

Winmostar チュートリアル
LAMMPS
基礎編
V7.016

株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2017/3/28

Contents

- I. 環境設定
 - II. 分子のモデリング
 - III. シミュレーションセルの作成
 - IV. エネルギー最小化計算
 - V. 温度一定計算
 - VI. 温度・圧力一定計算
 - VII. 本計算
- 補足 VMD連携

注意点

- 分子の種類、初期密度に応じて平衡化に必要なステップ数は変化します。
- 相互作用の計算方法、力場、電荷の算出方法も結果に影響を与えます。
- チュートリアルという性質上、ここでは平衡化に十分なステップ数の計算を実施しません。

I. 環境設定

- LAMMPS及びCygwinの入手とセットアップ
以下のリンク先の「Windows版LAMMPSのインストール手順」に従い、LAMMPS, およびCygwin_wmをセットアップする。

https://winmostar.com/jp/manual_jp.html

2. 計算エンジンのインストール

Windows版

[cygwin_wm_v7_20160926.exe](#)(418MB) ※NWChem, Gromacs, Amber Windowsビルド済パッケージ
(上級者向け)NWChem, Gromacs, AmberのCygwin用インストール手順 ※cygwin_wm_v7_20160926.exe

[V6用NWChem](#) ※Windowsビルド済パッケージ

[GAMESSのインストール手順](#)

[LAMMPSのインストール手順](#)

[Quantum ESPRESSOのインストール手順](#)

Windows 版 LAMMPS インストールマニュアル 2016/06/13

1. LAMMPS の入手

① サイトにアクセスする。 <http://rpm.lammps.org/windows.html>

インストール先の OS に応じて[32-bit Windows download area]もしくは[64-bit Windows download area]をクリックする。

LAMMPS-ICMS Windows Installer Repository

This repository is hosting pre-compiled Windows installers of the LAMMPS molecular dynamics simulation software package. The binaries are built semi-automatically with MinGW64 Linux to Windows cross compilers using up-to-date snapshots of the LAMMPS-ICMS git repository hosted at the Institute for Computational Molecular Sciences at Temple University. The LAMMPS binaries contain all optional packages included in the source distribution **except** KIM (license is not GPL compatible). USER_CUDA (CUDA does not support cross compilation), KOKOS and USER_INTEL (do not support cross-compilation with GCC), USER_HOMD (requires external library) PYHON (requires to bundle a full Python runtime), USER_GAMM (only useful when linking to a GM software), USER_DJUP (requires external library), SEAC (supported by the USER_SEACG package which is included). The **serial** executable additionally does not contain the USER_RL package. More from version 4.0.0 onwards, which are not available, are available at [http://www.lammps.org](#)



II. 分子のモデリング

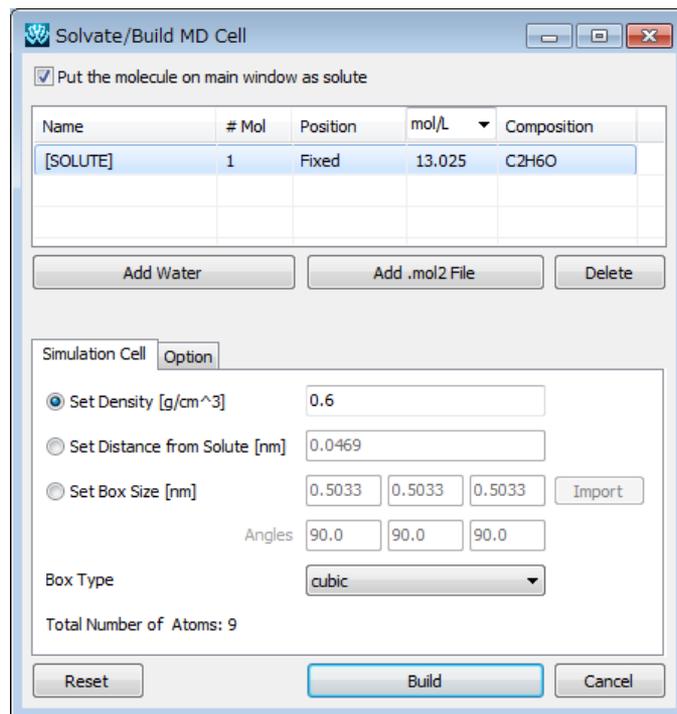
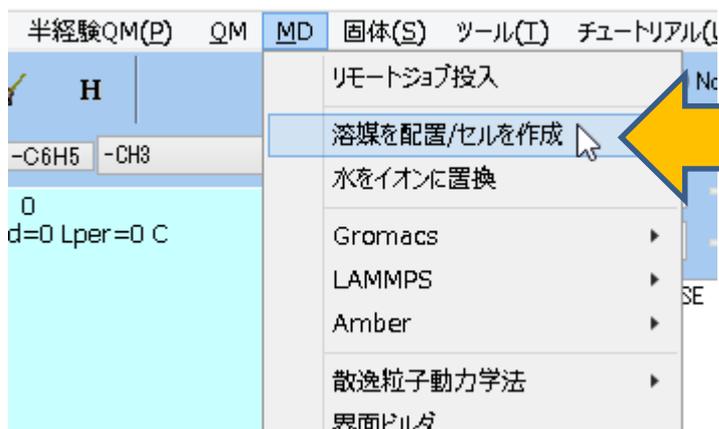
[ファイル]-[新規]を選び、[-CH3]ボタンを押し[Repl]ボタンを8回押す。
[ファイル]-[名前を付けて保存]にてmol2形式で、「C8H18.mol2」として保存する。

Winmostar 26 C8H18 MASS=114.23 X=7.7923 Y=-5.2773 Z=0.0000
26-23-20-17 Leng=1.100 Ang=109.000 Dihed=-180.000 Lper=0.000 H

9	H	1.10000	1	109.0000	1	-60.0000	1	8	2	1
10	H	1.10000	1	109.0000	1	120.0000	1	8	2	9
11	C	1.49380	1	109.0000	1	-120.0000	1	8	2	9
12	H	1.10000	1	109.0000	1	-60.0000	1	11	8	2
13	H	1.10000	1	109.0000	1	120.0000	1	11	8	12
14	C	1.49380	1	109.0000	1	-120.0000	1	11	8	12
15	H	1.10000	1	109.0000	1	-60.0000	1	14	11	8
16	H	1.10000	1	109.0000	1	120.0000	1	14	11	15
17	C	1.49380	1	109.0000	1	-120.0000	1	14	11	15
18	H	1.10000	1	109.0000	1	-60.0000	1	17	14	11
19	H	1.10000	1	109.0000	1	120.0000	1	17	14	18
20	C	1.49380	1	109.0000	1	-120.0000	1	17	14	18
21	H	1.10000	1	109.0000	1	-60.0000	1	20	17	14
22	H	1.10000	1	109.0000	1	120.0000	1	20	17	21
23	C	1.49380	1	109.0000	1	-120.0000	1	20	17	21
24	H	1.10000	1	109.0000	1	-60.0000	1	23	20	17
25	H	1.10000	1	109.0000	1	120.0000	1	23	20	24

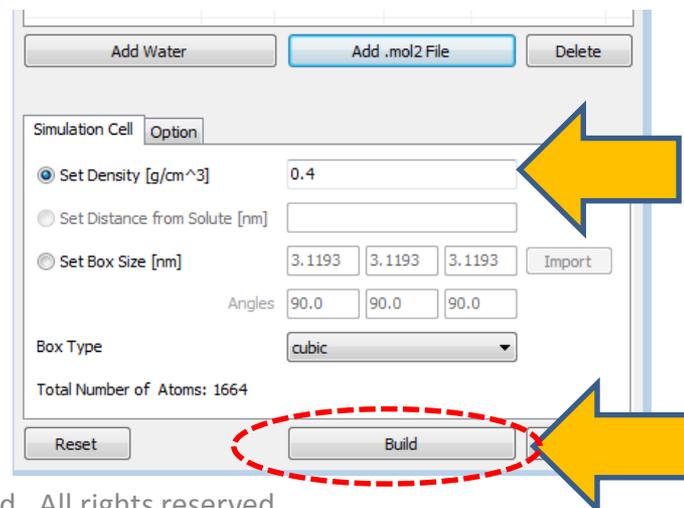
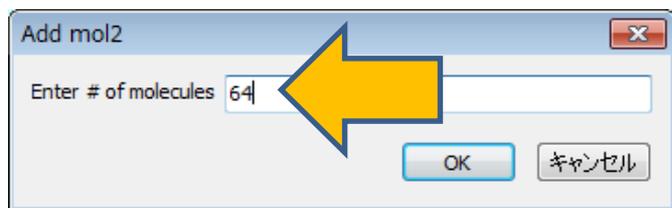
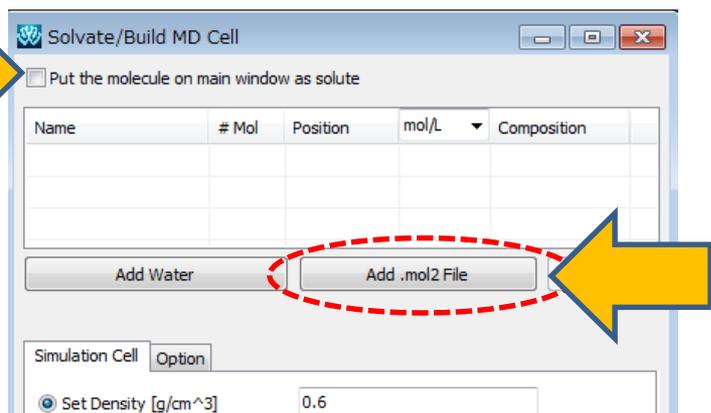
III. シミュレーションセルの作成

[MD]-[溶媒を配置/セルを作成]を選択する。



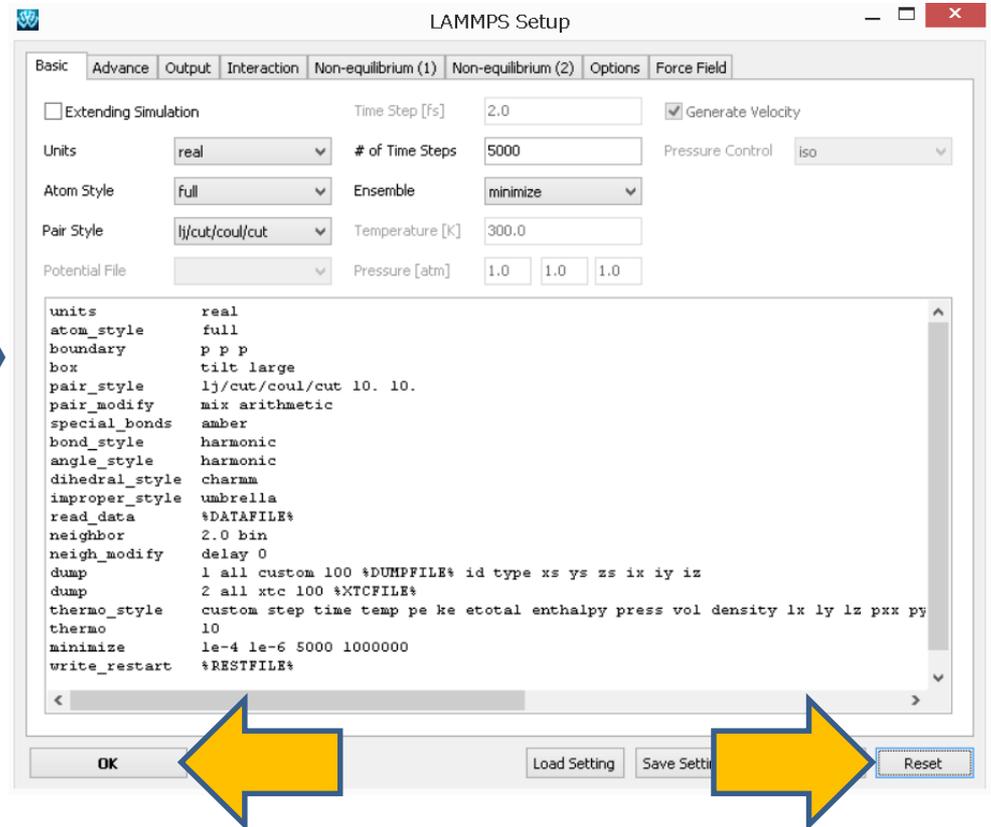
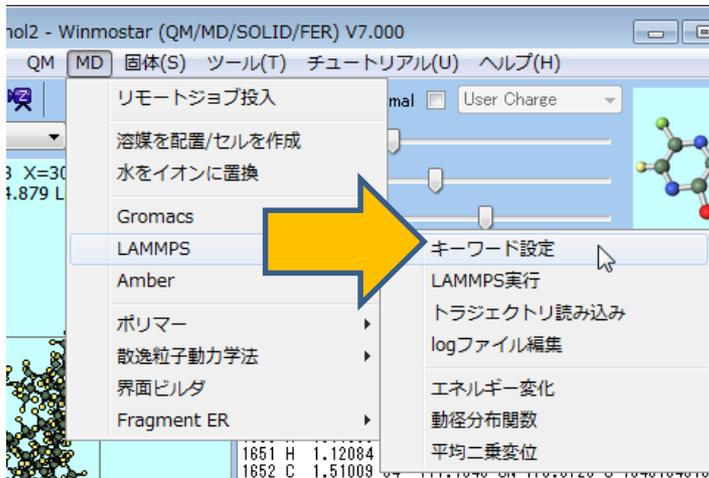
III. シミュレーションセルの作成

まず「Put the molecule on main windows as solute」のチェックを外す。次に、「Add .mol2 File」をクリックし、先ほど保存したC8H18.mol2を選択する。配置する分子数を聞かれるので64と入力して「OK」を押す。最後に、「Set Density」に0.4を設定して「Build」をクリックする。



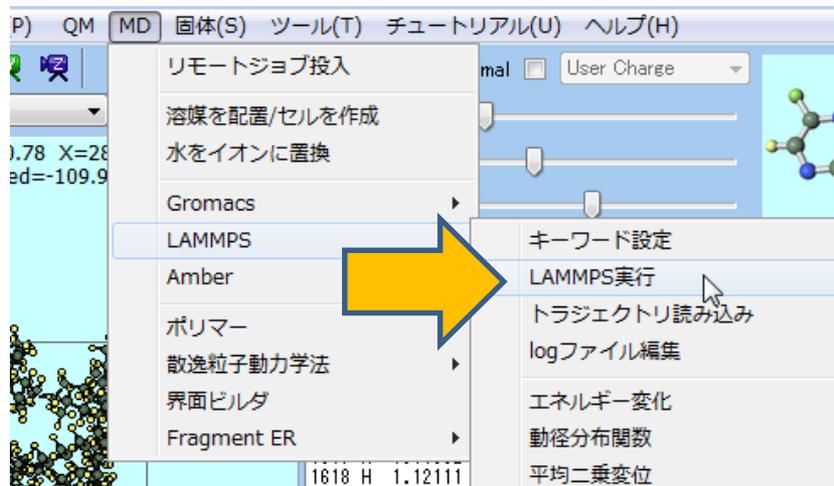
IV. エネルギー最小化計算

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]にて、一旦右下の「Reset」をクリックし、「OK」する。



IV. エネルギー最小化計算

[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]を選択する。LAMMPS(.data)形式のデータの保存先を聞かれるので、「C8H18.data」として保存する。



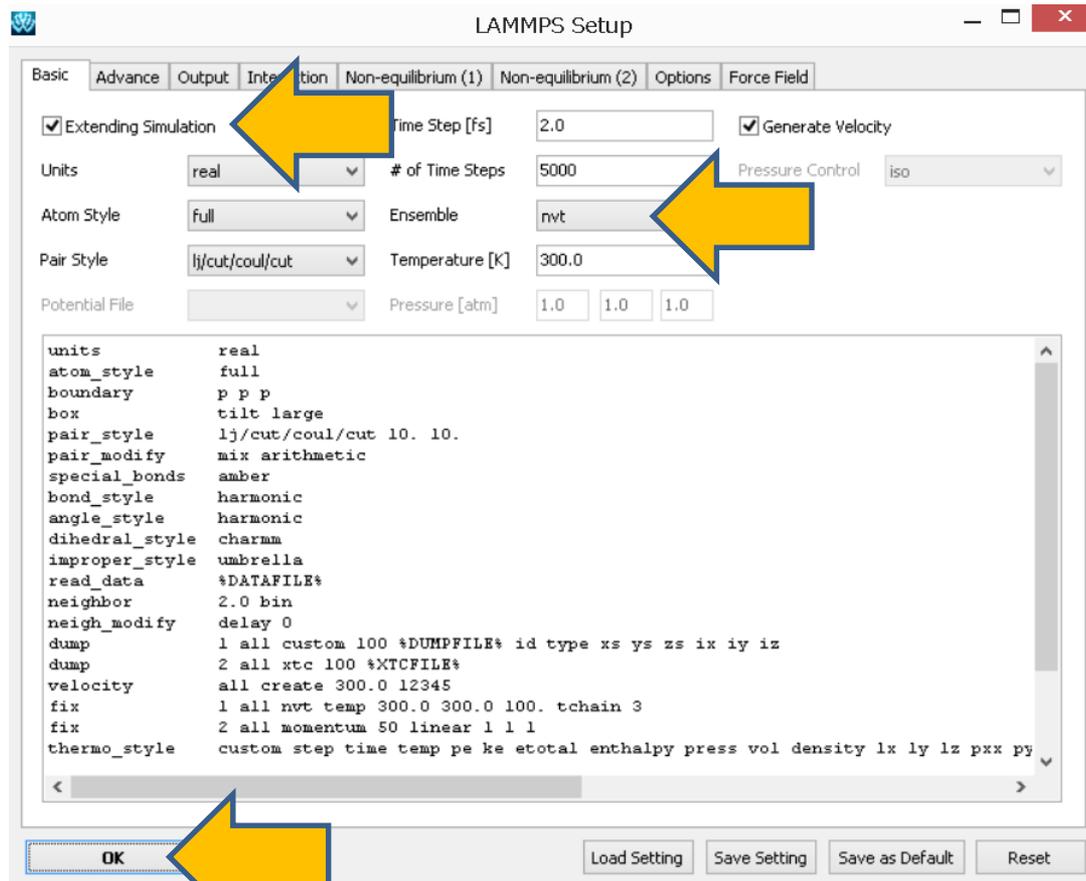
IV. エネルギー最小化計算

[MD]-[LAMMPS]-[エネルギー変化]にて、デフォルトで選ばれるファイルを開く。「Energy terms」に「PotEng」を選択し、「Draw」し、ポテンシャルエネルギーがエネルギー最小化計算の過程で低下し収束している様子を確認する。

The image shows a sequence of steps in the X-Ability software. On the left, the 'MD' menu is open, and the 'エネルギー変化' (Energy Change) option is highlighted with a yellow arrow. A blue arrow points to the right, where the 'Energy Plot' window is shown. In this window, the 'Energy terms' list has 'PotEng' checked, and the 'Draw' button is highlighted with a yellow arrow. To the right of the controls is a line graph titled 'LAMMPS Energies' showing 'PotEng' (Potential Energy) on the y-axis (ranging from 0 to 4000) against 'Time (fs)' on the x-axis (ranging from 0 to 40). The graph shows a sharp decrease in energy from approximately 3000 at 0 fs to near 0 by 10 fs, indicating convergence.

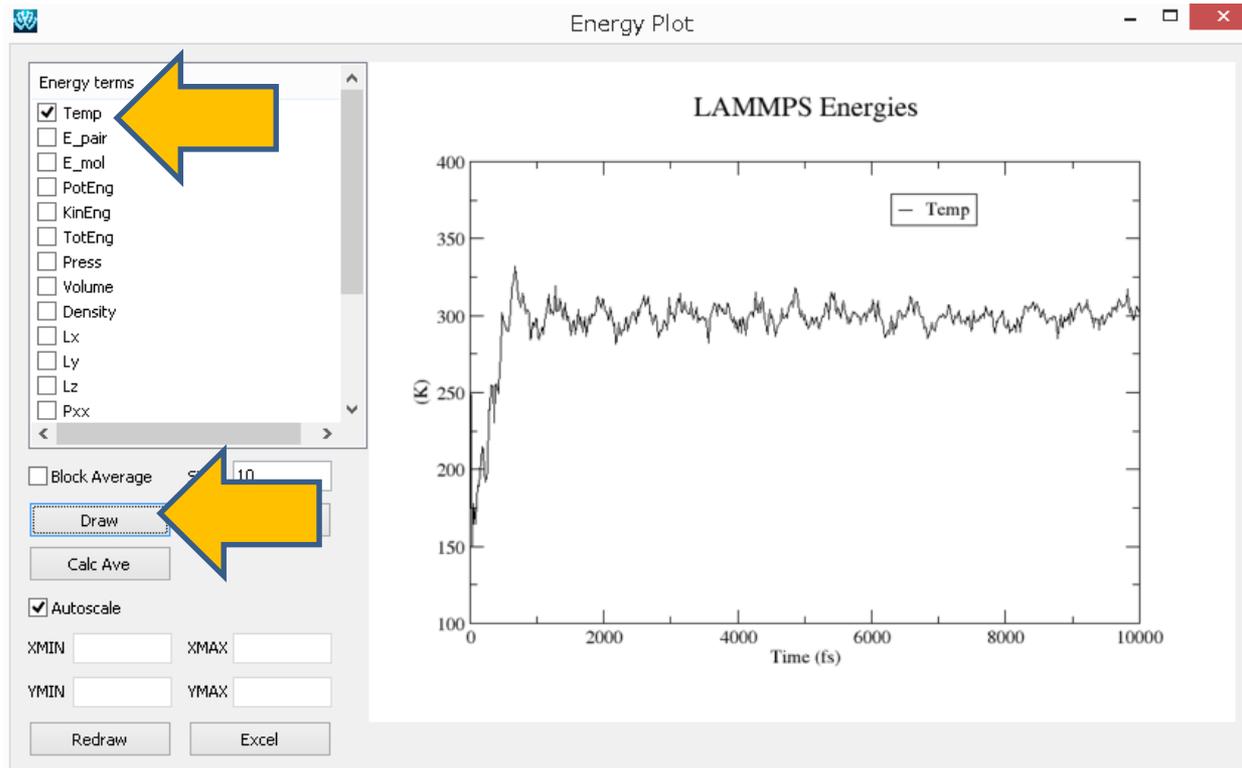
V. 温度一定計算

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]にて、「Extending Simulation」にチェックし、「Ensemble」に「nvt」を指定し、「OK」とする。



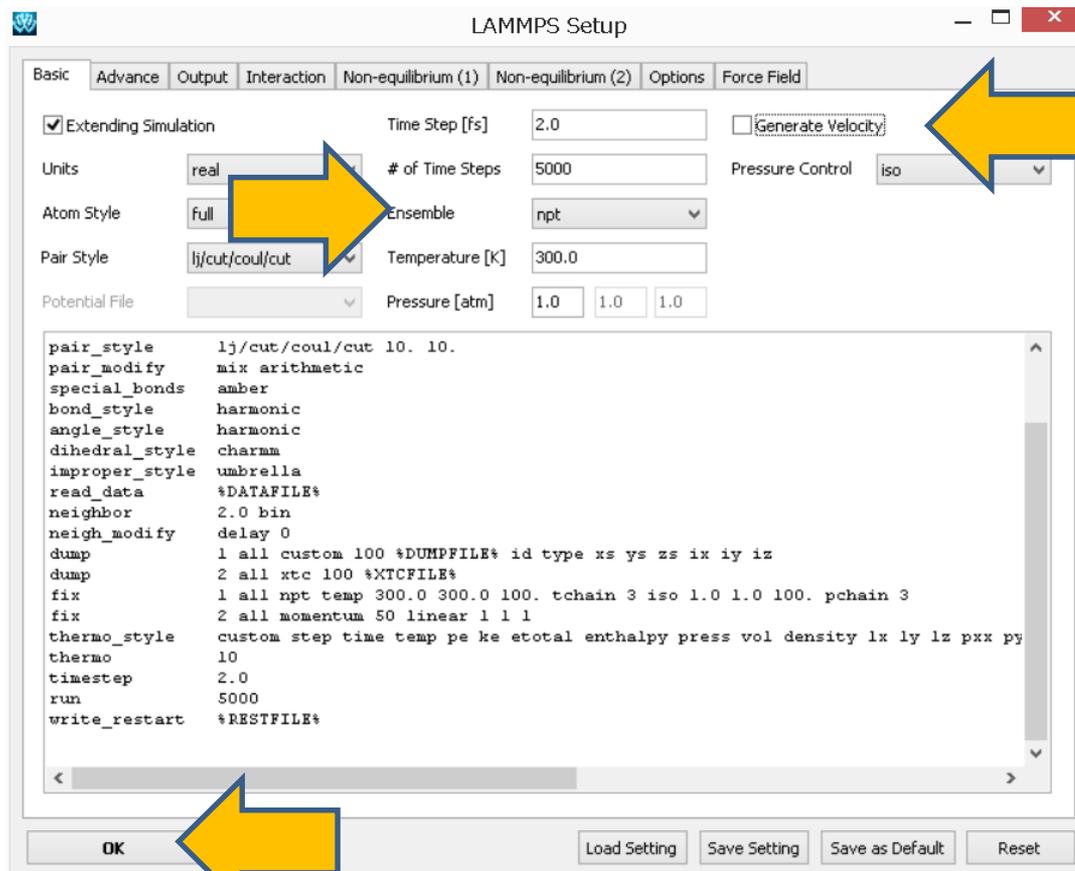
V. 温度一定計算

[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]により再度計算を開始する。計算終了後、同様に[MD]-[LAMMPS]-[エネルギー変化]にて、「Energy terms」に「Temp」を選択し、「Draw」し、温度が設定値(300 K)付近に制御されている様子を確認する。



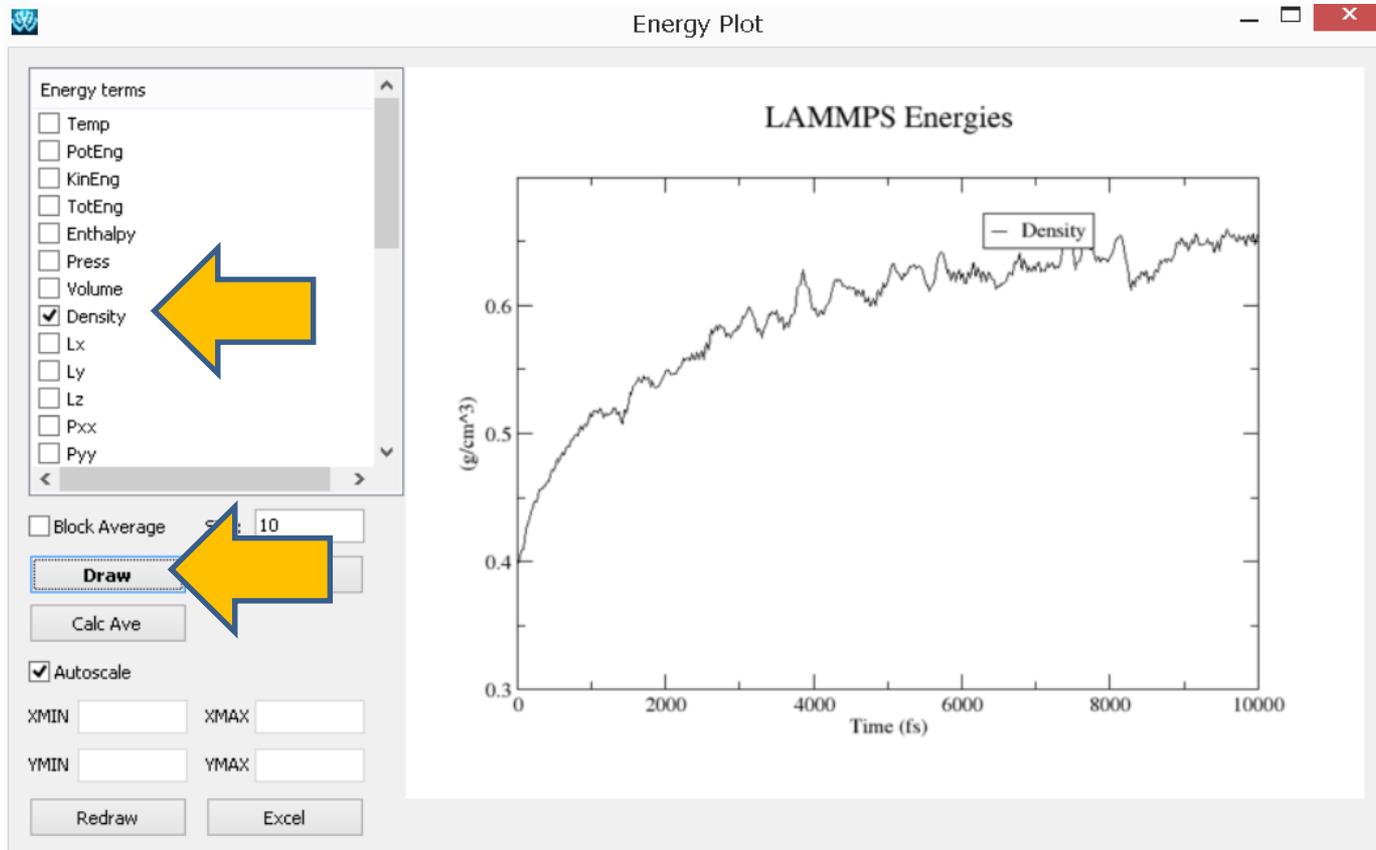
VI. 温度・圧力一定計算

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]にて、「Ensemble」に「npt」を指定し、「Generate Velocity」のチェックを外し、「OK」する。



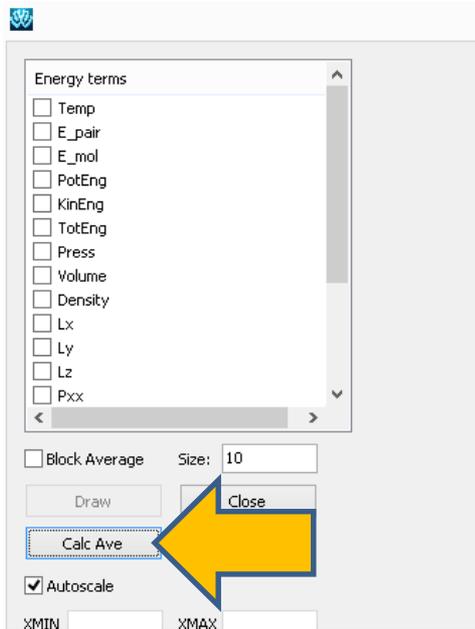
VI. 温度・圧力一定計算

[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]により再度計算を開始する。計算終了後、同様に[MD]-[LAMMPS]-[エネルギー変化]にて、「Energy terms」に「Density」を選択し、「Draw」し、密度の制御が収束している様子を確認する。



VII. 本計算

直前に実施した計算と同条件で本計算を実施するため、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]により再度計算を開始する。計算終了後、同様に[MD]-[LAMMPS]-[エネルギー変化]を開き、[Calc Ave]ボタンを押すと、各種熱力学量の平均値と標準誤差が表示される。



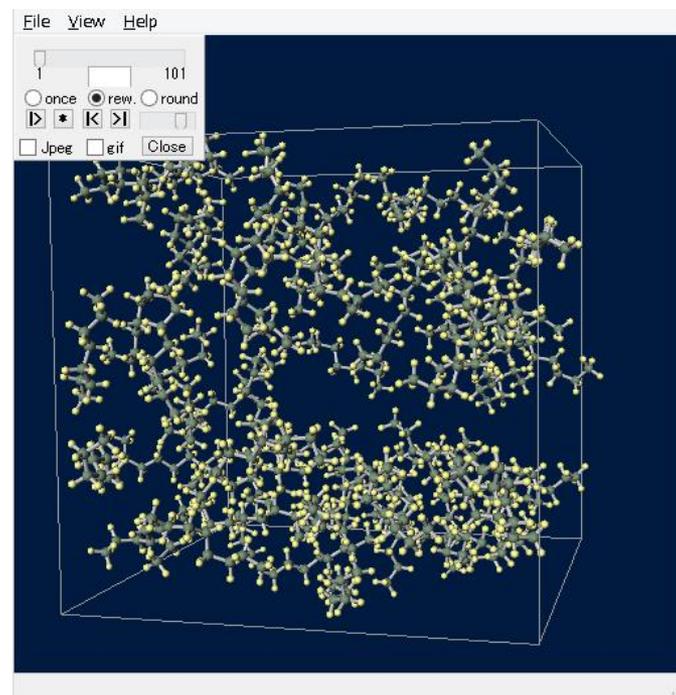
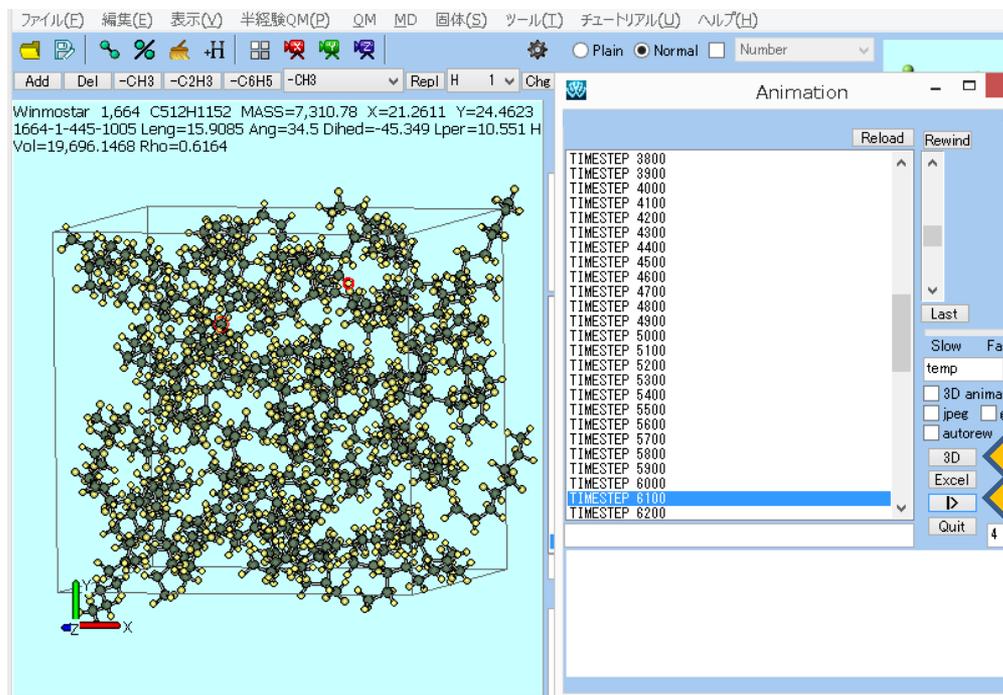
energy_ave.log - メモ帳

ファイル(E) 編集(E) 書式(Q) 表示(V) ヘルプ(H)

# data	Average	Standard error
Temp	300.486963812374995	0.267277816047493
PotEng	1344.237586227544850	1.620280409134919
KinEng	1489.540058083833400	1.324919343888137
TotEng	2833.777644510977550	2.067477401870140
Enthalpy	2835.315404391218180	16.196789024696327
Press	7.021588488622693	60.187323193988472
Volume	18400.373361277470400	12.082317945612558
Density	0.659863712654691	0.000436408933970
Lx	26.399664856287433	0.005791979814301
Ly	26.399664856287433	0.005791979814301
Lz	26.399664856287433	0.005791979814301
Pxx	50.938816222554834	85.043916363373446
Pyy	22.955510468562828	90.124821227931106
Pzz	-52.829565092015947	84.605978750348031
Pxy	69.082103955289441	53.299517590884118
Pxz	-18.186508107984007	57.498948425204888
Pyz	31.155091955888199	57.345856556180405
E_pair	-327.086015808383195	0.784289967391857
E_vdwl	-384.581808163672804	0.665207885761413
E_coul	57.495792438323363	0.676484725389858
E_long	0.000000000000000	0.000000000000000
E_tail	0.000000000000000	0.000000000000000
E_mol	1671.323605788423040	1.390678852179730
E_bond	554.949672954092421	0.901650315868023
E_angle	808.244270379241129	0.915866011278409
E_dihed	308.129660738522773	0.481720546715772
E_impro	0.000000000000000	0.000000000000000

VII. 本計算

[MD]-[LAMMPS]-[トラジェクトリ読み込み]にて、デフォルトで選ばれるdataファイルとdumpファイルを開くと、アニメーションウィンドウが表示される。「|>」ボタンでアニメーションを開始するか、あるいは「3D」ボタンで3Dビューワを起動する。



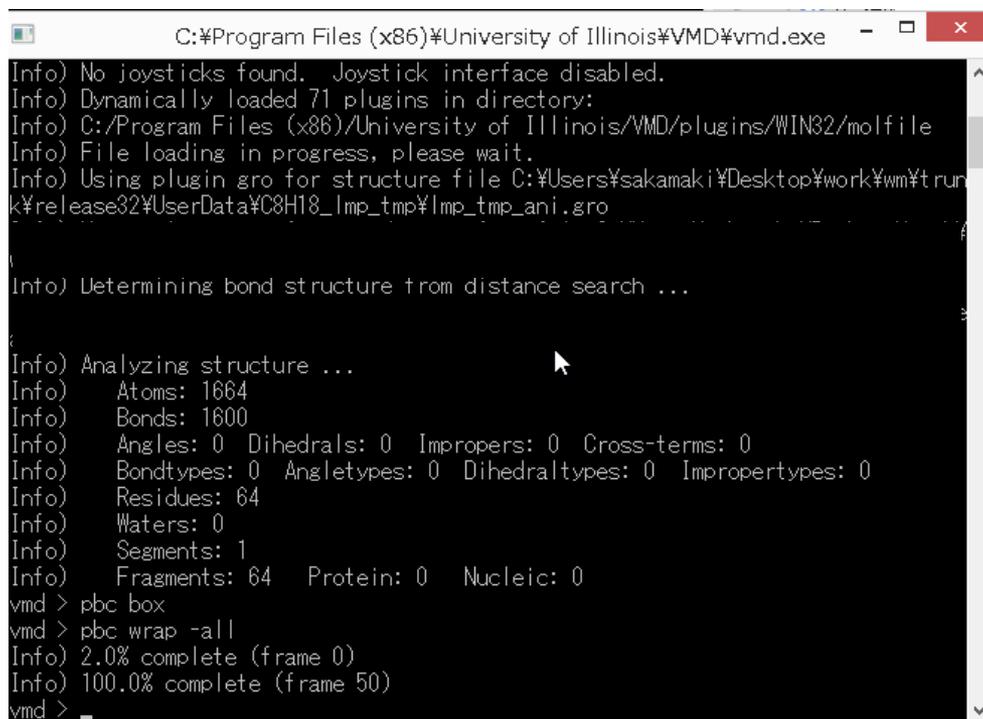
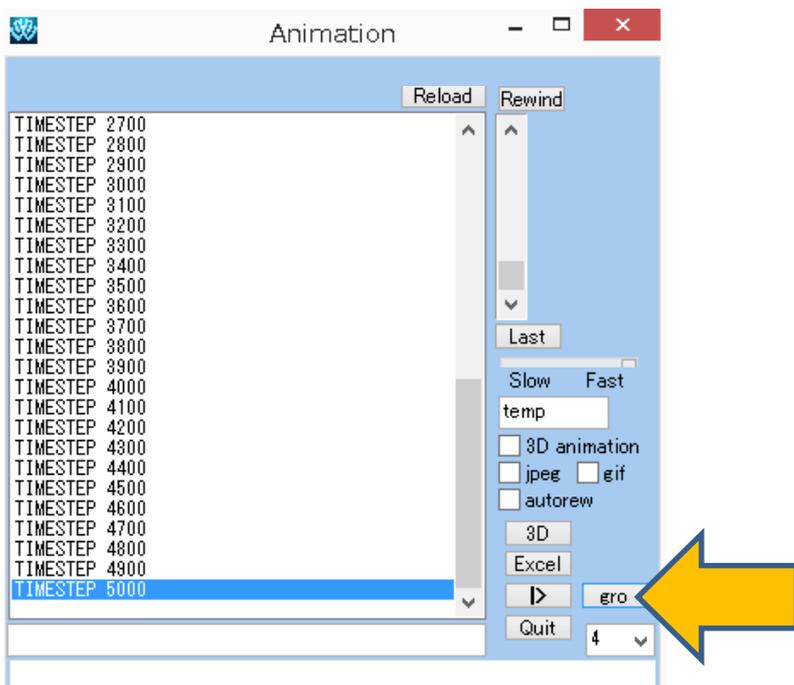
補足 VMD連携(1/2)

アニメーションをVMDで開きたいときは、[gro]ボタンを押しgro形式に変換してからVMDで開く。1フレーム目が表示された状態で、VMDのコンソールで

pbs box

pbs wrap -all

と入力する。



補足 VMD連携(2/2)

次に、[Graphics]-[Representation...]をクリックし、[Drawing Method]に「VDW」を選択し、適度に[Sphere Scale]を調整する。結合を表示したい場合は、続けて[Create Rep]をクリックし、[Drawing Method]を「DynamicBonds」にする。

The diagram illustrates the steps to configure VMD's graphical representations. It shows the VMD Main window with the 'Graphics' menu open and 'Representations...' selected. A yellow arrow points to the 'Representations...' option. A blue arrow points to the 'Graphical Representations' dialog box. In this dialog, the 'Drawing Method' is set to 'DynamicBonds', and a yellow arrow points to this dropdown. Below the 'Drawing Method' are sliders for 'Distance Cutoff' (1.6), 'Bond Radius' (0.3), and 'Bond Resolution' (12). A blue arrow points from the dialog box to the VMD 1.9.2 OpenGL Display window, which shows a 3D molecular model with a blue bounding box.

facebook アカウント登録

メールアドレスまたは携帯番号 パスワード

ログインしたままにする

X-Ability Co.,Ltd.
さんはFacebookを利用しています。
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の

アカウント登録 ログイン

X-Ability Co.,Ltd.
コンピュータ・テクノロジー

タイムライン 基本データ 写真 いいね! 動画

ユーザー

いいね! 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ビジター投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30

最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。
http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_detailpage_o00_s00...

山口 達明

フロンティアオービタルによる新有機化学教程
フロンティアオービタルによる新有機化学教程
AMAZON.CO.JP

いいね! コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)
11月9日 21:38

いいね!