

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

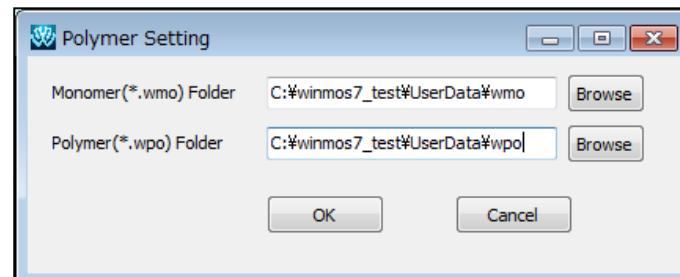
- 本チュートリアルでは、常温常圧の水の熱伝導率をGreen-Kubo式で計算する方法を紹介します。ここでは目標の温度・圧力でNVEアンサンブルの計算を実行する平衡化手順(以下)を適用します。
 - エネルギー最小化 : 座標重なり除去
 - NVT一定 : 粒子速度の平衡化
 - NPT一定 : 密度の平衡化
 - NPT一定 : 平均密度算出→系を平均密度にスケーリング
 - エネルギー最小化 : 座標重なり除去
 - NVT一定 : 粒子速度の平衡化
 - NVE一定 : 平均温度算出→系を平均温度にスケーリング
 - NVE一定 : 本計算
- ターゲットとなる物質の種類、初期密度に応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

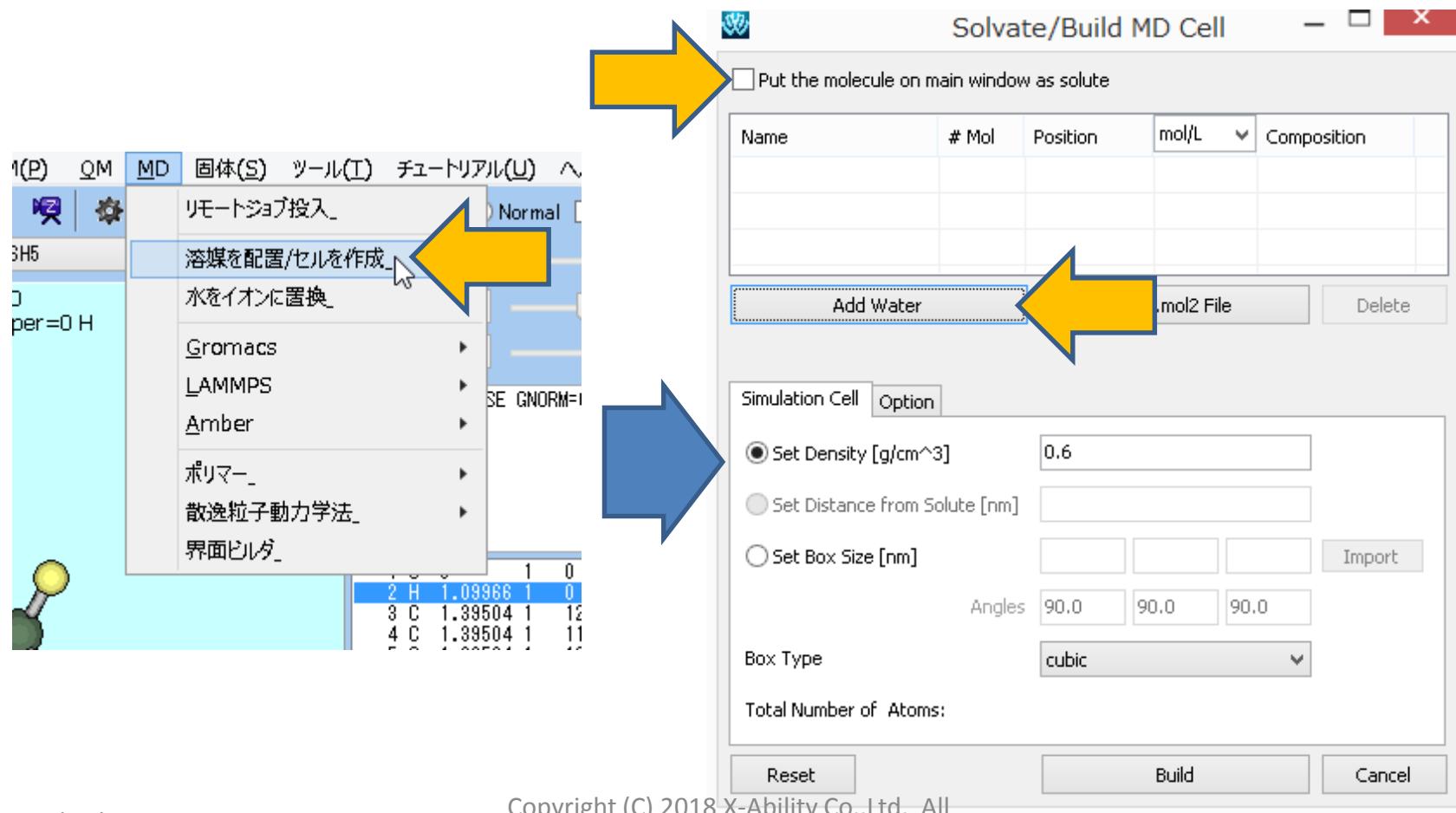


- ポリマーツールの設定
[MD]->[ポリマー]->[設定]（下図）で、必要に応じてモノマーファイル（拡張子.wmo）とポリマーファイル（拡張子.wpo）の格納フォルダを指定する。



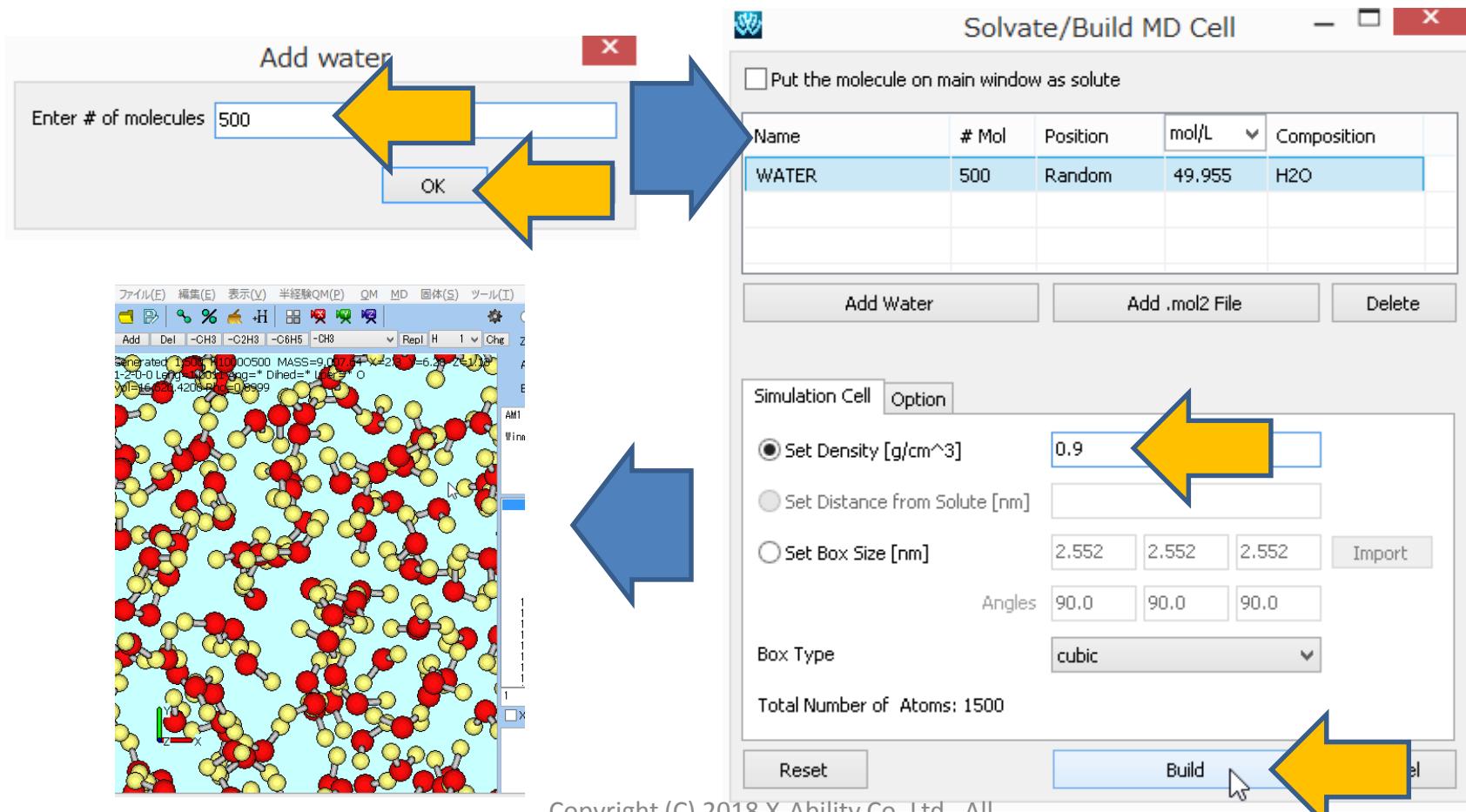
I. 系の作成

「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。



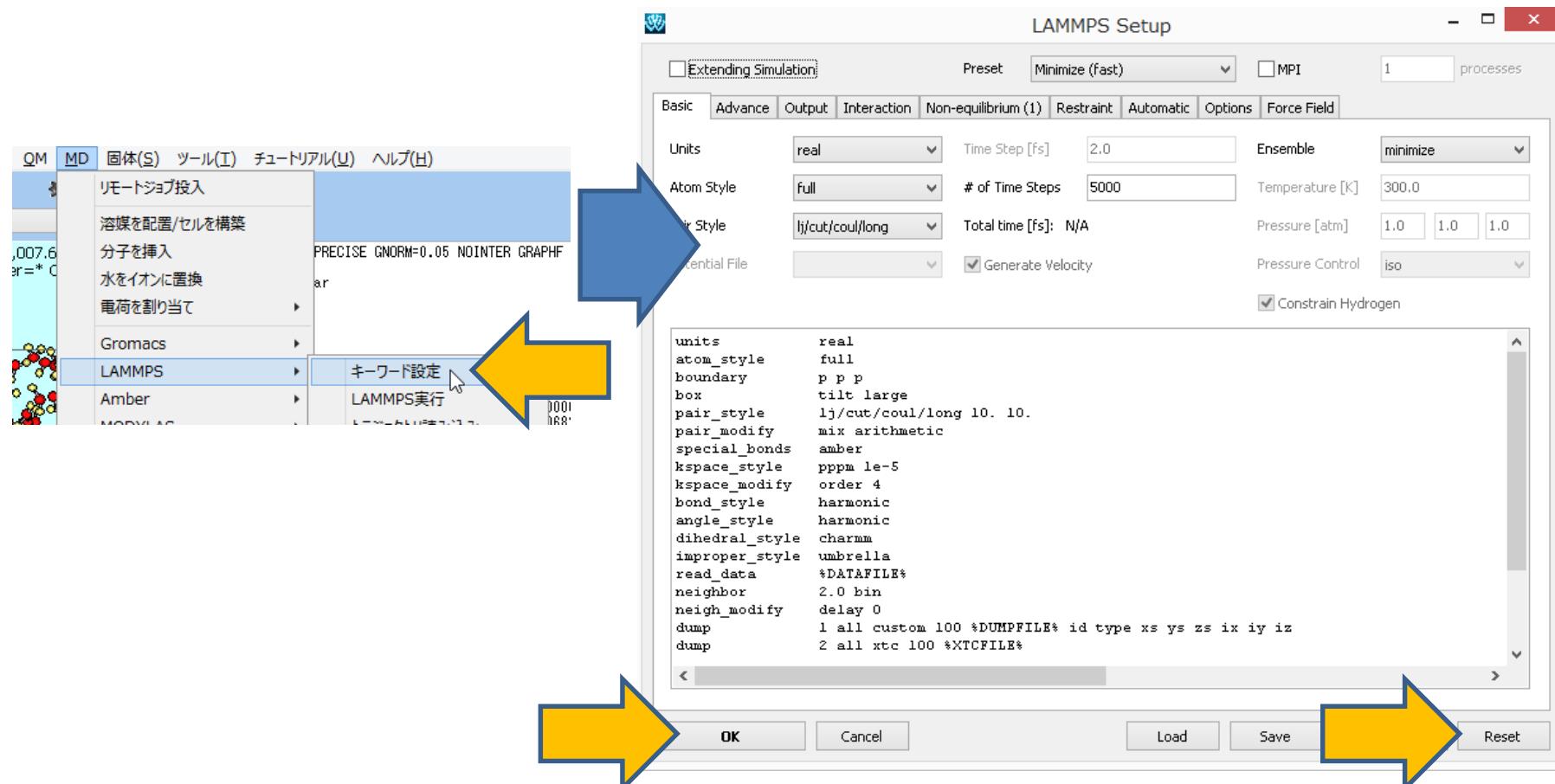
I. 系の作成

「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。



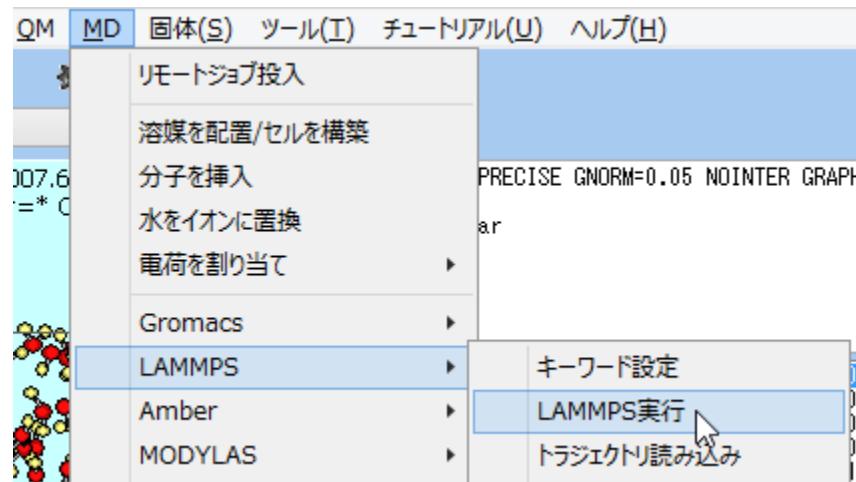
II. 系の平衡化

[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。



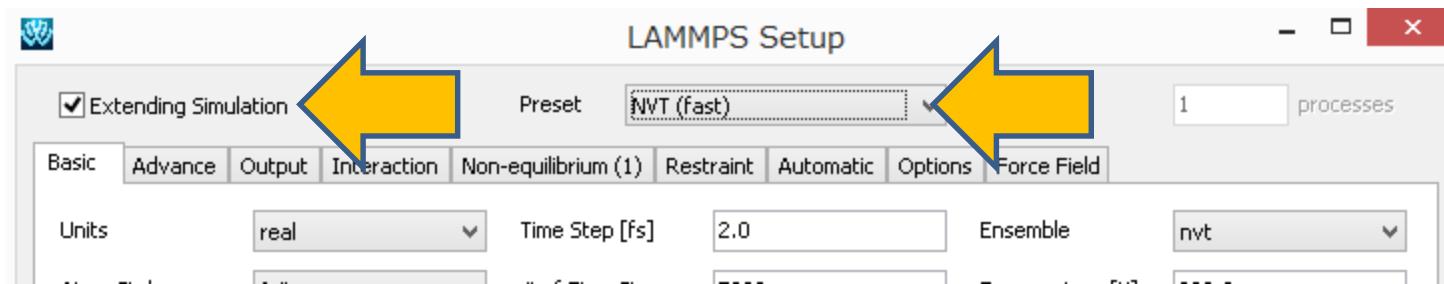
II. 系の平衡化

[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。



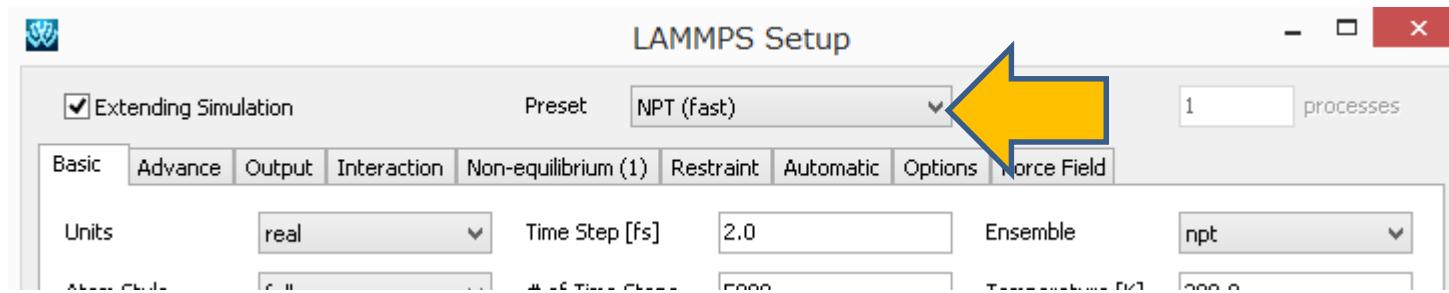
II. 系の平衡化

[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。



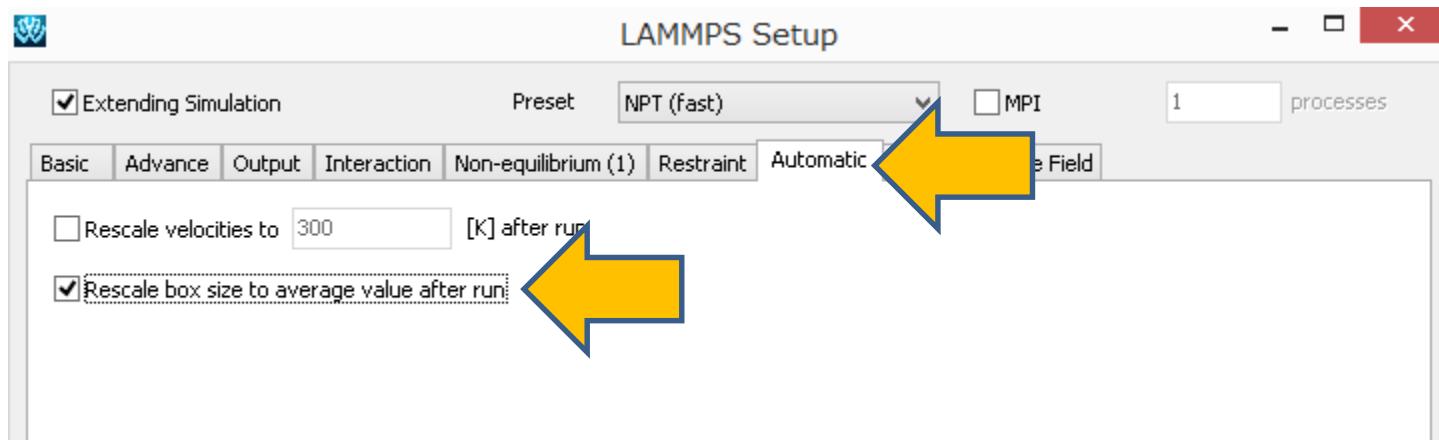
II. 系の平衡化

[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。



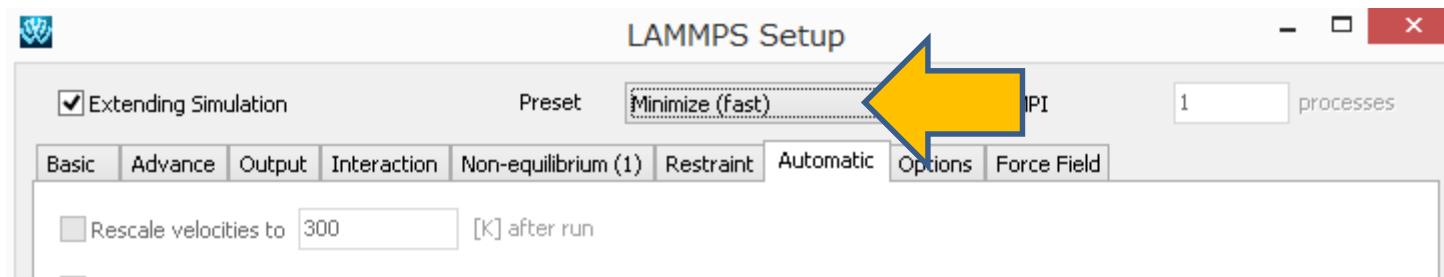
II. 系の平衡化

[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。



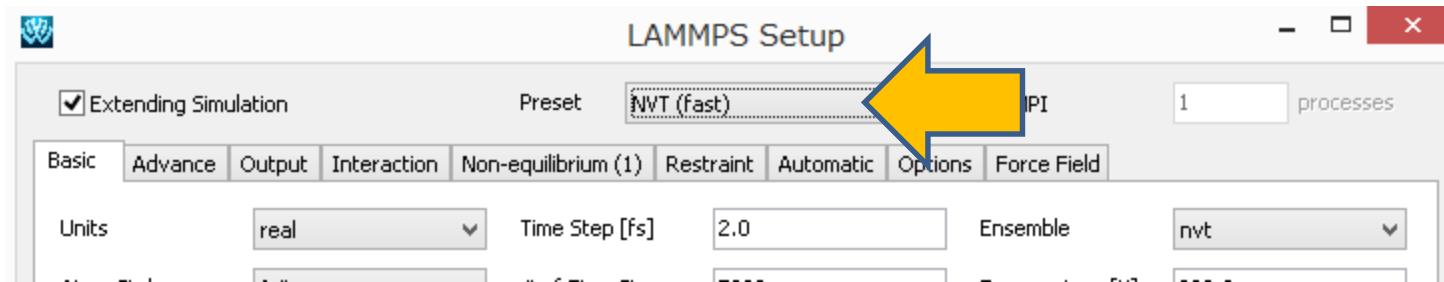
II. 系の平衡化

[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

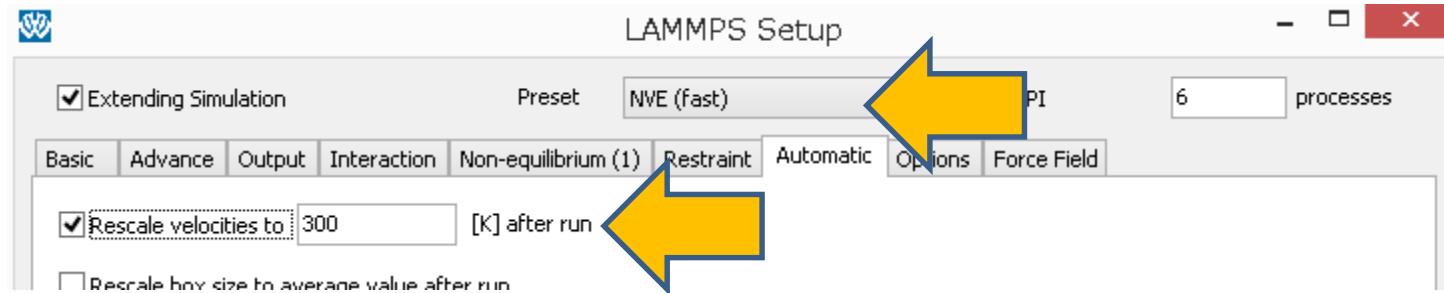
[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックし、「Preset」に「NVT (fast)」を選択し、「OK」をクリックする。
次に、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックする。



II. 系の平衡化

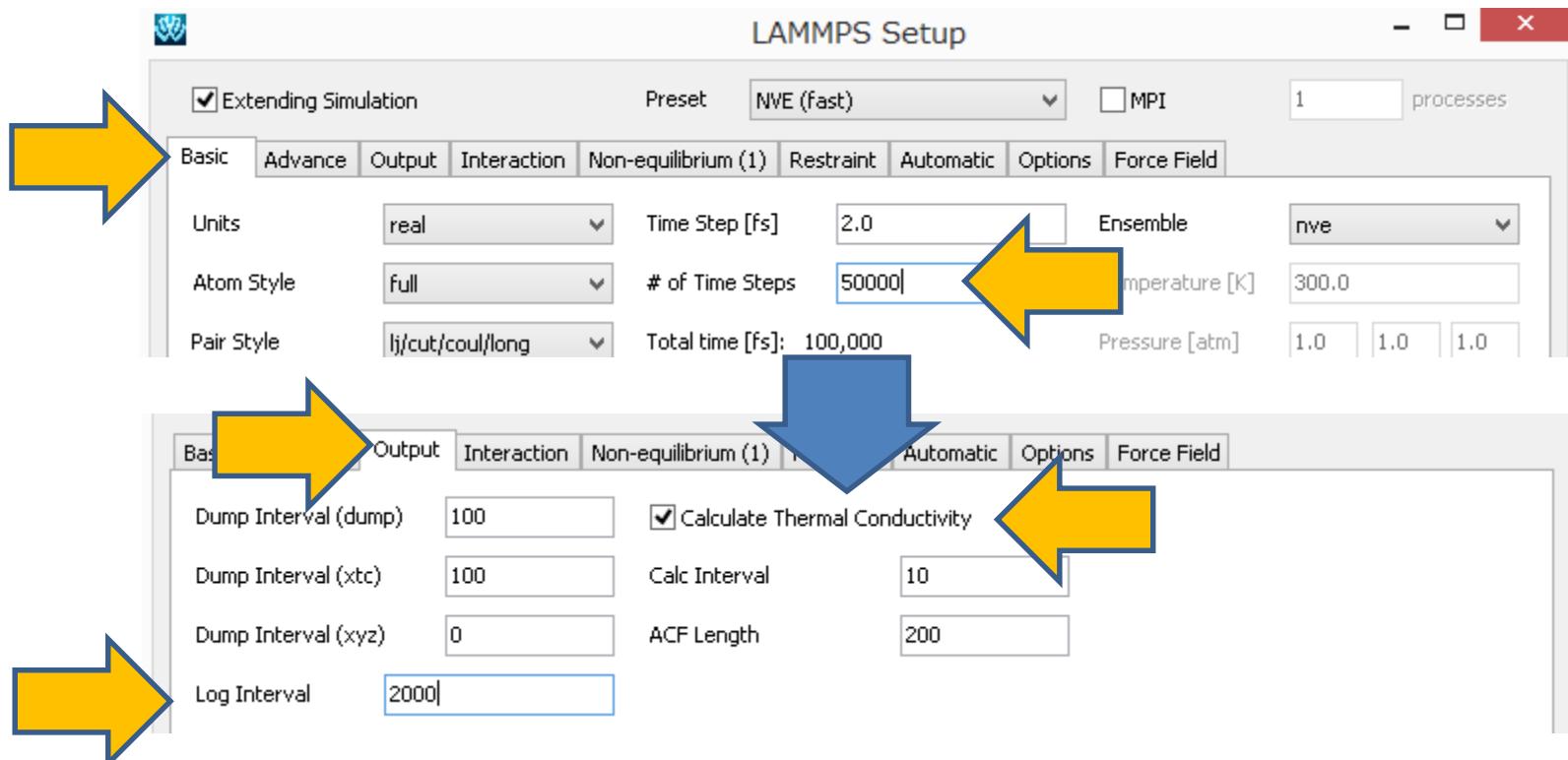
[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックし、「Preset」に「NVE (fast)」を選択し、「Automatic」タブの「Rescale velocities to...」にチェックを入れ、「OK」をクリックする。

次に、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックする。



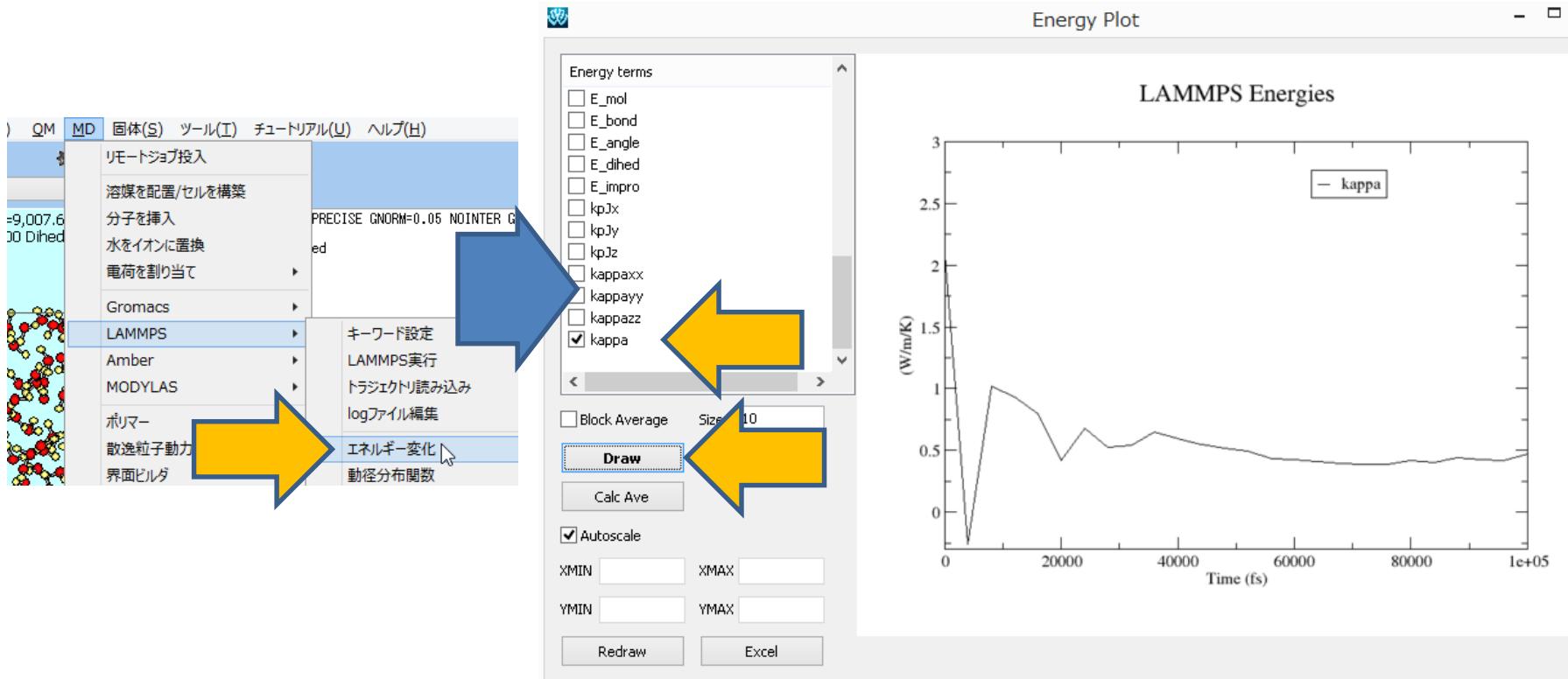
III. プロダクトラン

[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 ログイン リンク

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

いいね！

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 >

山口 達明

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...

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