

Winmostar チュートリアル

LAMMPS

基礎編

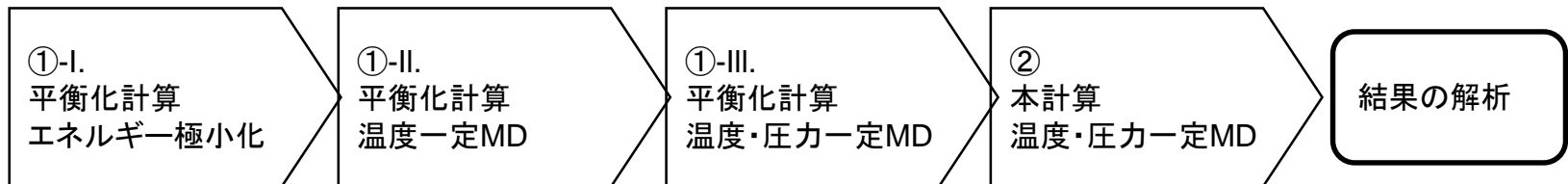
V8.000

株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2017/10/01

概要

- 常温常圧の水について、系の作成と平衡化計算と本計算を実行し、基礎的な結果解析を行います。



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本例と異なる場合があります。
- “本計算”のステップ数が大きいほど、再現性が良く、信頼性の高い結果を取得することができます。
- 相互作用計算方法や力場も計算結果に大きく影響します。

動作環境設定

- 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>

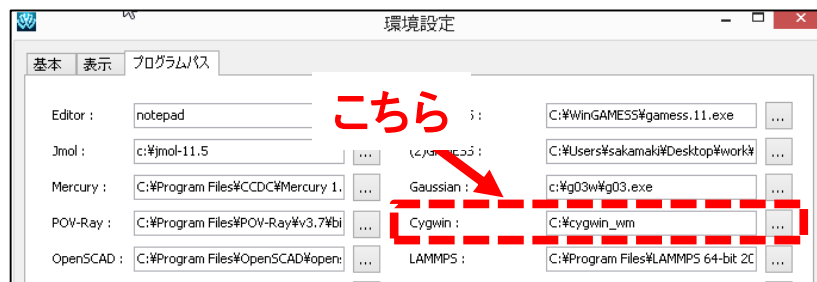
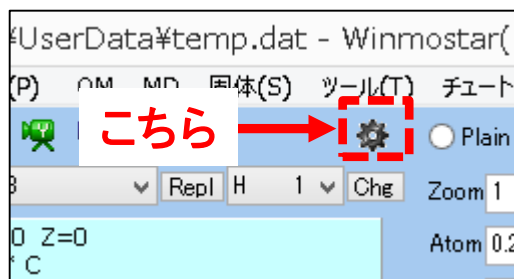
インストール先の OS に応じて [32-bit Windows download area] もしくは [64-bit Windows download area] をクリックする。

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 Science at Temple University. The LAMMPS binaries contain all optional packages included in the source distribution **except** IBM (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_HOUDINI (requires external library), EXYTHON (requires to bundle a full Python runtime), USER_JAMM (only useful when linking to a DM software), USER_GUP (requires external library), SEAX (suspended by the USER_READC package which is included). The serial executable additionally does not compile the MPIIO and USER_EB packages, since those require MPI or functions, which are not available without linking to a



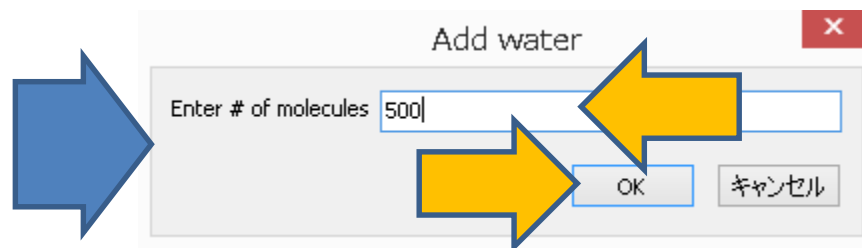
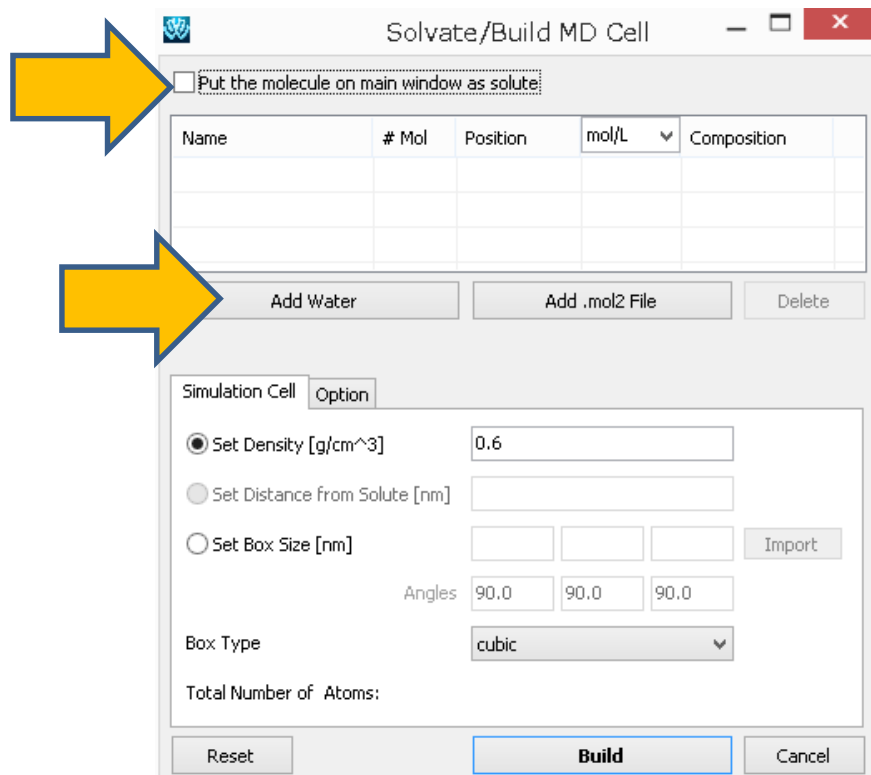
- LAMMPSとCygwinは、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」>「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



I. 系の作成

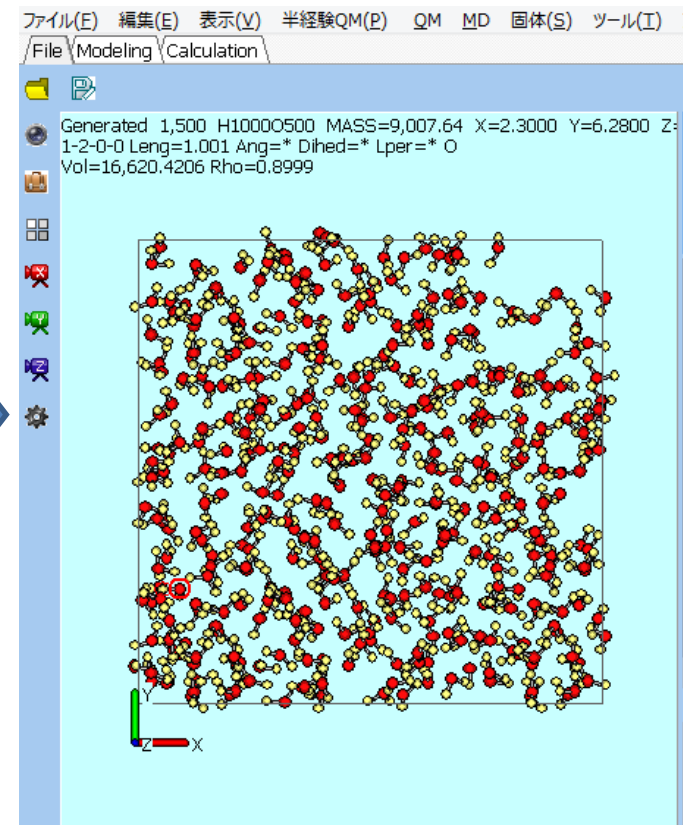
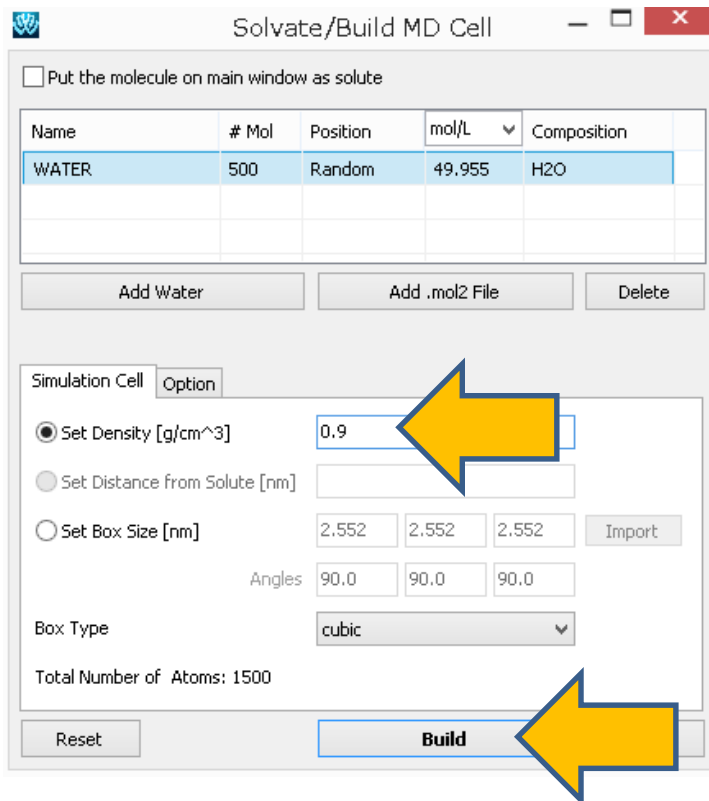
まず[MD]>[溶媒を配置/セルを作成]をクリックする。

[Put the molecule on main window as solute]のチェックを外し、[Add water]ボタンをクリックする。[Enter # of molecules]に「500」と入力し[OK]をクリックする。



I. 系の作成

「Set Density」に「0.9」と入力し、「Build」をクリックすると左図のような系が作成される。



II. 平衡化(エネルギー極小化)

「MD>LAMMPS>キーワード設定」を選択する。Winmostar起動後キーワードが変更されている場合は「Reset」ボタンを押す。その後「OK」ボタンを押す。

The screenshot shows the 'LAMMPS Setup' dialog box with the following settings:

- Extending Simulation
- Preset: Minimize (fast)
- MPI
- 1 processes

Basic tab settings:

- 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
- Potential File: (empty)
- Generate Velocity
- Pressure Control: iso
- Constrain Hydrogen

Simulation parameters list:

```

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 ppm le-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 %DUMPFIL% id type xs ys zs ix iy iz
dump 2 all xtc 100 %XTCFILE%
    
```

Buttons: Reset, Save, Save as Default, OK

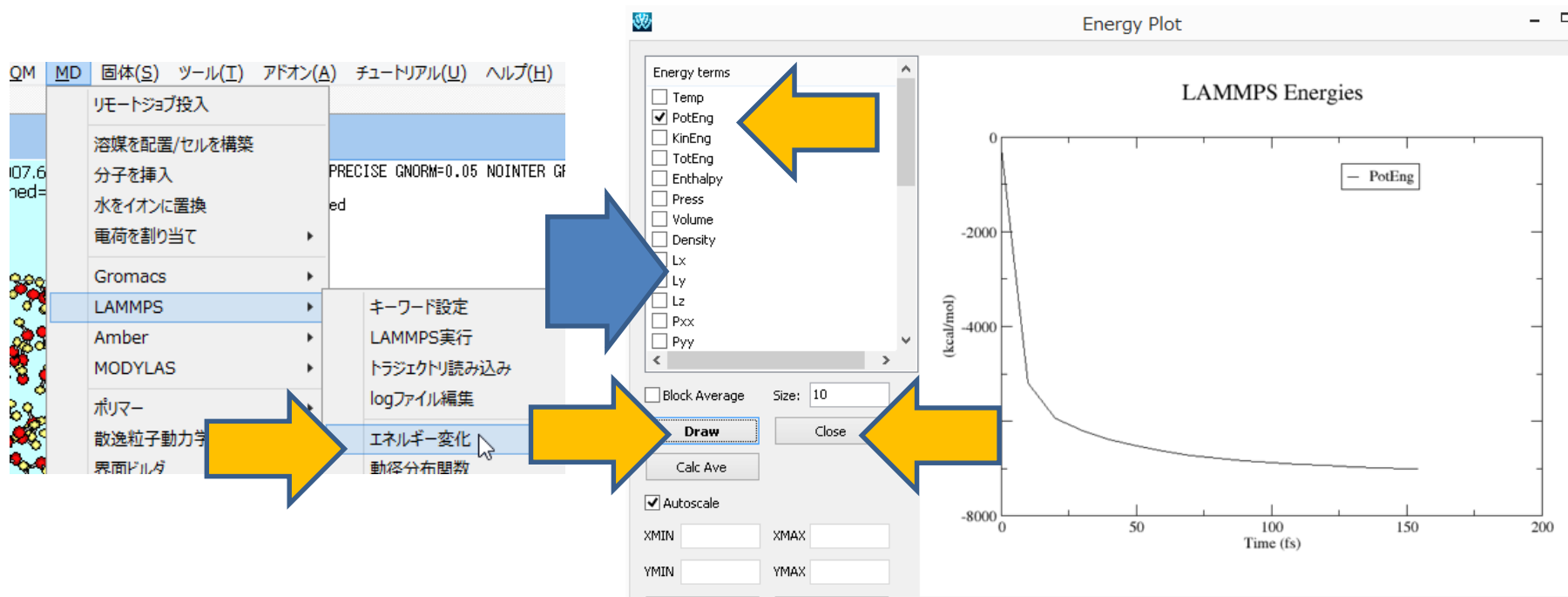
II. 平衡化(エネルギー極小化)

「MD>LAMMPS>LAMMPS実行」を選択する。座標ファイル(拡張子: data)の保存場所を聞かれるので、ファイル名を入力して保存する。
その後、Winmostar Job Managerが立ち上がり、LAMMPSが実行される。



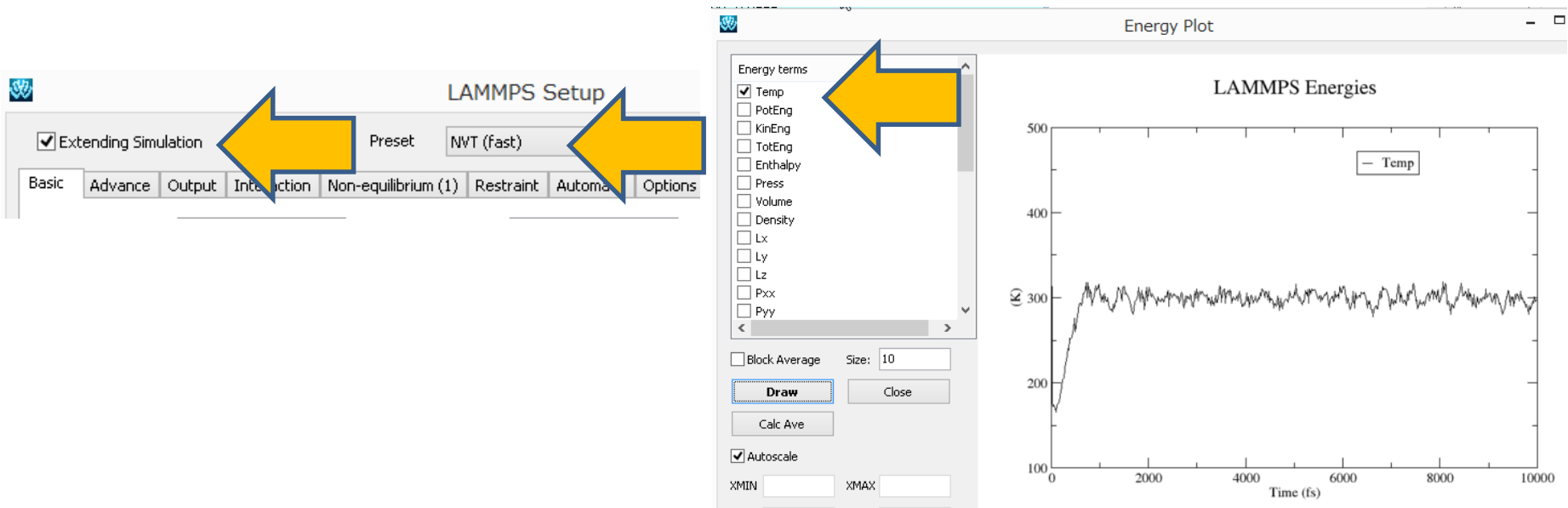
II. 平衡化(エネルギー極小化)

「MD>LAMMPS>エネルギー変化」を選択する。デフォルトで選択されるエネルギー(log)ファイルを開く。「Energy Term」で「PotEng」にチェックを入れ「Draw」ボタンを押し、ポテンシャルエネルギーの変化を確認する。確認後「Close」ボタンを押す。



II. 平衡化(温度一定)

「MD>LAMMPS>キーワード設定」を選択する。「Extending Simulation」にチェックを入れ、「Preset」に「NVT (fast)」を指定し「OK」を押す。
その後、「MD>LAMMPS>LAMMPS実行」を選択する。
計算終了後「MD>LAMMPS>エネルギー変化」にて「Temperature」を選択して「Draw」し、温度の変化を確認し「Close」する。

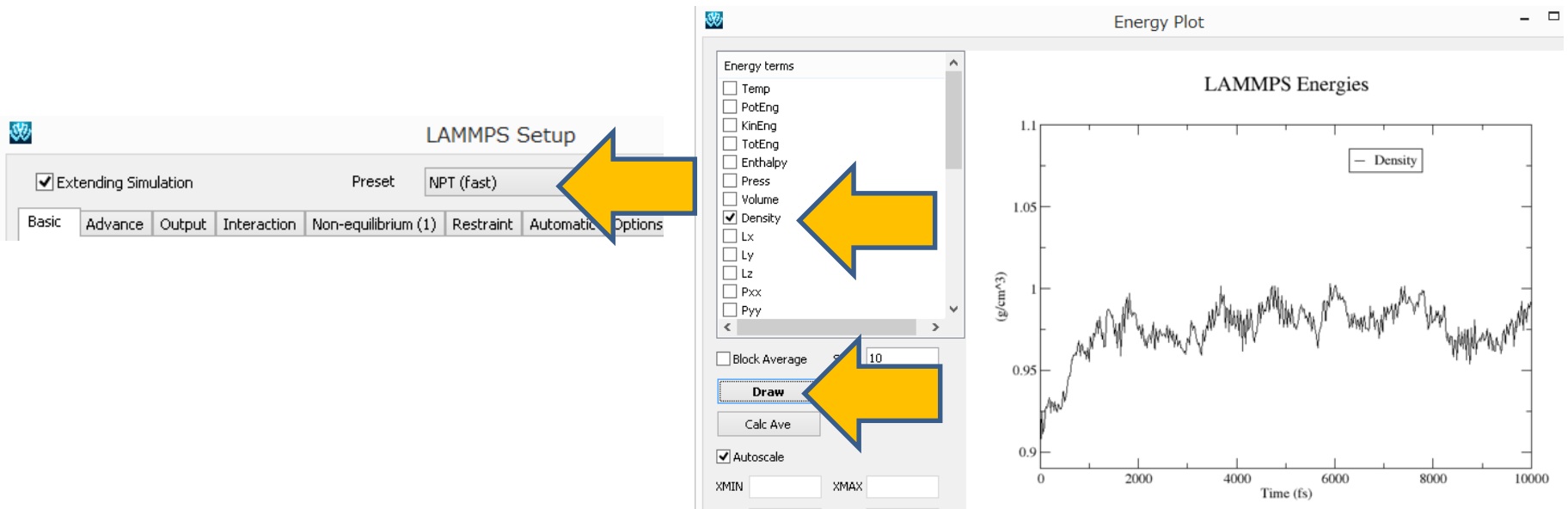


II. 平衡化(温度・圧力一定)

「MD>LAMMPS>キーワード設定」を選択する。「Preset」に「NPT (fast)」を指定し「OK」を押す。

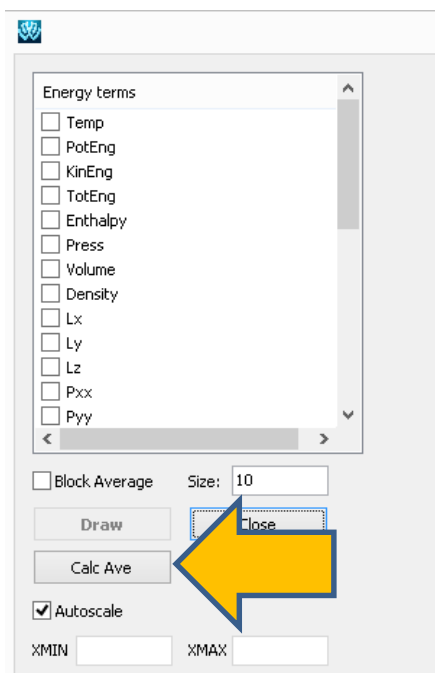
その後、「MD>LAMMPS>LAMMPS実行」を選択する。

計算終了後「MD>LAMMPS>エネルギー変化」にて「Density」を選択して「Draw」し、密度の変化を確認し「Close」する。



III. 本計算

同じキーワードのまま「MD>LAMMPS>LAMMPS実行」を選択する。
 計算終了後「MD>LAMMPS>エネルギー変化」にて「Calc Ave」ボタンをクリックし、
 デフォルトで選択される座標ファイルを選択すると各種統計量の平均が表示される。



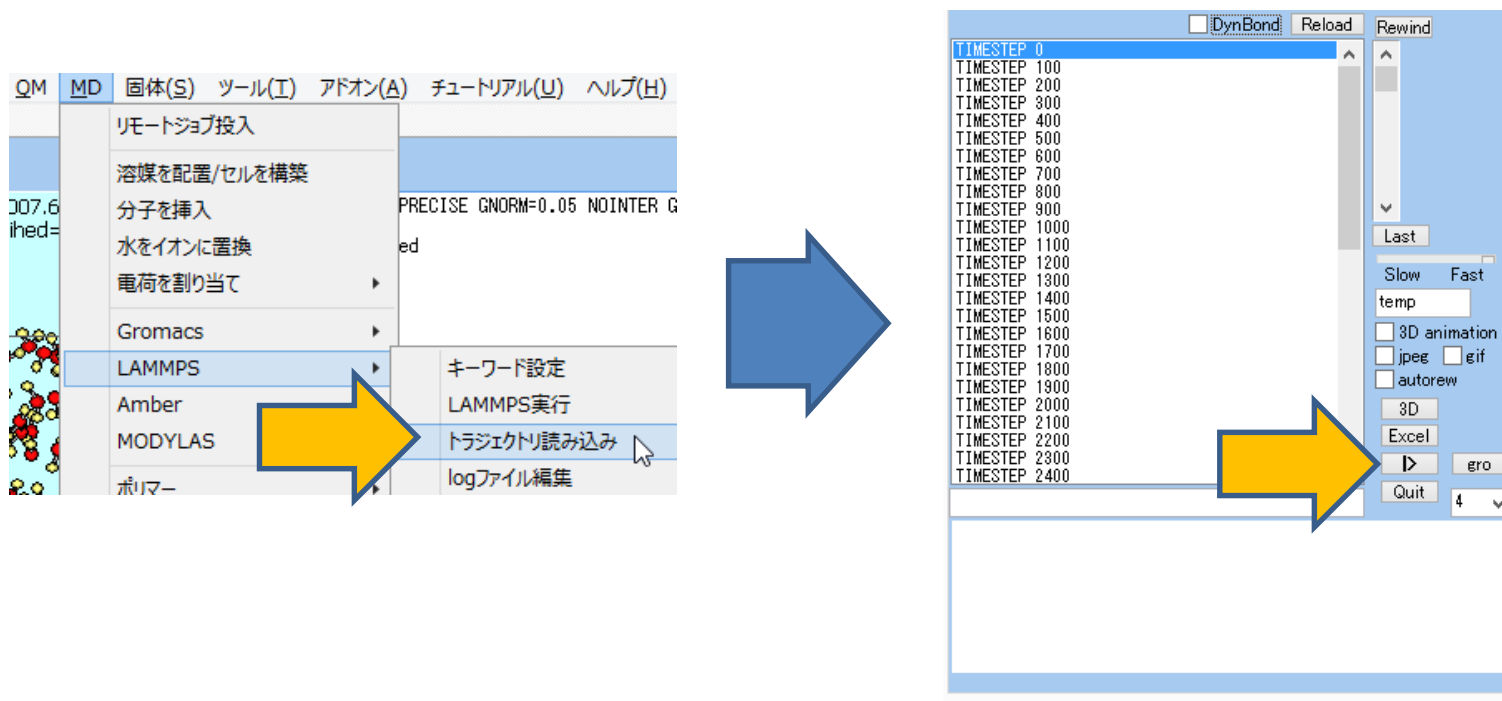
energy_ave.log - メモ帳

	Average	Standard error
# data		
Temp (K)	299.835444231536485	0.327788167594984
PotEng (kcal/mol)	-5544.767736526945560	1.348629955017838
KinEng (kcal/mol)	892.858752455089757	0.976097180514877
TotEng (kcal/mol)	-4651.908982634735370	1.644125872677692
Enthalpy (kcal/mol)	-4651.697317964072680	5.200100384349269
Press (atm)	3.122773844510978	22.346024184835606
Volume (Å ³)	15055.435726546909800	7.289356913733757
Density (g/cm ³)	0.993621123532934	0.000482677087822
Lx (Å)	24.692141984031920	0.003989345835806
Ly (Å)	24.692141984031920	0.003989345835806
Lz (Å)	24.692141984031920	0.003989345835806
Pxx (atm)	6.033117067844310	35.197060641085216
Pyy (atm)	-47.875726259481084	35.819951158445115
Pzz (atm)	51.210931500997987	34.105345932735254
Pxy (atm)	-19.311790480039935	22.050771267739162
Pxz (atm)	-2.152596176447073	21.187953566794391
Pyz (atm)	116.175317359666693	23.786597504576520
gamma (mN/m)	18.017179333732543	10.050334052860517
E_pair (kcal/mol)	-5544.767736526945560	1.348629955017838
E_vdwl (kcal/mol)	1063.448844890219330	1.605651126850460
E_coul (kcal/mol)	24008.761293413175700	2.368927929489807
E_long (kcal/mol)	-30616.977882235540200	0.106573159470741
E_tail (kcal/mol)	0.00000000000000000	0.00000000000000000
E_mol (kcal/mol)	0.00000000000000000	0.00000000000000000
E_bond (kcal/mol)	0.00000000000000000	0.00000000000000000
E_angle (kcal/mol)	0.00000000000000000	0.00000000000000000
E_dihed (kcal/mol)	0.00000000000000000	0.00000000000000000
E_impro (kcal/mol)	0.00000000000000000	0.00000000000000000

IV. 結果の解析

①アニメーションの表示

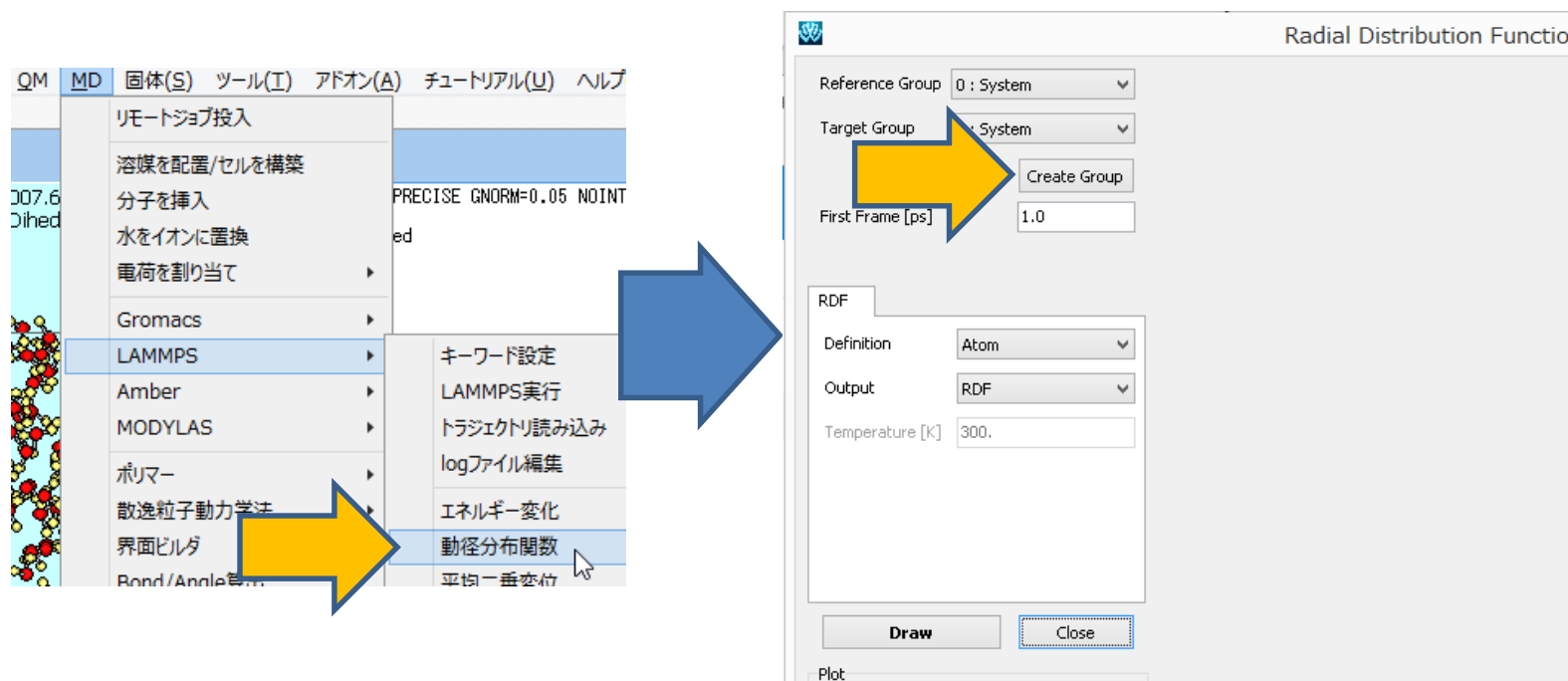
- 「MD>LAMMPS>トラジェクトリ読み込み」を選択する。対象となる座標ファイル（拡張子:data）とトラジェクトリファイル（拡張子:dump）をそれぞれ聞かれるので、デフォルトで表示されたファイルをそのまま開く。
- アニメーション操作ウインドウ（右図）が開く。再生ボタンを押すとアニメーションが表示される。



IV. 結果の解析

② 動径分布関数

- 「MD>LAMMPS>動径分布関数」を選択する。対象となるトラジェクトリファイル（拡張子: xtc）、座標ファイル（拡張子: gro）、インデックスファイル（拡張子: ndx）をそれぞれ聞かれるので、デフォルトで表示されたファイルをそのまま開く。
- 「Create Group」ボタンを押し、デフォルトで選ばれるgroファイルを開く。



IV. 結果の解析

② 動径分布関数

「Extracted Atom Names」の「O」にチェックを入れ、「New Group Name」に「Oxy」と入力し「Create」ボタンを押す。その後「Close」ボタンを押し、「Radial Distribution Function」ウィンドウにて「Reference Group」と「Target Group」に「Oxy」を選択し「Draw」ボタンを押すと動径分布関数のグラフが出現する。

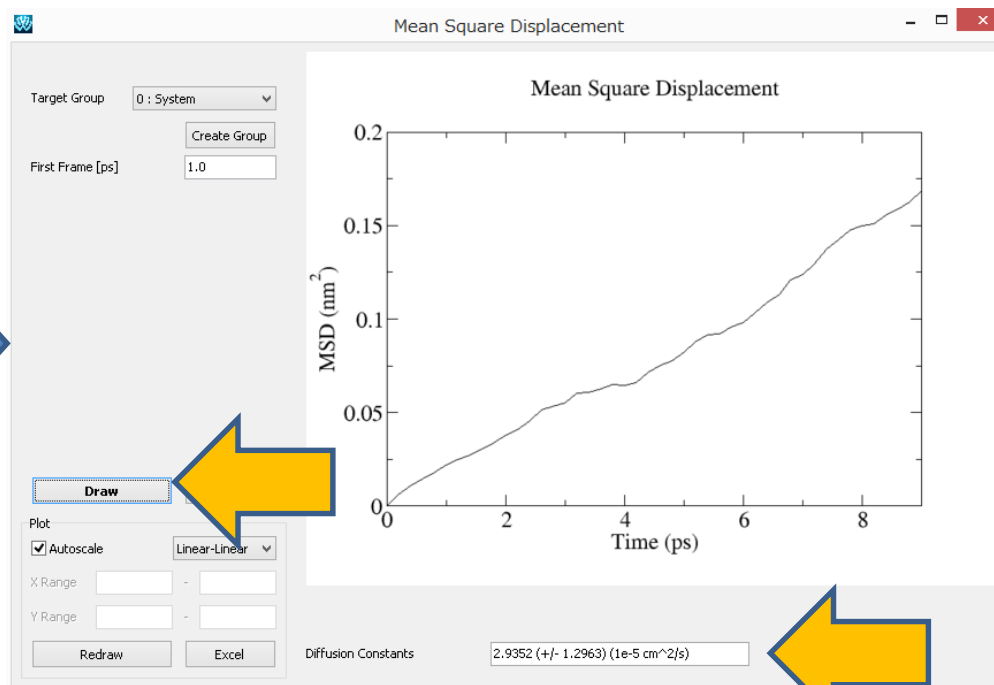
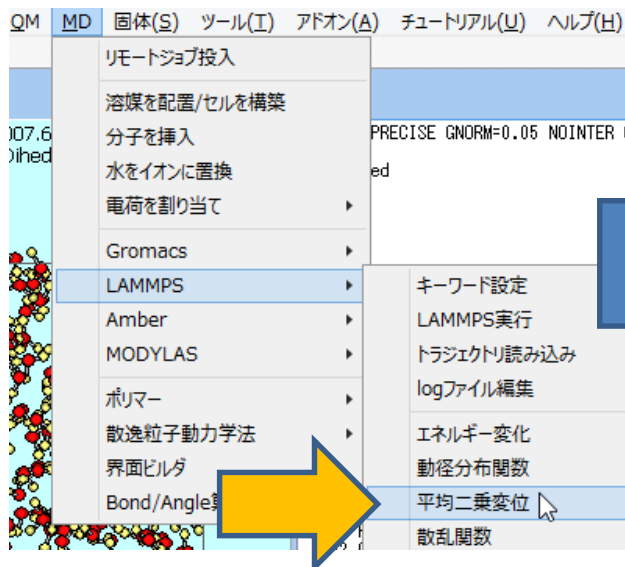
The figure illustrates the process of generating a Radial Distribution Function (RDF) plot through three sequential screenshots:

- Step 1: Create Group Dialog** - The 'Extracted Atom Names' section has the checkbox for 'O' checked. The 'New Group Name' field contains 'Oxy'. The 'Create' button is highlighted with a yellow arrow.
- Step 2: Radial Distribution Function Dialog** - Both the 'Reference Group' and 'Target Group' dropdown menus are set to '3 : Oxy'. The 'Draw' button is highlighted with a yellow arrow.
- Step 3: Radial Distribution Function Plot** - The plot shows the radial distribution for 'Oxy - Oxy'. The x-axis is labeled 'r' and ranges from 0 to 2. The y-axis ranges from 0 to 4. A sharp peak is visible at approximately r = 0.3, followed by a smaller peak at r ≈ 0.5 and a noisy baseline around 1.0.

IV. 結果の解析

③自己拡散係数

- 「MD>LAMMPS>平均二乗変位」を選択する。対象となるトラジェクトリファイル（拡張子: xtc）、座標ファイル（拡張子: gro）、インデックスファイル（拡張子: ndx）をそれぞれ聞かれるので、デフォルトで表示されたファイルをそのまま開く。
- 「Draw」ボタンを押すと平均二乗変位のグラフが表示され、その下に自己拡散係数が表示される。



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!