

Winmostar チュートリアル

LAMMPS

伸長計算(ポリマー)

V8.000

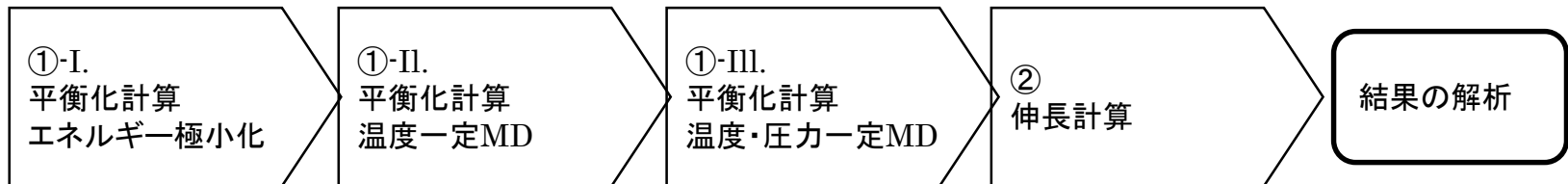
株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2017/10/01

概要

- ポリエチレン溶融体の伸長過程を計算し、ひずみ-応力の取得を行います。処理のフローを以下に示します。温度・圧力一定MDは、平衡化に掛かるステップ数を短縮するために、一旦高圧(200 atm)に制御した後常圧に戻します。



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。
- 重合度(鎖長)、分子数、伸長速度、圧力制御(ポアソン比)も結果に影響を与えます。
- チュートリアルという性質上、ここではポリマー系の平衡化に十分なステップ数の計算を実施しません。

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>

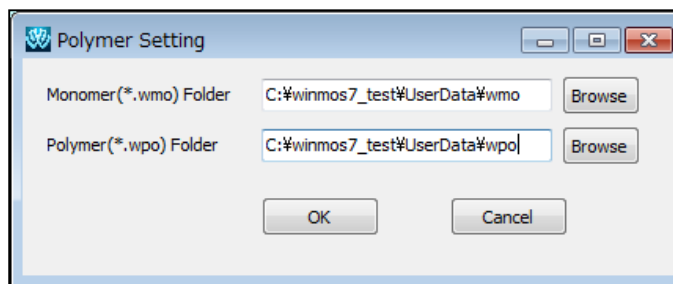
インストール先の OS に応じて [32-bit Windows download area] もしくは [64-bit Windows download area] をクリックする。

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 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_USMD (requires external library) EXHIBIT (requires to bundle a full Python runtime), USER_MMM (only useful when linking to a GM software), USER_SJUE (requires external library), SGA (supported by the USER_SGA package which is included). The **serial** executable additionally does not contain the MPI and USER MPI packages. More from version 4.0.1.1, functions, which are not available without external libraries.

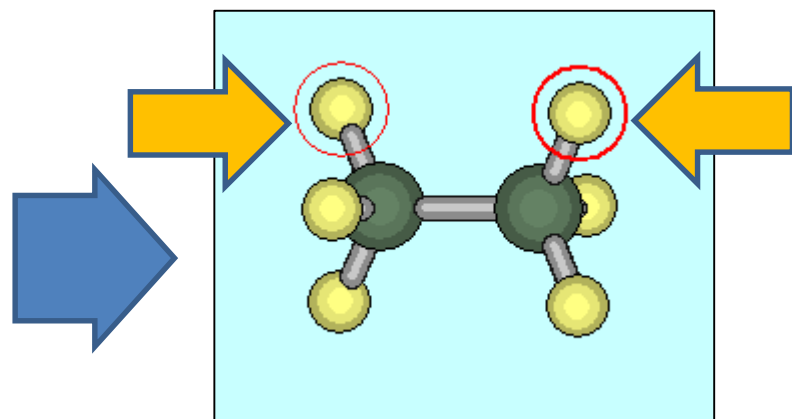
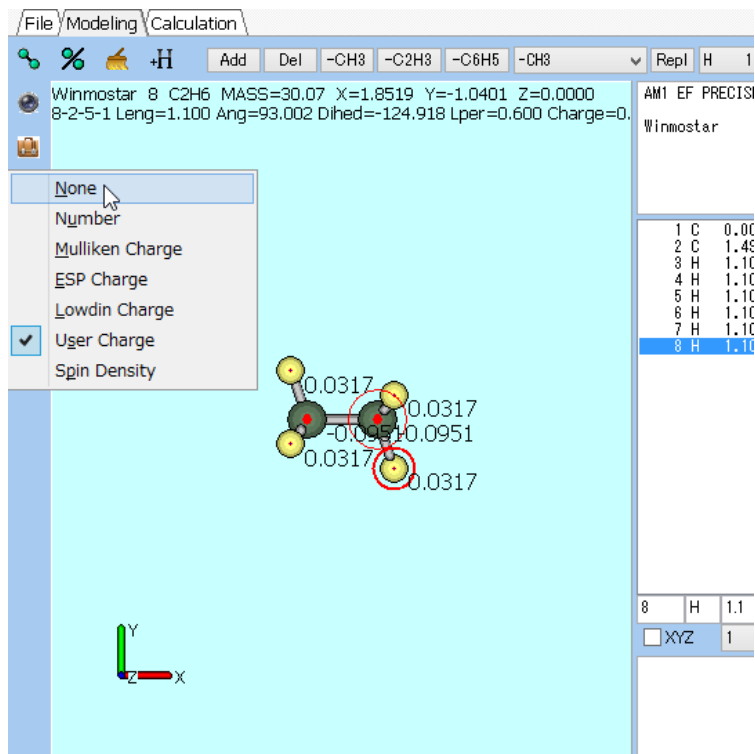


- ポリマーツールの設定
[MD]->[ポリマー]->[設定](下図)で、必要に応じてモノマーファイル(拡張子.wmo)とポリマーファイル(拡張子.wpo)の格納フォルダを指定する。



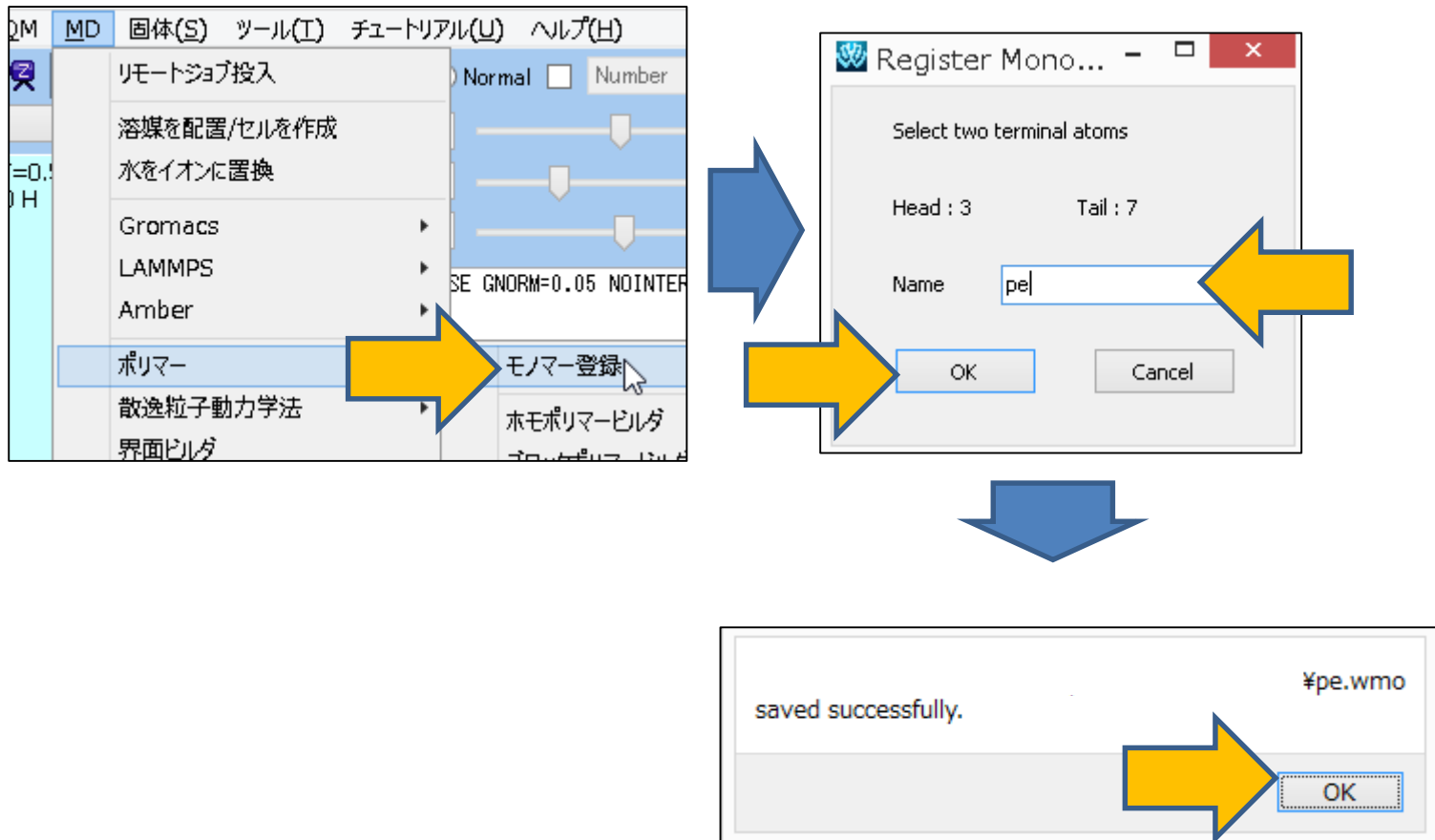
I. モノマーを登録

まず、ポリエチレンの繰り返し構造(エタン、 C_2H_6)をメイン画面上で作成する。
次に、[MD] - [電荷割り当て] - [Acptypeを使用]とする。
電荷を非表示にしたい場合はメイン画面左のアノテーションボタンで「None」を選ぶ。
最後に、重合した際に隣のモノマーと結合する2箇所を続けて左クリックする。



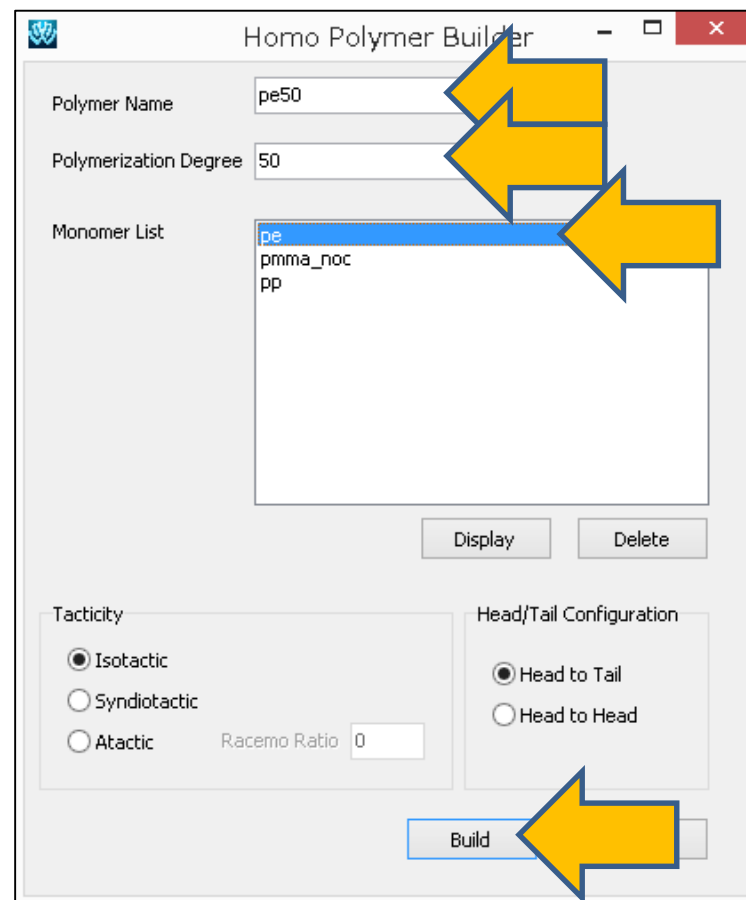
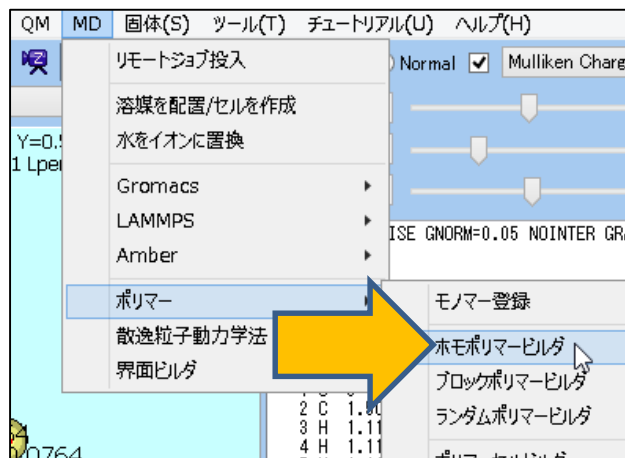
1. モノマーを登録

[MD]-[ポリマー]-[モノマー登録]にて、「Name」に「pe」と入力し「OK」とする。
登録が成功した旨を伝えるダイアログが出現するので「OK」とする。



II. ポリマーを定義

[MD]-[ポリマー]-[ホモポリマービルダ]にて、「Polymer Name」に「pe50」、
「Polymerization Degree」に「50」、「Monomer List」で「pe」を選択し、「Build」し、
「Close」する。



III. 系を作成

[MD]-[ポリマー]-[ポリマーセルビルダ]にて、「Polymers Available」から「pe50」を選択し、「Number」を「20」とし「Add」する。その後「Build」する。
保存時のファイル名は仮に「pe_elong.mol2」とする。

The image shows a software interface with a menu on the left and a 'Polymer Cell Builder' dialog box on the right. The menu path is: MD -> ポリマー -> ポリマーセルビルダ. The dialog box has the following sections:

- Box Configuration:**
 - Density [g/cm³]: 0.5
 - X-Axis Length [Å]: 45.3556
 - Y-Axis Length [Å]: 45.3556
 - Z-Axis Length [Å]: 45.3556 (Selected)
 - Periodic Boundary Condition: X, Y, Z (all checked)
 - Cubic Cell
- Polymers Available:**
 - pe50 (Selected)
 - pmma_noc10
 - pp15
 - pp20
 - pp30
- Polymers Used:**

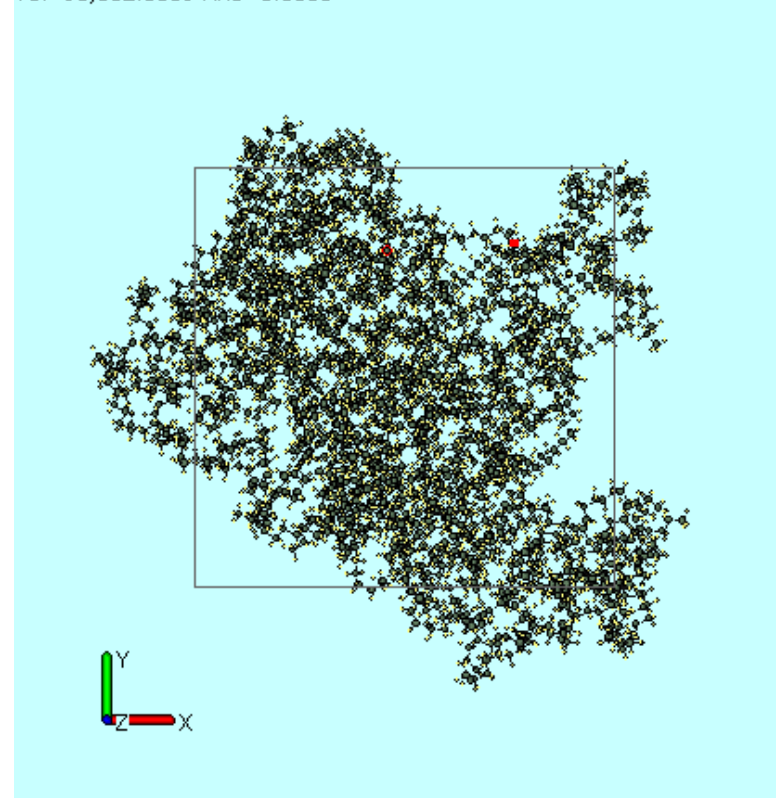
Name	Number
pe50	20
- Buttons:** >> Add >>, << Delete <<, Display, Delete, Build, Close
- MPI:** MPI processes 1

III. 系を作成

作成が成功したことを告げるダイアログを閉るとメイン画面に系が表示される。
ポリマーセルビルダは「Close」する。

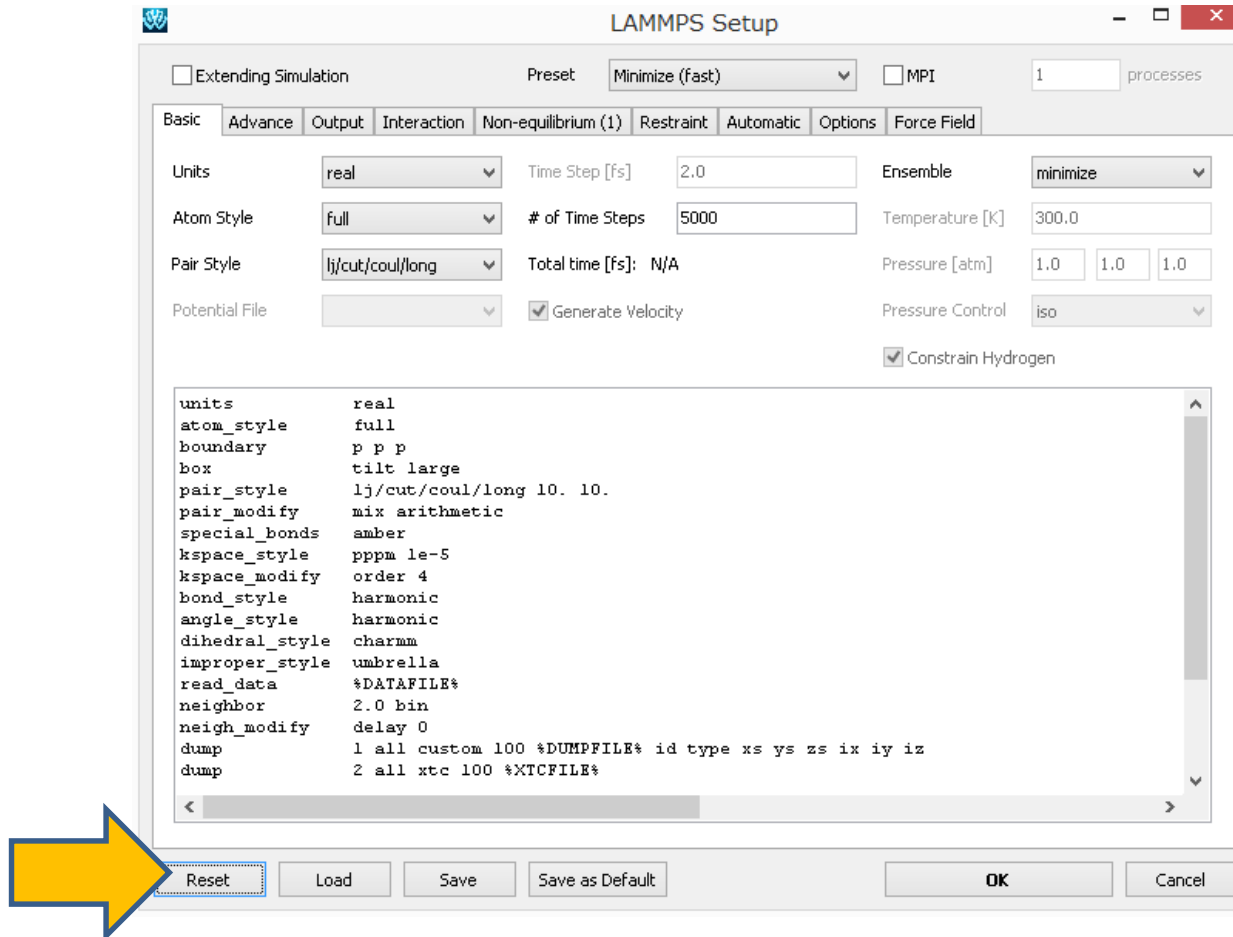


Polymer 6,040 C2000H4040 MASS=28,094.08 X=34.5864 Y=37.0875
6040-1-6039-7 Leng=29.339 Ang=3.443 Dihed=153.745 Lper=0.402 Cha
Vol=93,302.3859 Rho=0.5000



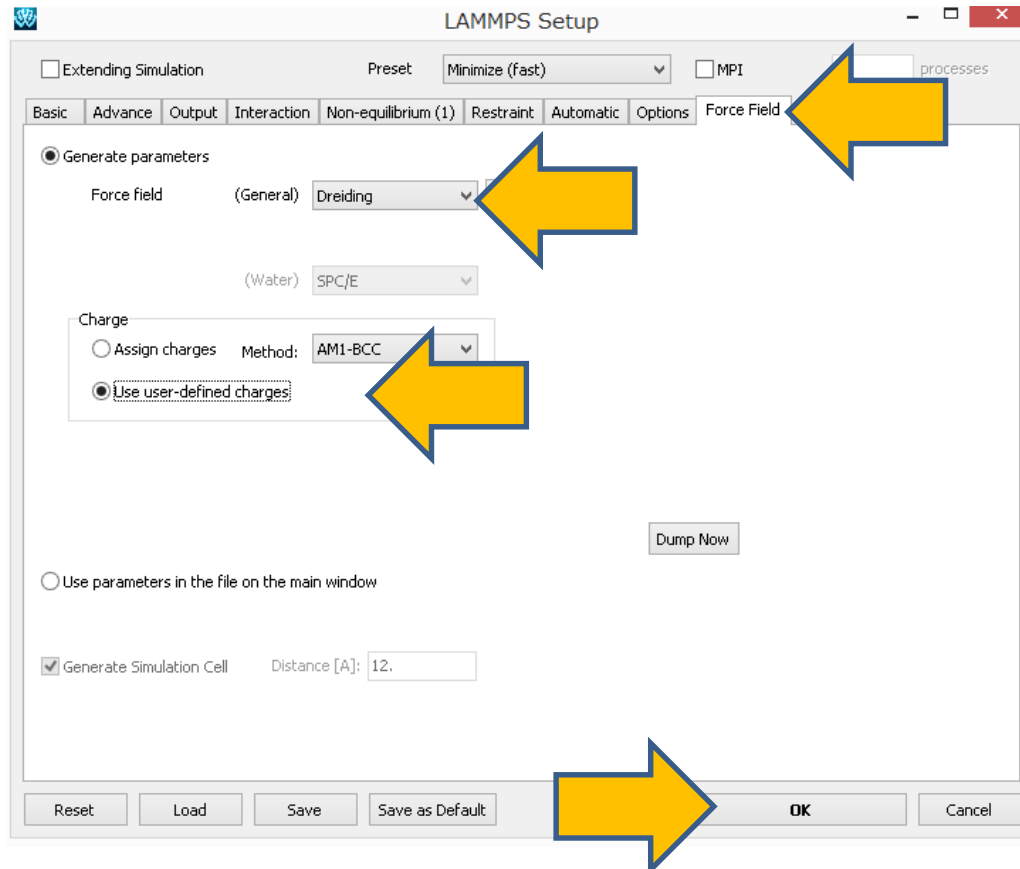
IV. 平衡化計算

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Reset」をクリックする。



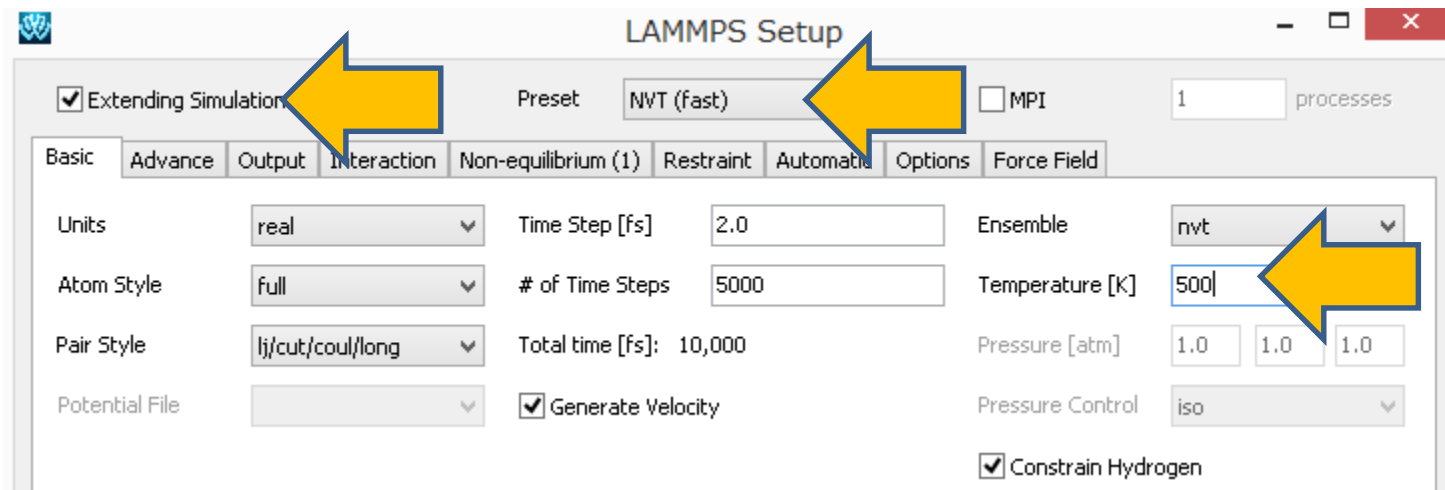
IV. 平衡化計算

「Force Field」タブを選択し、「Force Field」に「Dreiding」、「Charge」に「Use user-defined charges」を選択し、「OK」する。
その後、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]とする。



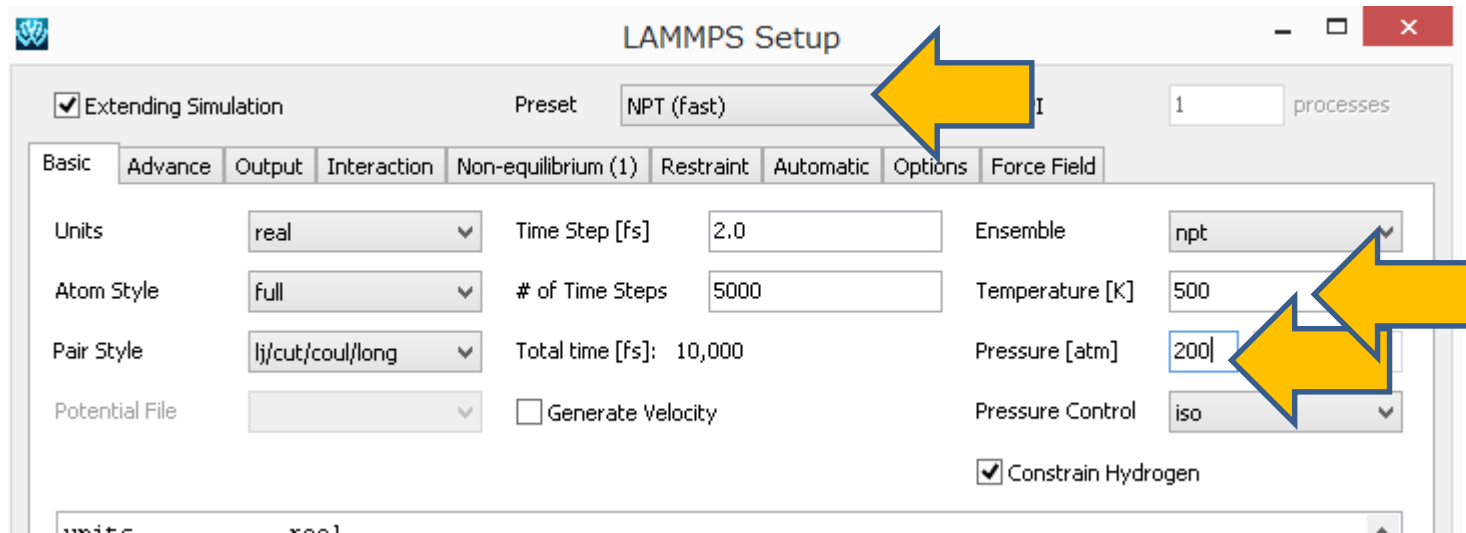
IV. 平衡化計算

計算終了後、同様に[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Extending Simulation」にチェックを入れ、「Preset」に「NVT (fast)」を指定し、「Temperature」は「500」に変更し「OK」する。その後、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]とする。



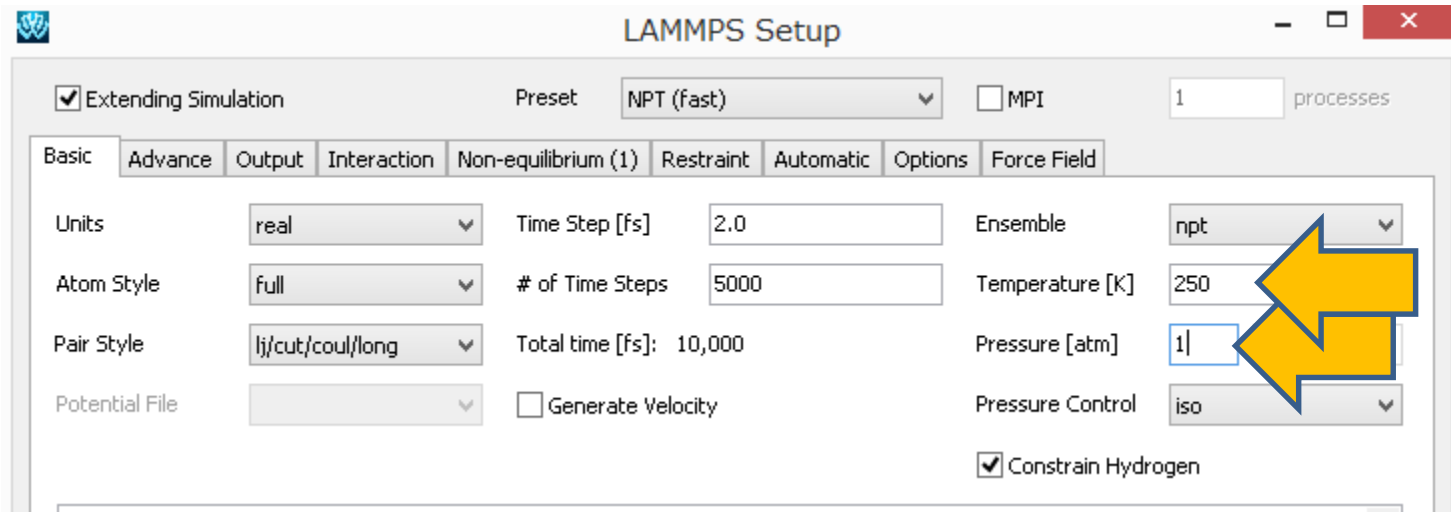
IV. 平衡化計算

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Preset」に「NPT (fast)」に設定し、「Temperature」を「500」、「Pressure」を「200」に変更し、「OK」する。
その後、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]とする。



IV. 平衡化計算

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Basic」タブの「Temperature」を「250」、「Pressure」を「1」とし、「OK」する。
その後、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]とする。



V. 伸長計算

次に、ひずみ-応力 (S-S) 曲線算出を目的として、伸長計算を行う。

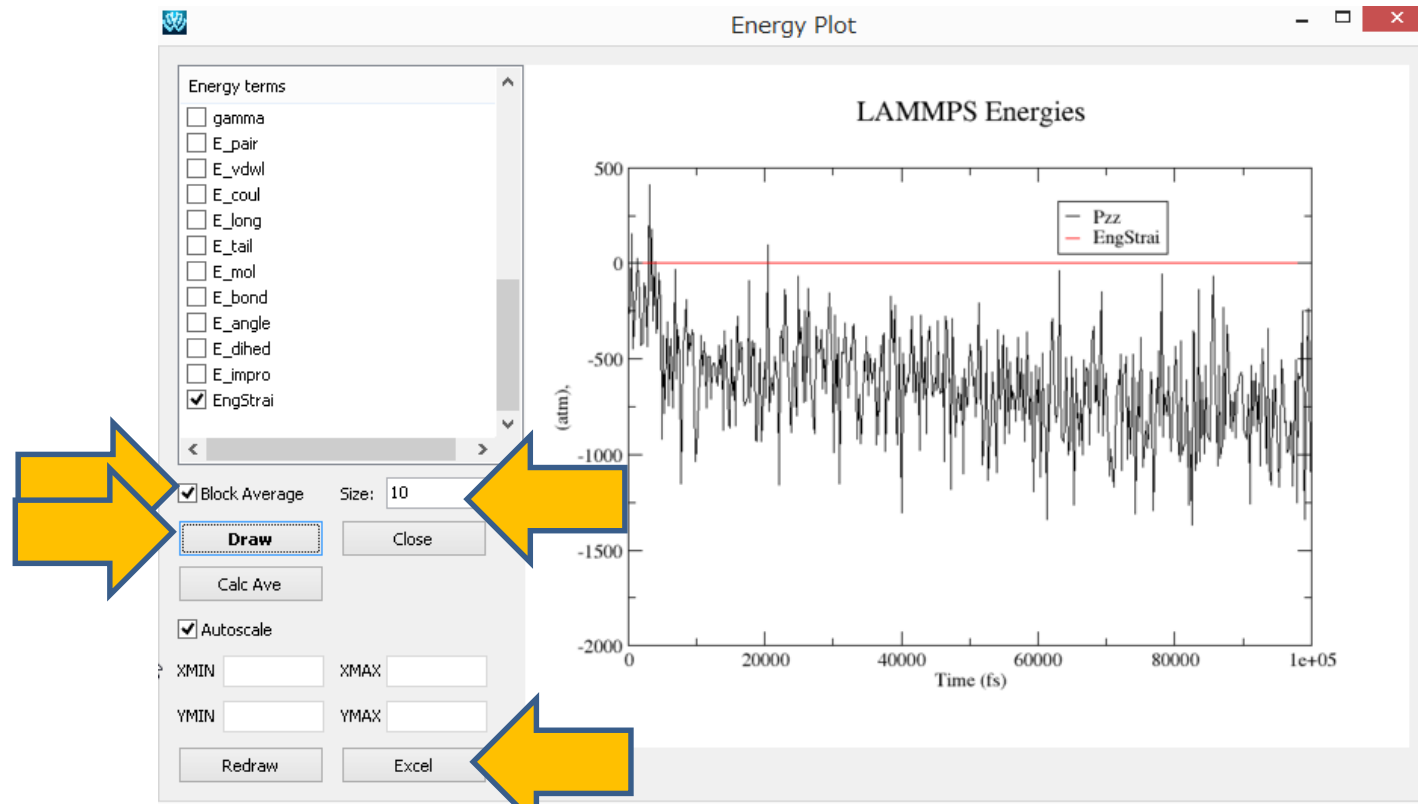
[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Basic」タブの「# of Time Steps」を「50000」、「Pressure Control」を「xy」とし、「Non-equilibrium (1)」タブの「Enable Elongation」にチェックを入れ、「Eng. Strain Rate」を「1e-5」にし、「OK」する。その後、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]とする。

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

- Extending Simulation:** (checked)
- Preset:** NPT (fast)
- MPI:** (checked), 2 processes
- Basic Tab:**
 - Units: real
 - Atom Style: full
 - Pair Style: lj/cut/coul/long
 - Potential File: (empty)
 - Time Step [fs]: 2.0
 - # of Time Steps: 50000
 - Total time [fs]: 100,000
 - Generate Velocity: (unchecked)
 - Ensemble: npt
 - Temperature [K]: 250
 - Pressure [atm]: 1 1 1
 - Pressure Control: xy
 - Constrain Hydrogen: (checked)
- Non-equilibrium (1) Tab:**
 - Enable Elongation: (checked)
 - Affine Transformation: (checked)
 - Eng. Strain Rate [1/fs]: 1e-5
 - Max Eng. Strain: 1.000
 - Preserve Volume: (unchecked)

V. 伸長計算

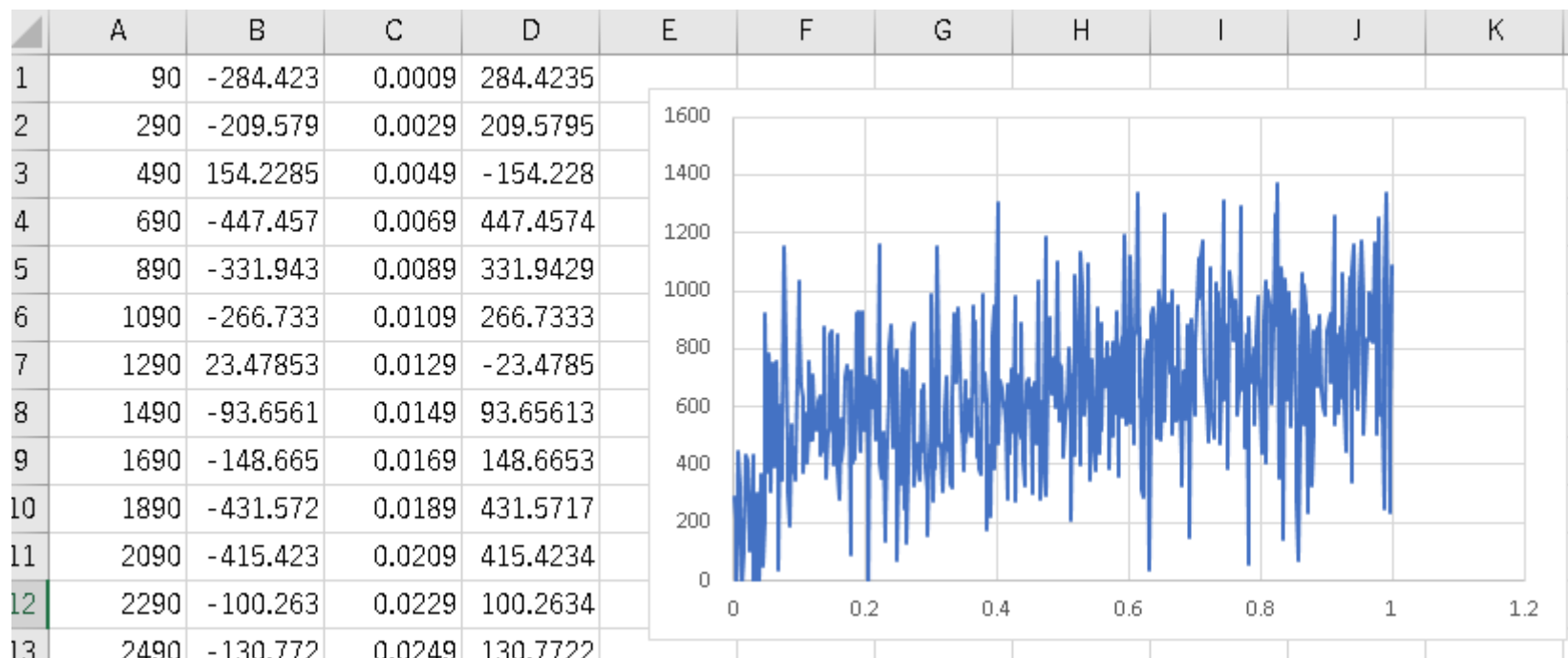
計算終了後、[MD]-[LAMMPS]-[エネルギー変化]にて、デフォルトで選ばれるファイルを選び、「Energy terms」にて「Pzz」(z方向の圧力)、「EngStrai」(工業ひずみ)にチェックを入れ、「Block Average」にチェックを入れ「Size」を「10」とし、「Draw」をクリックした後「Excel」を押す。



V. 伸長計算

3列目と, 2列目に-1を掛けた列(ここではD列)をプロットする。これはひずみ-応力曲線(S-S曲線)に相当する。

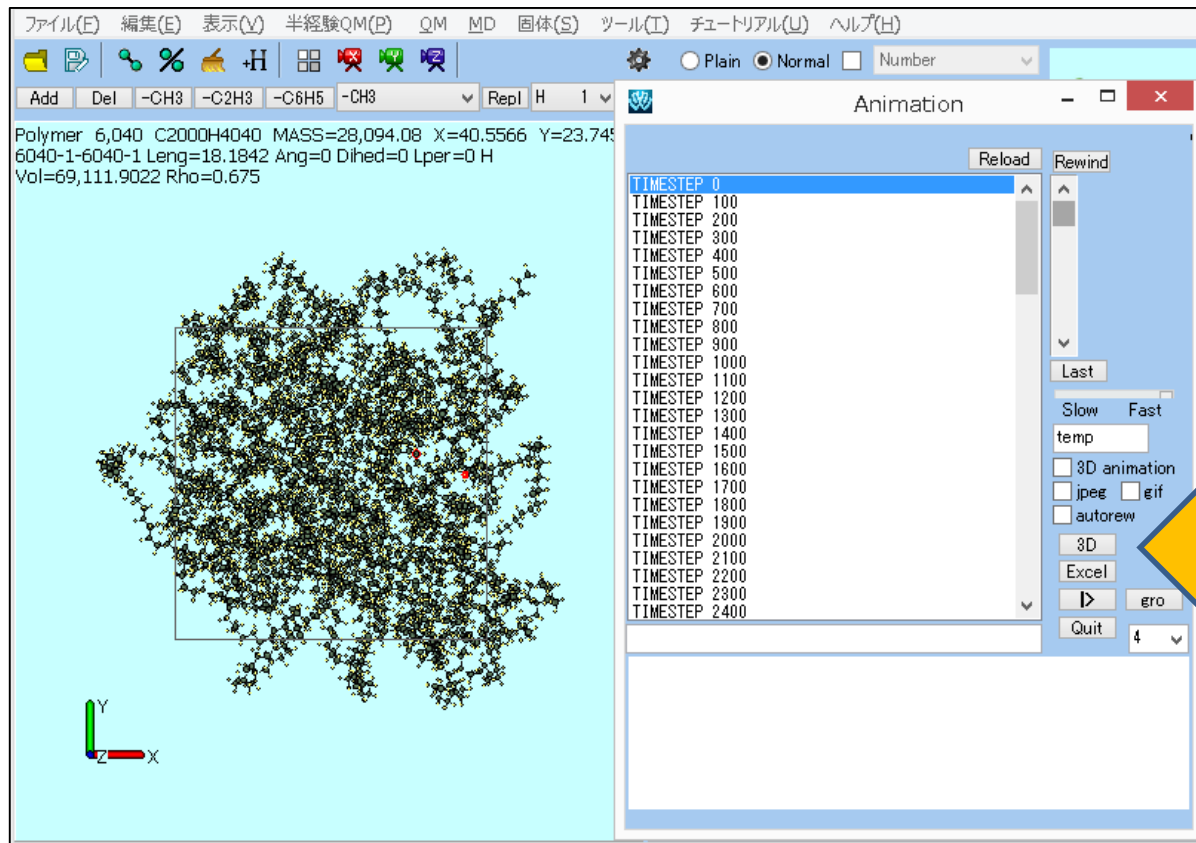
(ここでは縦軸の下限は0としてプロットした)



参考文献: Hossain, D., Tschopp, M.A., Ward, D.K., Bouvard, J.L., Wang, P., Horstemeyer, M.F., Polymer, 51 (2010) 6071-6083.

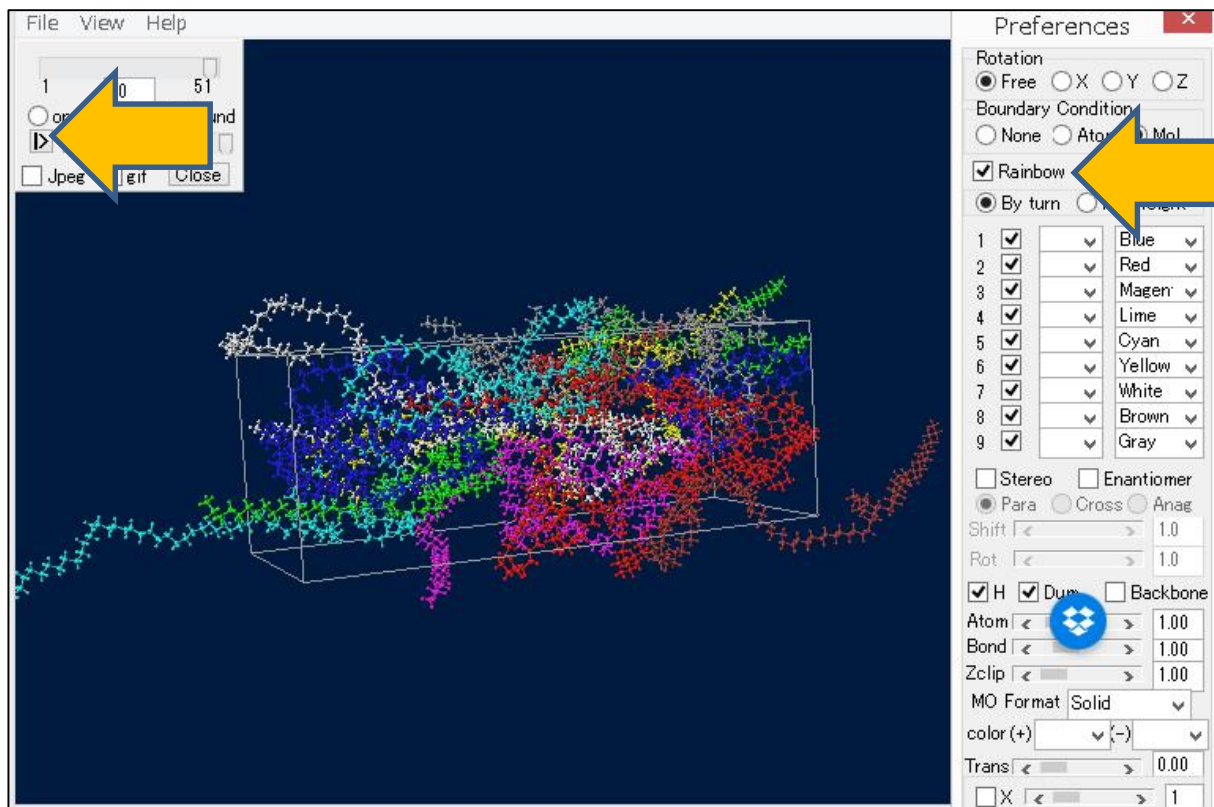
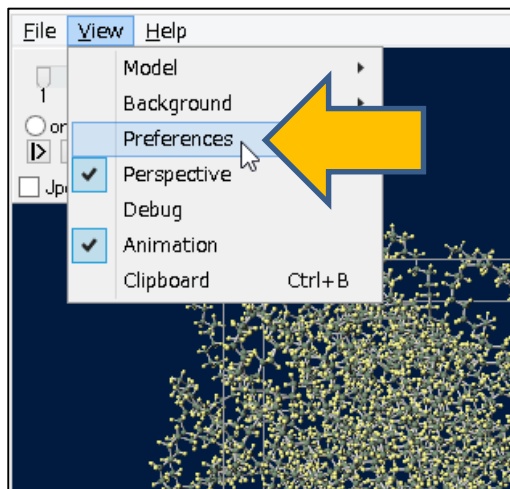
V. 伸長計算

Winmostarに戻り[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ファイルを開く。そして、「Animation」ウインドウの「3D」をクリックする。



V. 伸長計算

起動したWinmostar 3Dの[View]-[Preferences]を選び、「Preferences」パネルにて「Rainbow」をチェックする。画面左の「|>」(再生)ボタンを押し、ポリマーが引き伸ばされる様子を観察する。



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!