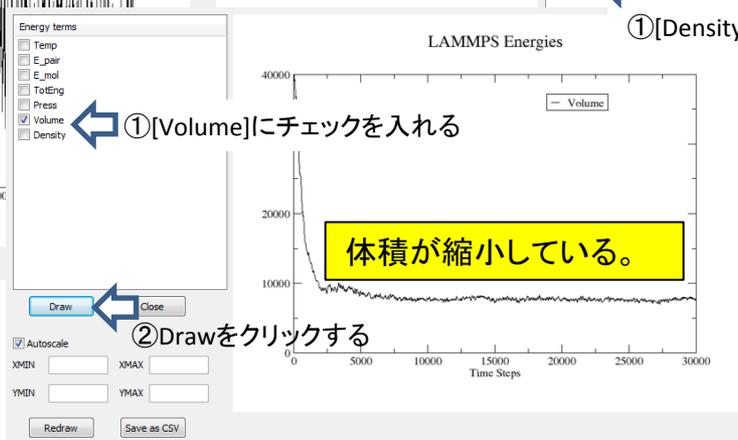
↑[開く]をクリックする

温度変化

密度変化

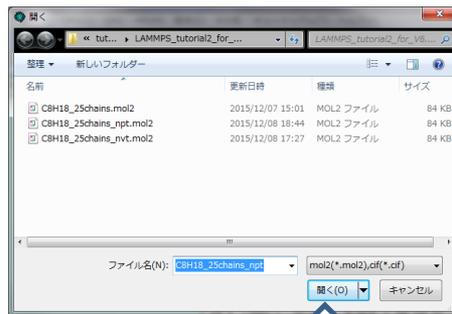
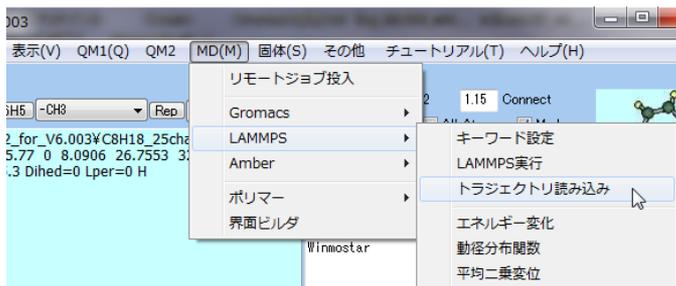


体積変化

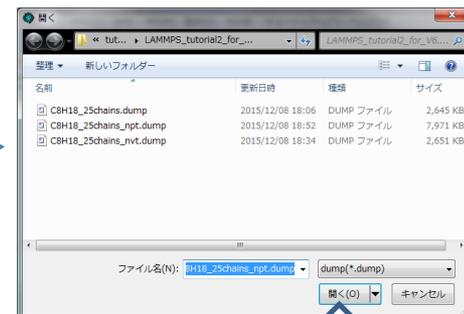


# VI. npt(温度／圧力一定)計算 「トラジェクトリー表示」

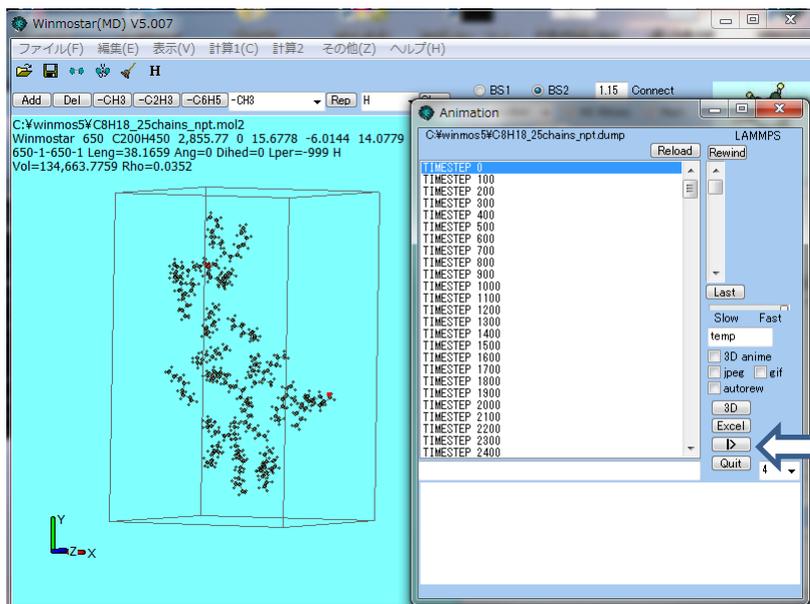
LAMMPS トラジェクトリ読み込み画面を起動する



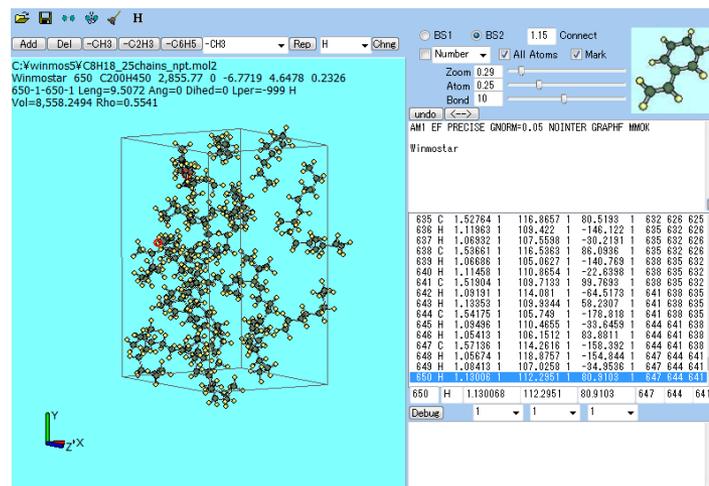
[開く]をクリックする



[開く]をクリックする

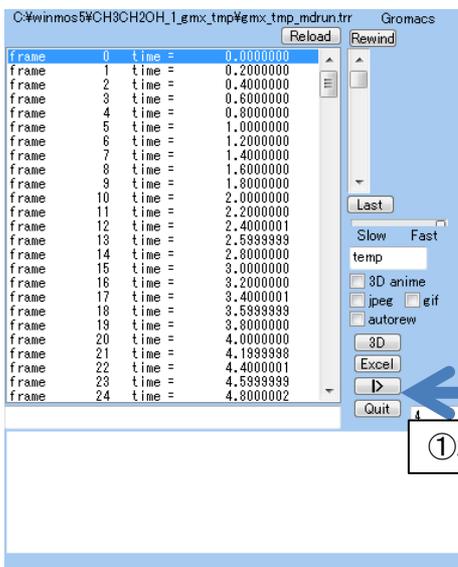


アニメーション  
が始まる



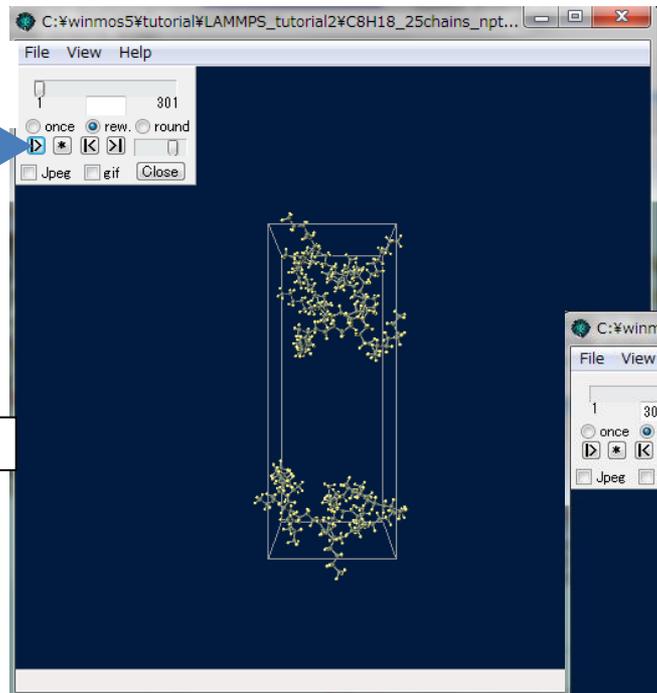
# VI. npt(温度／圧力一定)計算 「トラジェクトリー表示」

3Dを起動する



① 3Dをクリックする

② 再生ボタンをクリックする



③ アニメーションが始まる

