

Winmostar - LAMMPS

散逸粒子動力学 (DPD)

V6.006

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2016/1/27

修正履歴

2016/1/27版

- 初版

Contents

- 0 環境設定
- I. 初期座標の作成
- II. ポテンシャルの設定
- III. LAMMPSの設定
- IV. LAMMPSの実行

0 環境設定1

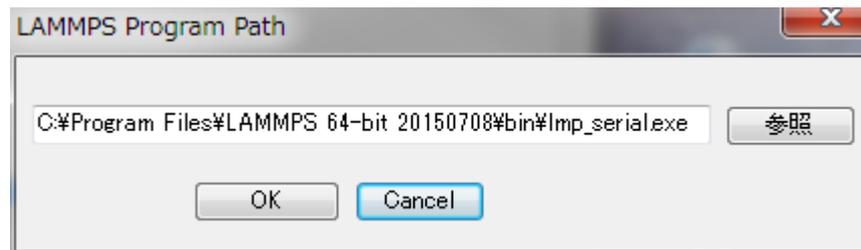
- ① LAMMPS及びcygwinの入手とセットアップ
LAMMPSのサイトからLAMMPSを入手する。さらにX-abilityのサイトからcygwin_wmを入手しセットアップを実施する。詳細は以下のリンク先を参照のこと。

http://winmostar.com/jp/LAMMPS_install_manual_jp_win.pdf

- ② パスの設定

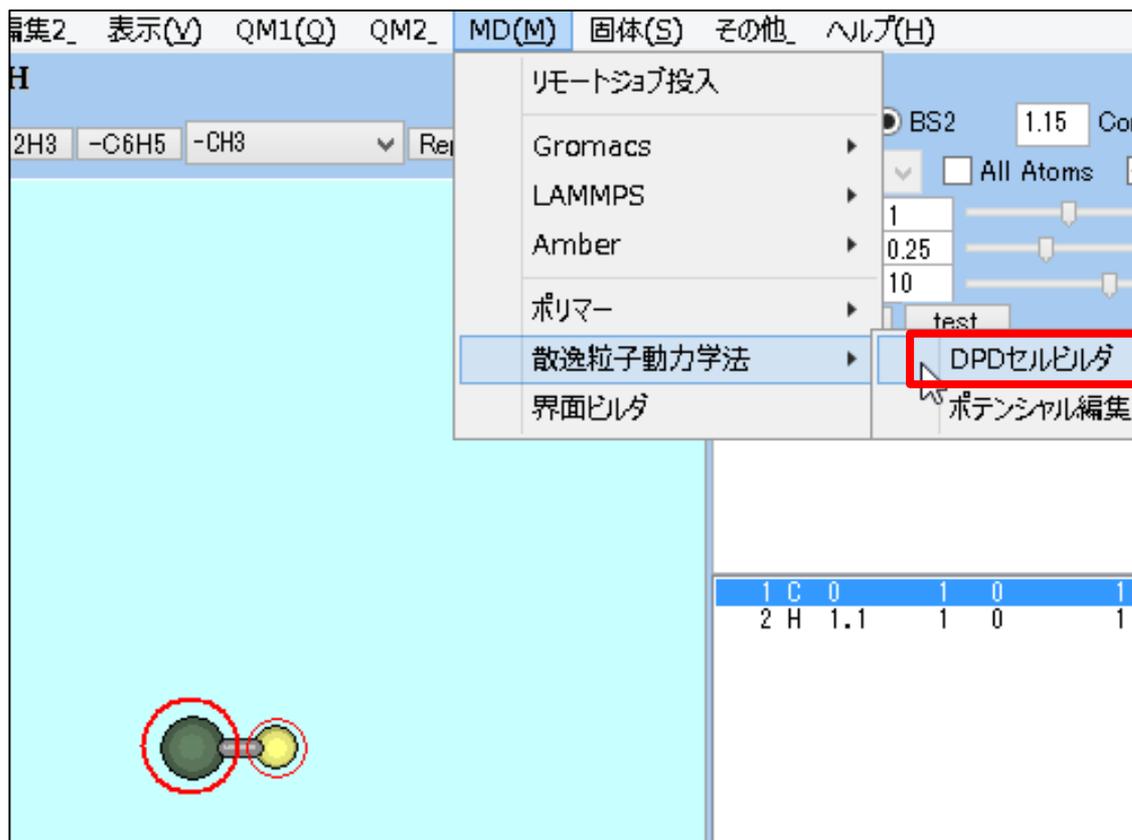
Winmostarのメニュー [その他]→[パスの設定]→[LAMMPS]を選択し「LAMMPS Program Path」画面(下図)にLAMMPSの実行ファイル(lmp_serial.exe)を登録し[OK]をクリックする。

※ デフォルトはC:\Program Files\LAMMPS 64-bit 20150708\bin\lmp_serial.exeと表示されるが32ビット版を使用する場合はC:\Program Files (x86)\LAMMPS 32-bit 20150708\bin\lmp_serial.exeなどに変更する。



I. 初期座標の作成

「MD>散逸粒子動力学法>DPDセルビルダ」を選択する。



I. 初期座標の作成

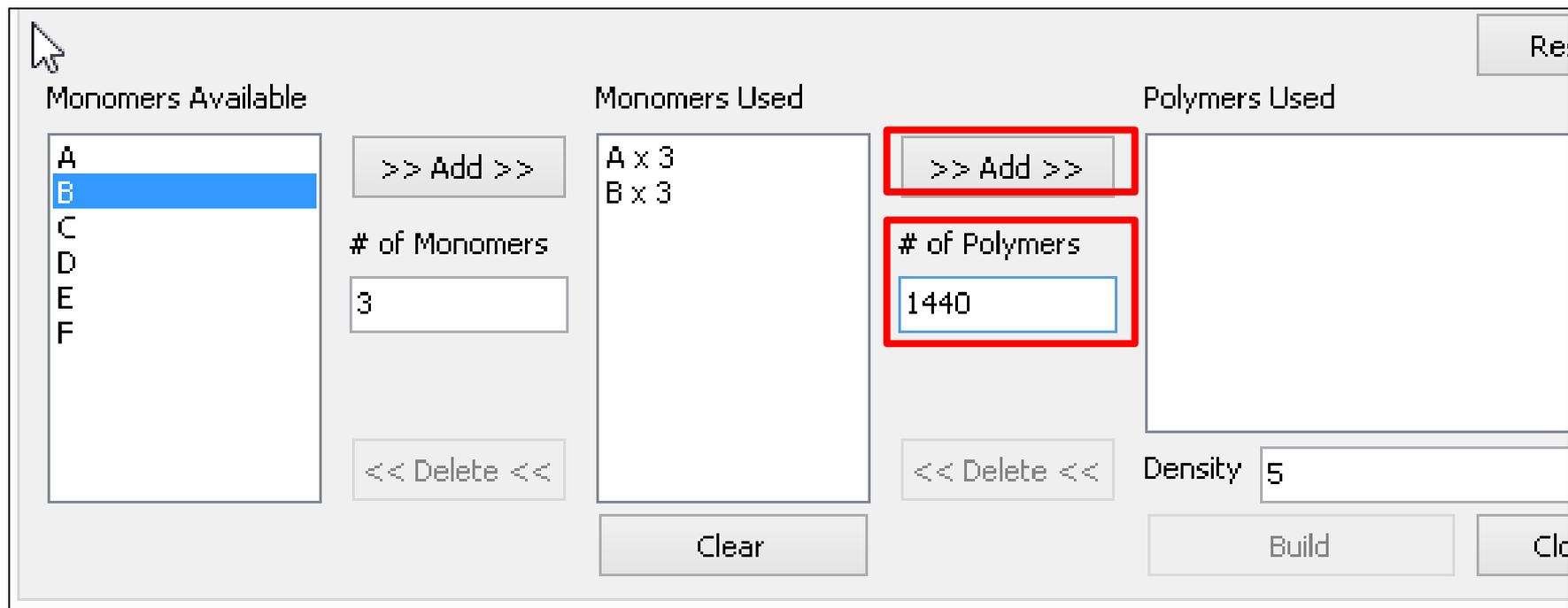
Monomers Availableの「A」を選択し、「# of Monomers」に「3」を入力して「Add」を押す。
次に、同様に、「B」を選択し、「# of Monomers」に「3」を入力して「Add」を押す。

The screenshot displays a software interface with the following components:

- Monomers Available:** A list box containing letters A, B, C, D, E, and F. Option B is highlighted in blue.
- Monomers Used:** A list box containing "A x 3" and "B x 3".
- Buttons:** ">> Add >>" (top), "<< Delete <<" (bottom), and "Clear" (bottom center).
- Input Fields:** "# of Monomers" (containing "3") and "# of Polymers" (empty).
- Other Labels:** "Density" (bottom right).
- Callout:** An orange box with a pointer to the "Add" button containing the text "# of Monomersの上のAddを押す".

I. 初期座標の作成

「# of Polymers」に「1440」を入力して「Add」を押す。



Monomers Available

A
B
C
D
E
F

>> Add >>

of Monomers

3

<< Delete <<

Monomers Used

A x 3
B x 3

>> Add >>

of Polymers

1440

<< Delete <<

Clear

Polymers Used

Density 5

Build

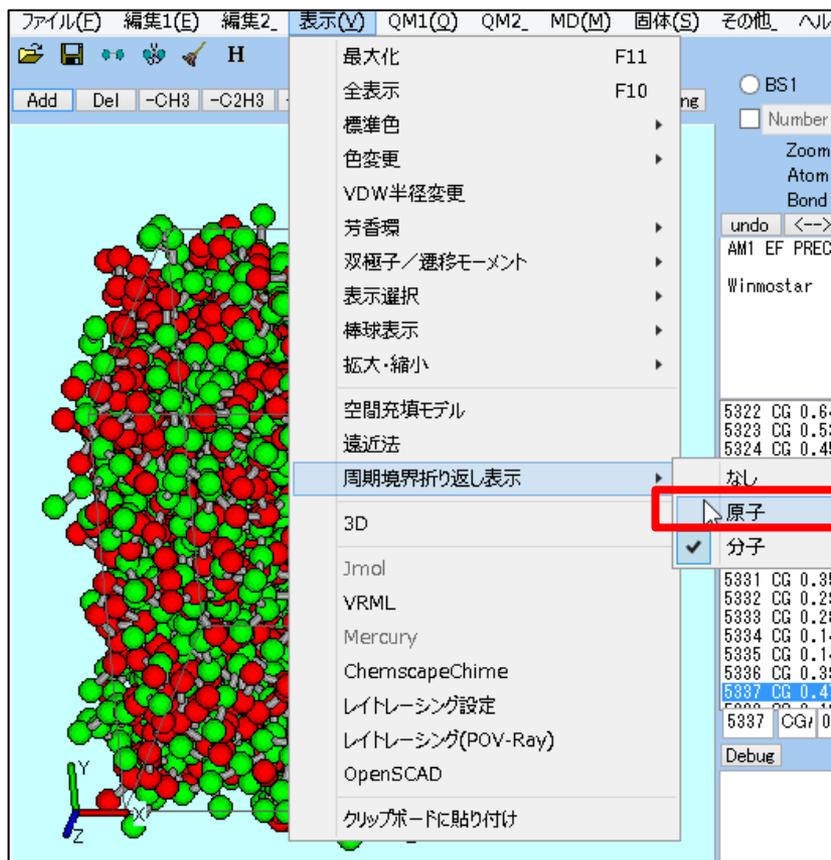
Close

I. 初期座標の作成

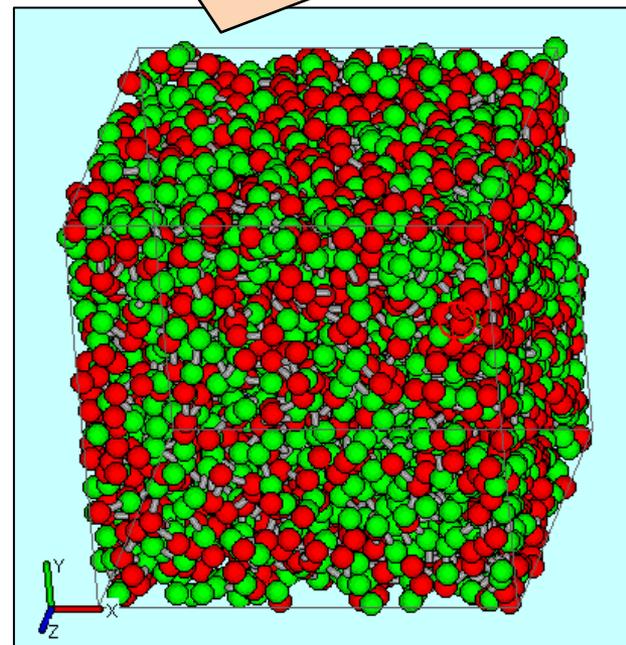
「Density」に「5」（単位は無次元）を入力して「Build」を押す。その後「Close」を押す。

I. 初期座標の作成

表示をわかりやすくするため、「表示＞周期境界折り返し表示＞原子」を選択する。

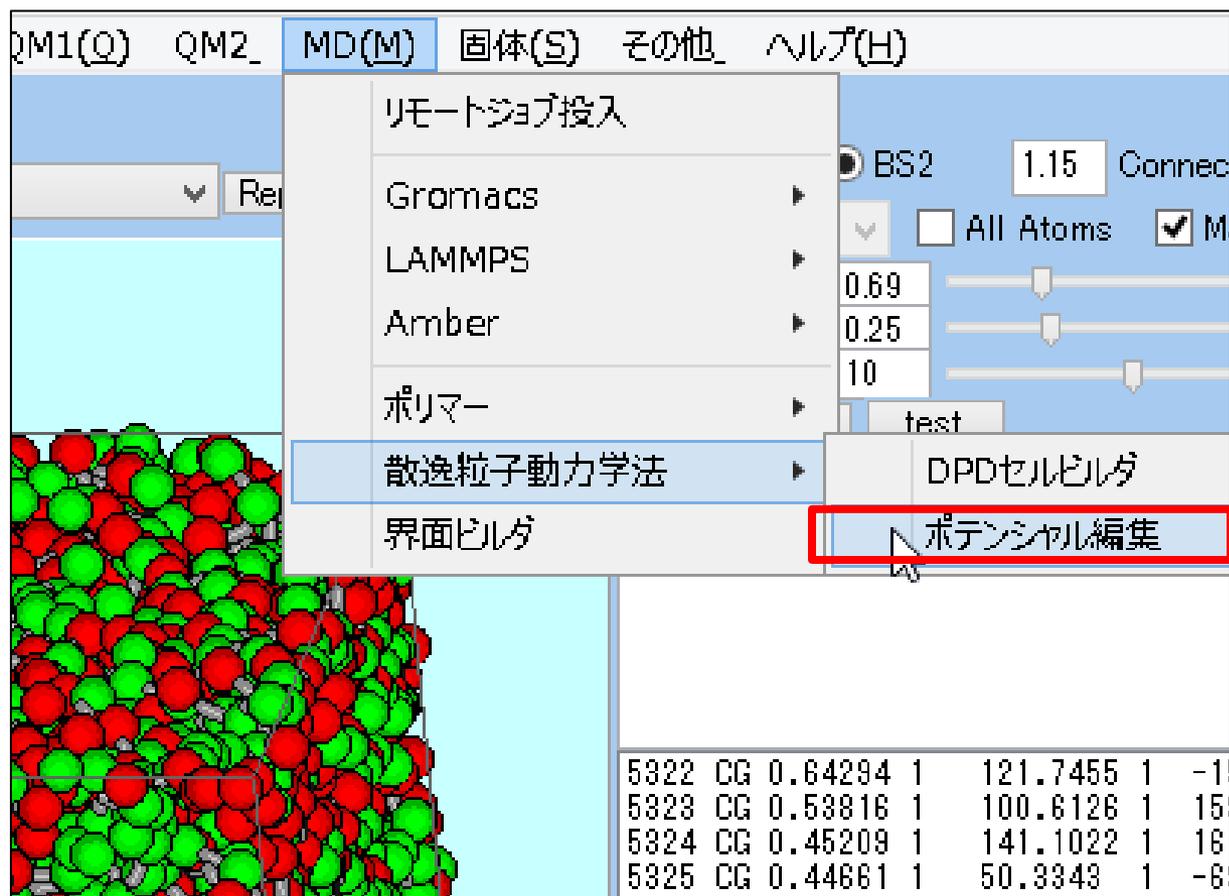


周期境界をまたいだ粒子が
折り返されて表示される



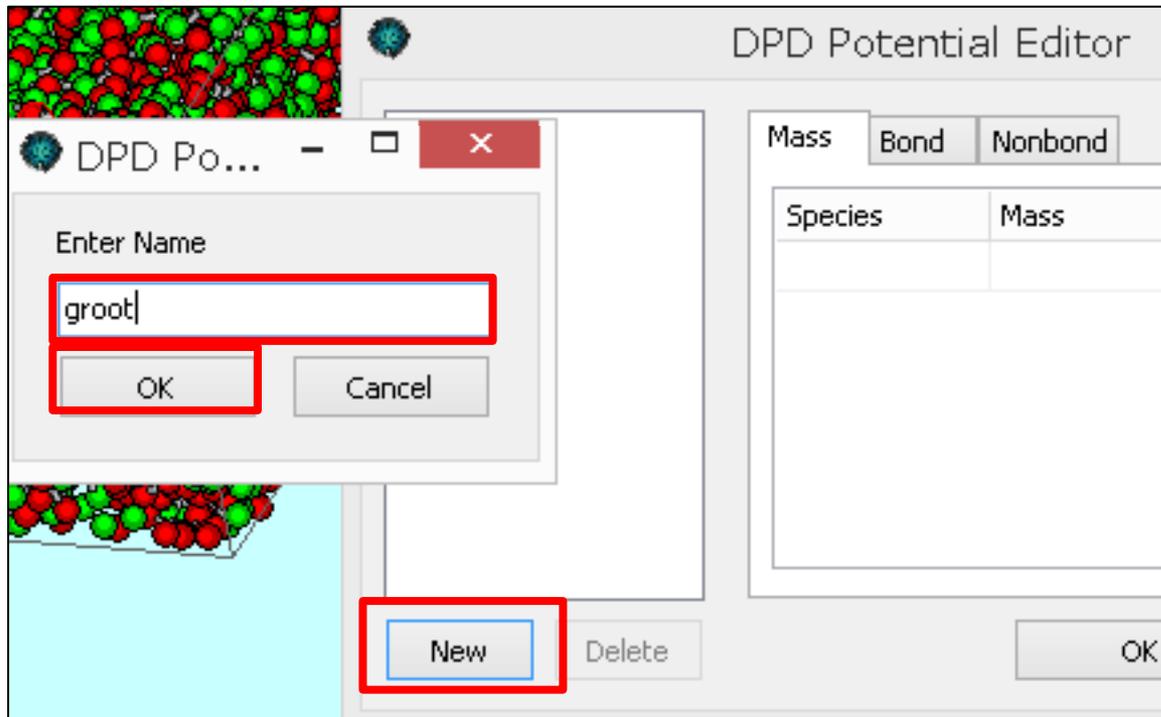
II. ポテンシャルの設定

「MD>散逸粒子動力学>ポテンシャル編集」を選択し、Potential Editorを起動する。



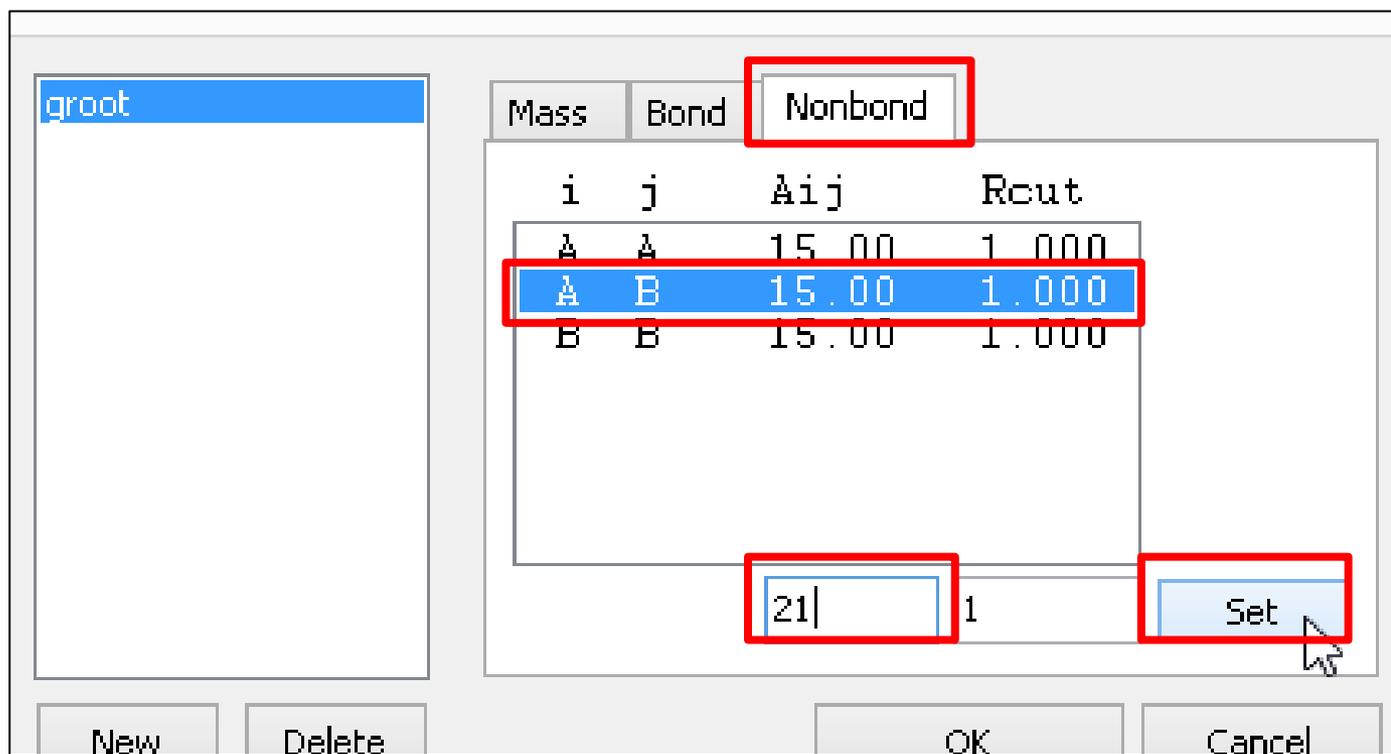
II. ポテンシャルの設定

「New」ボタンをクリックし、ポテンシャルファイルを新たに作成する。
Enter nameで「groot」と入力し、「OK」する。



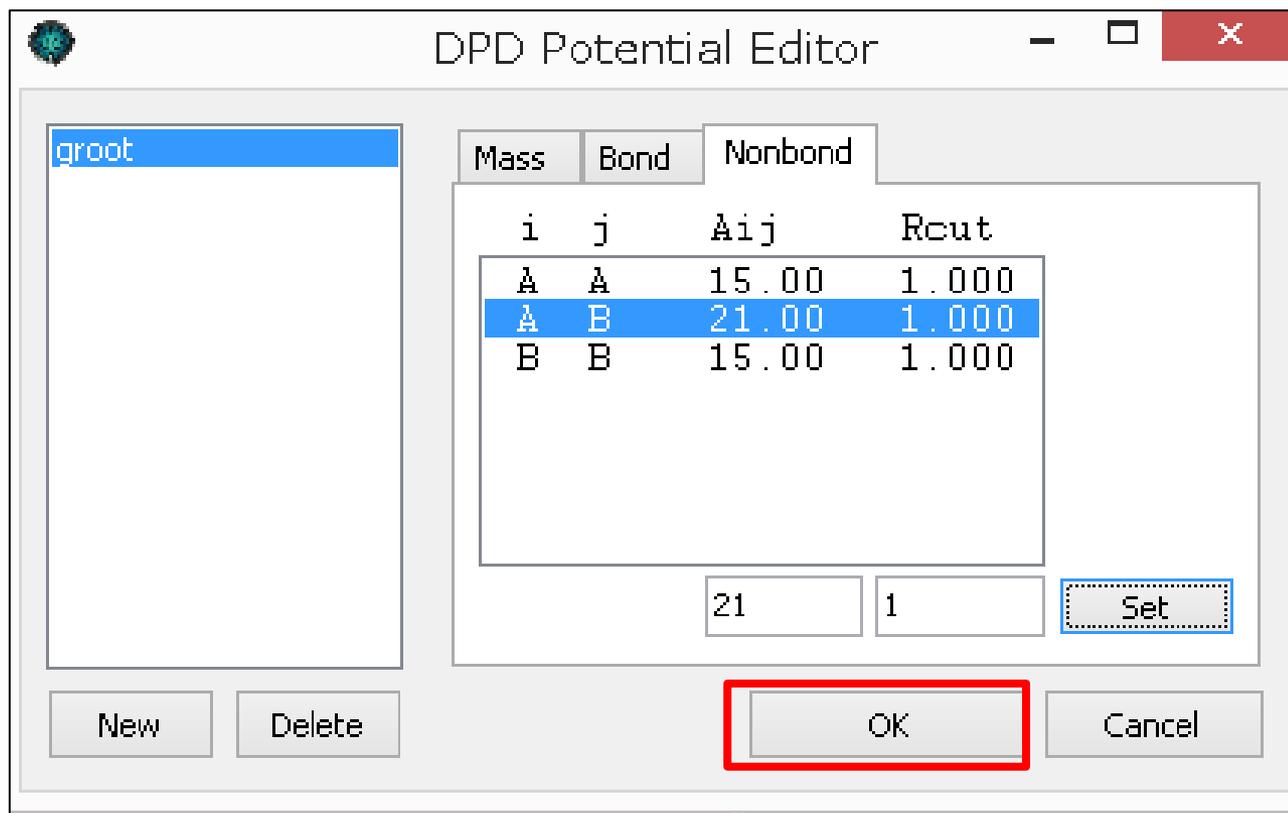
II. ポテンシャルの設定

「Nonbond」タブを選び、リストから「A B 15.00 1.00」と表示された行を選び、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」する。
(Aij、Rcutともに単位は無次元)



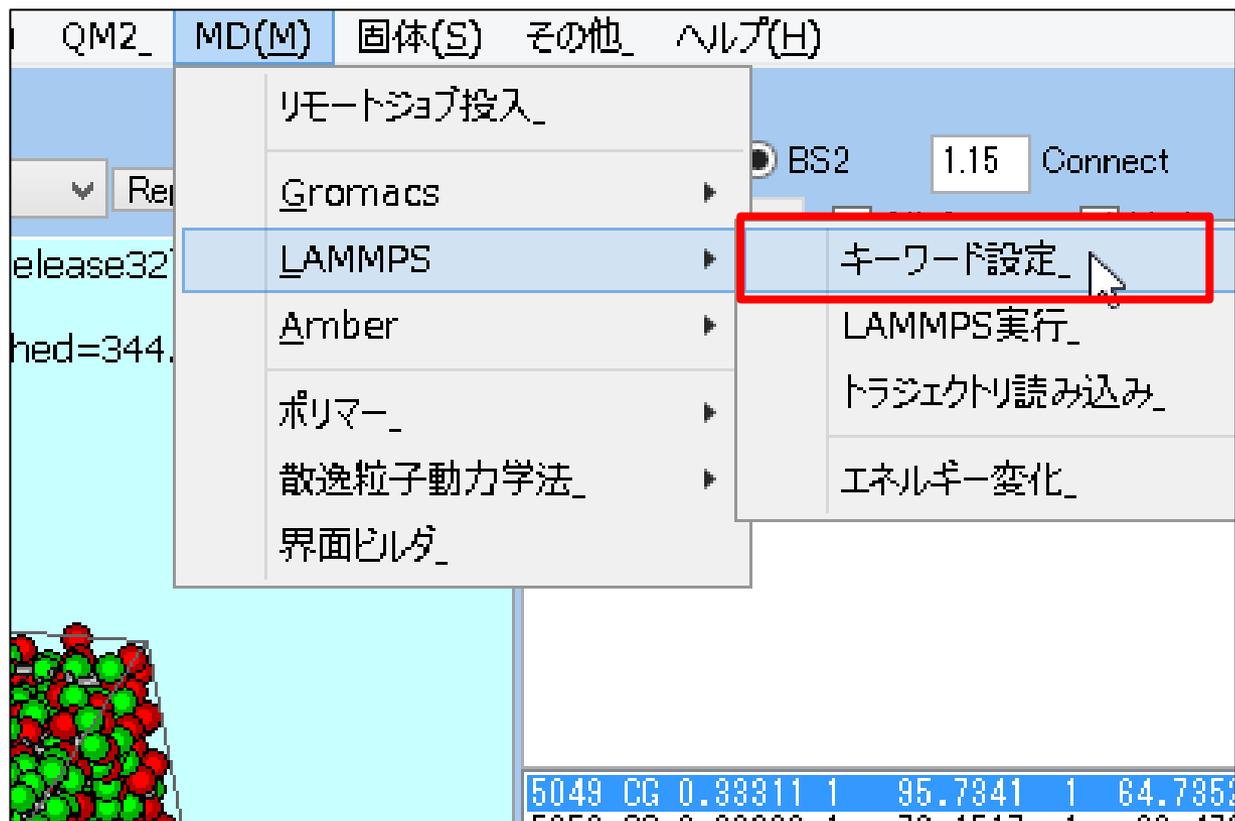
II. ポテンシャルの設定

「OK」ボタンを押し、Potential Editorを終了する。



III. LAMMPSの設定

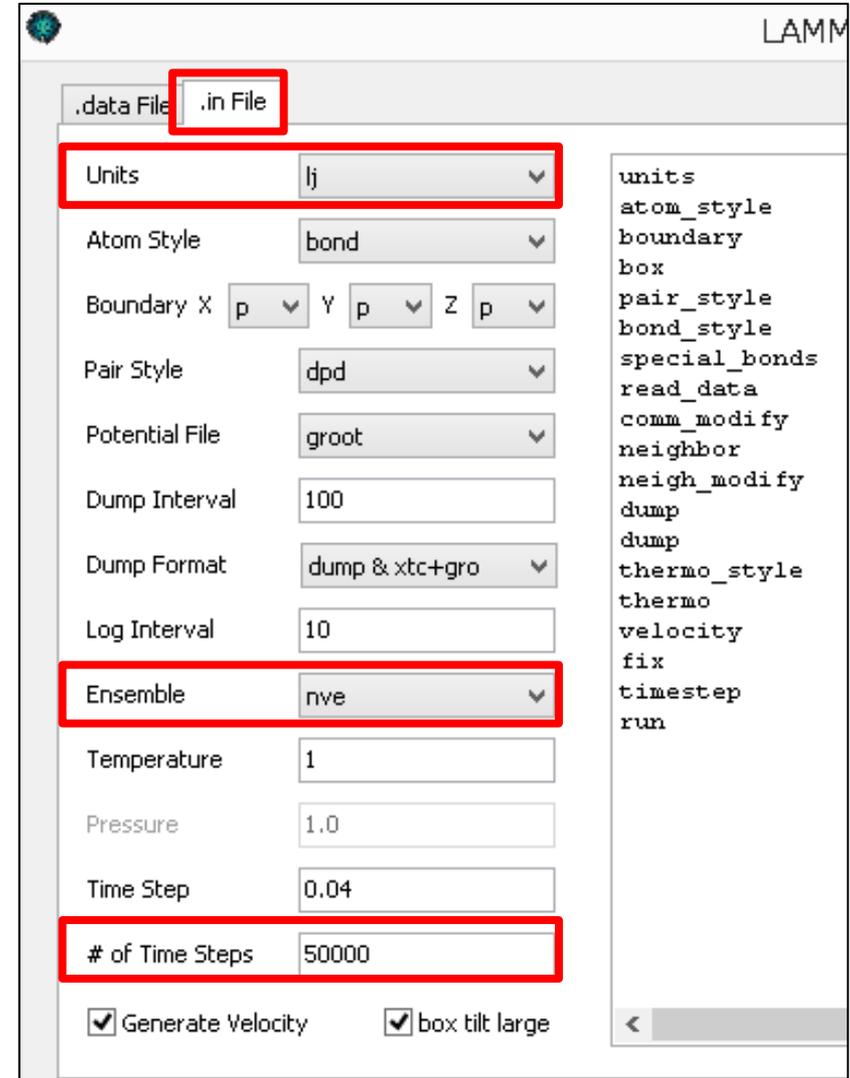
「MD>LAMMPS>キーワード設定」を選択する。



III. LAMMPSの設定

.in Fileタブにて

- ① UnitsをLJに変更
 - ② Ensembleをnveに変更
 - ③ # of Time Stepsを50,000に変更
- 最後に、左下の「OK」を押す。
(表示される温度・圧力・時間は無次元)



III. LAMMPSの設定

必要に応じて、.data FileタブにてMPI並列数の指定を行う。

.data File | .in File

Simulation Box

X Low: -6.0000 | X High: 6.0000
Y Low: -6.0000 | Y High: 6.0000
Z Low: -6.0000 | Z High: 6.0000
XY: 0.0000
XZ: 0.0000
YZ: 0.0000
Distance: 5.0 | Auto Generate

Charge

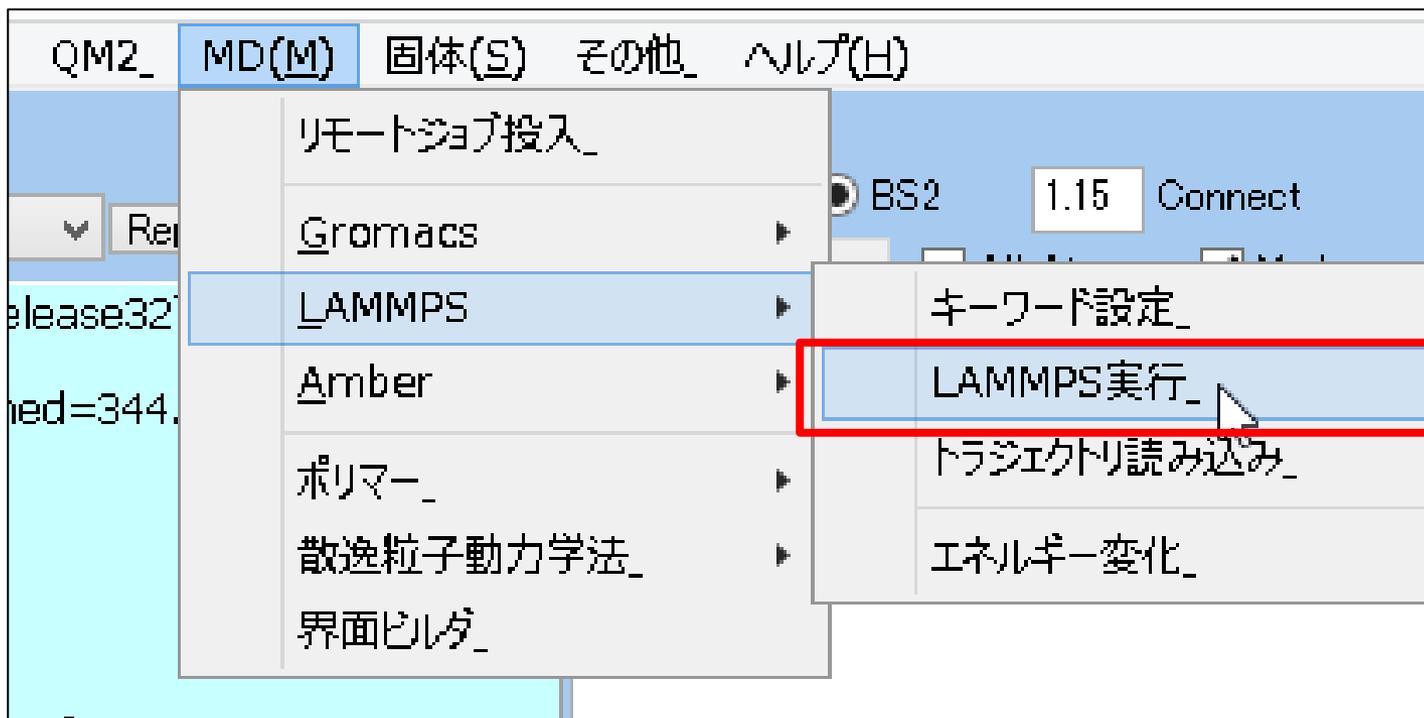
Atom Type
CGA
CGB

Specify data file

MPI processes 2

IV. LAMMPSの実行

「MD>LAMMPS>LAMMPS実行」からLAMMPSを実行する。



V. 結果の解析

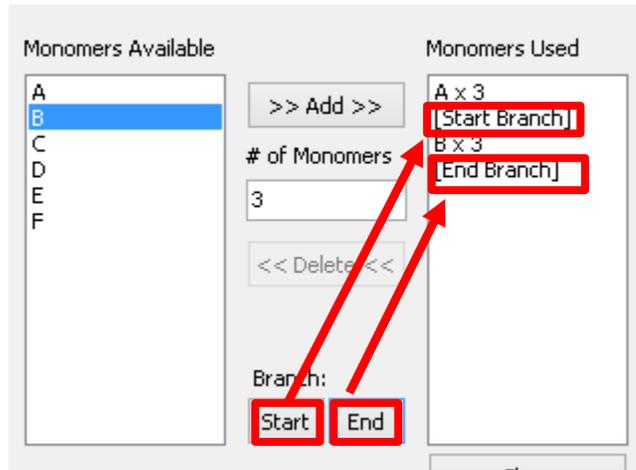
「MD>LAMMPS>トラジェクトリ読み込み」にてデフォルトで選択されたファイルを開く。

The screenshot shows the software interface with the 'MD(M)' menu open. The path 'MD > LAMMPS > トラジェクトリ読み込み' is highlighted with a red box. Below the menu, a 3D visualization of a molecular simulation is shown, consisting of red and green spheres. A callout box points to the simulation with the text: 'ミクロ相分離を起こし、ラメラ相が表れていることが分かる' (Microphase separation occurs, and it can be seen that a lamellar phase is formed). To the right, a 'POV-Rayにも対応' (Compatible with POV-Ray) callout box is present. A data table is visible in the top right corner of the simulation window.

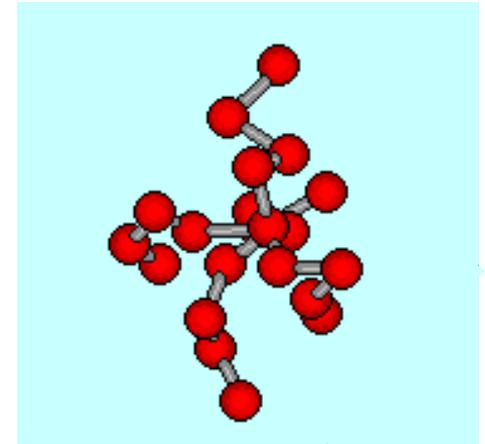
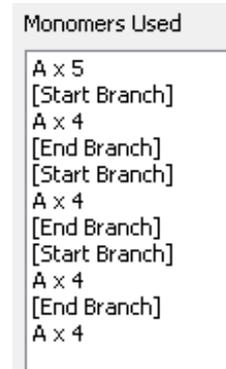
Atom	0.25		
Bond	10		
undo <-->			
AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINT			
Winmostar			
884 CG	0.27888	1	60.4903
885 CG	0.89821	1	118.0553
886 CG	0.88132	1	129.2125
887 CG	0.68401	1	127.8692

補足： 分岐の作成

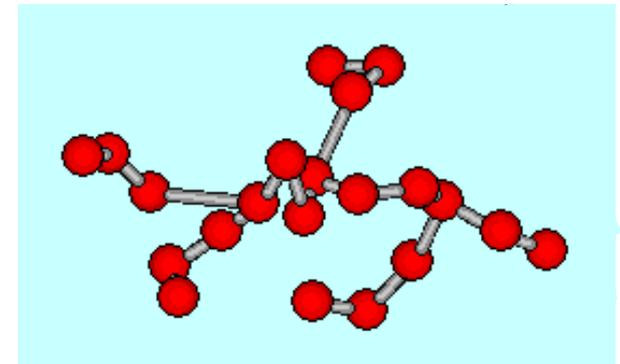
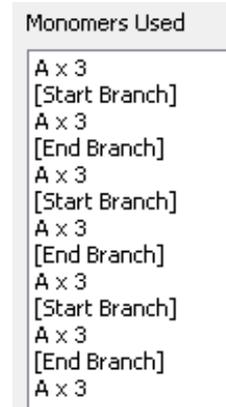
[Start]および[End]により分子に分岐 (Branch) を導入できる。



例) 星形ポリマー



楕円形ポリマー



[Start]: 直前の粒子から分岐を発生
[End]: [Start]で開始した分岐を終了

