

Winmostar チュートリアル  
LAMMPS  
散逸粒子動力学 (DPD)  
V8.000

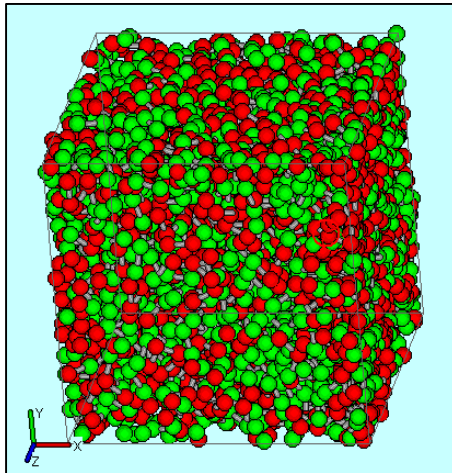
株式会社クロスアビリティ

[question@winmostar.com](mailto:question@winmostar.com)

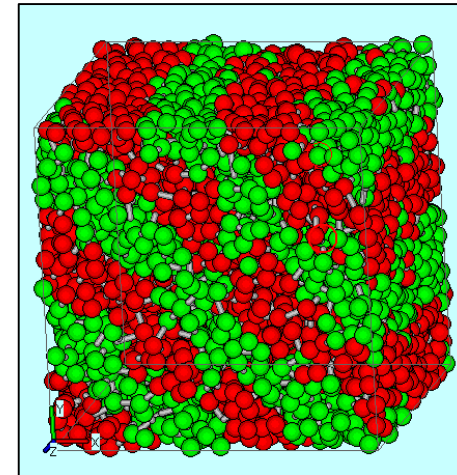
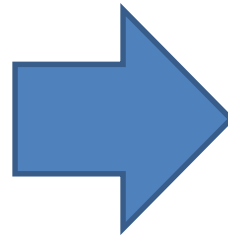
2017/10/01

## 概要

- ジブロックコポリマーの相分離構造を、DPD法により予測する手順を示します。構造の定量的な評価方法の一つとしてここでは散乱関数を算出します。  
参考文献: R. D. Groot and T. J. Madden, J. Chem. Phys, 108, 20, (1998), 8713.



初期構造



得られる構造

- ※ 全原子MDの構造にマッピングする方法を本資料最後の示しています。
- ※ DPDパラメータの算出方法はGromacsチュートリアルをご参照ください。

# 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](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。

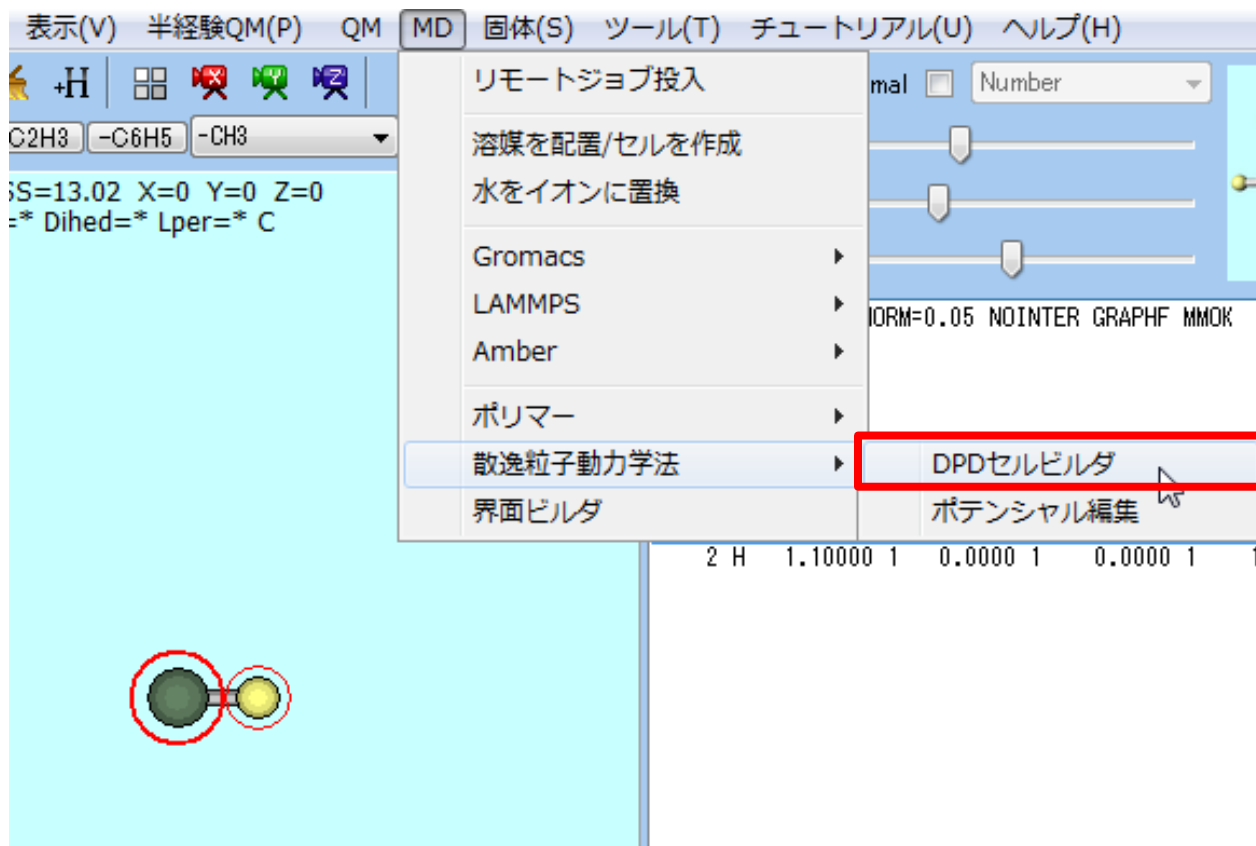
**LAMMPS-ICMS Windows Installer Repository**

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\_HOARD (requires external library) P2YTHON (requires to bundle a full Python runtime), USER\_GAMMMA (only useful when linking to a GM software), USER\_DJLIE (requires external library), SEAS (supported by the USER\_SEASG package which is included). The **serial** executable additionally does not contain the USER\_IBM and USER\_IBM64 packages. Please contact JPC@temple.edu when you get questions about installing it.



# 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 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 and highlighted in blue.
- Monomers Used:** A list showing the current composition: A x 3 and B x 3.
- Buttons:** There are '>> Add >>' buttons between the 'Monomers Available' and 'Monomers Used' sections, and '<< Delete <<' buttons between the 'Monomers Used' and 'Polymers' sections. A 'Clear' button is located at the bottom of the 'Monomers Used' section.
- Input Fields:** A '# of Monomers' input field is located between the 'Monomers Available' and 'Monomers Used' sections, containing the value '3'. A '# of Polymers' input field is located between the 'Monomers Used' and 'Polymers' sections.
- Callout:** An orange callout box points 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

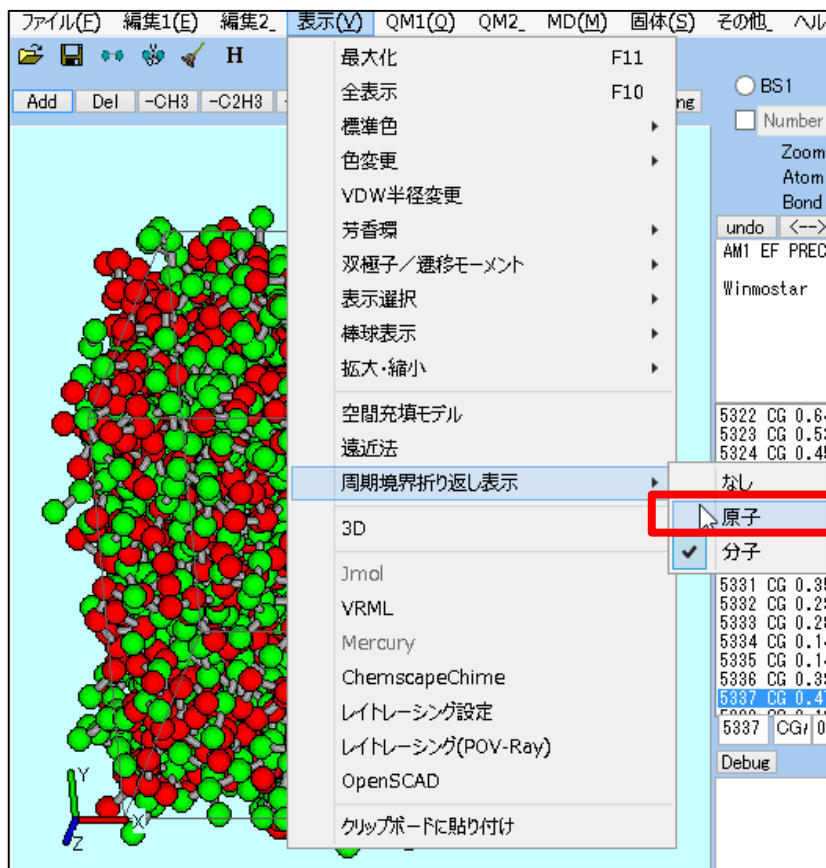
Close

# I. 初期座標の作成

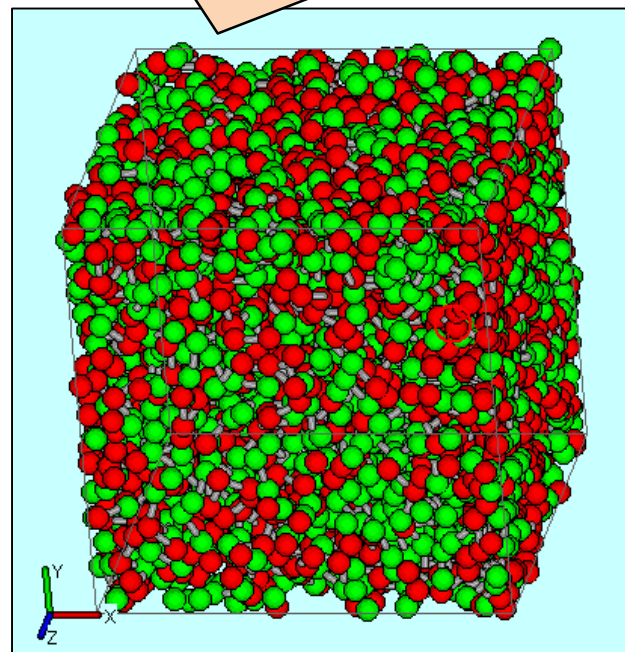
「Density」に「5」(単位は無次元)を入力して「Build」を押す。その後「Close」を押す。

# 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。



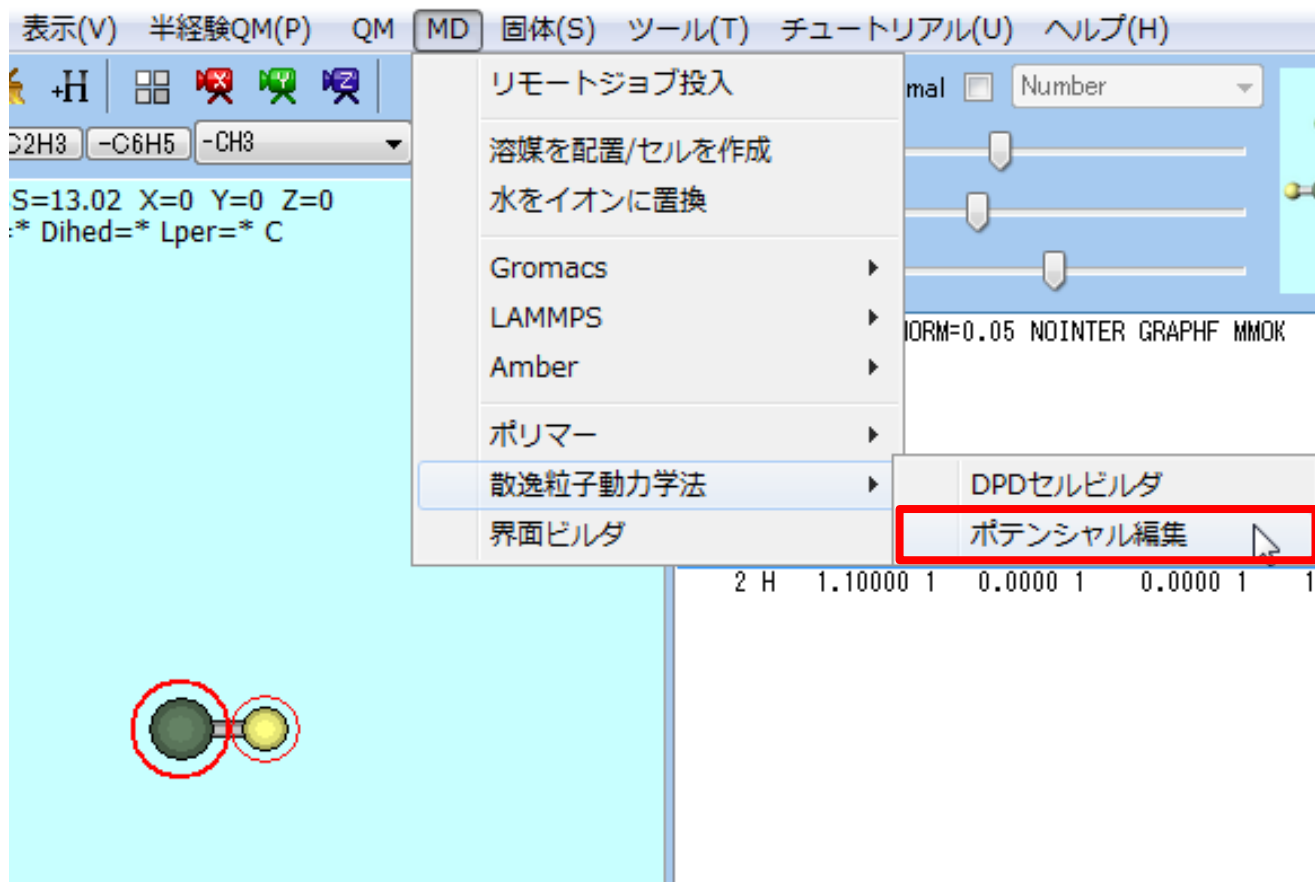
周期境界をまたいだ粒子が  
折り返されて表示される





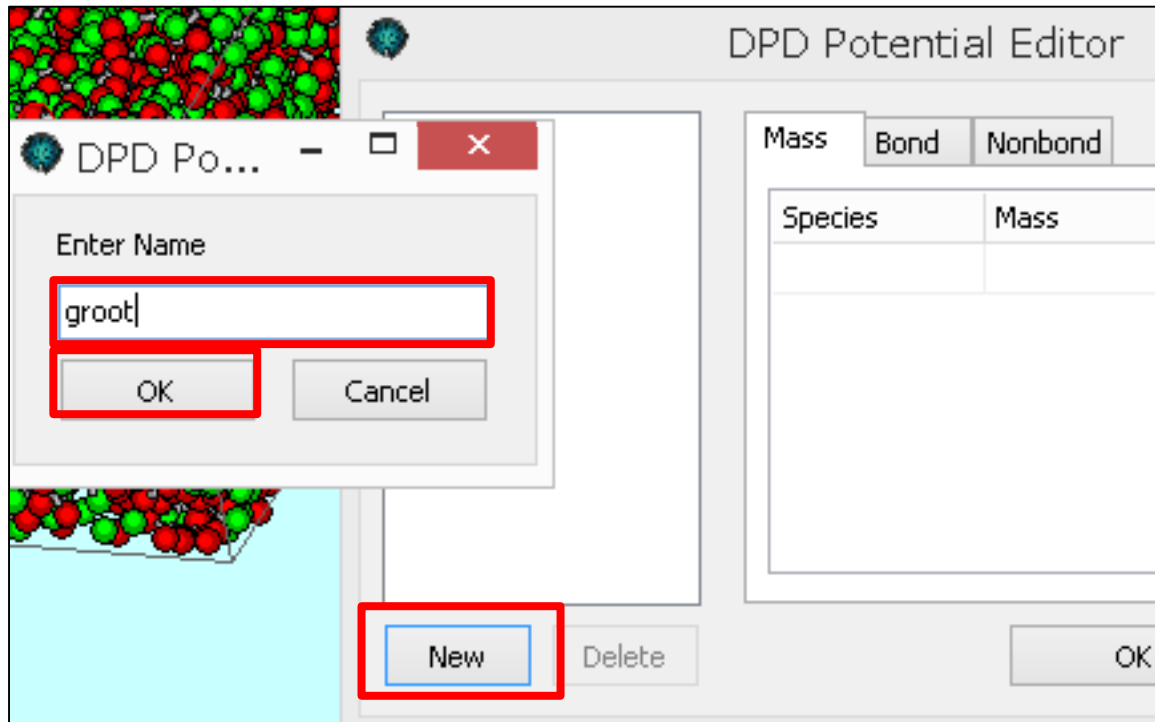
## II. ポテンシャルの設定

「MD>散逸粒子動力学>ポテンシャル編集」を選択し、DPD 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。

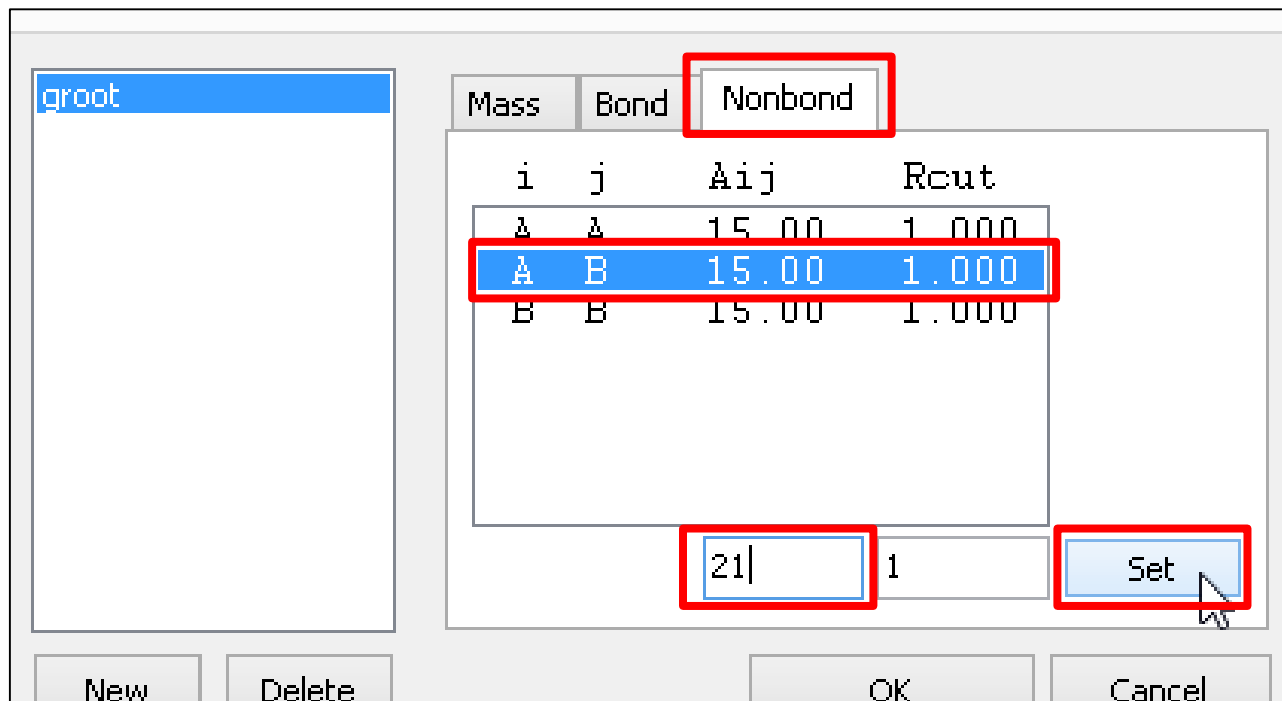


## II. ポテンシャルの設定

「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。

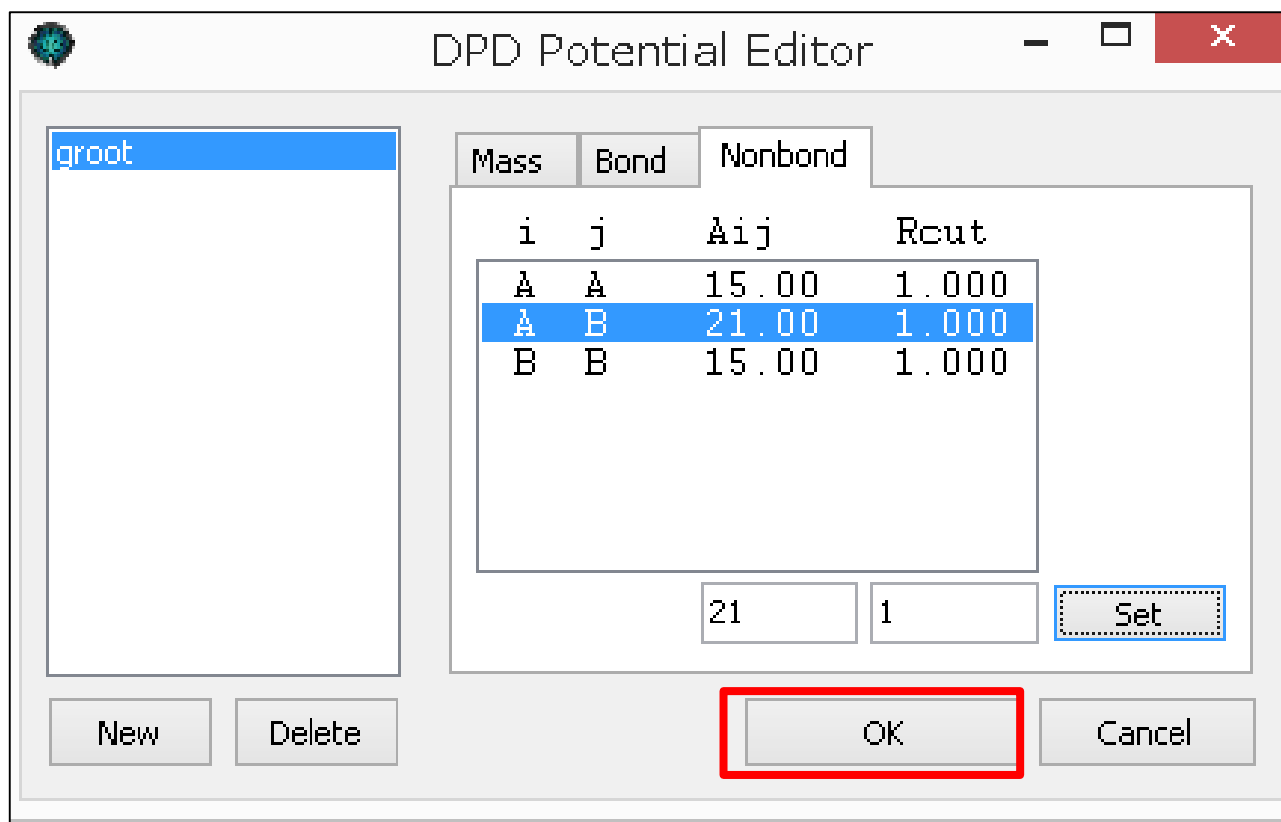
(Aij、Rcutともに単位は無次元)

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・ $\chi$ ・DPDパラメータの算出」の方法がある。



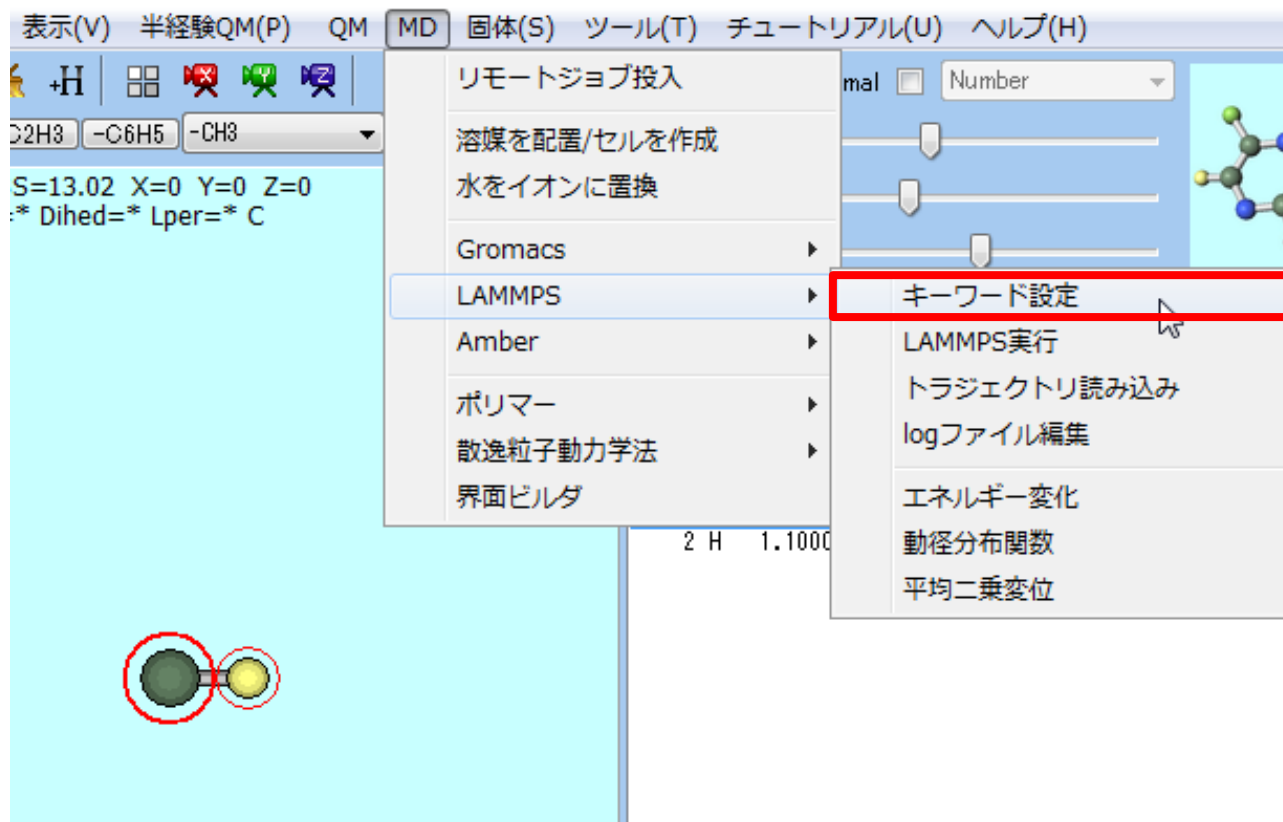
## II. ポテンシャルの設定

「OK」ボタンを押し、Potential Editorを終了する。



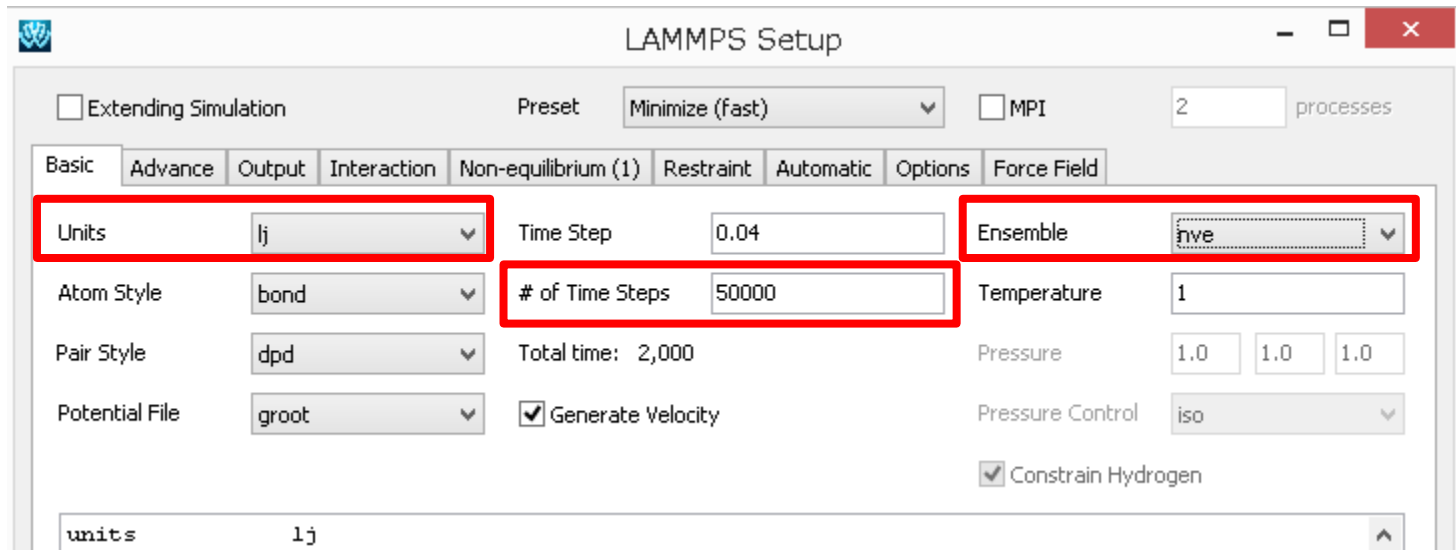
# III. LAMMPSの設定

「MD>LAMMPS>キーワード設定」を選択する。



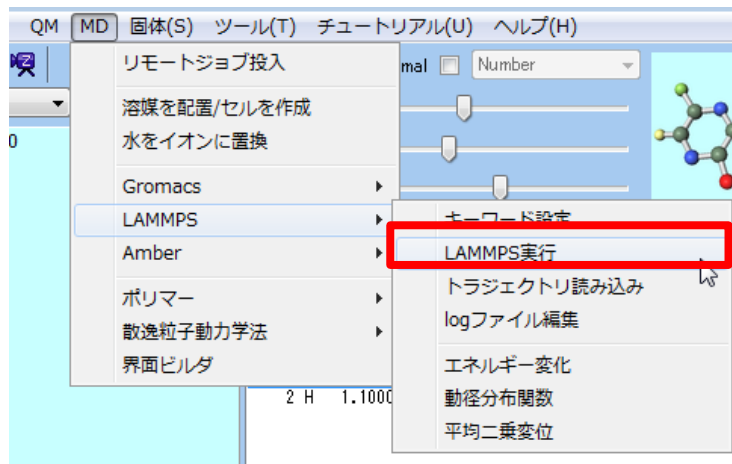
## III. LAMMPSの設定

- 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)

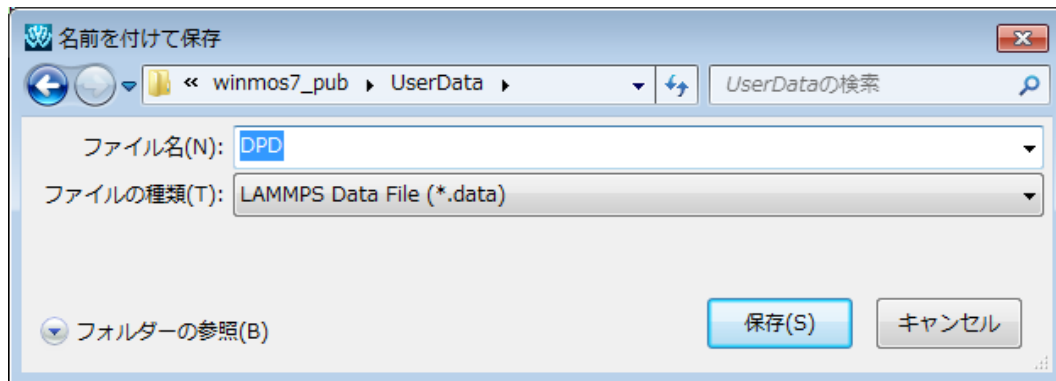


## IV. LAMMPSの実行

「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 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」.

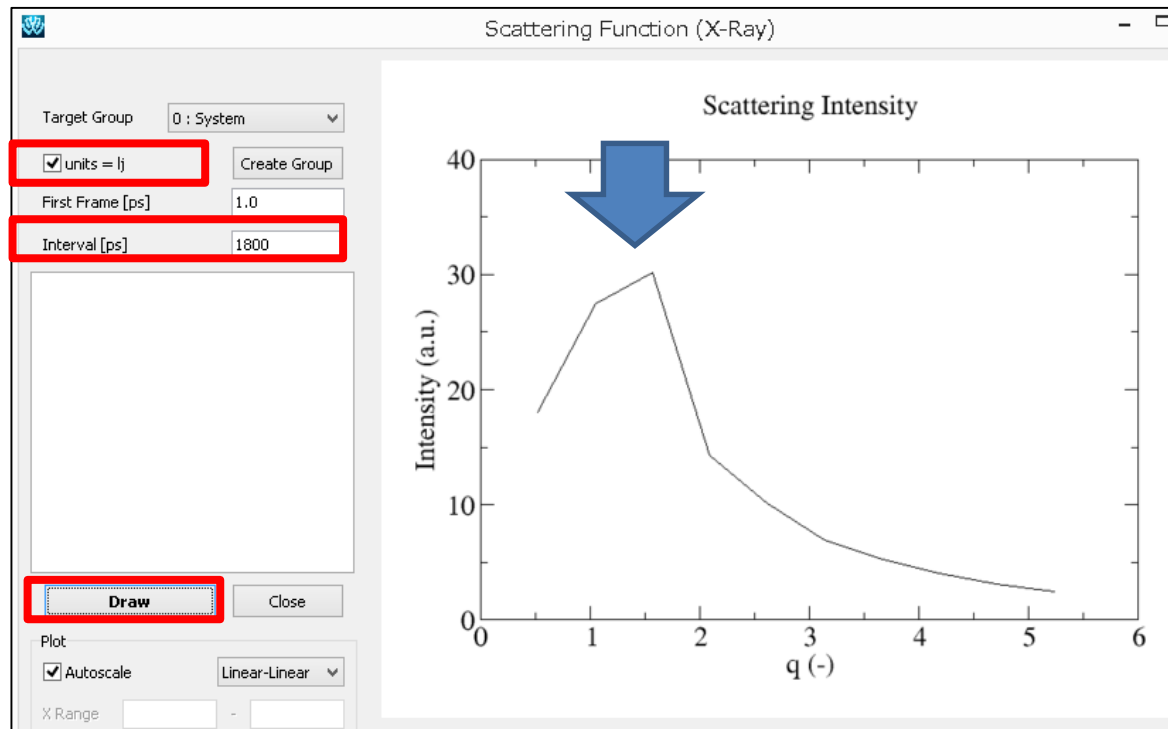
On the right side of the interface, there is a data table with the following content:

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



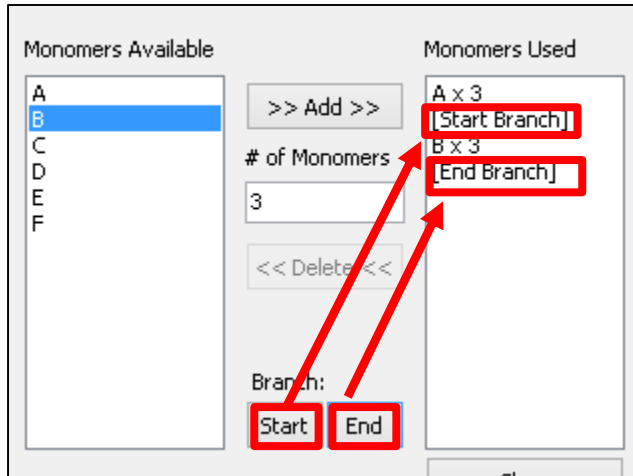
## V. 結果の表示

「MD>LAMMPS>散乱関数」にてデフォルトで選択されたファイルを開く。  
「units = lj」にチェックを入れ、「First Frame」に「1800」と入力し「Draw」ボタンを押すと、散乱関数が表示される。ピークが、波数 $q=1 \sim 2$ 、すなわち、長さ $l=6.42 \sim 3.14$ 程度 ( $l = 2\pi/q$ ) のところに現れていて、これは実際に出現したラメラ構造の繰り返し単位に一致する。

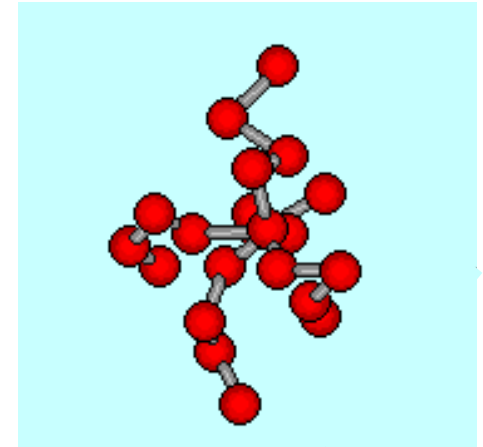
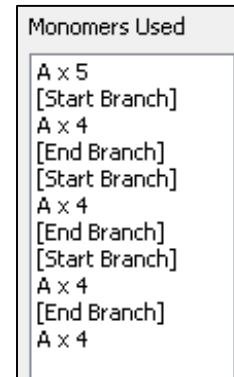


# 補足1: 分岐の作成

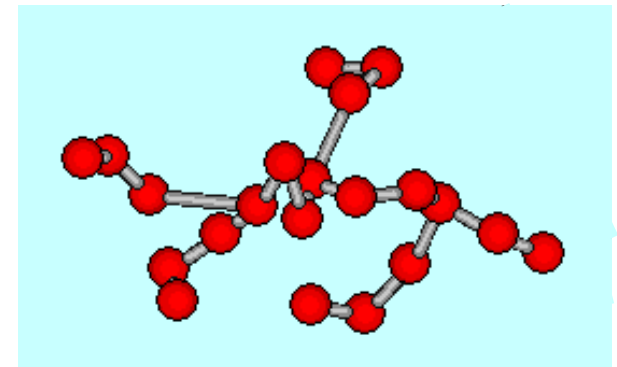
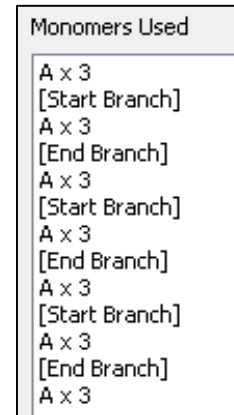
[Start]および[End]により分子に分岐(Branch)を導入できる。



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。

