

Winmostar チュートリアル

LAMMPS

散逸粒子動力学 (DPD)

V7.009

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2016/12/28

Contents

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

V. 結果の表示

補足1: 分岐の作成

補足2: 古典MDの座標への変換

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_v7.2

V6用NWChem ※Windowsビルド済パッケージ

GAMMESS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。

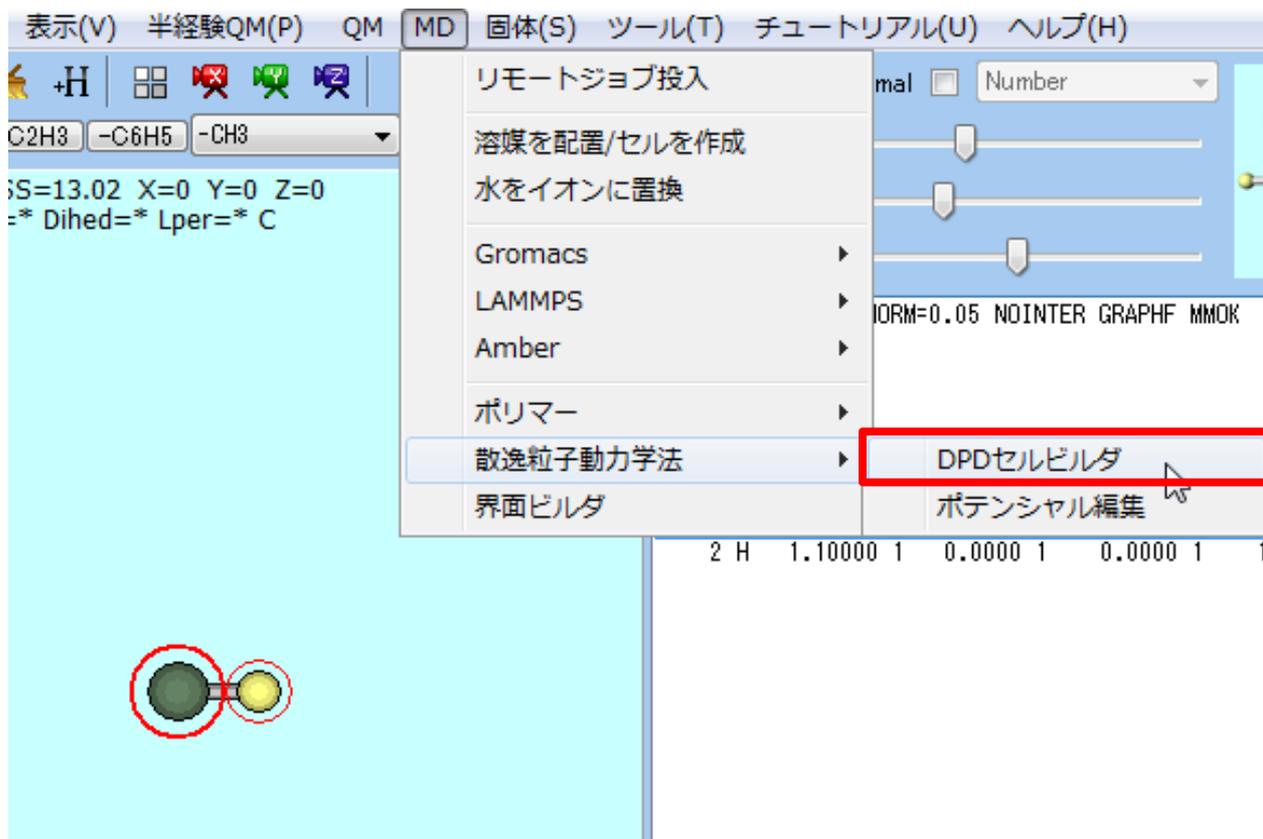
LAMMPS-ICMS Windows Installer Repository

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 Science 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) EXHIBIT (requires to bundle a full Python runtime), USER_GAMMMA (only useful when linking to a GM software), USER_DJUP (requires external library), SEAS (supported by the USER_SEASG package which is included). The **serial** executable additionally does not contain the USER_4B package, which, from version 4.0.0 onwards, which are not available without additional build.



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 the software interface for creating initial coordinates. It is divided into several sections:

- Monomers Available:** A list of monomers A, B, C, D, E, and F. Monomer B is currently selected.
- Monomers Used:** A list showing the current composition, which includes A x 3 and B x 3.
- Control Buttons:** Includes '>> Add >>' (highlighted with a red box), '<< Delete <<', and 'Clear'.
- Input Fields:** A field for '# of Monomers' contains the value '3'. There are also fields for '# of Polymers' and 'Density'.

An orange callout box points to the 'Add' button with the text: **# of Monomers の上のAddを押す** (Press the Add button above the number of monomers).

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。

作成された初期座標が表示される

DPD Cell Builder

Monomers Available: A, B, C, D, E, F

Monomers Used: A x 3, B x 3

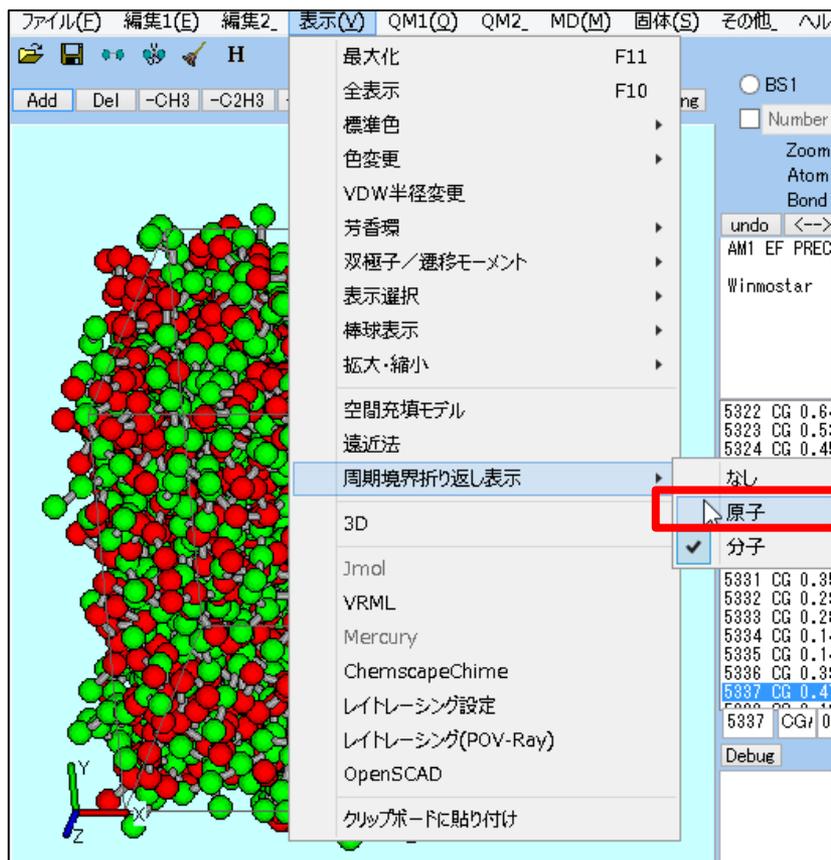
Polymers Used: AAABBB x 1440

Density: 5

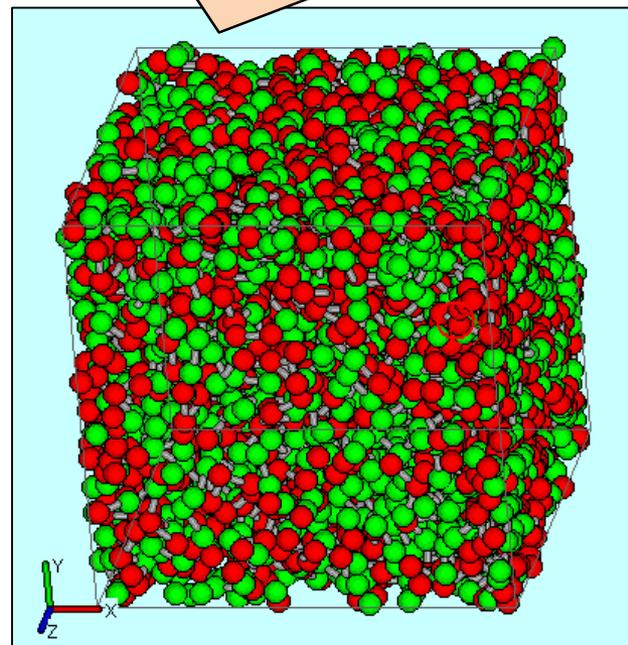
Build

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。

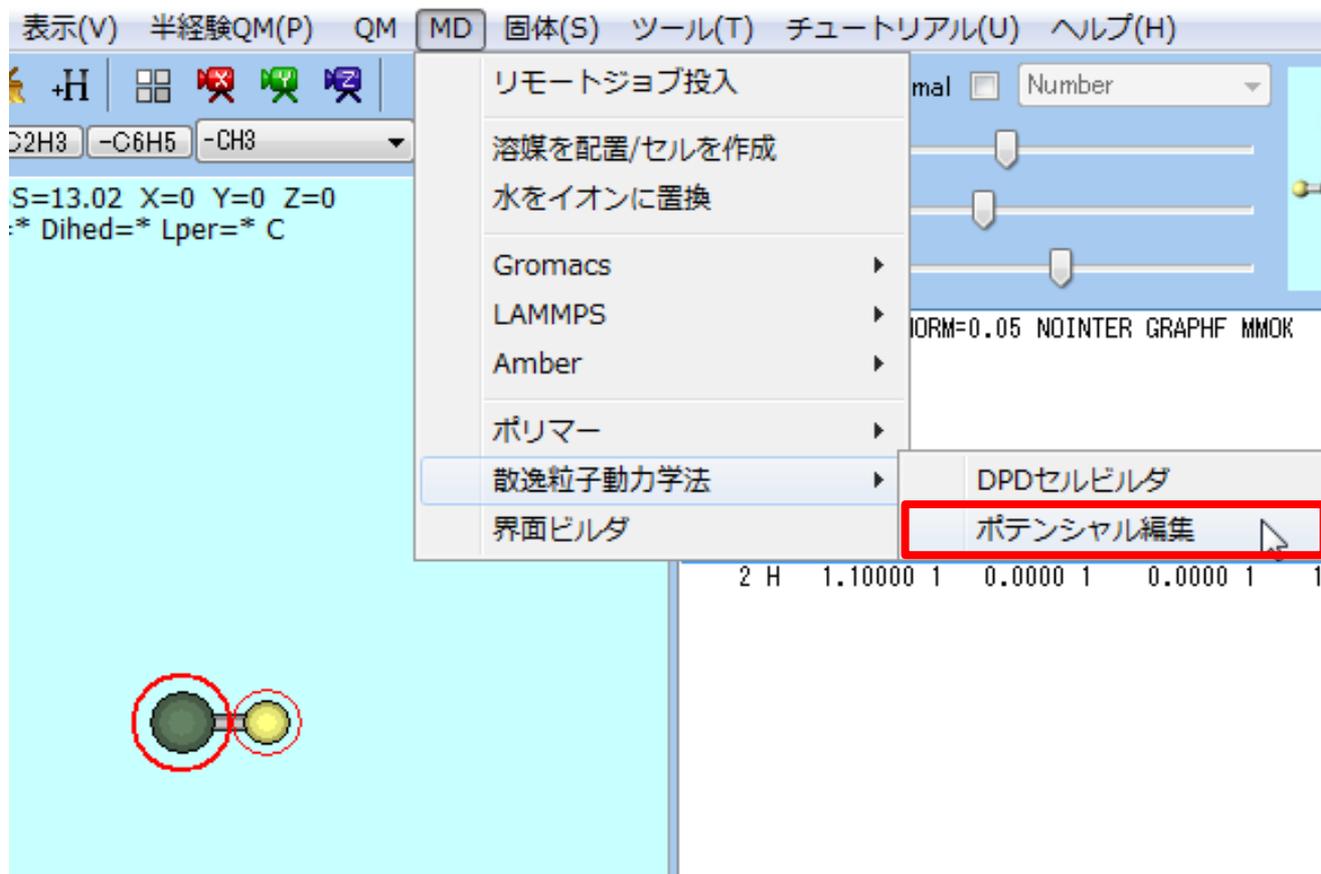


周期境界をまたいだ粒子が
折り返されて表示される



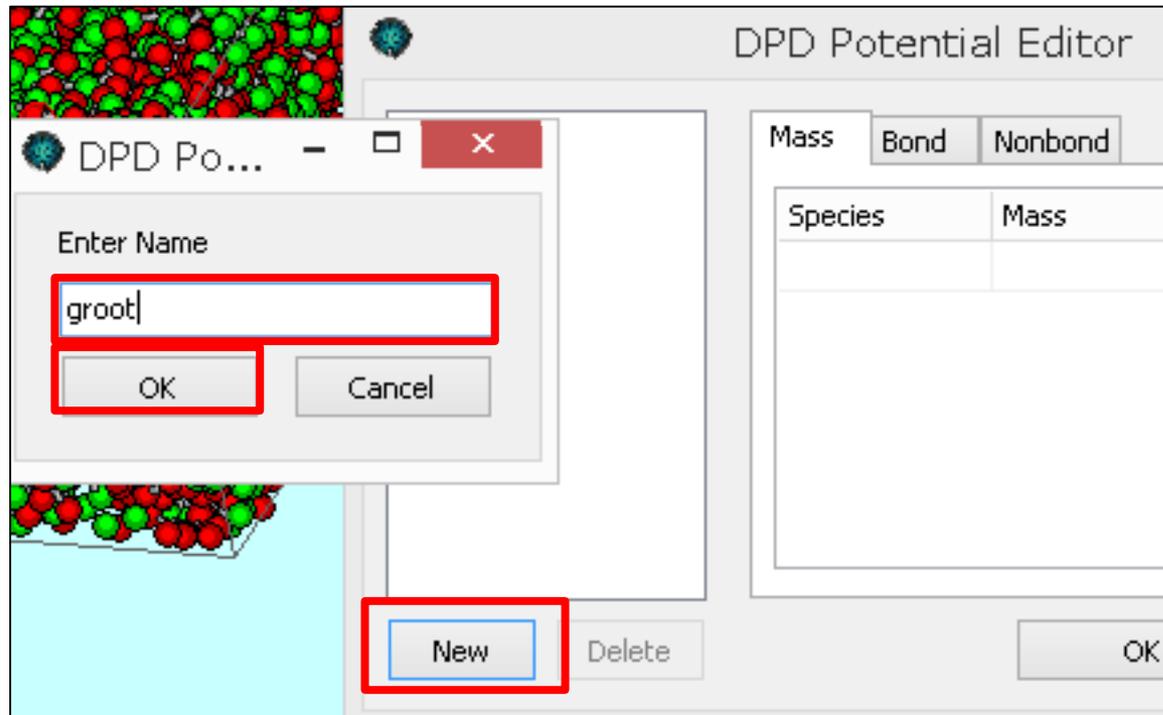
II. ポテンシャルの設定

「MD>散逸粒子動力学>ポテンシャル編集」を選択し、DPC 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。

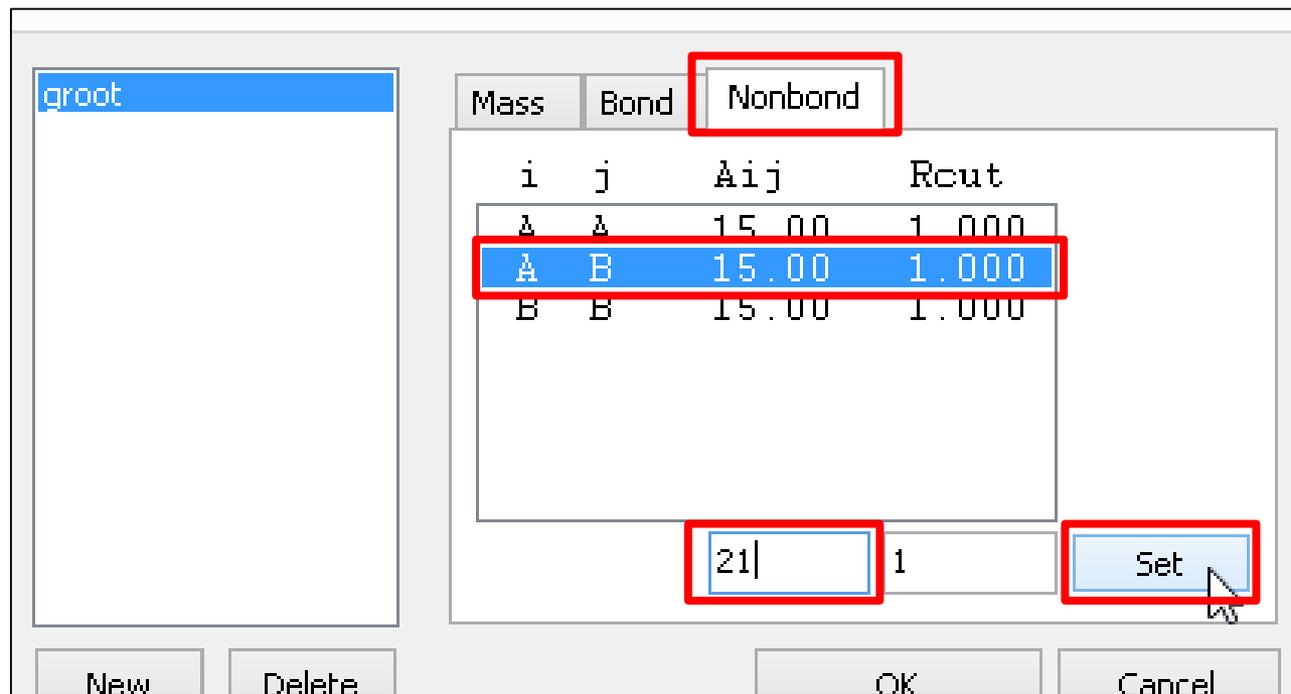


II. ポテンシャルの設定

「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。

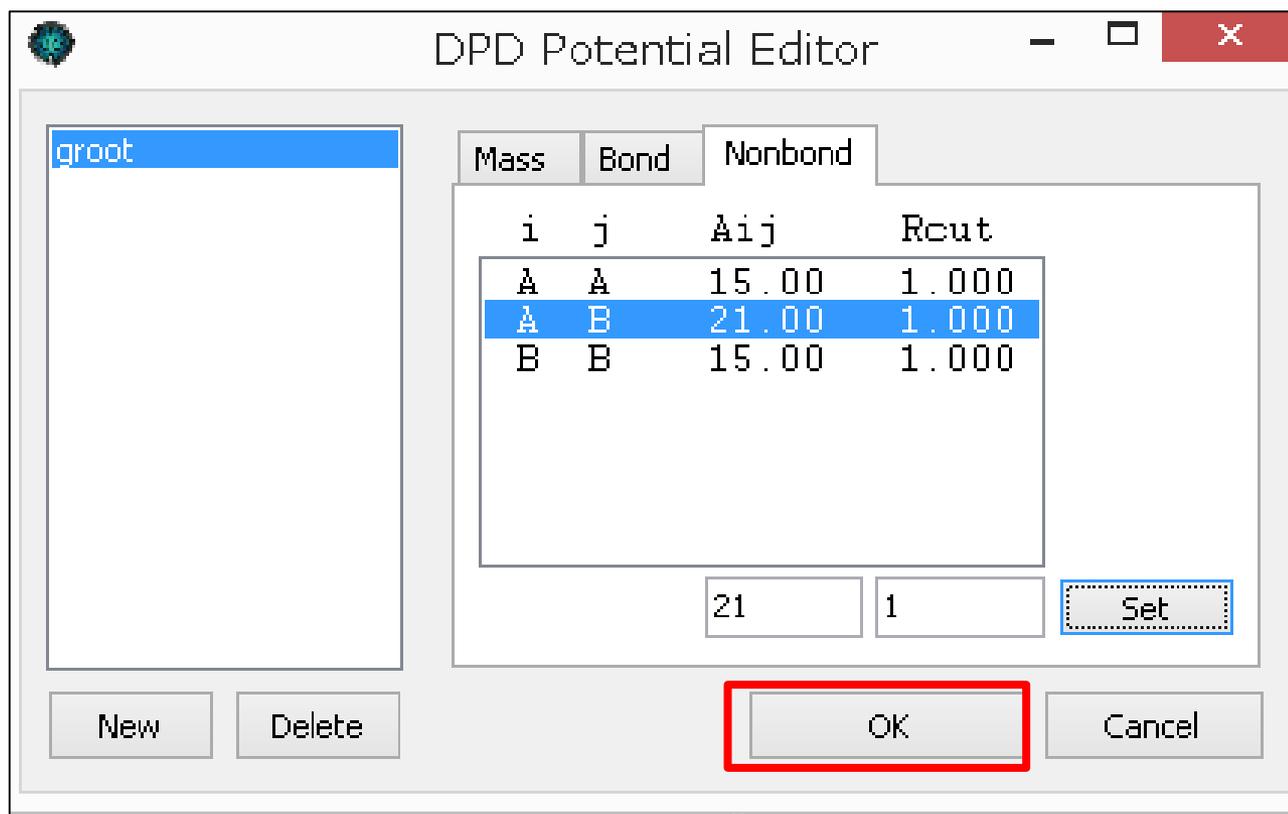
(Aij、Rcutともに単位は無次元)

任意のモノマーについてAijを決める方法は何通りかあるが、例えば「Winmostar Gromacsチュートリアル 溶解度・ χ ・DPDパラメータの算出」の方法がある。



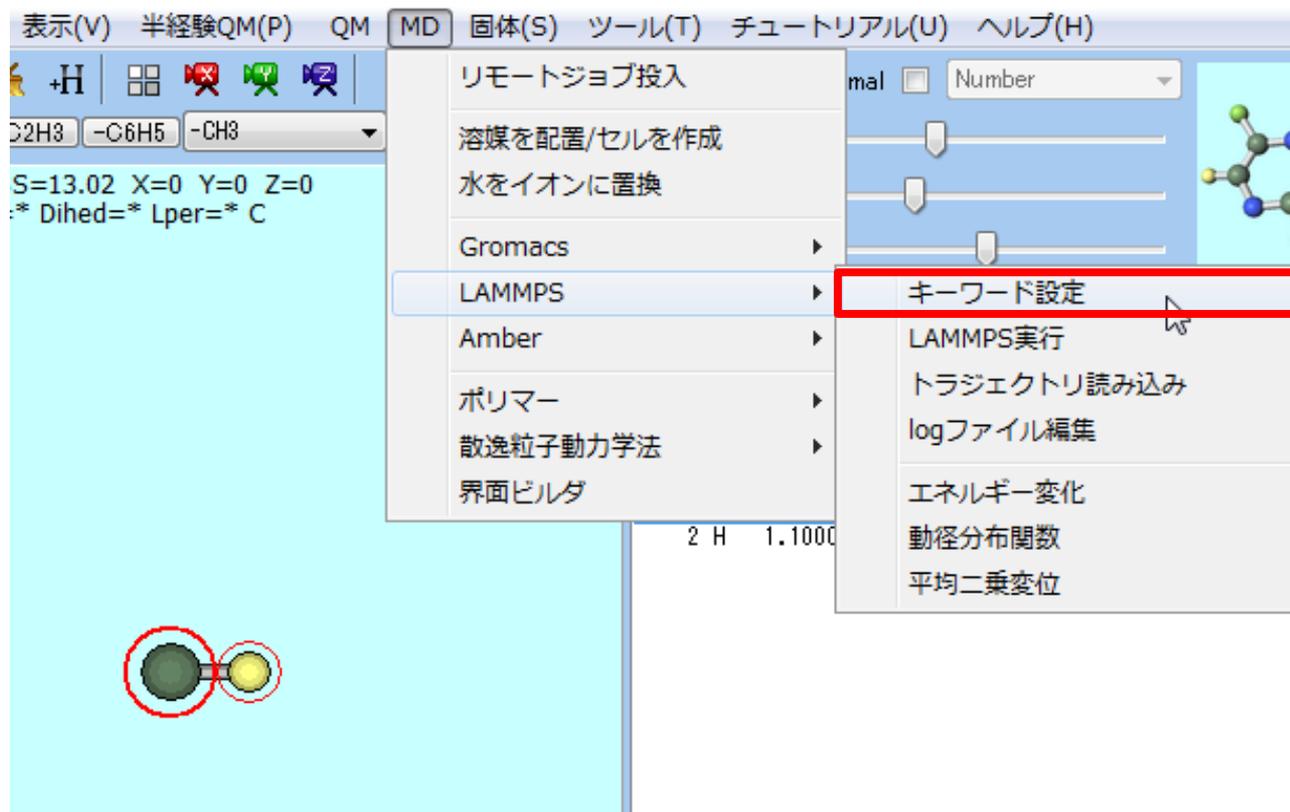
II. ポテンシャルの設定

「OK」ボタンを押し、Potential Editorを終了する。



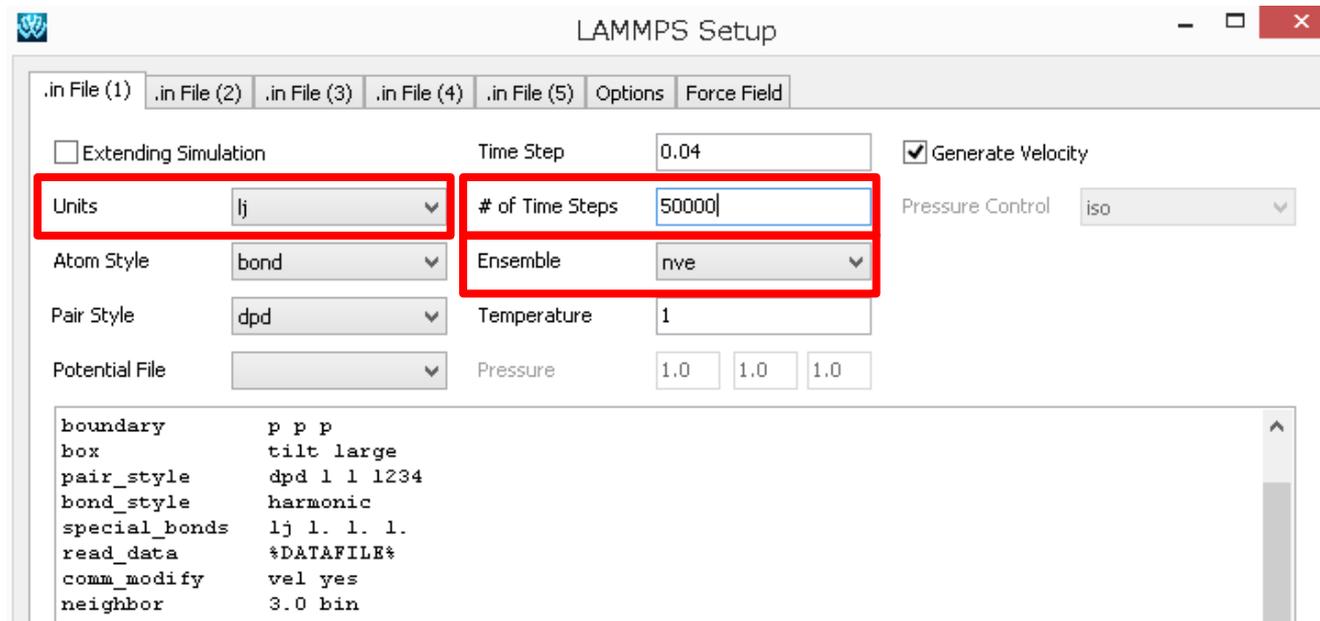
III. LAMMPSの設定

「MD>LAMMPS>キーワード設定」を選択する。



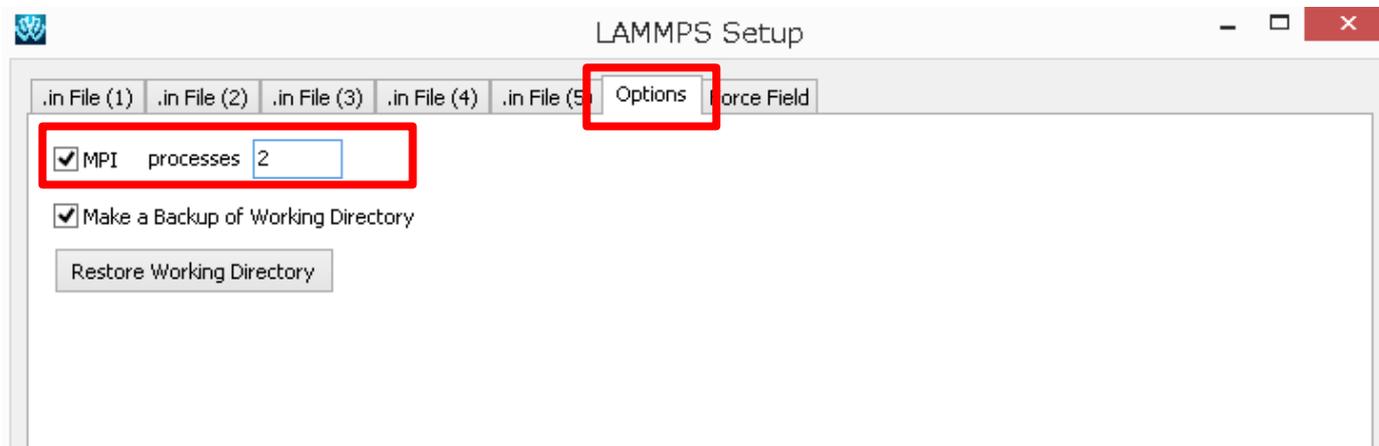
III. LAMMPSの設定

- 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)



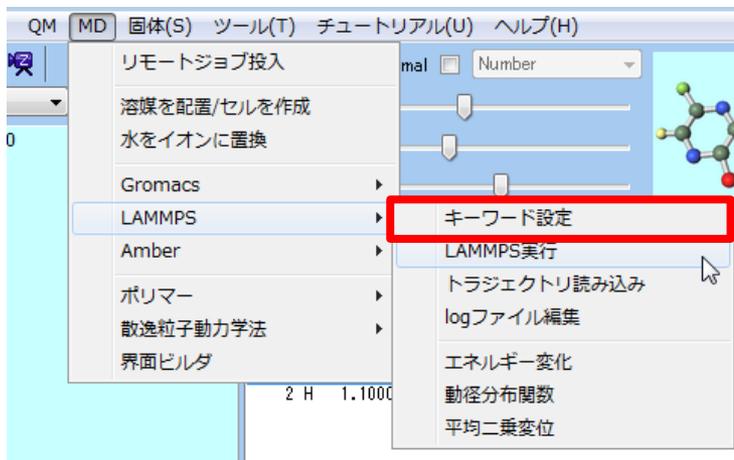
III. LAMMPSの設定

必要に応じて、OptionタブにてMPI並列数の指定を行う。

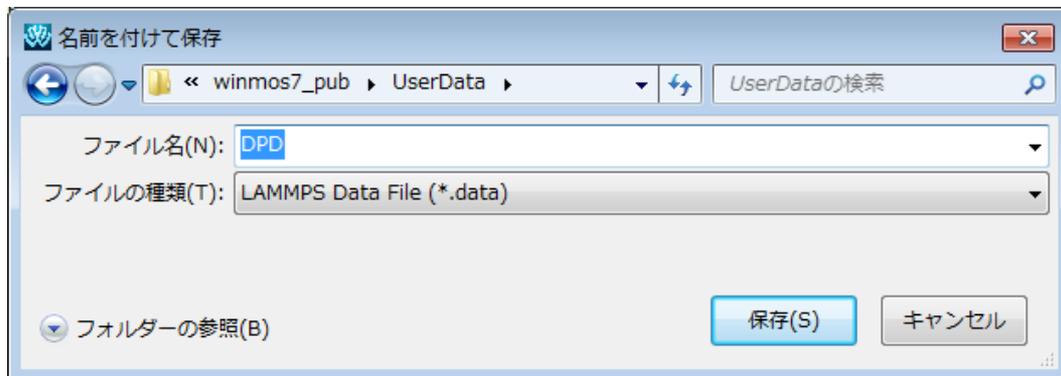


IV. LAMMPSの実行

「MD>LAMMPS>LAMMPS実行」を選択する。



ファイル名に「DPD」と入力し保存をクリックする。



→ 計算終了

V. 結果の表示

「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。

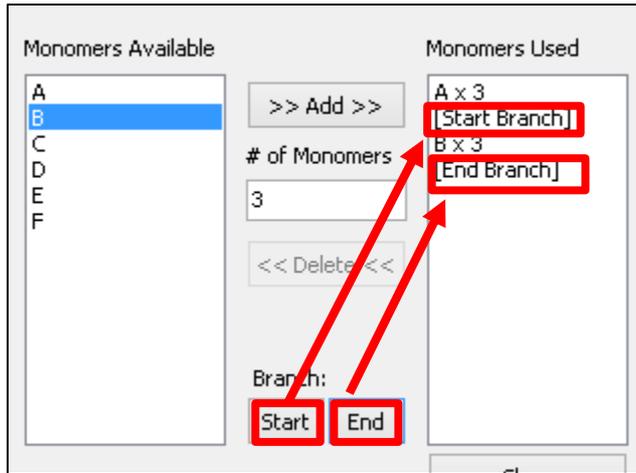
The screenshot shows the software interface with the 'MD(M)' menu open. The path 'MD > LAMMPS > トラジェクトリ読み込み' is highlighted with a red box. The main window displays a 3D visualization of a molecular simulation, showing a lamellar phase with alternating layers of red and green spheres. A callout box points 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'.

On the right side of the interface, there is a data table with the following content:

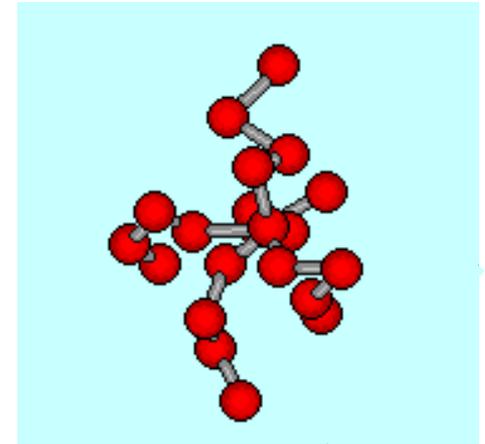
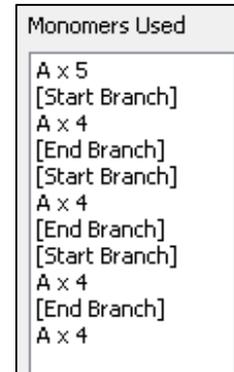
Atom	0.25	
Bond	10	
undo	<-->	
AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINT		
Winmostar		
834	CG	0.27888 1 60.4903
835	CG	0.89821 1 118.0553
836	CG	0.88132 1 129.2125
837	CG	0.68401 1 127.3692
838	CG	0.81672 1 96.6628
839	CG	0.13273 1 38.8179
840	CG	0.88708 1 153.1635
841	CG	0.74628 1 59.1998
842	CG	0.86813 1 52.7975
843	CG	0.30447 1 87.2366
844	CG	0.56977 1 72.464
845	CG	1 104.5355
846	CG	1 104.8269
847	CG	0.44378 1 112.9228
848	CG	0.75777 1 102.7709
849	CG	0.60808 1 125.2487
834	CG	0.278886 60.4903
Debug	1	1

補足1: 分岐の作成

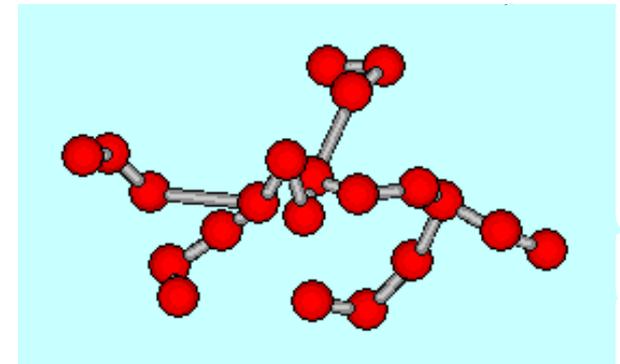
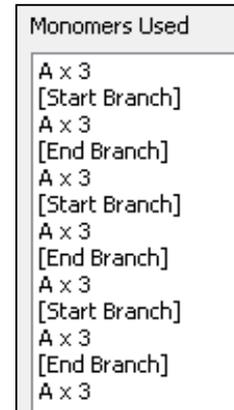
[Start]および[End]により分子に分岐(Branch)を導入できる。



例) 星形ポリマー



楕形ポリマー



[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

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 ポリマーモデリング」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。

