

Winmostar チュートリアル

LAMMPS

熱伝導率計算

V8.002

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2017/11/05

概要・注意点

- 本チュートリアルでは、常温常圧の水の熱伝導率をGreen-Kubo式で計算する方法を紹介します。ここでは目標の温度・圧力でNVEアンサンブルの計算を実行する平衡化手順(以下)を適用します。
 1. エネルギー最小化 : 座標重なり除去
 2. NVT一定 : 粒子速度の平衡化
 3. NPT一定 : 密度の平衡化
 4. NPT一定 : 平均密度算出→系を平均密度にスケーリング
 5. エネルギー最小化 : 座標重なり除去
 6. NVT一定 : 粒子速度の平衡化
 7. NVE一定 : 平均温度算出→系を平均温度にスケーリング
 8. NVE一定 : 本計算
- ターゲットとなる物質の種類、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、ここでは物理量の収束に十分なステップ数の計算を実施していません。熱伝導率算出時の相関関数計算のパラメータも調整の余地があります。

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_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>

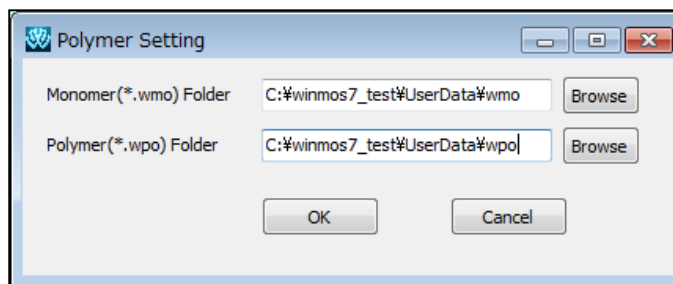
インストール先の OS に応じて [32-bit Windows download area] もしくは [64-bit Windows download area] をクリックする。

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_USMD (requires external library) PYH2O2 (requires to bundle a full Python runtime), USER_MMM (only useful when linking to a GM software), USER_SJUE (requires external library), SGA2 (supported by the USER_SGA2 package which is included). The **serial** executable additionally does not contain the MPI and USER MPI packages. More from version 4.0.1 onwards, which are not available without internet.



- ポリマーツールの設定
[MD]->[ポリマー]->[設定](下図)で、必要に応じてモノマーファイル(拡張子.wmo)とポリマーファイル(拡張子.wpo)の格納フォルダを指定する。



I. 系の作成

「MD＞溶媒を配置/セルを作成」にて、「Put the molecule on main window as solute」のチェックを外し、「Add Water」ボタンを押す。

The image shows the 'Solvate/Build MD Cell' dialog box in the X-Ability software. The 'MD' menu is open, and the option '溶媒を配置/セルを作成' (Solvate/Build MD Cell) is selected. The dialog box has the checkbox 'Put the molecule on main window as solute' unchecked. The 'Add Water' button is highlighted. The 'Simulation Cell' tab is active, showing options for 'Set Density [g/cm³]' (0.6), 'Set Distance from Solute [nm]', and 'Set Box Size [nm]'. The 'Box Type' is set to 'cubic'. The 'Total Number of Atoms' is displayed at the bottom.

Name	# Mol	Position	mol/L	Composition

I. 系の作成

「Add water」ウインドウで“500”と入力し「OK」をクリックする。「Set Density」に“0.9”と入力し「Build」ボタンをクリックする。

The screenshot shows the 'Solvate/Build MD Cell' window with the following configuration:

Name	# Mol	Position	mol/L	Composition
WATER	500	Random	49.955	H2O

Simulation Cell Option:

- Set Density [g/cm³]: 0.9
- Set Distance from Solute [nm]:
- Set Box Size [nm]: 2.552, 2.552, 2.552 (Import)
- Angles: 90.0, 90.0, 90.0
- Box Type: cubic
- Total Number of Atoms: 1500

Buttons: Add Water, Add .mol2 File, Delete, Reset, Build

II. 系の平衡化

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックし、既に何らかのキーワードを設定していた場合は[Reset]ボタンをクリックし、最後に[OK]ボタンをクリックする。

The screenshot shows the LAMMPS Setup dialog box with the following configuration:

- Extending Simulation:**
- Preset:** Minimize (fast)
- MPI:** 1 processes
- Basic:** Units: real, Time Step [fs]: 2.0, Ensemble: minimize
- Atom Style:** full, # of Time Steps: 5000, Temperature [K]: 300.0
- Pair Style:** lj/cut/coul/long, Total time [fs]: N/A, Pressure [atm]: 1.0, 1.0, 1.0
- Force Field:** Generate Velocity, Pressure Control: iso, Constrain Hydrogen

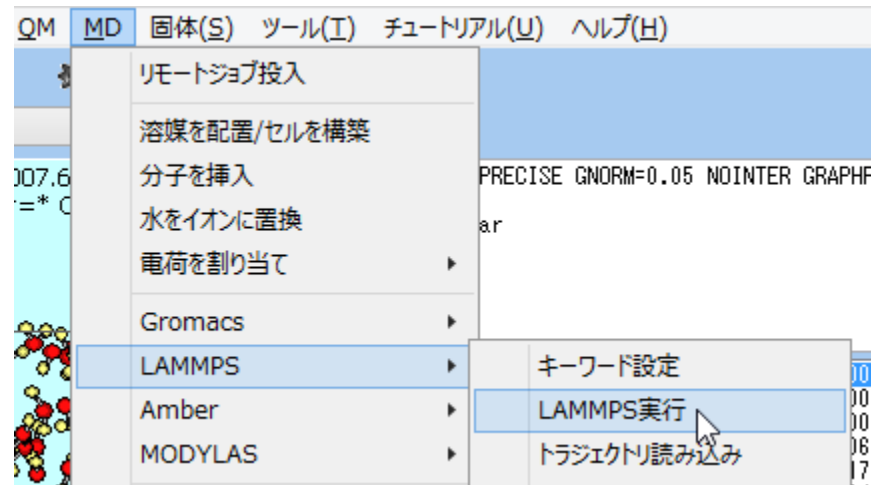
The keyword list in the bottom panel is as follows:

```

units real
atom_style full
boundary p p p
box tilt large
pair_style lj/cut/coul/long 10. 10.
pair_modify mix arithmetic
special_bonds amber
kspace_style pppm 1e-5
kspace_modify order 4
bond_style harmonic
angle_style harmonic
dihedral_style charmm
improper_style umbrella
read_data %DATAFILE%
neighbor 2.0 bin
neigh_modify delay 0
dump 1 all custom 100 %DUMPPFILE% id type xs ys zs ix iy iz
dump 2 all xtc 100 %XTCFILE%
  
```

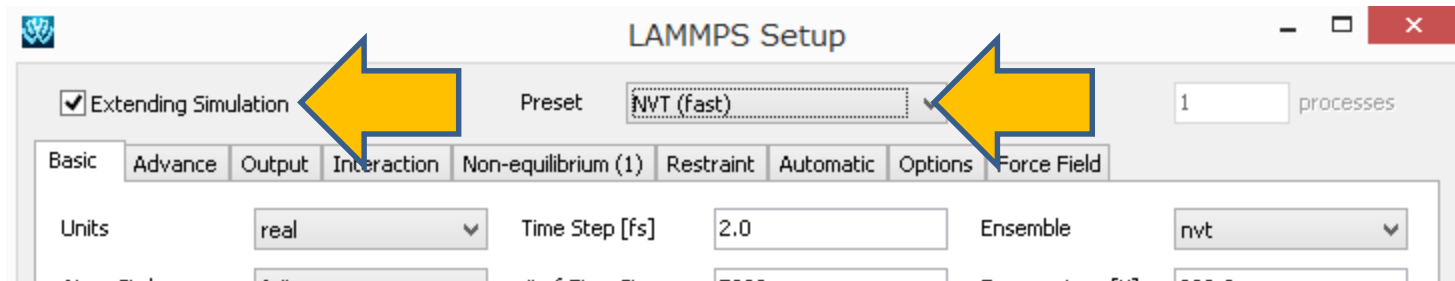
II. 系の平衡化

[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックし、保存する.dataファイルの名前を指定すると計算が開始される。ここでは仮に「kappa.data」とする。



II. 系の平衡化

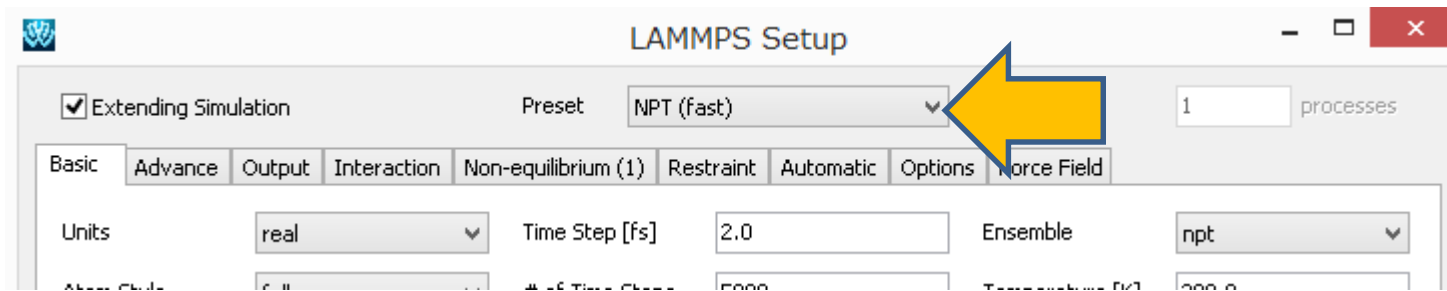
[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックし、「Extending Simulation」にチェックを入れ、「Preset」に「NVT (fast)」を選択し、「OK」をクリックする。
次に、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックする。



II. 系の平衡化

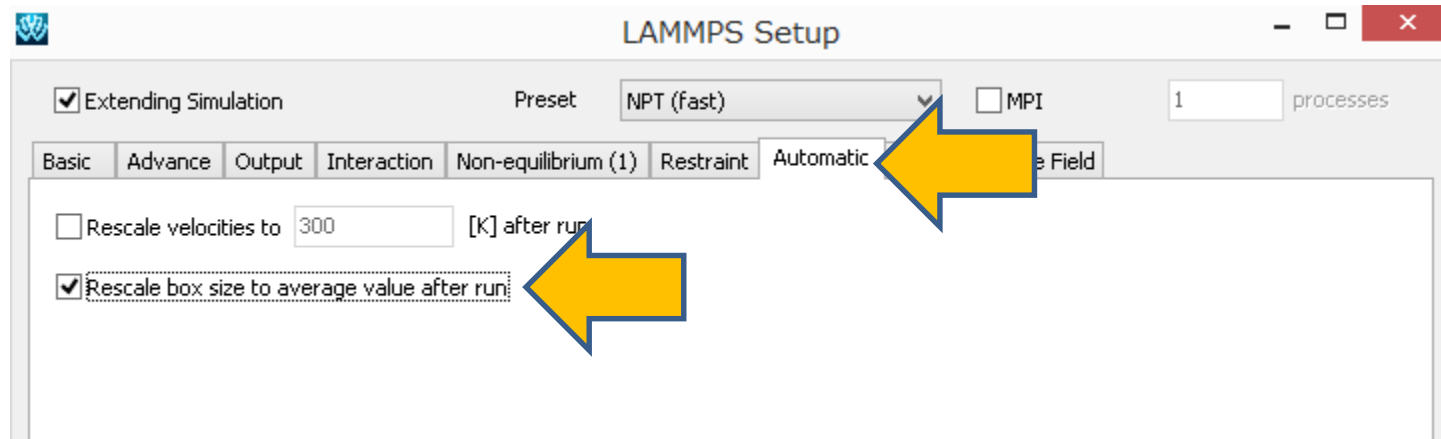
[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックし、「Preset」に「NPT (fast)」を選択し、「OK」をクリックする。

次に、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックする。



II. 系の平衡化

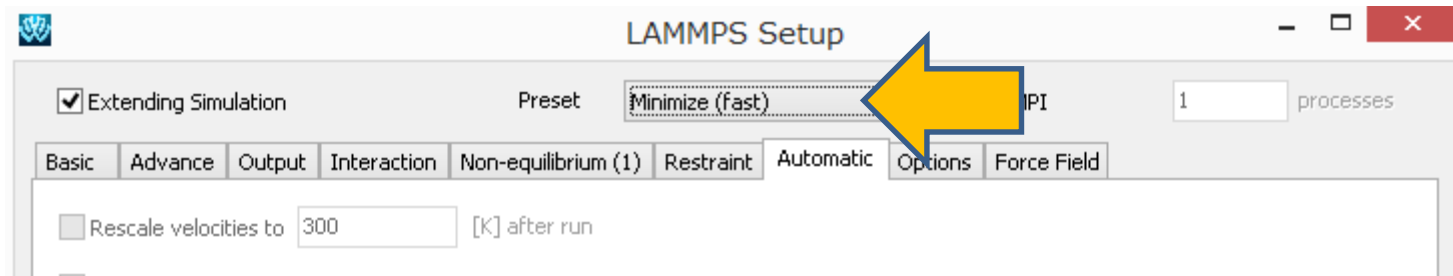
[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックし、「Automatic」タブを開き、「Rescale box size to average value after run」にチェックを入れ、「OK」をクリックする。
次に、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックする。



II. 系の平衡化

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックし、「Preset」に「Minimize (fast)」を選択し、「OK」をクリックする。

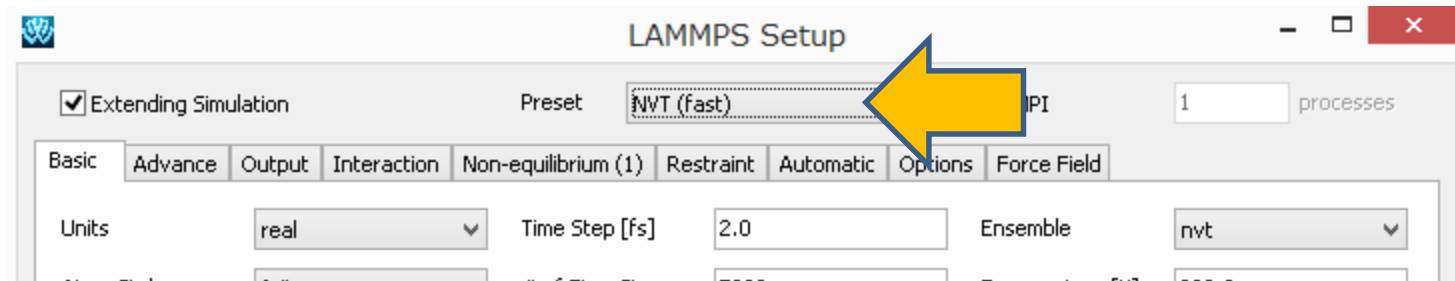
次に、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックする。



II. 系の平衡化

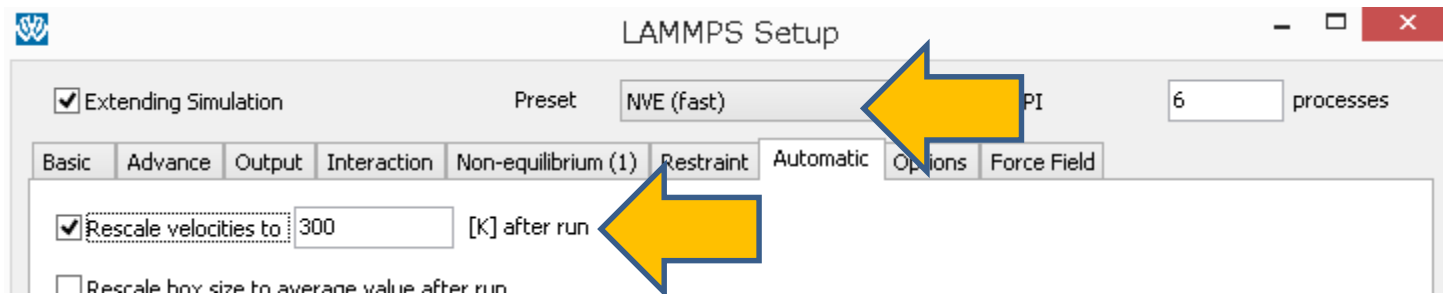
[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックし、「Preset」に「NVT (fast)」を選択し、「OK」をクリックする。

次に、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックする。



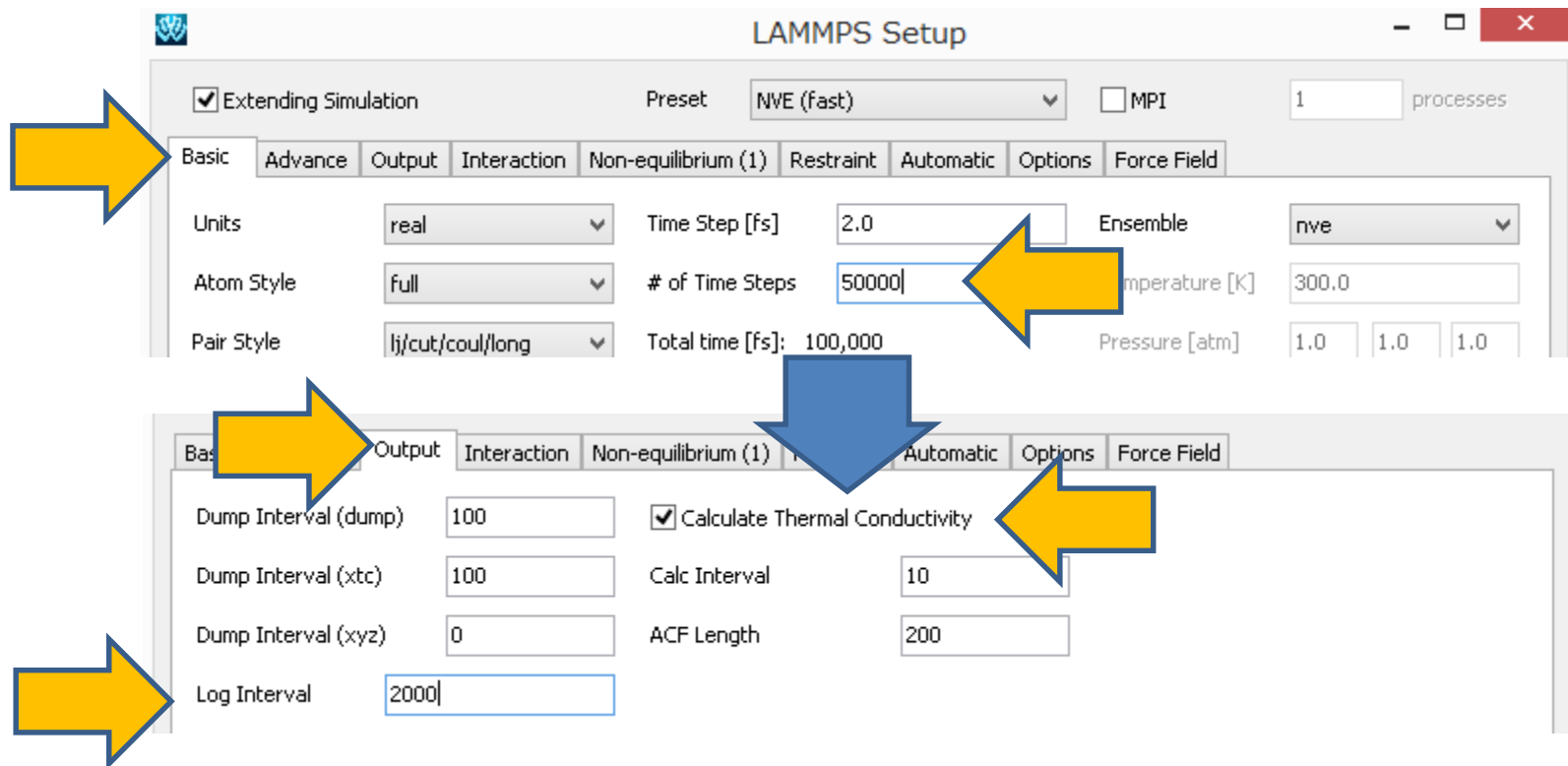
II. 系の平衡化

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックし、「Preset」に「NVE (fast)」を選択し、「Automatic」タブの「Rescale velocities to...」にチェックを入れ、「OK」をクリックする。
次に、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックする。



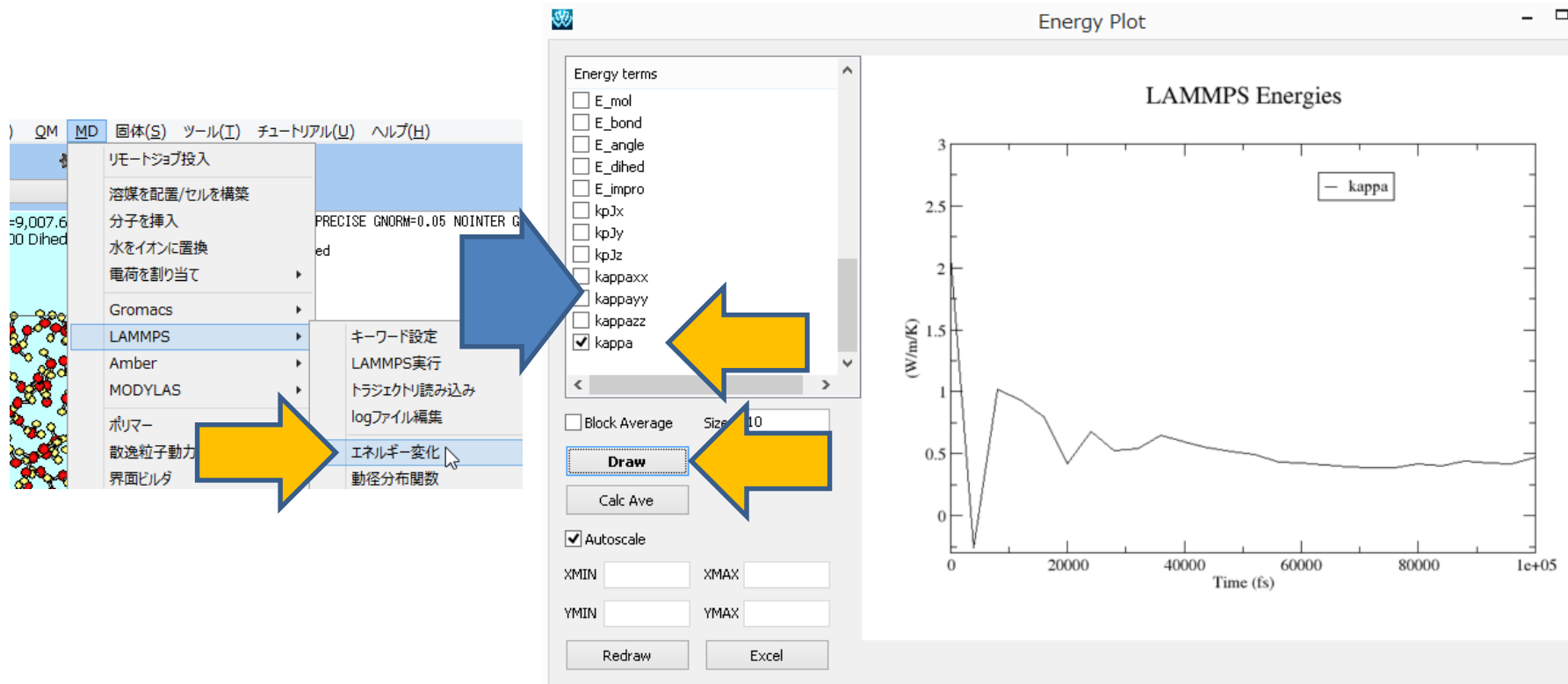
III. プロダクトラン

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックし、「Basic」タブの「# of TimeSteps」を「50000」に変更する。次に、「Output」タブの「Log Interval」を「2000」に変更し、「Calculate Thermal Conductivity」にチェックを入れ、「OK」をクリックする。次に、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックする。



IV. 熱伝導率の取得

[MD]-[LAMMPS]-[エネルギー変化]をクリックし、デフォルトで選ばれるファイルを開く。「Energy Terms」の「kappa」にチェックを入れ「Draw」ボタンを押すと、グラフが得られる。このグラフは、Green-Kubo式に基づいて計算された熱伝導率の積算平均値の時間変化を示している。



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!