

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

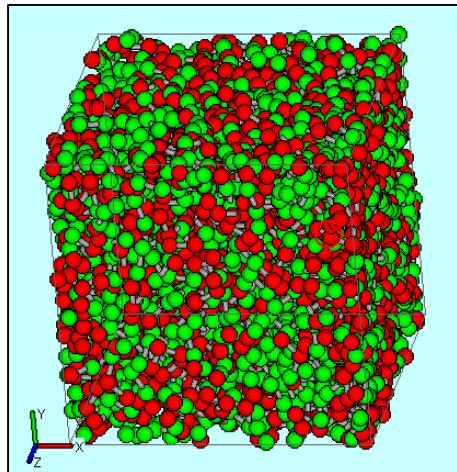
株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

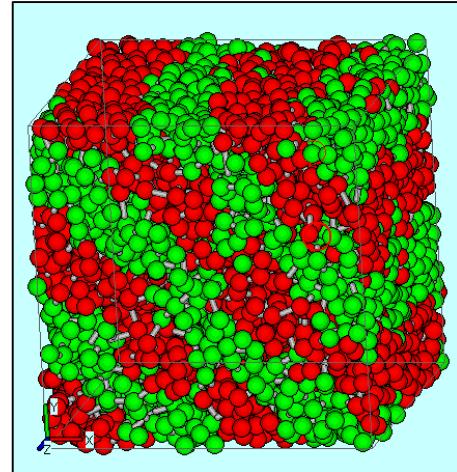
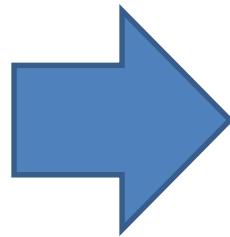
2017/10/01

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

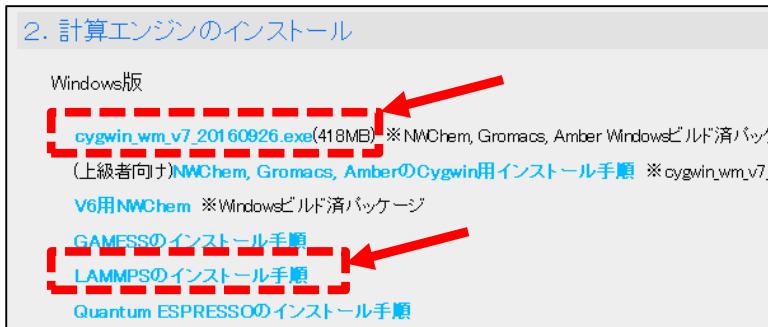


得られる構造

- ※ 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



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。

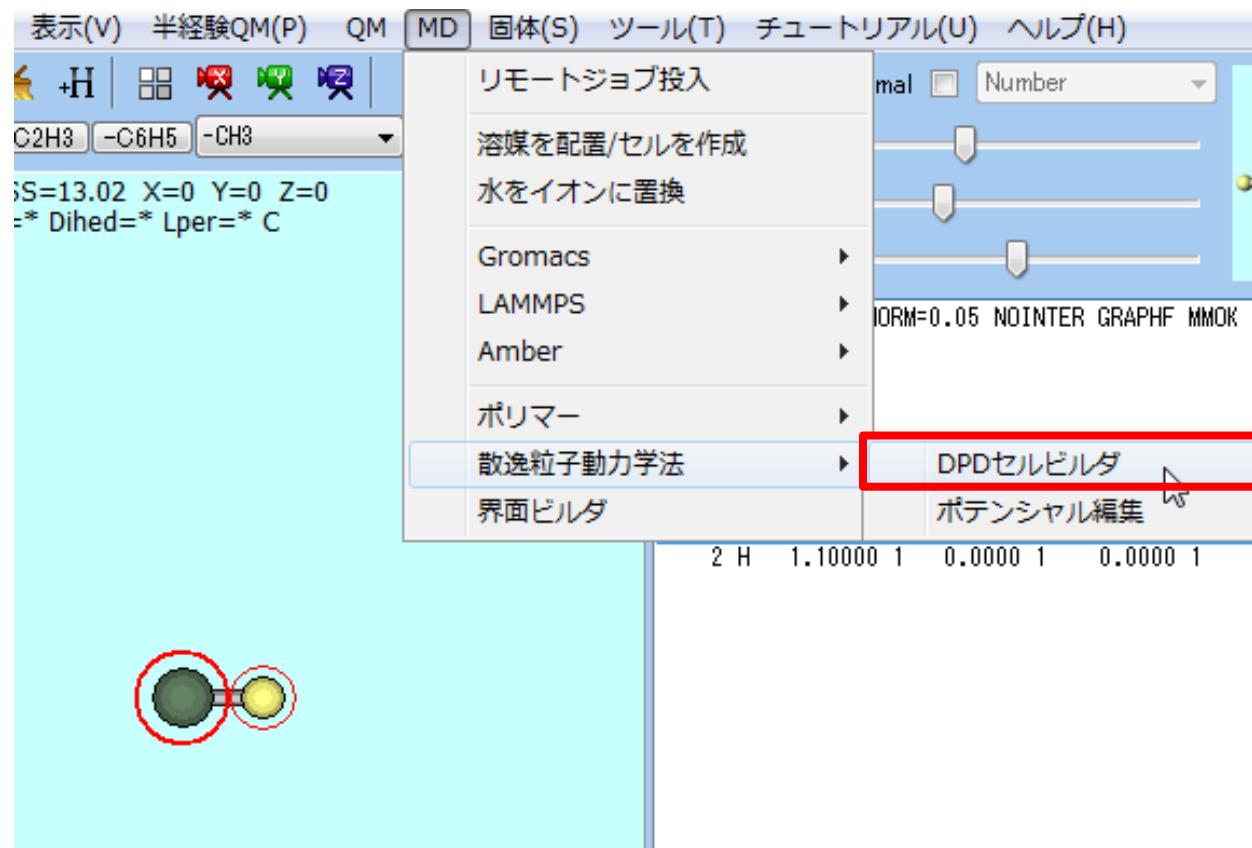
LAMMPS-ICMS Windows Installer Repository

This repository is hosting pre-compiled Windows installs of the LAMMPS molecular dynamics simulation software package. The binaries are built semi-automatical with MinGW-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 libraries required to run in the Windows environment. The LAMMPS source code contains all dependencies (GCC, CMake, MPI) and support cross compilation. KOKkos and USER-INTEL (do not support cross-compilation with GCC). USER-HMD (requires external library: PYTHON requires to bundle a full Python runtime). USER-QM (only useful when linking to a QM software). USER-QMIP (requires external library). SCM is provided by the USER-SCM package which is included. The serial executable additionally does not require the MPI and USER-INTEL dependencies. Please consult LAMMPS documentation for more information about linking to a

A screenshot of the LAMMPS-ICMS Windows Installer Repository page. It features a large 'LAMMPS' logo at the top right and a 'Windows' logo below it. The main content area displays various software packages and their versions, such as 'LAMMPS-ICMS Windows Installer' and 'LAMMPS-ICMS Windows Source'.

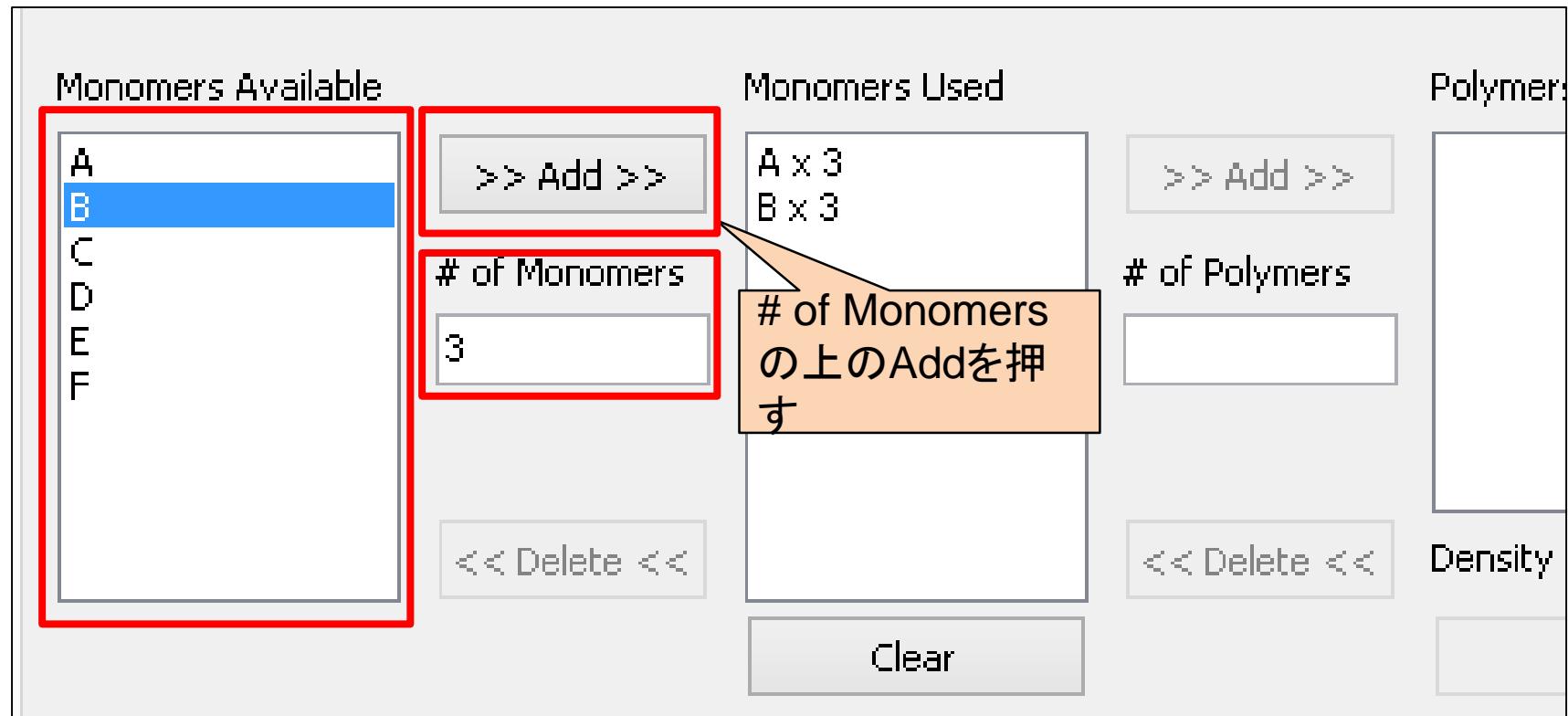
I. 初期座標の作成

「MD>散逸粒子動力学法>DPDセルビルダ」を選択する。



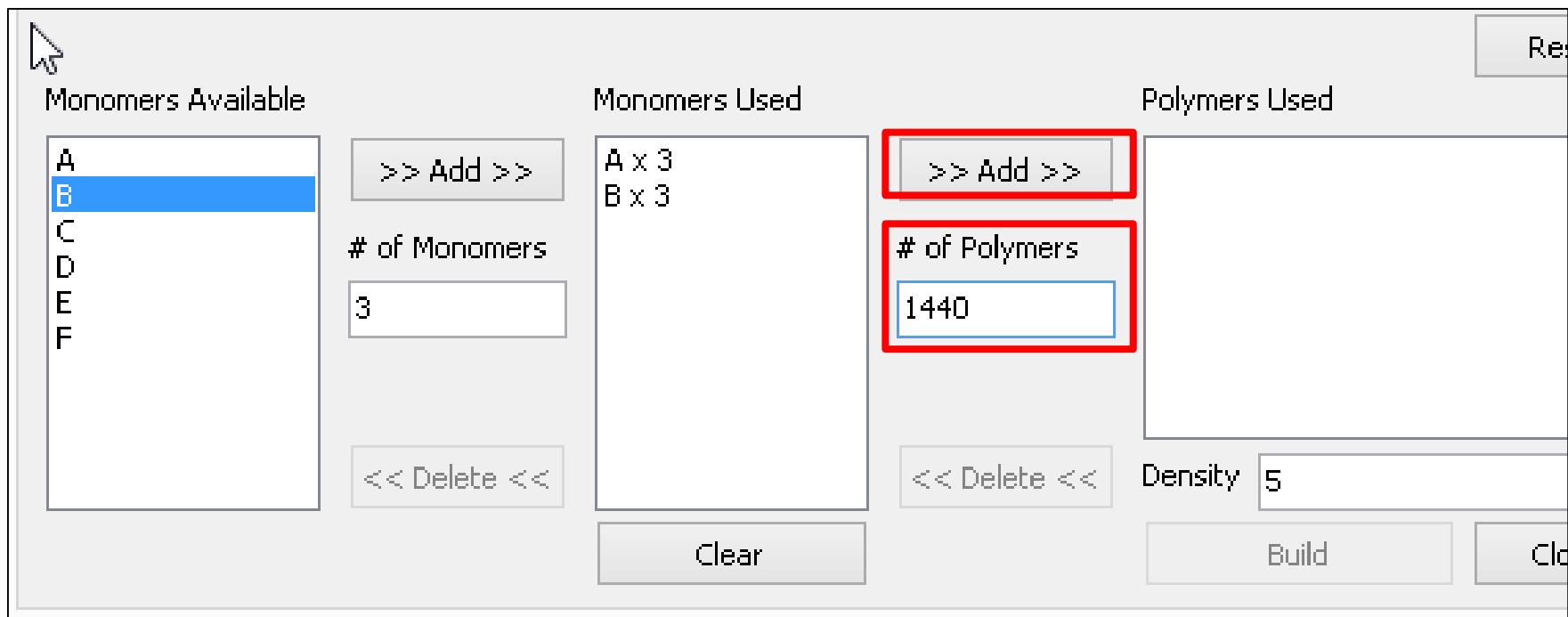
I. 初期座標の作成

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。



I. 初期座標の作成

「# of Polymers」に「1440」を入力して「Add」を押す。

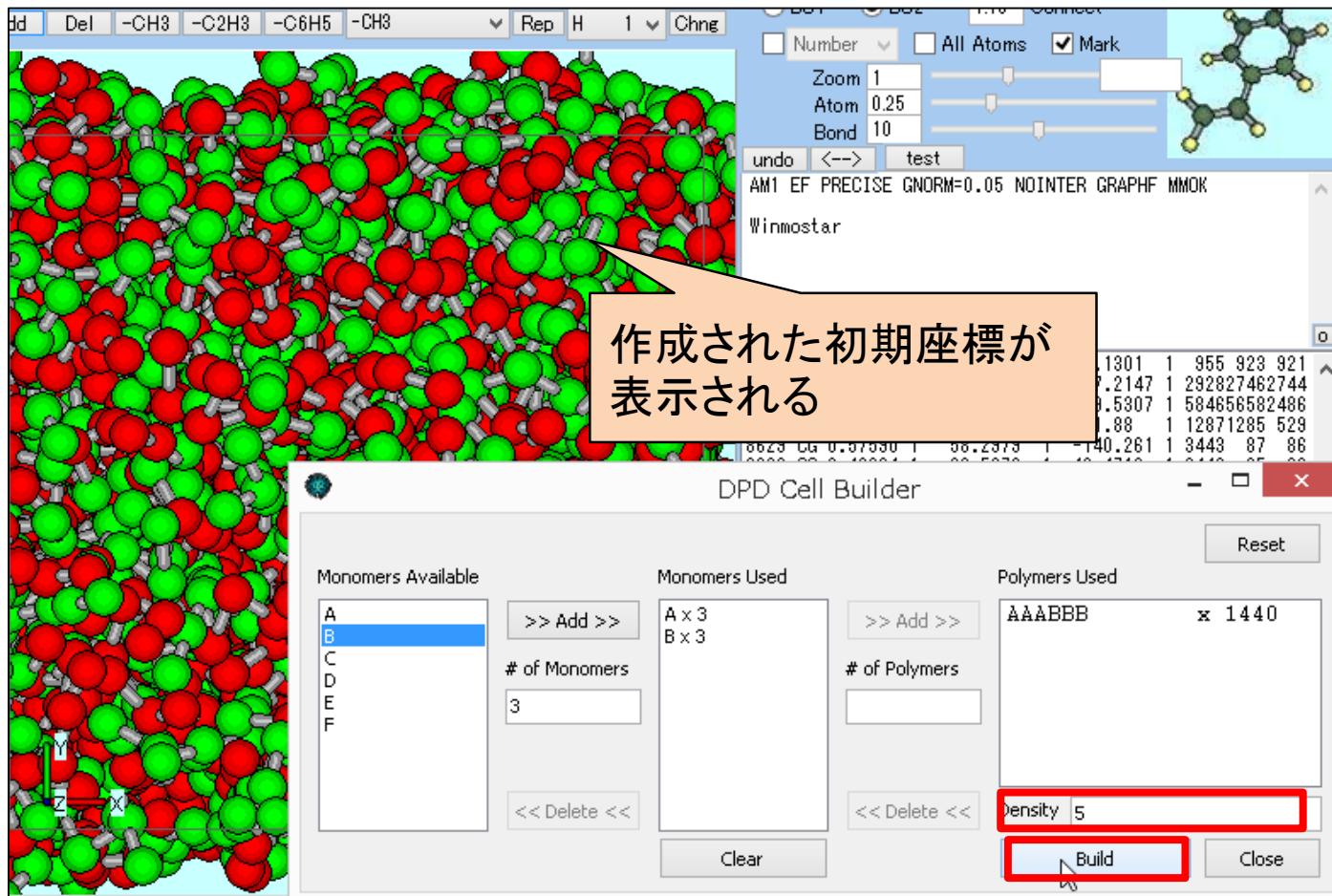


The screenshot shows the 'Monomers Available' section with 'B' selected. In the 'Monomers Used' section, 'A x 3' and 'B x 3' are listed. In the 'Polymers Used' section, the '# of Polymers' input field contains '1440'. A red box highlights the '# of Polymers' input field and the 'Add' button next to it.

| Monomers Available | Monomers Used | Polymers Used |
|-----------------------------------|--------------------|-----------------------|
| A B C D E F | A x 3 B x 3 | # of Polymers 1440 |
| | >> Add >> | >> Add >> |
| | # of Monomers 3 | Density 5 |
| | << Delete << | Build |
| | Clear | Close |

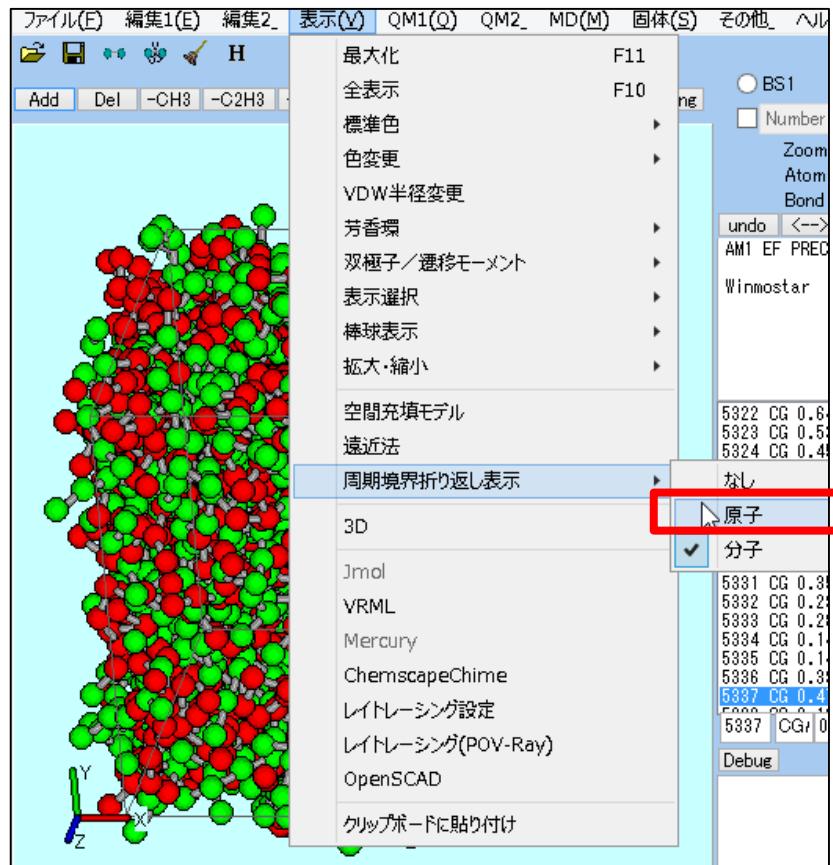
I. 初期座標の作成

「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。

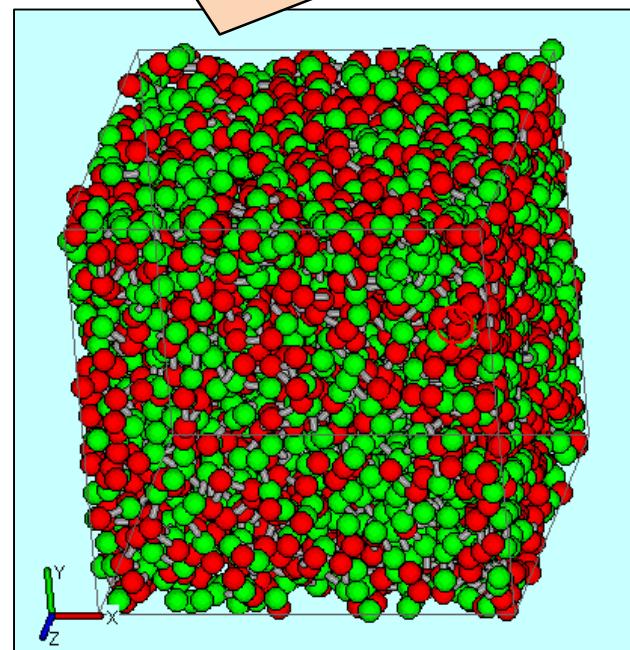


I. 初期座標の作成

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。

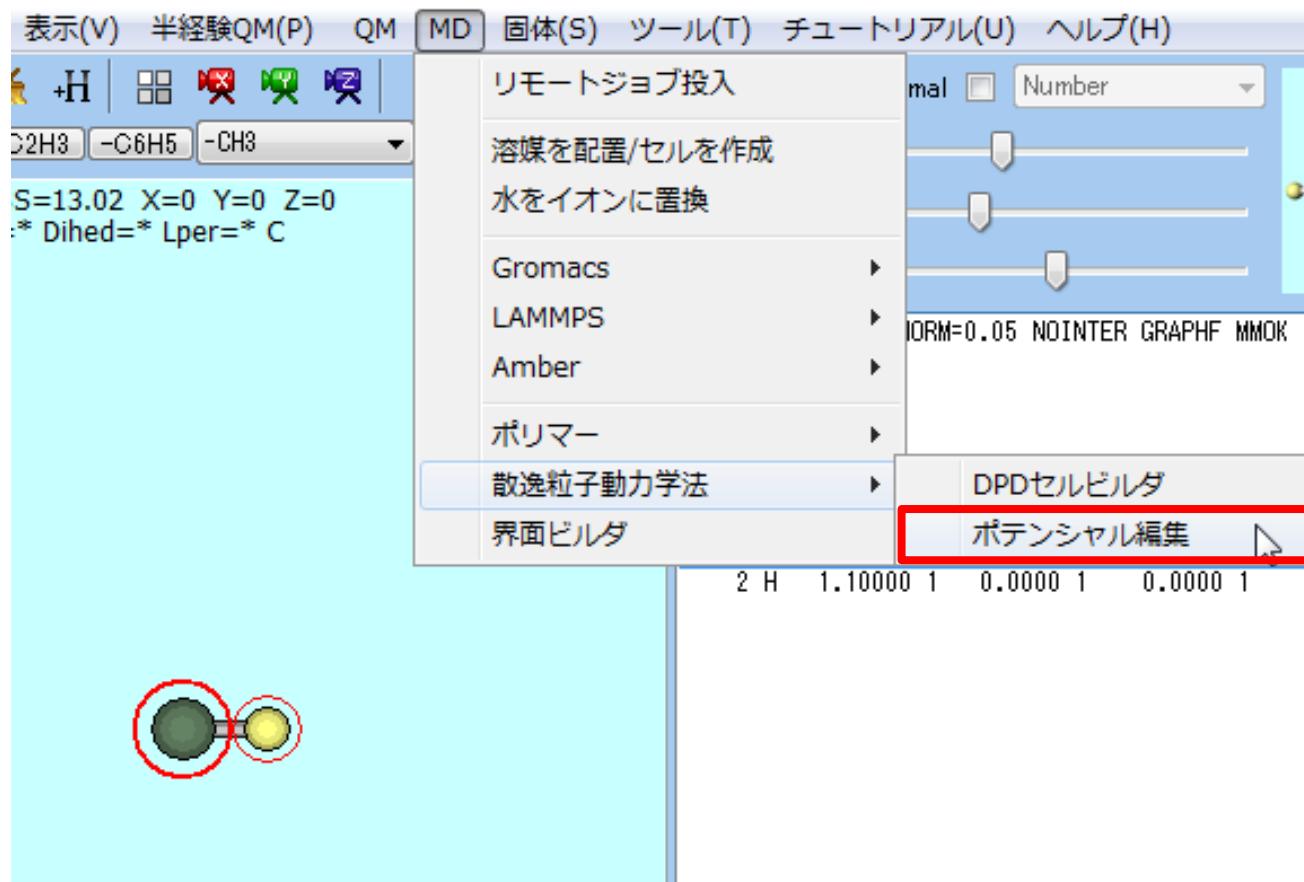


周期境界をまたいだ粒子が
折り返されて表示される



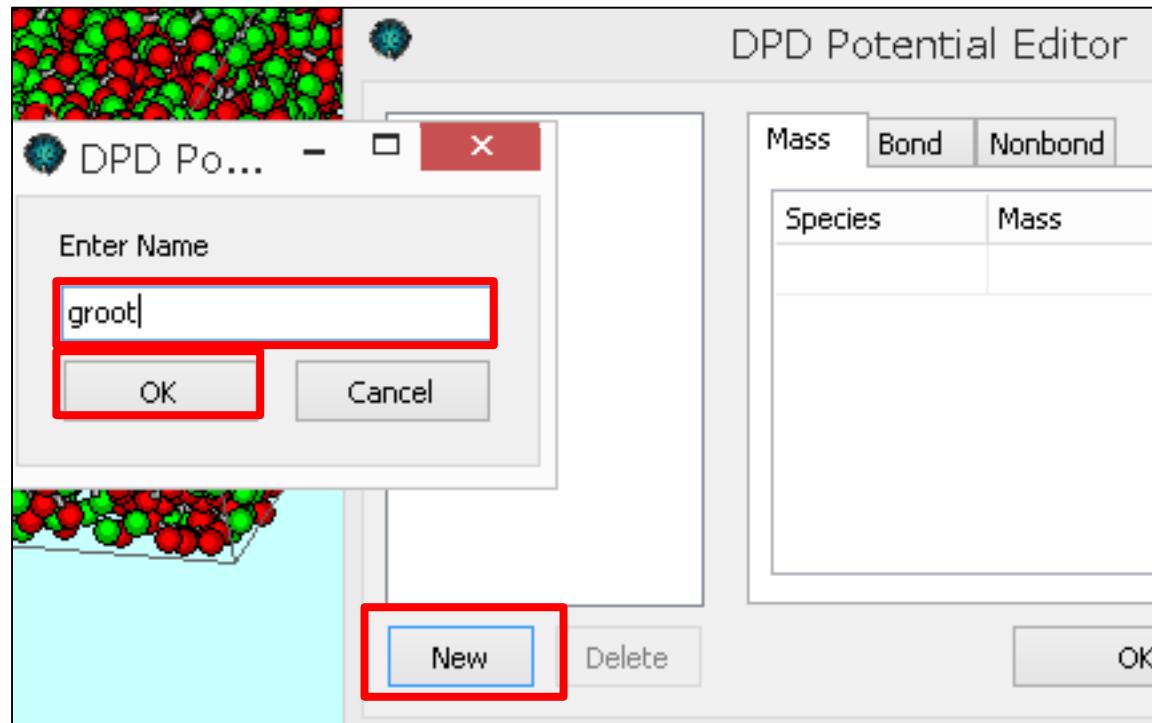
II. ポテンシャルの設定

「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

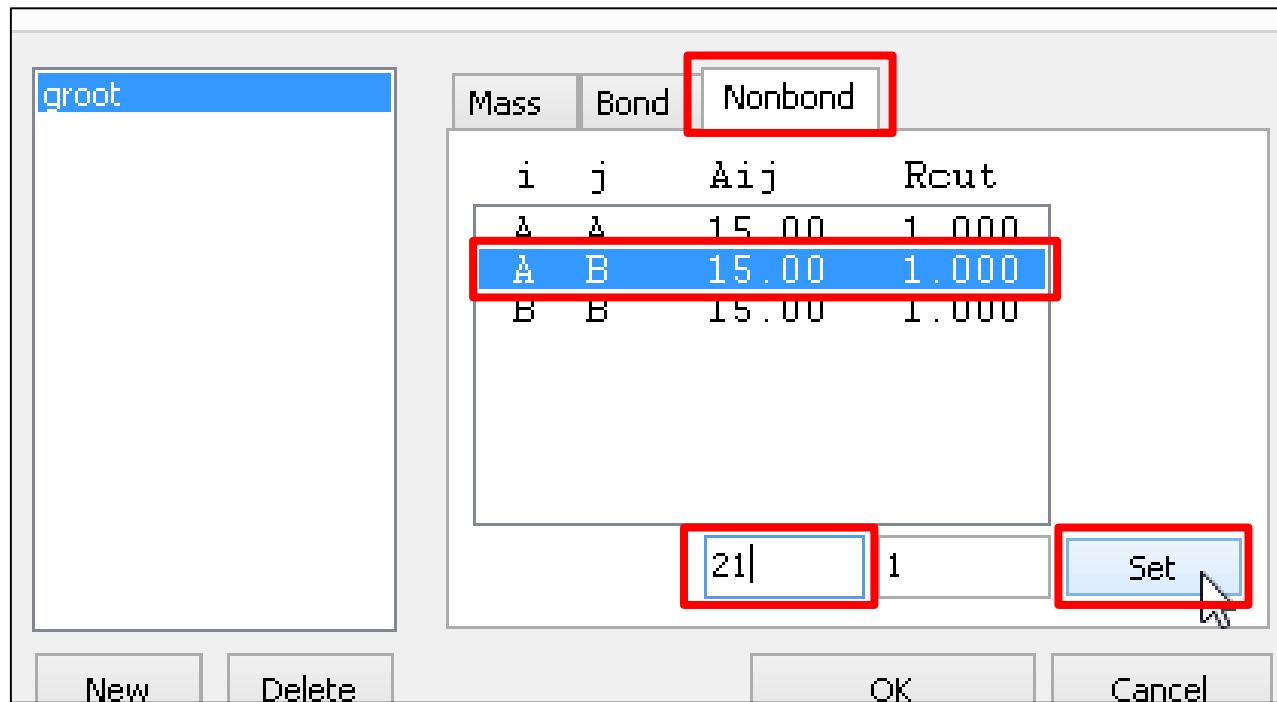
「New」ボタンをクリックし、ポテンシャルファイルを新たに作成する。
Enter nameで「groot」と入力し、「OK」する。



II. ポテンシャルの設定

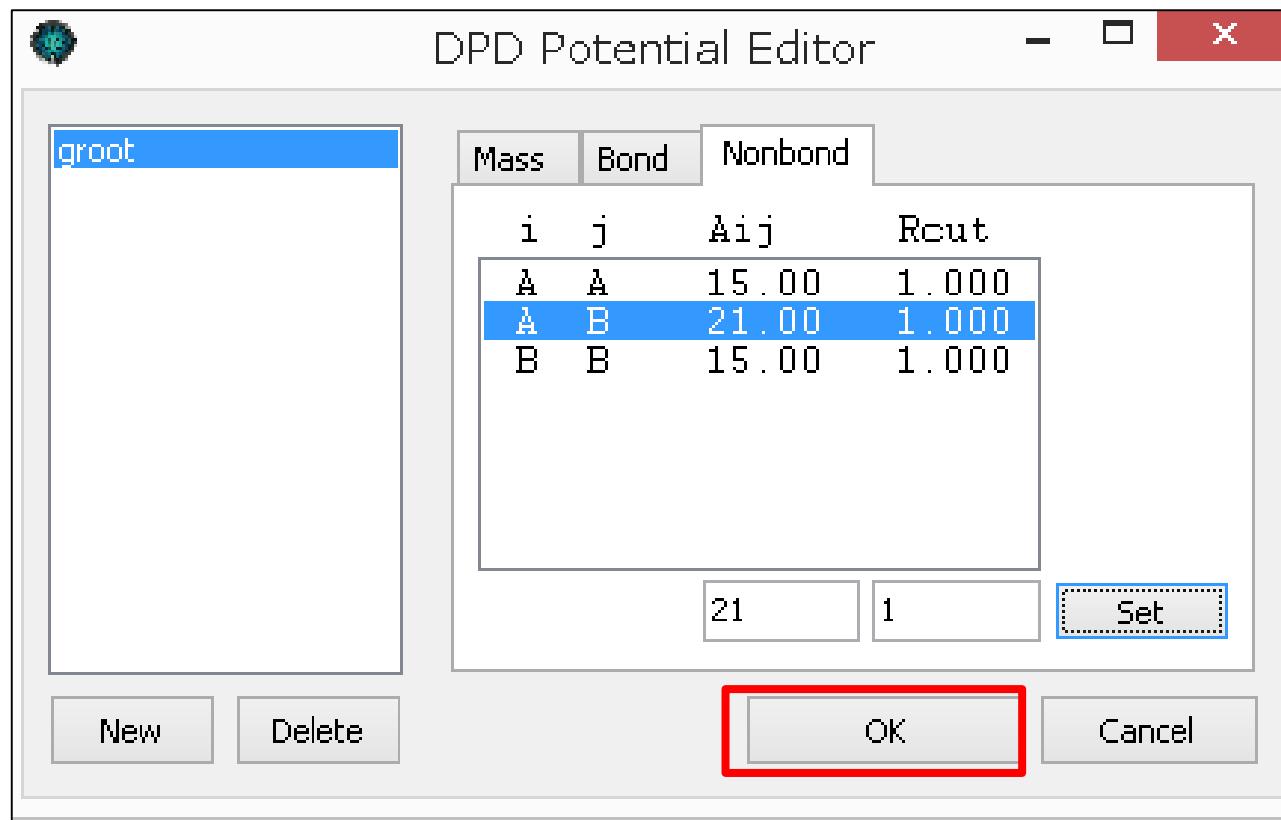
「Nonbond」タブを選び、リストから「A B 15.00 1.00」と表示された行を選び、その下の左側のテキストボックスの値を15から21に変更し、「Set」する。
(A_{ij} 、 R_{cut} ともに単位は無次元)

任意のモノマーについて A_{ij} 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・ χ ・DPDパラメータの算出」の方法がある。



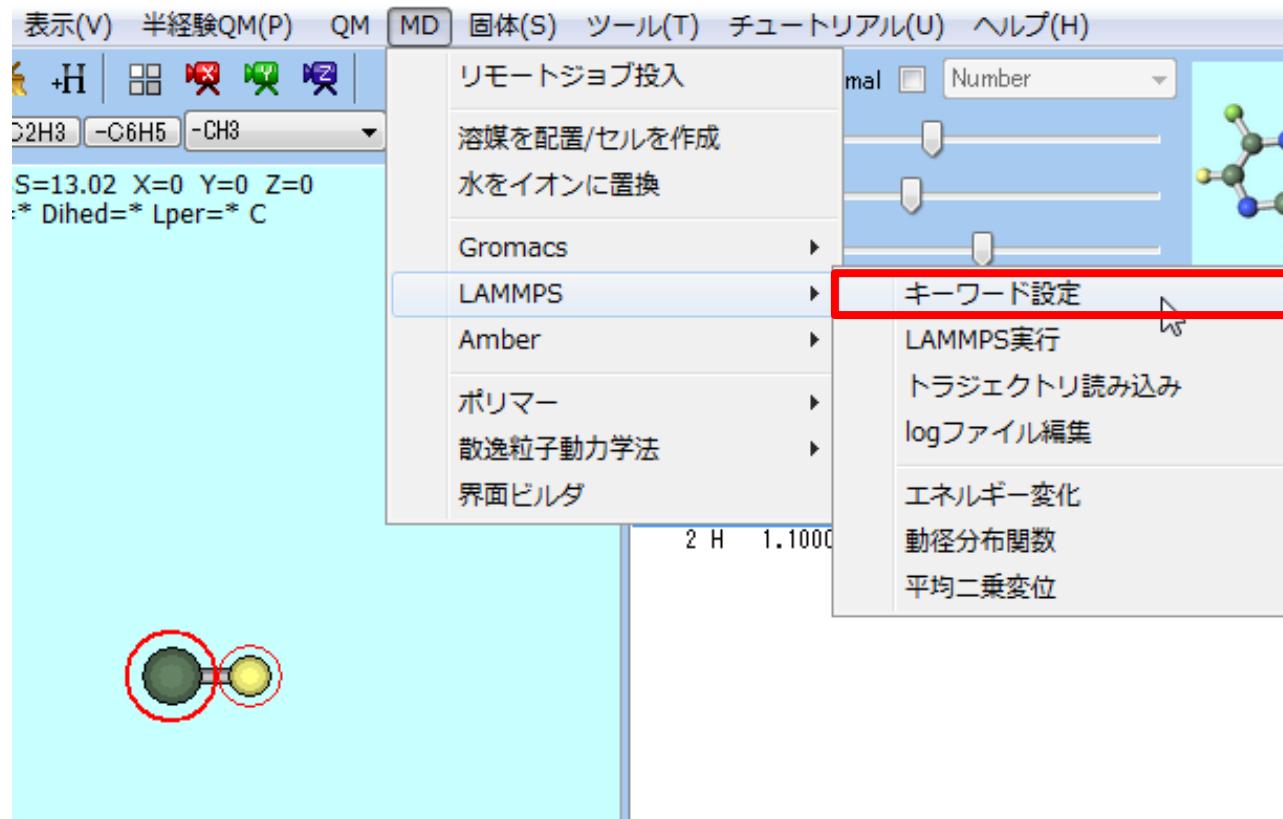
II. ポテンシャルの設定

「OK」ボタンを押し、Potential Editorを終了する。



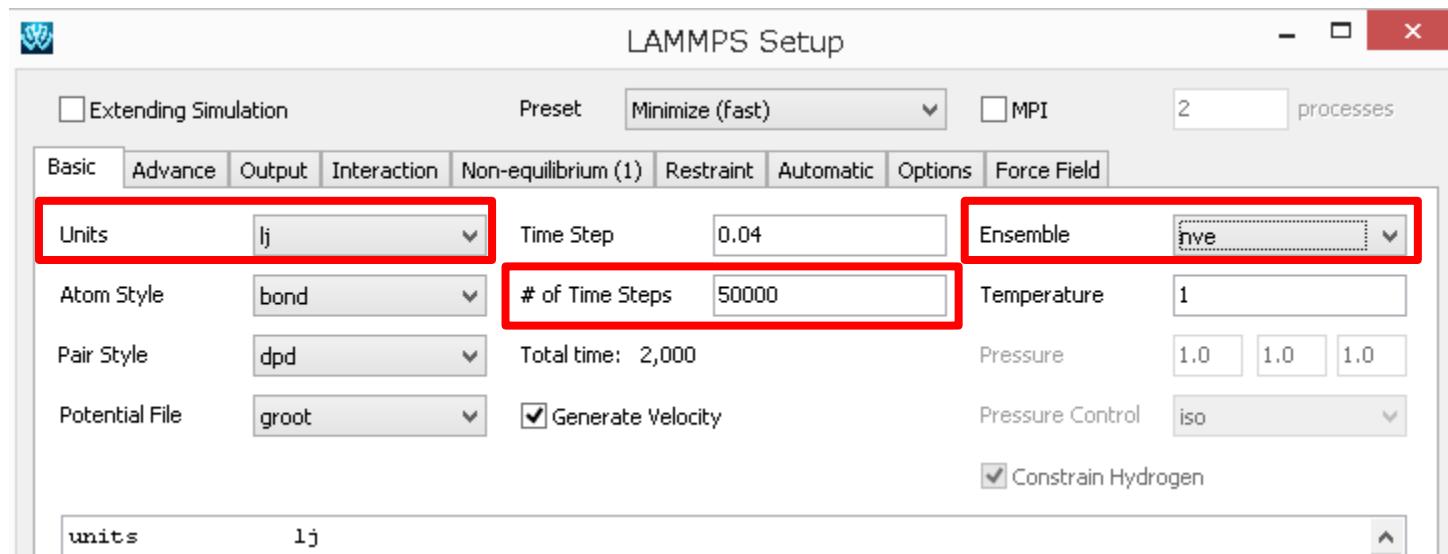
III. LAMMPSの設定

「MD>LAMMPS>キーワード設定」を選択する。



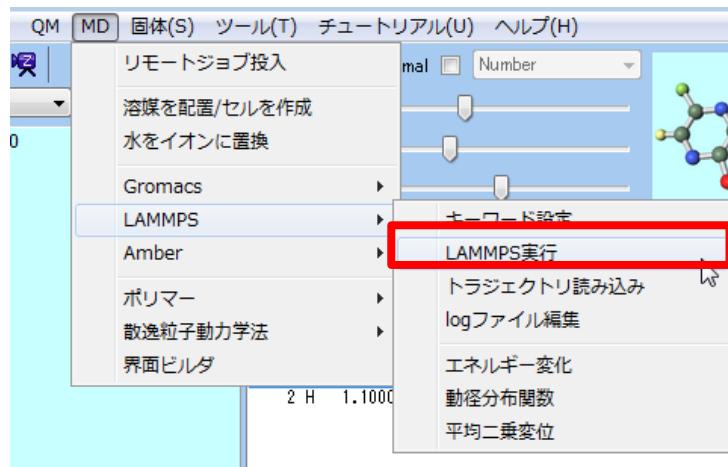
III. LAMMPSの設定

- 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)

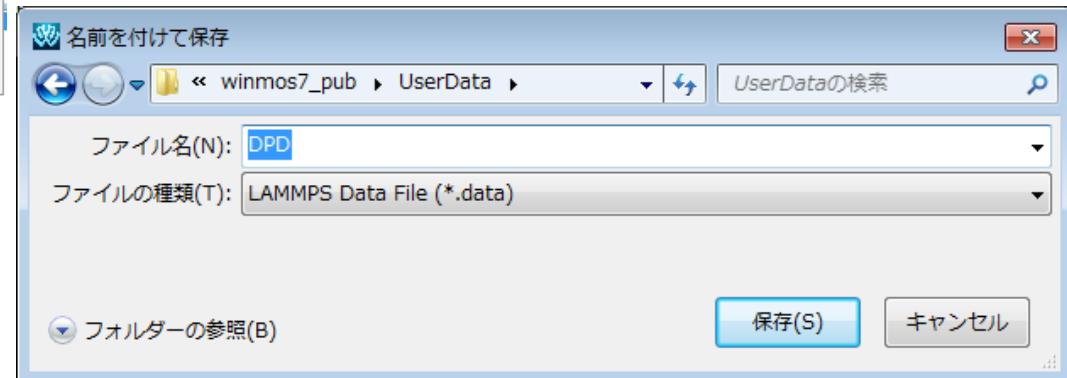


IV. LAMMPSの実行

「MD>LAMMPS>LAMMPS実行」を選択する。



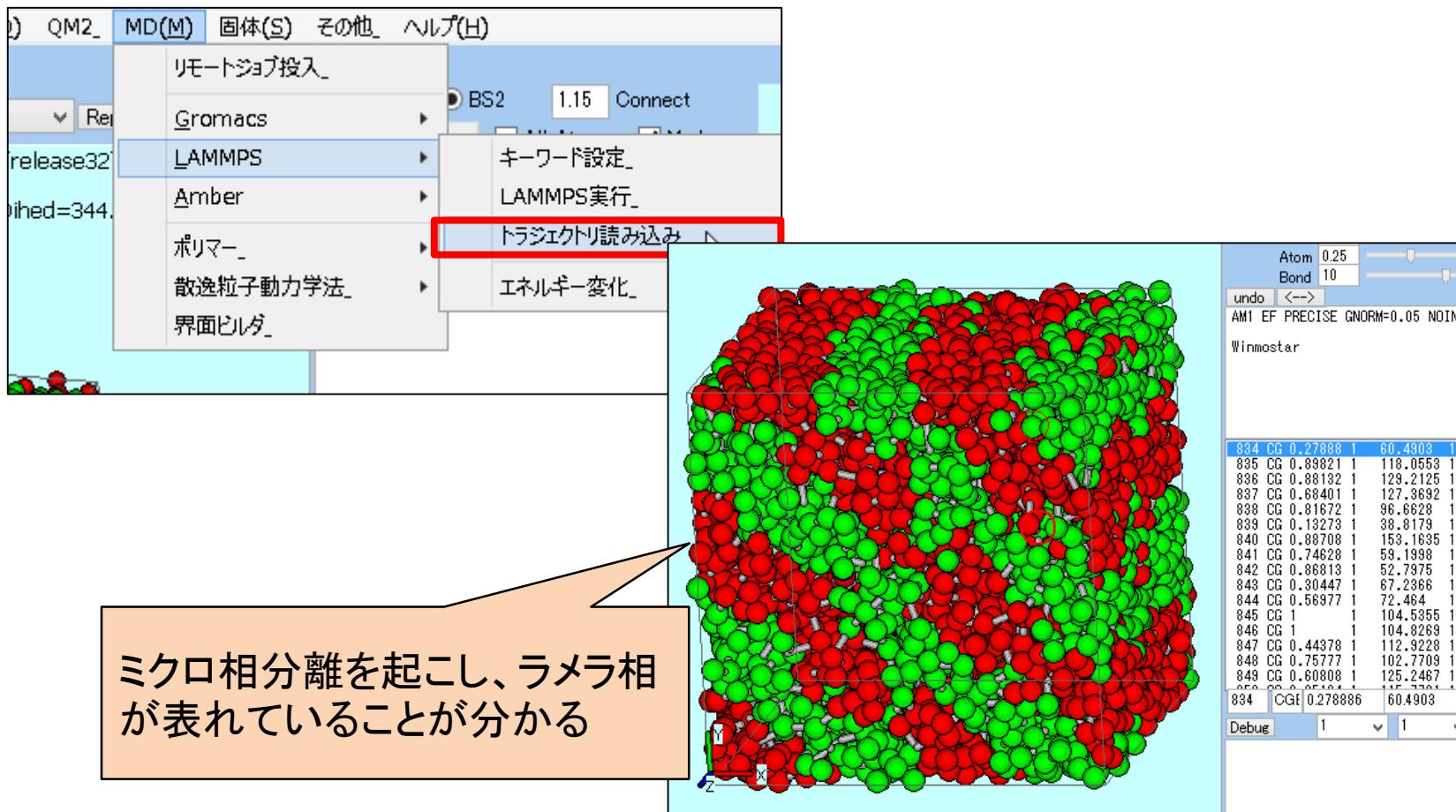
ファイル名に「DPD」と入力し保存をクリックする。



→ 計算終了

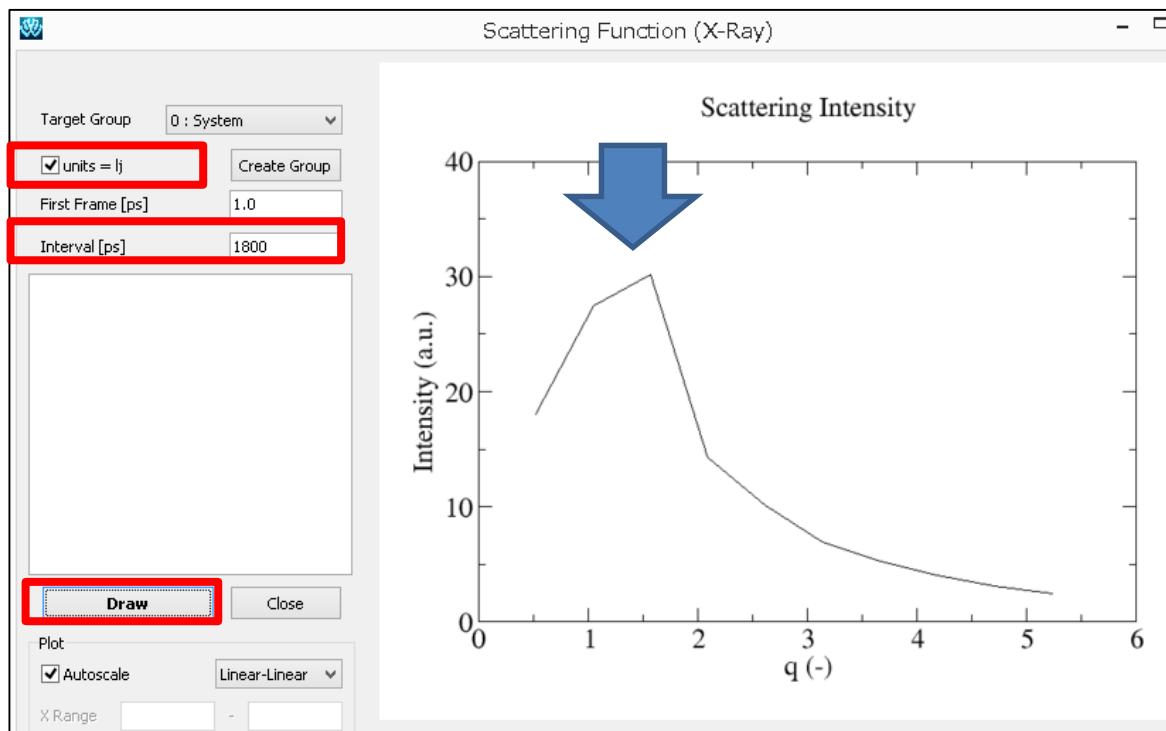
V. 結果の表示

「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。



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。



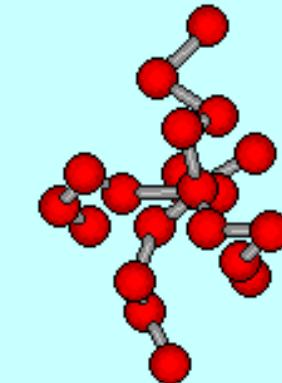
補足1：分岐の作成

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

| Monomers Available | | Monomers Used | |
|--------------------------------------|---------------|------------------------------------|----------------|
| A | | A x 3 | [Start Branch] |
| B | >> Add >> | B x 3 | [End Branch] |
| C | # of Monomers | | |
| D | 3 | | |
| E | << Delete << | | |
| F | | | |
| Branch: | | | |
| <input type="button" value="Start"/> | | <input type="button" value="End"/> | |

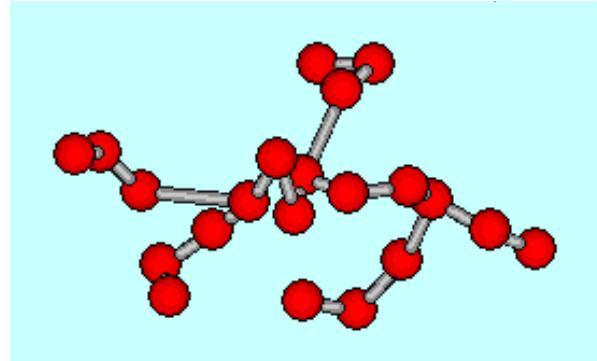
例) 星形ポリマー

| Monomers Used | |
|---------------|----------------|
| A x 5 | [Start Branch] |
| A x 4 | [End Branch] |
| A x 4 | [Start Branch] |
| A x 4 | [End Branch] |
| A x 4 | [Start Branch] |
| A x 4 | [End Branch] |
| A x 4 | [Start Branch] |



輪形ポリマー

| Monomers Used | |
|---------------|----------------|
| A x 3 | [Start Branch] |
| A x 3 | [End Branch] |
| A x 3 | [Start Branch] |
| A x 3 | [End Branch] |
| A x 3 | [Start Branch] |
| A x 3 | [End Branch] |
| A x 3 | [Start Branch] |
| A x 3 | [End Branch] |
| A x 3 | [Start Branch] |



[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。

