

2020年6月18日(木) CCMSハンズオン



MateriApps LIVE!講習

LAMMPS を利用した古典動力学計算 の簡単な実習

高度情報科学技術研究機構(RIST)

吉澤香奈子

Outline

- LAMMPSについて
 - 分子動力学計算について
 - 力場(ポテンシャル)について
 - 実行時エラー
- LAMMPSのexamplesの実行(演習)
 - melt, micelle, colloid を実行する
 - 計算結果をVMDで可視化する
 - micelle を3次元化する
 - サイズを大きくした計算
- HPCIについて

LAMMPSについて

- Large-scale **A**tomic/**M**olecular **M**assively **P**arallel **S**imulator
<https://lammps.sandia.gov/>
- 並列計算機のために設計された分子動力学シミュレータ
 - 物質系を構成する原子や分子の1つ1つに対する運動方程式を数値的に計算している
 - 高並列計算のため2007年にC++でオブジェクト指向で完全に、rewriteされている
オブジェクト指向 → コード拡張・公開 → 多分野・多スケールに渡る計算
 - 現在、粒子系統合シミュレータとして高い支持
- ソースコードダウンロード
<https://lammps.sandia.gov/download.html>
 - 最新のStable version (3 Mar 2020) : **2020年6月14日現在**
ソースファイル名 : **lammps-stable.tar.gz**
 - Stable以外の最新のコードもある
過去のメジャーなコード : <http://lammps.sandia.gov/tars/>
- ドキュメント
<https://lammps.sandia.gov/doc/Manual.html>

何か不明なことがあつたらこの
ページを見る

分子動力学計算について

- ニュートンの運動方程式

$$F=ma$$

- 複数の粒子の運動を記述する運動方程式を時間に関して積分して粒子の軌跡を求める。
- 力は経験的に決められたポテンシャル（力場）の空間座標に対する微分である。
- 例：モデリング（平衡化）の流れ
 - 平衡化計算
エネルギー極小化
 - 平衡化計算
温度一定MD
 - 平衡化計算
温度・圧力一定MD
 - 本計算
温度・圧力一定MD

力場(ポテンシャル)について(1)

- LAMMPS Force Fields
https://lammps.sandia.gov/doc/99/force_fields.html
- まずは、パッケージにある examples や potentials を参考にする。
(例)LAMMPSのパッケージ内にある potentials の
/usr/share/lammps/potentials
を参考にする。
- 目安としては、計算対象の物性が正しいものを選ぶ。
(例)常温常圧の鉄は、体心立方格子構造(bcc構造)
/usr/share/lammps/potentials/Fe_mm.eam.fs を用いる

```
# Interatomic potential – Embedded Atom Method
pair style eam/fs
# interaction pairs , filename , Element parameters
pair coeff * * Fe mm.eam. fs Fe
```

入力ファイルの書式例

- 自分でカスタマイズできるが、初心者には難しい。
(→ 専門家に相談)
- 力場(ポテンシャル)にこだわっても、結局は古典計算？
経験的に決める
→ 過去の成功例、論文になっているポテンシャルを用いる。
(非経験的に決めるなら第一原理計算)

物性が正しいように決める

力場(ポテンシャル)について(2)

- ポテンシャルのデータベース
Interatomic Potentials Repository Project
<https://www.ctcms.nist.gov/potentials/>
(例) Al-Ni : <https://www.ctcms.nist.gov/potentials/Al-Ni.html>
Mishin-Ni-Al-2009.eam.alloy を用いる
- 分子モデリングソフトウェアで設定する
下記のURLなどを参考にする
Winmostar: https://winmostar.com/jp/manual_jp.html
Molby: <https://molby.osdn.jp/doc/ja/index.html>

実行時エラー(1)

- 実行時にエラーが出た場合

ホームページ

<https://lammps.sandia.gov/doc/Errors.html>

13.3. Error messages

1-3 bond count is inconsistent

An inconsistency was detected when computing the number of 1-3 neighbors for each atom. This likely means something is wrong with the bond topologies you have defined.

1-4 bond count is inconsistent

An inconsistency was detected when computing the number of 1-4 neighbors for each atom. This likely means something is wrong with the bond topologies you have defined.

Accelerator sharing is not currently supported on system

Multiple MPI processes cannot share the accelerator on your system. For NVIDIA GPUs, see the nvidia-smi command to change this setting.

All angle coeffs are not set

All angle coefficients must be set in the data file or by the angle_coeff command before running a simulation.

...

を参考にする。

実行時エラー(2)

- 経験を積むとエラーの原因がわかりやすくなる。
- (例) colloidのパッケージが入っていない場合
examples の colloid を実行しようとすると、
ERROR: Unknown pair style colloid (../force.cpp:246)
Last command: pair_style colloid 12.5
のエラーが出る。

入力ファイル(in.colloid)において、
“pair_style colloid 12.5” という指定が許されていない

https://lammps.sandia.gov/doc/Errors_messages.html

13.3. Error messages

のページには、

Unknown pair style

The choice of pair style is unknown.

→ make yes-colloid によって、colloidのパッケージを入れれば解決する。

LAMMPSのexamplesについて

- LAMMPS の examples

MateriApps LIVE!: `/usr/share/lammps/examples`

- examples の解説

<https://lammps.sandia.gov/doc/Examples.html>

- 2次元系(ビジュアル重視)

- `colloid`, `crack`, `flow`, `friction`,
`micelle`, `nemd`, `obstacle`, `shear`

- 3次元系(簡単なもの)

- `melt`, `peptide`

- 力場

- `dreiding`, `kim`, `reax`

- 高速化機能

- `cuda`, `gpu`, `intel`

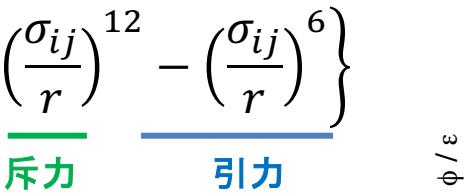
高分子物理向けのExamples

例	説明
<code>melt</code>	rapid melt of 3d LJ system
<code>micelle</code>	self-assembly of small lipid-like molecules into 2d bilayers
<code>colloid</code>	big colloid particles in a small particle solvent, 2d system
<code>peptide</code>	dynamics of a small solvated peptide chain (5-mer)

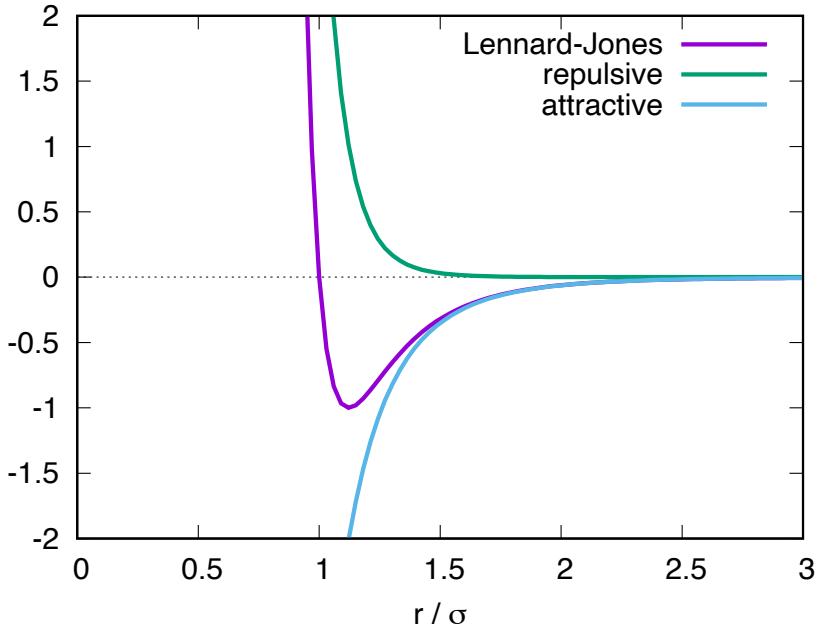
meltについて

- melt: FCC 格子状に並んだ Lennard-Jones (LJ) 粒子が溶けて拡散
- Lennard-Jones ポテンシャル

$$\phi_{ij}(r) = 4\epsilon_{ij} \left\{ \left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 \right\}$$


斥力 引力

- ポテンシャルの傾きが力として働く。
- 分子同士が十分離れているとき($r \rightarrow$ 大)、力は働くかない。
- 分子同士が近づくと、引力が働くようになり、 $r \sim 1.12$ 付近でエネルギーが最小となり、分子が近づきすぎると斥力(反発力)が働き、エネルギーは急激に増大する。



- ◆ 引力と斥力を持ち、希ガスの性質(ファンデルワールス力)を良く表す粒子モデルとして知られている。
- ◆ 古典MD計算のモデルポテンシャルとしてよく用いられる。

examples/melt(1)

入力ファイル: in.melt

```
# 3d Lennard-Jones melt
```

units lj
atom_style atomic

Lennard-Jones (LJ)
古典粒子

lattice fcc 0.8442

region box block 0 10 0 10 0 10

create_box 1 box

create_atoms 1 box

mass 1 1.0

格子定数: FCC 0.8442
シミュレーションボックスの指定
→ 今は、4,000原子の計算
create_atoms で、シミュレーション
ボックスの中に原子を配置する。

velocity all create 3.0 87287

速度の設定

pair_style lj/cut 2.5

pair_coeff 1 1 1.0 1.0 2.5

力場パラメータの設定 (ljポテンシャルを指定)

neighbor 0.3 bin
neigh_modify every 20 delay 0 check no

neighborでは、ポテンシャルcutoffよりどれだけ外側までを隣接原子として探す
かを指定(距離内にある粒子で neighbor list を構成する)。ここでは (cutoff +
0.3)Ang の範囲を隣接とし、bin で O(N) の探索手法を用いる

fix

1 all nve

fixで系の制御

NVEアンサンブル

examples/melt(2)

入力ファイル: in.melt (続き)

```
#dump           id all atom 50 dump.melt  
  
#dump      2 all image 25 image.*.jpg type type &      # は、コメントアウト  
#       axes yes 0.8 0.02 view 60 -30          dump:出力形式の指定  
#dump_modify 2 pad 3  
  
#dump      3 all movie 25 movie.mpg type type &  
#       axes yes 0.8 0.02 view 60 -30  
#dump_modify 3 pad 3  
  
thermo 50 何ステップ毎に温度情報を出力するかの指定  
run 250 計算実行(step)数
```

詳しくは、

Commands

https://lammps.sandia.gov/doc/commands_list.html

を参照

実行準備

- ホームディレクトリに作業ディレクトリを作る。(例: \$HOME/lammps)

```
$ cd $HOME
```

```
$ mkdir lammps
```

- 作成した作業ディレクトリへ移動する。(\$HOME/lammps)

```
$ cd lammps
```

- examplesファイルのコピー (melt, micelle, colloid)

```
$ cp -r /usr/share/lammps/examples/melt ./
```

```
$ cp -r /usr/share/lammps/examples/micelle ./
```

```
$ cp -r /usr/share/lammps/examples/colloid/ ./
```

meltの実行(1)

- melt へ移動

```
$ cd melt
```

- melt の中のファイルの確認

```
$ ls
```

```
in.melt  log.27Nov18.melt.g++.1  log.27Nov18.melt.g++.4
```

- in.melt の実行

```
$ lammmps < in.melt
```

LAMMPS (4 Feb 2020)

OMP_NUM_THREADS environment is not set. Defaulting to 1 thread.

(../comm.cpp:90)

using 1 OpenMP thread(s) per MPI task

...

Total # of neighbors = 151513

Ave neights/atom = 37.8783

Neighbor list builds = 12

Dangerous builds not checked

Total wall time: 0:00:00

エラーメッセージなしで
Total wall time が表示されれば
正常終了

- log.lammps というログファイルも出力される。

meltの実行(2)

- MPIプロセス数=4 での実行

マシンに4コア以上ある場合

```
$ mpirun -oversubscribe -n 4 lammps < in.melt  
LAMMPS (4 Feb 2020)
```

...

1 by 2 by 2 MPI processor grid

...

Performance: 90089.282 tau/day, 208.540 timesteps/s
22.1% CPU use with 4 MPI tasks x 1 OpenMP threads

...

meltの実行(3)



- スレッド数=4 での実行

```
$ OMP_NUM_THREADS=4 lammps < in.melt
```

LAMMPS (4 Feb 2020)

using 4 OpenMP thread(s) per MPI task

...

Performance: 115561.777 tau/day, 267.504 timesteps/s

97.6% CPU use with 1 MPI tasks x 4 OpenMP threads

...

マシンに4コア以上ある場合

micelle と colloid の実行

- micelle: 会合する分子の2次元の計算
micelle へ移動 → melt と同様の操作

```
$ cd $HOME/lammps/micelle  
$ lammps < in.micelle
```

(注) 4 Feb 2020 の実行では、

WARNING: Communication cutoff 1.42246 is shorter than a bond length based estimate of 1.425. This may lead to errors. (./comm.cpp:686)

の警告ができるが(カットオフを大きくすると回避できる)、この演習においては無視してください。
(examples の中にあるログファイル 29 Mar 2020 の実行においては、この警告は出ない。)

→ 自分で入力ファイルを作成する時は警告は出ないようにした方が良い。

- colloid: 大きいコロイド粒子と小さい LJ 粒子の系における2次元の計算

colloid へ移動 → melt, micelle と同様の操作

```
$ cd $HOME/lammps/colloid  
$ lammps < in.colloid
```

VMDで可視化する(1)

- \$HOME/lammpas/melt へ移動
\$ cd \$HOME/lammps/melt
- melt の入力ファイルをエディタ(emacs)で編集
\$ emacs in.melt &

(emacs でなくても好きなエディタで編集すれば良い)

VMDで可視化する(2)

- emacs の起動

emacs@malive.local

File Edit Options Buffers Tools Help ?

3d Lennard-Jones melt

```

units      lj
atom_style atomic

lattice    fcc 0.8442
region     box block 0 10 0 10 0 10
create_box 1 box
create_atoms 1 box
mass       1 1.0

velocity   all create 3.0 87287

pair_style lj/cut 2.5
pair_coeff 1 1 1.0 1.0 2.5

neighbor   0.3 bin

```

in.melt Top L1 (Fundamental)-----

Welcome to GNU Emacs, one component of the GNU/Linux operating system.

[Emacs Tutorial](#) Learn basic keystroke commands
[Emacs Guided Tour](#) Overview of Emacs features at gnu.org
[View Emacs Manual](#) View the Emacs manual using Info
[Absence of Warranty](#) GNU Emacs comes with ABSOLUTELY NO WARRANTY
[Copying Conditions](#) Conditions for redistributing and changing Emacs
[Ordering Manuals](#) Purchasing printed copies of manuals
To quit a partially entered command, type Control-g.

This is GNU Emacs 23.4.1 (i486-pc-linux-gnu, GTK+ Version 2.24.10)
of 2012-09-10 on murphy, modified by Debian
Copyright (C) 2012 Free Software Foundation, Inc.

Dismiss this startup screen Never show it again.

-U:%%- *GNU Emacs* All L3 (Fundamental)-----

For information about GNU Emacs and the GNU system, type C-h C-a.

①

Welcome to GNU Emacs, one component of the GNU/Linux operating system.

[Emacs Tutorial](#) Learn basic keystroke commands
[Emacs Guided Tour](#) Overview of Emacs features at gnu.org
[View Emacs Manual](#) View the Emacs manual using Info
[Absence of Warranty](#) GNU Emacs comes with ABSOLUTELY NO WARRANTY
[Copying Conditions](#) Conditions for redistributing and changing Emacs
[Ordering Manuals](#) Purchasing printed copies of manuals
To quit a partially entered command, type Control-g.

This is GNU Emacs 23.4.1 (i486-pc-linux-gnu, GTK+ Version 2.24.10)
of 2012-09-10 on murphy, modified by Debian
Copyright (C) 2012 Free Software Foundation, Inc.

Dismiss this startup screen Never show it again.

② ここ(青字)をクリック

① チェックを入れる

②

emacs@malive.local

File Edit Options Buffers Tools Help ?

3d Lennard-Jones melt

```

units      lj
atom_style atomic

lattice    fcc 0.8442
region     box block 0 10 0 10 0 10
create_box 1 box
create_atoms 1 box
mass       1 1.0

velocity   all create 3.0 87287

pair_style lj/cut 2.5
pair_coeff 1 1 1.0 1.0 2.5

neighbor   0.3 bin
neigh_modify every 20 delay 0 check no

fix        1 all nve

#dump      id all atom 50 dump.melt

#dump      2 all image 25 image.*.jpg type type &
#           axes yes 0.8 0.02 view 60 -30
#           2 pad 3

#dump      3 all movie 25 movie.mpg type type &
#           axes yes 0.8 0.02 view 60 -30
#           3 pad 3

thermo    50
run       250

```

in.melt All L1 (Fundamental)-----

Wrote /home/user/.emacs

③

VMDで可視化する(3)

- melt の入力ファイル(in.melt)の編集

```
# 3d Lennard-Jones melt

units          lj
atom_style     atomic

lattice        fcc 0.8442
region         box block 0 10 0 10 0 10
create_box     1 box
create_atoms   1 box
mass           1 1.0

velocity       all create 3.0 87287

pair_style     lj/cut 2.5
pair_coeff    1 1 1.0 1.0 2.5

neighbor       0.3 bin
neigh_modify   every 5 delay 0 check no
fix            1 all nve

dump          id all atom 5 dump.melt
...
```

20から5に変更する

#を取り、四角で囲まれた内容
に修正する

VMDで可視化する(4)

- 編集した in.melt の実行

```
$ lammmps < in.melt
```

エラーメッセージなしで

Total wall time が表示されれば
正常終了

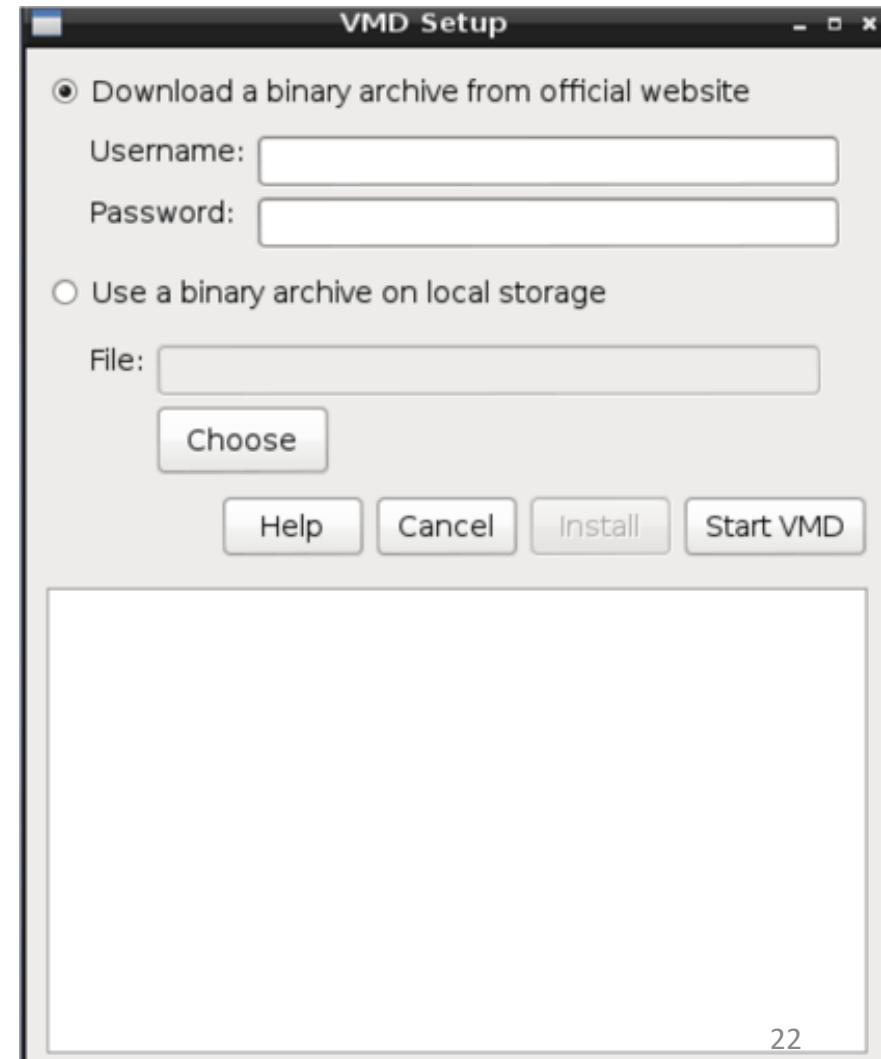
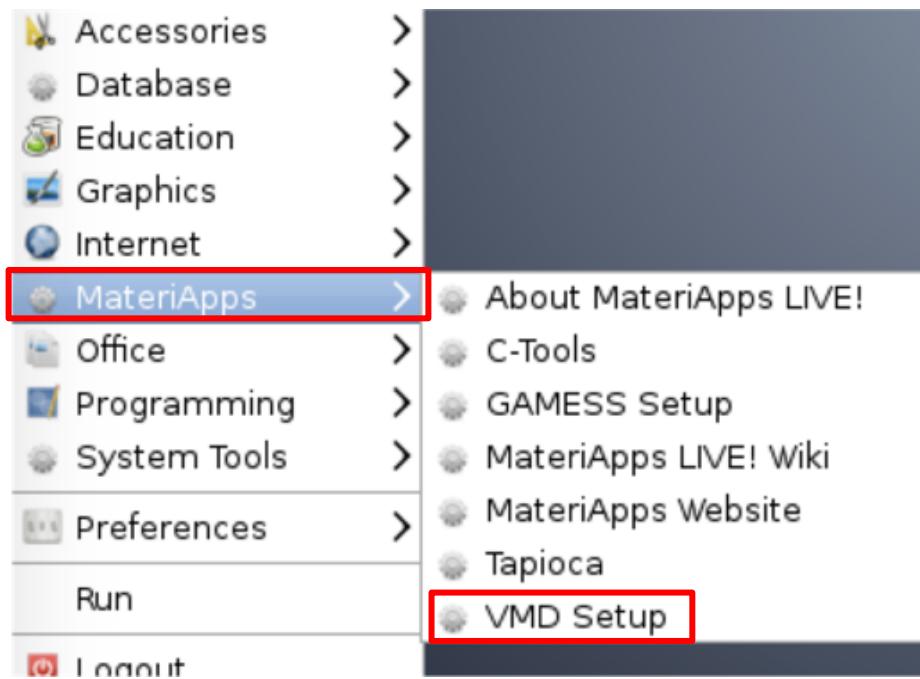
- dump.melt というファイルができているか確認する。

```
$ ls
```

dump.melt in.melt.org in.melt log.lammps

VMDで可視化する(5)

- VMDの起動
「MateriApps」の「VMD Setup」を選択



VMDで可視化する(6)

- VMDのユーザ登録
(すでにユーザIDとパスワードをお持ちの方は必要ありません。)
- VMDのウェブサイトへアクセスする。
「Download VMD」でgoogle検索する。
Download VMD - Theoretical and Computational Biophysics Group
<https://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=VMD>
のサイトへアクセス

NIH CENTER FOR MACROMOLECULAR MODELING & BIOMINFORMATICS | UNIVERSITY OF ILLINOIS AT URBANA-CHAMPAIGN

Type Keywords SEARCH

THEORETICAL and COMPUTATIONAL BIOPHYSICS GROUP

Home Research Publications Software Instruction News Galleries Facilities About Us

Software Downloads

Download VMD:

VMD is a molecular visualization program for displaying, animating, and analyzing large biomolecular systems using 3-D graphics and built-in scripting. Visit the [VMD website](#) for complete information and documentation.

Selecting an archive below will lead to a user registration and login page. Your download will continue after you have registered or logged in.

Version 1.9.4 LATEST ALPHA (2017-12-21) Platforms:

Latest pre-release ALPHA test version

クリック

- [LINUX_64 OpenGL, CUDA, OptiX, OSPRay \(Linux \(RHEL 6.7 and later\) 64-bit Intel/AMD x86_64 SSE, with CUDA 9.x, OptiX, OSPRay\)](#)
- [MacOSX A OpenGL \(32-bit Intel x86\) \(Apple MacOS-X \(10.10.x or later\) with hardware OpenGL \(native bundle\)\)](#)

VMDで可視化する(7)

- username と password を入力
(新しく自分で決める。)

Registration/Login

You will need a username and password to download software.

If this is your first download, please choose a username and password to register.
Current NAMD or VMD users, please enter your existing username and password.

Username:

① Username と Passwordを入力
(注)rist2018は使えません

Password:

② ボタンを押す

[Continue with registration or download](#)

Your download will continue after you have registered or logged in.

すでにユーザIDとパスワードをお持ちの方は、この作業は必要ありません。

VMDで可視化する(8)

- ユーザ登録をする

New User Registration

New User Registration for 'rist2018':

すでにユーザIDとパスワードをお持ちの方は、この作業は必要ありません。

First and Last Name:

Kanako Yoshizawa

Email Address:

yoshizawa@rist.or.jp

① ご自身の情報を入力

Affiliation:

Academic Government Industrial Other (specify)

The number of people using TCBG software at my site is:

1 2-4 5-10 11-20 21 or more

I use TCBG software primarily for:

Research Teaching Commerce Personal

The work I do with TCBG software is funded (at least partially) by NIH:

Yes No

Re-enter password for confirmation:

Register

② ボタンを押す

VMDで可視化する(9)

- 承諾をする

Software Downloads

Welcome! Account created for 'rist2018'.

Please remember your password for future downloads.

You may avoid logins for 6 months by saving a cookie on your browser:

VMD 1.9.4 for Linux (RHEL 6.x) 64-bit x86_64 w/ SSE, CUD

To download this software you must agree to abide by the terms of the following license:

UNIVERSITY OF ILLINOIS
VISUAL MOLECULAR DYNAMICS SOFTWARE LICENSE AGREEMENT

Upon execution of this Agreement by the party identified below ("Licensee"),
The Board of Trustees of the University of Illinois ("Illinois"), on behalf
of The Theoretical and Computational Biophysics Group ("TCBG") in the
Beckman Institute, will provide the Visual Molecular Dynamics ("VMD") software in
Executable Code and/or Source Code form ("Software") to Licensee, subject to the
following

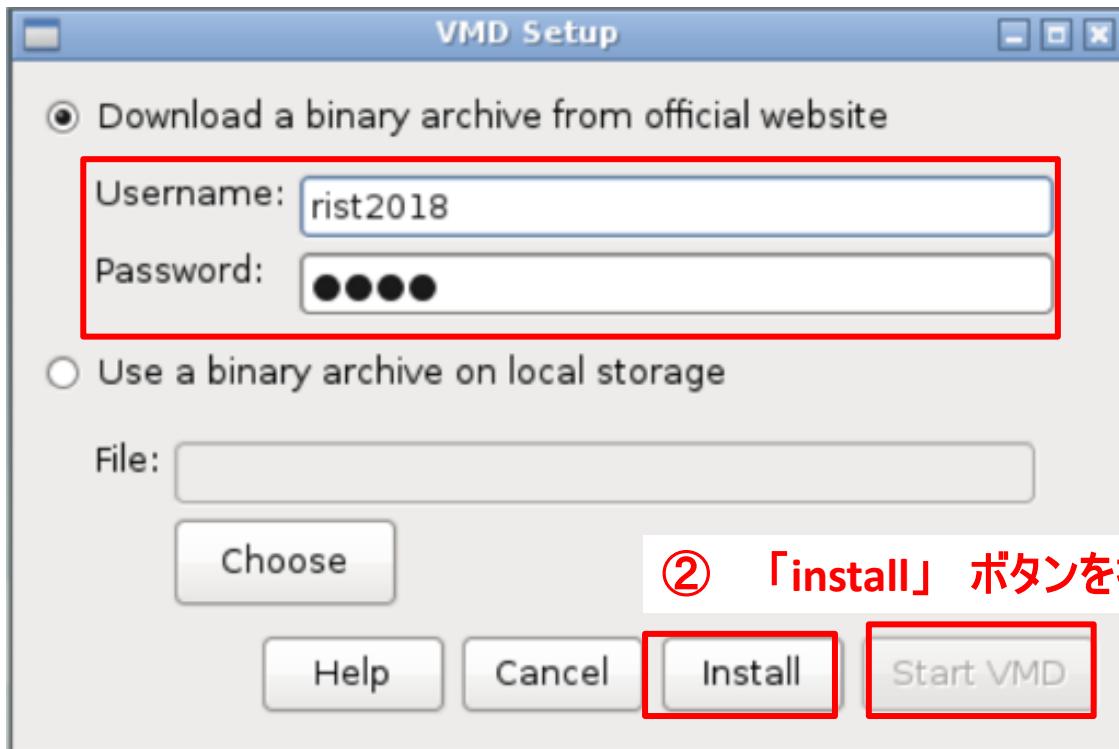
terms and conditions. For purposes of this Agreement, Executable Code is the
compiled code, which is ready to run on Licensee's computer. Source code
consists of a set of files which contain the actual program commands that are
compiled to form the Executable Cod

ボタンを押す

すでにユーザIDとパス
ワードをお持ちの方は、
この作業は必要ありま
せん。

VMDで可視化する(10)

- 「VMD Setup」において、username と password を入力



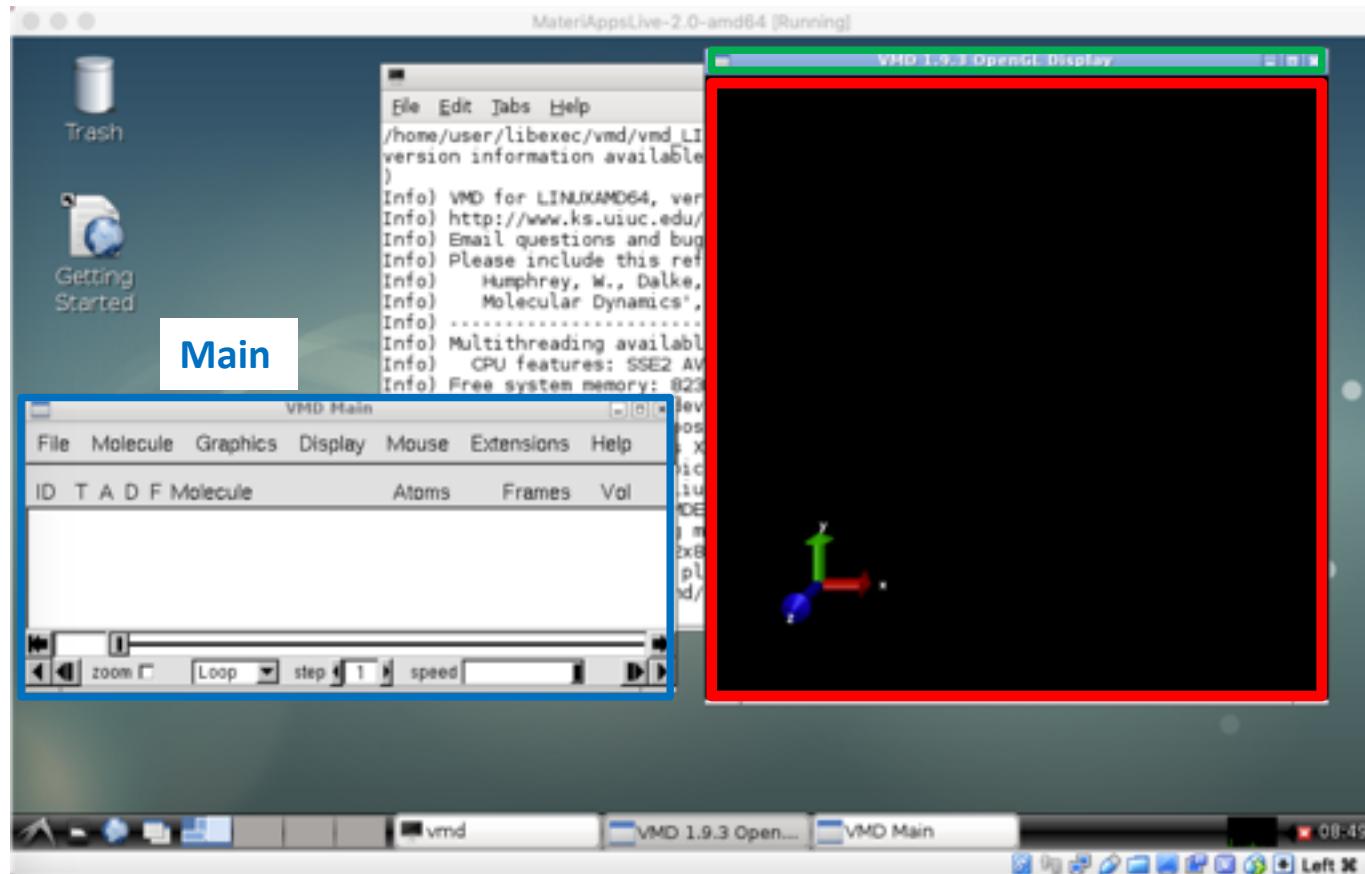
① username と
password を入力

② 「install」 ボタンを押す

③ install が終わったら
「Start VMD」 ボタンを押す

VMDで可視化する(11)

- VMDのウインドウ

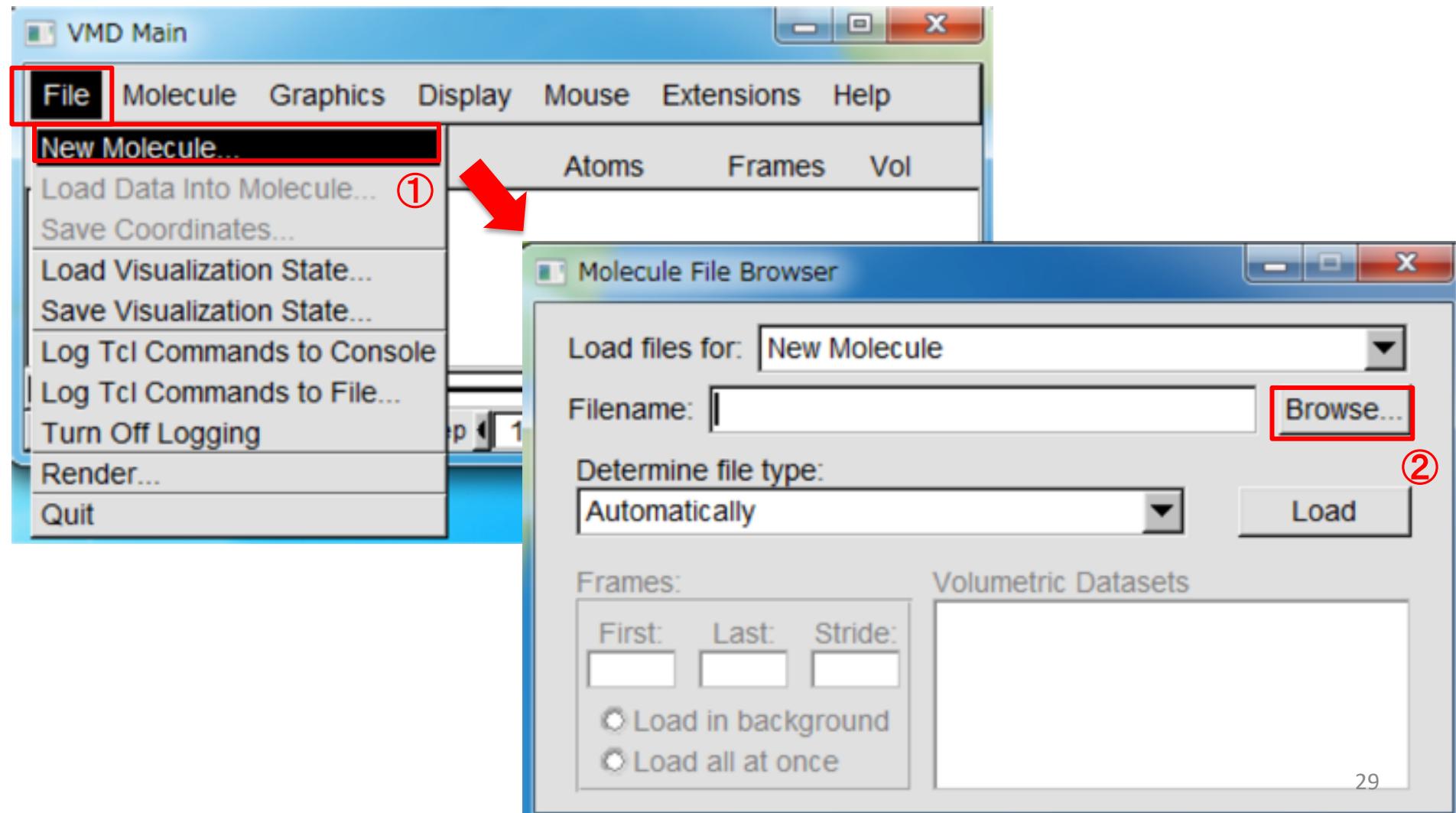


(注) 緑の部分が隠れてしまい、ウインドウが移動できないときは、

- Mac の場合
option を押しながら ドラッグ
- Windows の場合 ALT を押しながら ドラッグ
すると、赤で囲まれたウインドウを移動できる。

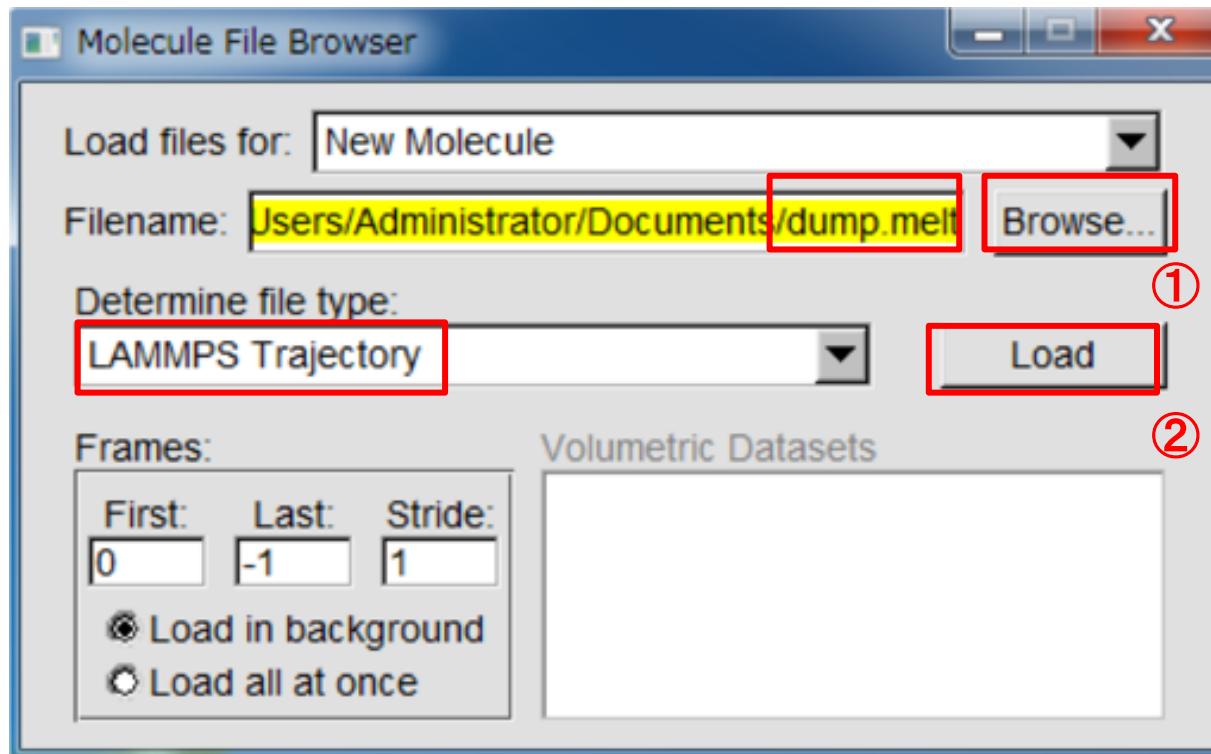
VMDで可視化する(12)

- dump.melt を開く



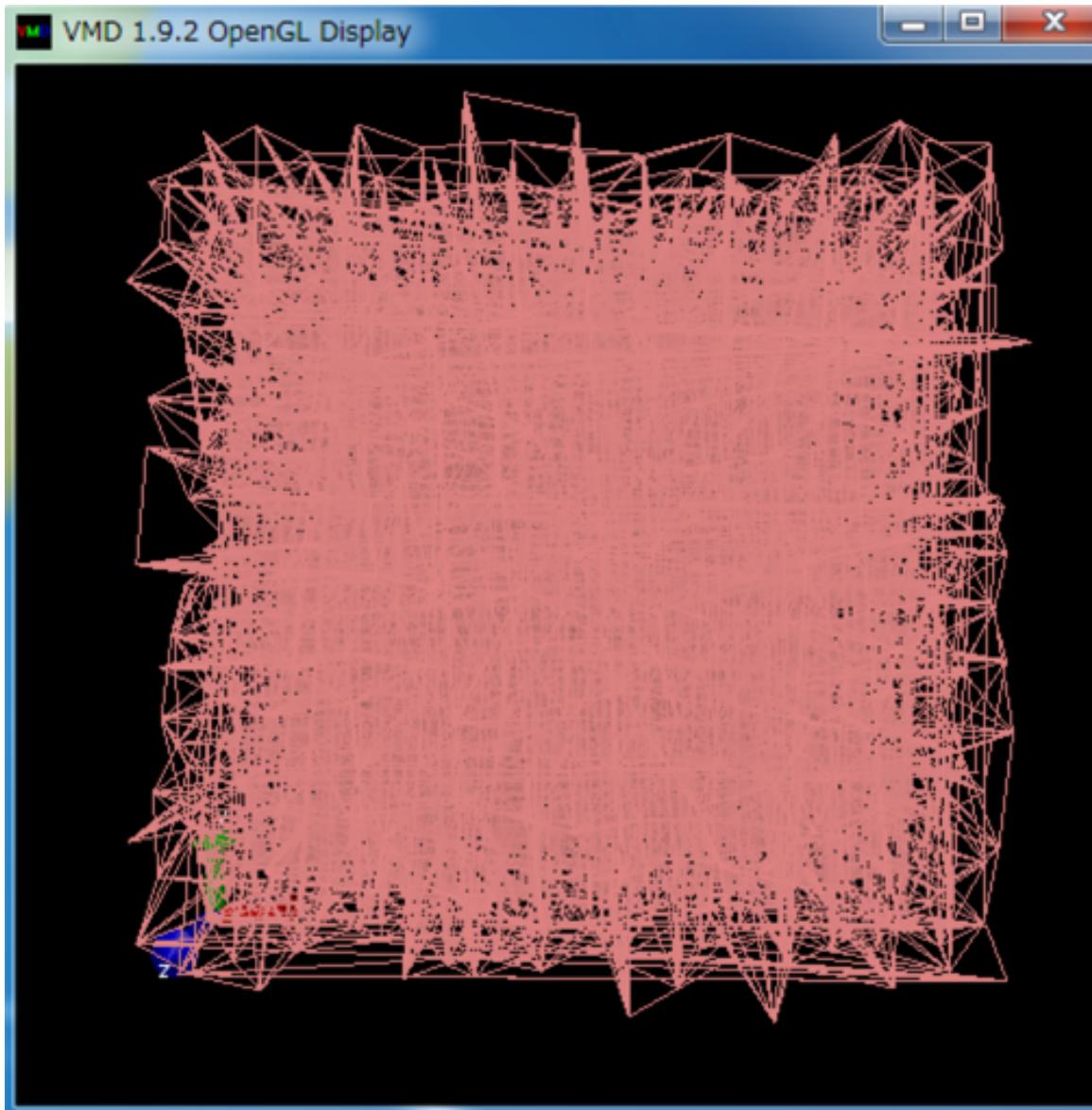
VMDで可視化する(13)

- ファイルタイプの選択 → 「LAMMPS Trajectory」



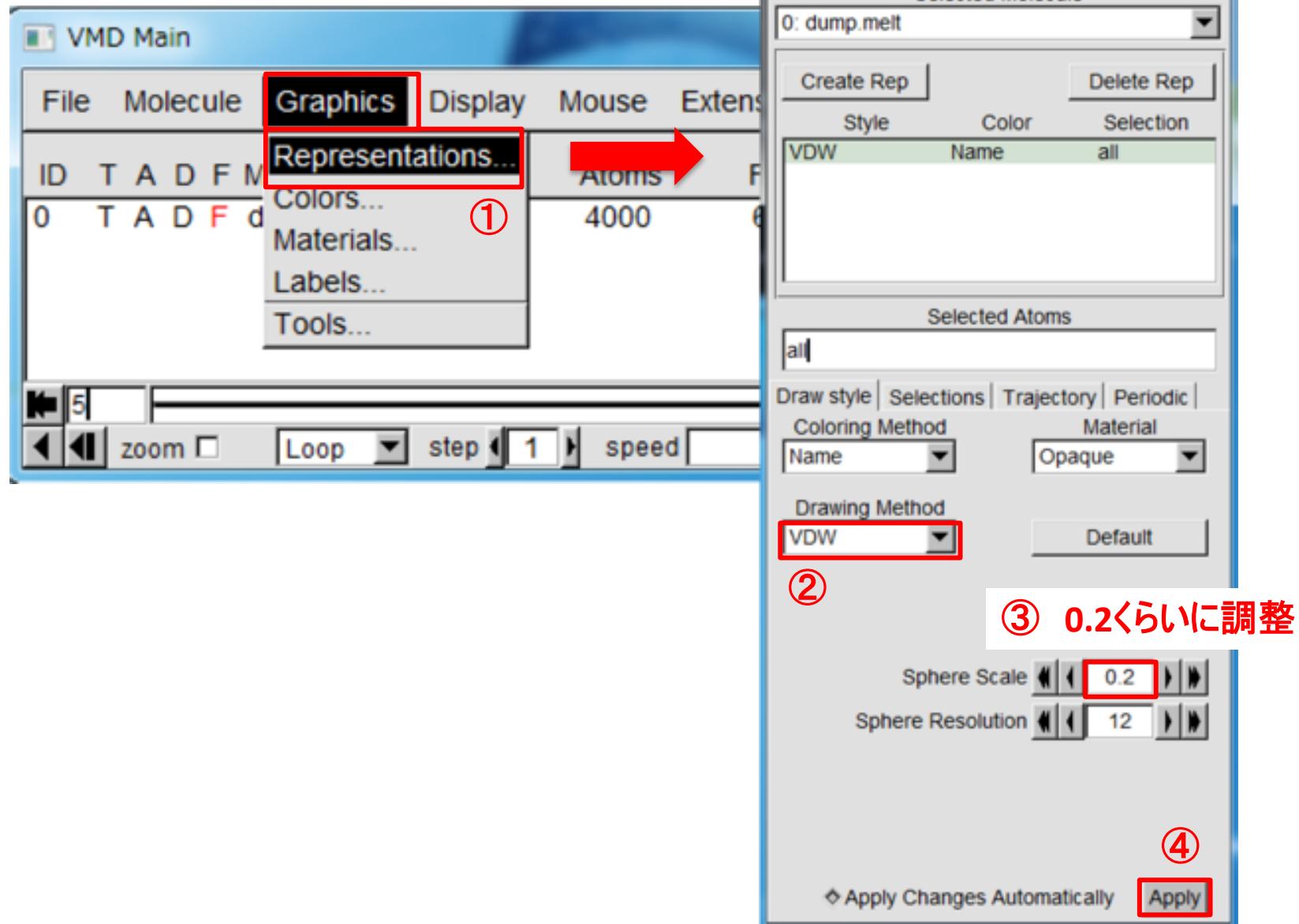
VMDで可視化する(14)

- ディスプレイの起動(Linesの表示)



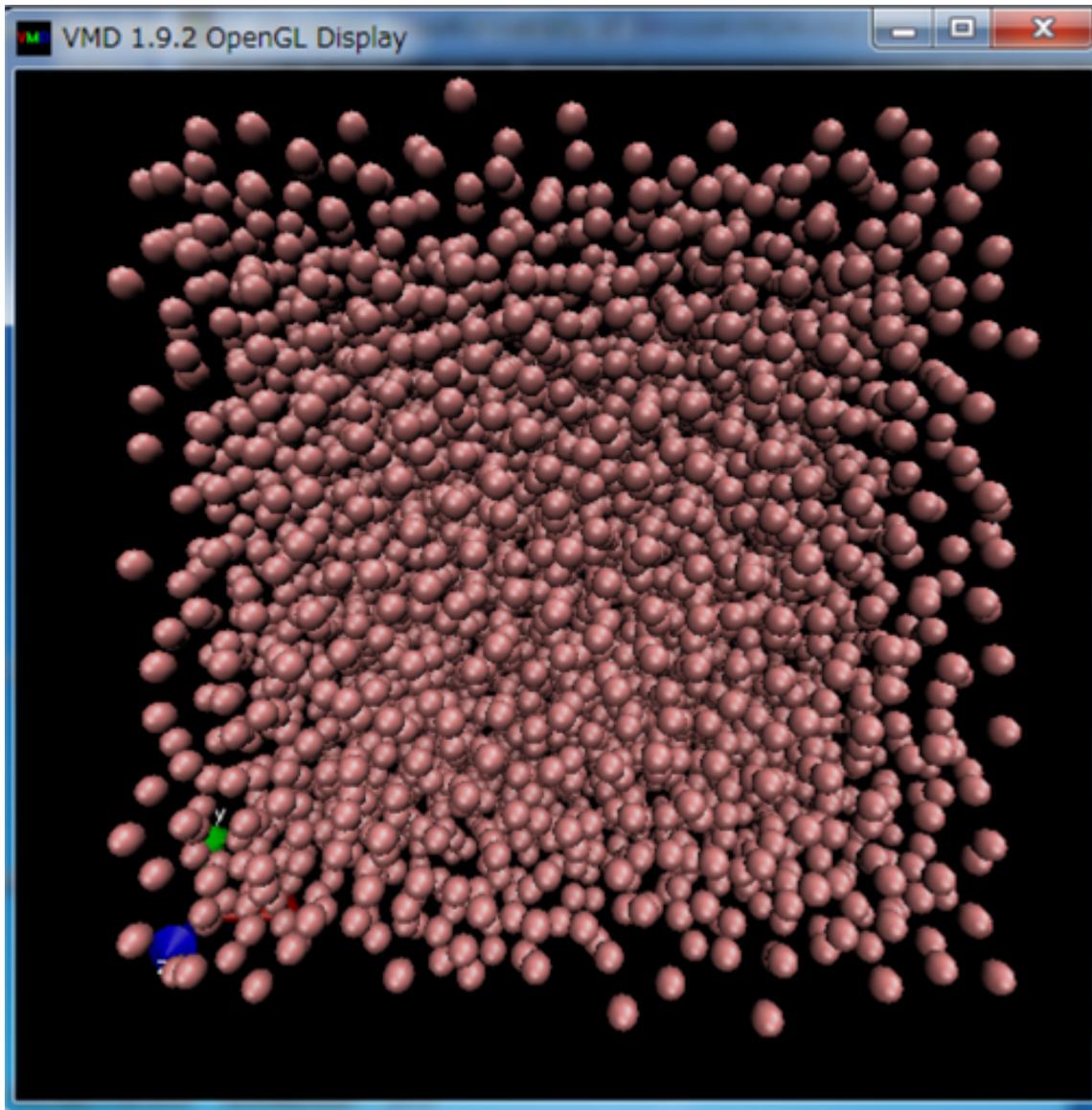
VMDで可視化する(15)

- 表示形式の調整



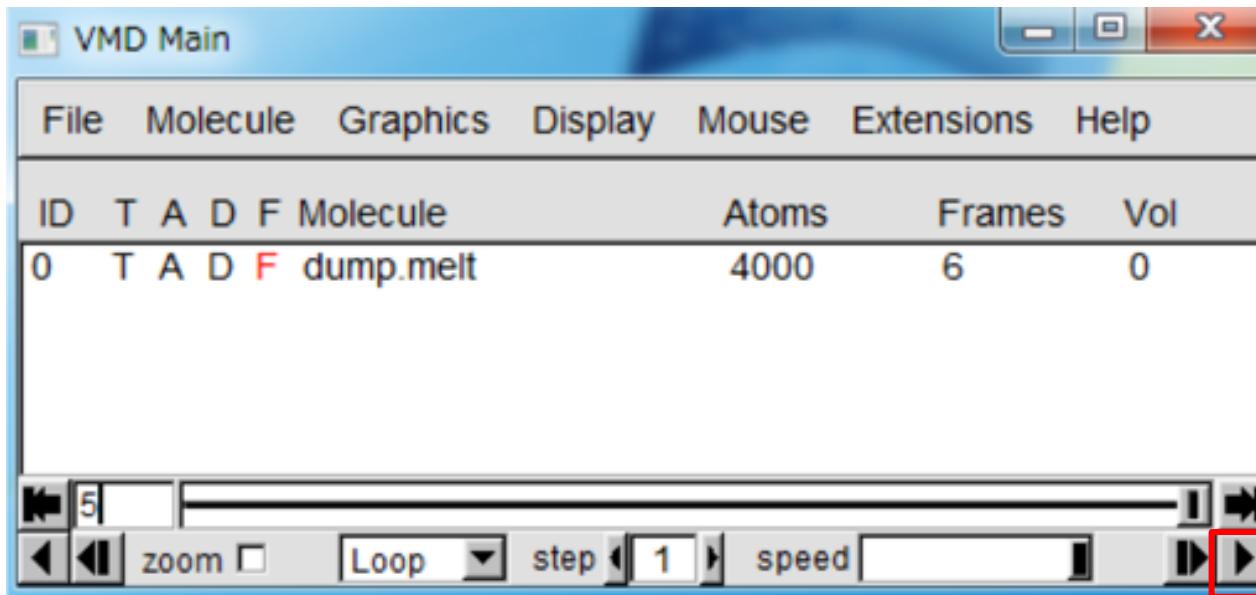
VMDで可視化する(16)

- ディスプレイ(VDWの表示)



VMDで可視化する(17)

- MDスタート



ここをクリック

可視化(VMDやOVITO)の起動



- デスクトップのメニューから起動しても良いがコマンドでも起動できる
(VMDはインストール後にコマンドが有効になる)
\$ vmd
- OVITO
<https://www.ovito.org>
でもLAMMPSのdumpファイルを可視化できる。
\$ ovito

micelle と colloid の可視化の手順

1. micelle と colloid に対しても dumpファイルを出力
2. micelle と colloid の dumpファイルをVMDで可視化

micelle の可視化(1)

```
# 2d micelle simulation

dimension 2      2次元の計算

neighbor 0.3 bin
neigh_modify delay 5

atom_style bond

# Soft potential push-off

read_data data.micelle      データファイル data.micelle を読み込む
special_bonds fene

...
fix 1 all nve      NVEアンサンブル

...
thermo 1000

dump 1 all atom 2000 dump.micelle ← #を取る
```

micelle の可視化(2)

```
#dump      2 all image 2000 image.*.jpg type type zoom 1.6
#dump_modify 2 pad 5 adiam 1 0.5 adiam 2 1.5 adiam 3 1.0
adiam 4 0.75

#dump      3 all movie 2000 movie.mpg type type zoom 1.6
#dump_modify 3 pad 5 adiam 1 0.5 adiam 2 1.5 adiam 3 1.0
adiam 4 0.75

reset timestep 0
run      500000
```

ステップ数を増やす

micelle の可視化(2)

- 編集した in.micelle の実行

```
$ lammps < in.micelle
```

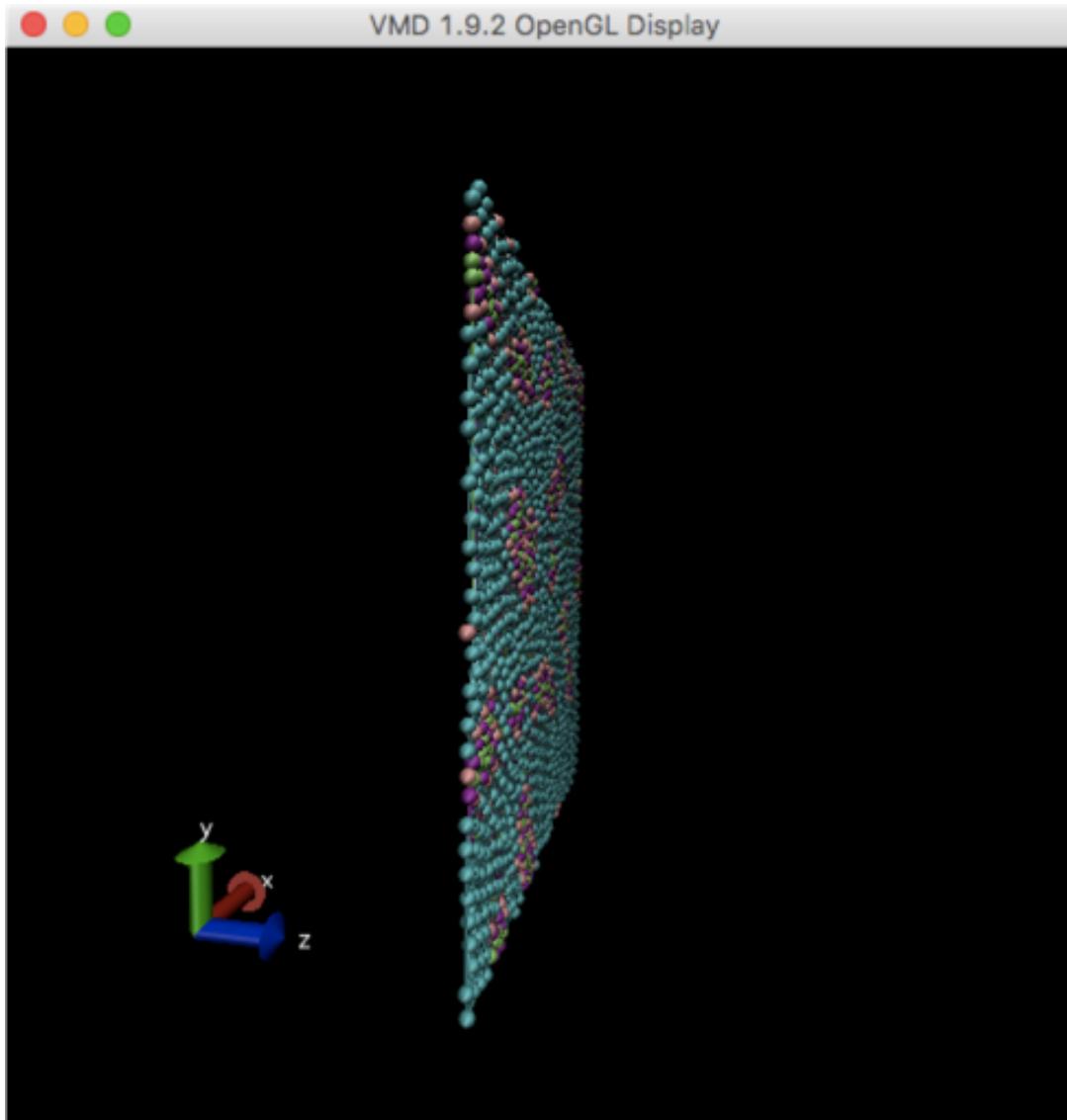
エラーメッセージなしで
Total wall time が表示されれば
正常終了

- dump.micelle というファイルができているか確認する。

```
$ ls  
data.micelle dump.micelle log.lammps  
def.micelle in.micelle
```

micelle の可視化(3)

- dump.micelle を開く



可視化をすると
計算している系が
わかりやすい。

micelle の3次元化の手順



1. 2次元の micelle が、3次元になるように入力ファイルを編集する
2. これらの結果をVMDで可視化する

作業内容

- 作業ディレクトリを作る。(例: \$HOME/lammps/micelle3d など)
\$ cd \$HOME/lammps
\$ mkdir micelle3d
- micelle ディレクトリから in.micelle をコピーする
\$ cp ./micelle/in.micelle ./micelle3d
\$ cp ./micelle/data.micelle ./micelle3d
- 入力ファイル in.micelle と data.micelle を編集する。
\$ cd ./micelle3d
\$ emacs in.micelle &
\$ emacs data.micelle &

micelleの3D化(1)

ファイルの変更点

- in.micelle(入力ファイル)
 - Dimension文コメントアウト
 - Replicateコマンド(read_dataの下)
replicate 1 1 36
 - NPT計算に変更
`fix 1 all npt temp 1.0 1.0 1.0 iso 3.0 3.0 10.0`
(計算時間がかかるようなら、run 60000 の回数を減らす)
- data.micelle(データファイル)
 - PBC-boxの大きさ
`0.0000000E+00 0.996023889 zlo zhi`
ここで、 $0.996023889 = 35.85686 / 36$

micelleの3D化(2)

in.micelle(入力ファイル)

```
# 3d micelle simulation
```

```
bond_coeff 1 50.0 0.75
```

```
# dimension 2
```

2次元の設定の
コメントアウト
→ 3次元

```
velocity all create 0.45 2349852
```

```
neighbor 0.3 bin
```

```
variable prefactor equal ramp(1.0,20.0)
```

```
neigh_modify delay 5
```

```
atom_style bond
```

```
# Soft potential push-off
```

```
read_data data.micelle
```

data.micelle
のデータファイルが
読み込まれる

```
replicate 1 1 36
```

z方向に36個
複製する

```
special_bonds fene
```

```
pair_style soft 1.12246
```

```
pair_coeff * * 0.0 1.12246
```

```
bond_style harmonic
```

```
fix 1 all npt temp 1.0 1.0 1.0 iso 3.0 3.0 10.0
```

```
fix 2 all temp/rescale 100 0.45 0.45 0.02 1.0
```

```
fix 3 all adapt 1 pair soft a * * v_prefactor
```

```
# fix 4 all enforce2d
```

コメントアウト

```
thermo 50
```

```
run 1000
```

```
unfix 3
```

1(=ID)という名称で、
全て(=all)の粒子に対して、NPT積分を行う。温
度(=temp)は、計算開始時は1.0、終了時は
1.0、時間単位1.0で
dampする。
isoは、外圧を指定する。

→ 続く

micelleの3D化(3)

in.micelle(入力ファイル)

```
→ 続く          pair_coeff 1 3 1.0 1.0 1.12246
# Main run      pair_coeff 1 4 1.0 1.0 1.12246
                  thermo     1000
pair_style    lj/cut 2.5
                  dump       1 all atom 2000 dump.micelle
# solvent/head - full-size and long-range
pair_coeff    1 1 1.0 1.0 2.5
pair_coeff    2 2 1.0 1.0 2.5
pair_coeff    1 2 1.0 1.0 2.5
                  #dump      2 all image 2000 image.*.jpg type type
                  zoom      1.6
                  #dump_modify 2 pad 5 adiam 1 0.5 adiam 2 1.5
                  adiam 3 1.0 adiam 4 0.75
# tail/tail - size-averaged and long-range
pair_coeff    3 3 1.0 0.75 2.5
pair_coeff    4 4 1.0 0.50 2.5
pair_coeff    3 4 1.0 0.67 2.5
                  #dump      3 all movie 2000 movie.mpg type type
                  zoom      1.6
                  #dump_modify 3 pad 5 adiam 1 0.5 adiam 2 1.5
                  adiam 3 1.0 adiam 4 0.75
                  reset_timestep 0
run          60000
```

計算時間がかかるようなら
減らす

solvent/tail - full-size and repulsive

micelleの3D化(4)

data.micelle(データファイル)

LAMMPS 3d micelle data file

1200 atoms

1 1.000000

300 bonds

2 1.000000

0 angles

3 1.000000

0 dihedrals

4 1.000000

0 impropers

Atoms

4 atom types

1 139 2 0.000 0.000 0.000

1 bond types

2 0 1 1.195 0.000 0.000

0 angle types

3 0 1 2.390 0.000 0.000

0 dihedral types

4 0 1 3.586 0.000 0.000

0 improper types

5 0 1 4.781 0.000 0.000

...

0.0000000E+00 35.85686 xlo xhi

0.0000000E+00 35.85686 ylo yhi

0.0000000E+00 0.996023889 zlo zhi

micelleの3D化(5)

データファイル

LAMMPS Description

5 atoms

4 bonds

1 atom types

1 bond types

-10.0 10.0 xlo xhi

-10.0 10.0 ylo yhi

-10.0 10.0 zlo zhi

Masses

1 1

Atoms

1 1 1 0.0 0.0 0.0

2 1 1 0.0 0.0 1.0

3 1 1 0.0 0.0 2.0

4 1 1 0.0 0.0 3.0

5 1 1 0.0 0.0 4.0

Bonds

1 1 1 2

2 1 2 3

3 1 3 4

4 1 4 5

データフォーマット

Masses

atom type番号, 質量

Atoms

周期境界条件
のwrap数

粒子番号, Mol-ID, atom type, x, y, z, **wx**, **wy**, **wz**

Velocities

粒子番号, vx, vy, vz

Bonds

ボンド番号, bond type, bond1, bond2

※ 速度データを含む場合
(AtomsとBondsの間)

Velocities

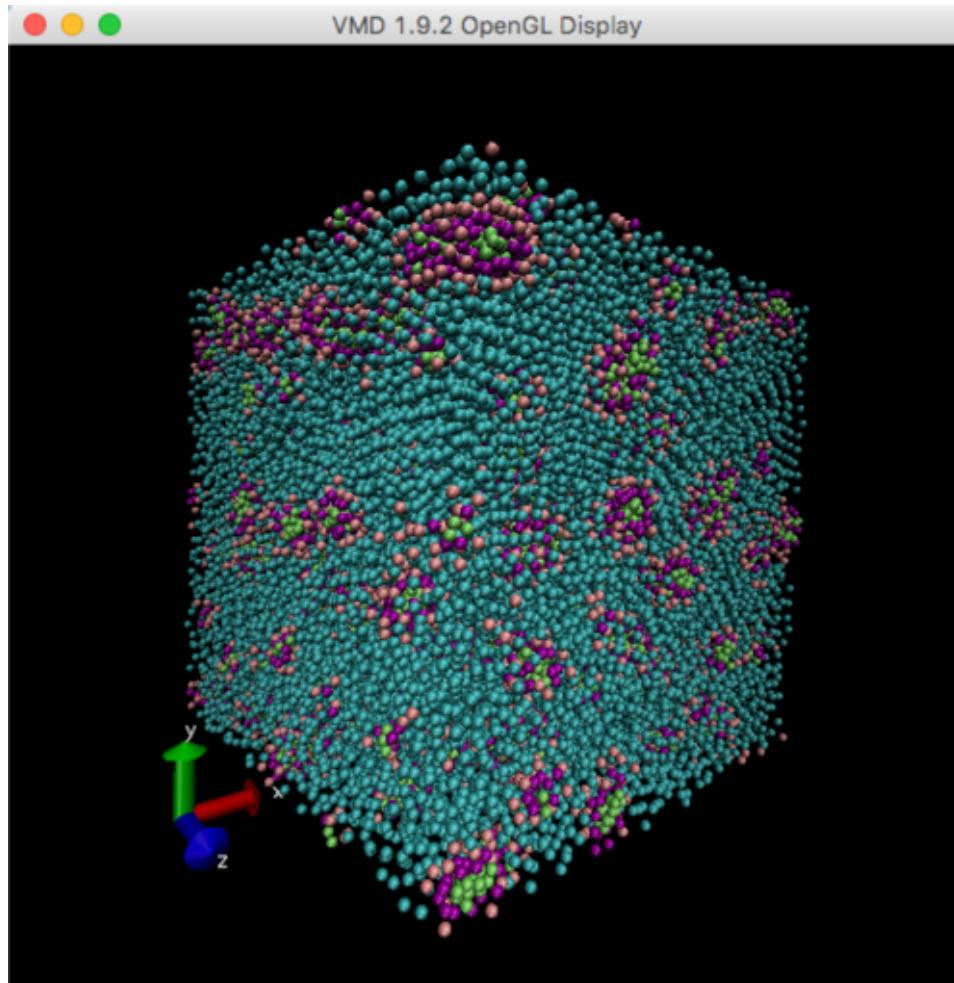
1 0.5 0.5 0.5

※ MassesとAtomsの間に、力場 パラメータを記録する
場合もある。

※ Bondsの後に、Angles, Dihedrals, Impropersを記録する場
合もある。

micelleの3D化(6)

- in.micelle と data.micelle の編集後、実行する
 \$ lammmps < in.micelle
- dump.micelle を開く



VMDで可視化すると、3D になつたことが確認出来る

サイズを大きくした計算(1)

- 作業ディレクトリを作る。(例: \$HOME/lammps/melt2)
\$ cd \$HOME/lammps
\$ mkdir melt2
- 作成した作業ディレクトリへ移動する。(\$HOME/lammps/melt2)
\$ cd melt2
- meltディレクトリから in.melt をコピーする
\$ cp ../melt/in.melt ./
- melt の入力ファイルを開く
\$ emacs in.melt

サイズを大きくした計算(2)

```
# 3d Lennard-Jones melt

units          lj
atom_style    atomic

lattice        fcc 0.8442
region         box block 0 40 0 40 0 40      256,000原子になる
create_box     1 box
create_atoms   1 box
mass           1 1.0

velocity       all create 3.0 87287

pair_style     lj/cut 2.5
pair_coeff     1 1 1.0 1.0 2.5

neighbor       0.3 bin
neigh_modify   every 20 delay 0 check no

fix            1 all nve
```

サイズを大きくした計算(3)

- 編集した in.melt の実行

```
$ lammps < in.melt
```

- ログファイルの確認

```
$ cat log.lammps
```

...

Created 256000 atoms

...

サイズを大きくした計算(4)

examples/melt

実行時間(時:分:秒)

iMac:
2.8 GHz Intel Core i7

	手持ちのPC(iMac)	
プロセス数	1	4
4000原子1,000ステップ	0:00:02	0:00:01
4000原子10,000ステップ	0:00:29	0:00:11
256,000原子1,000ステップ	0:03:06	0:01:13
256,000原子10,000ステップ	0:31:15	0:12:48
2,048,000原子1,000ステップ	0:27:04	0:10:06
2,048,000原子10,000ステップ		1:46:38

フラットMPI

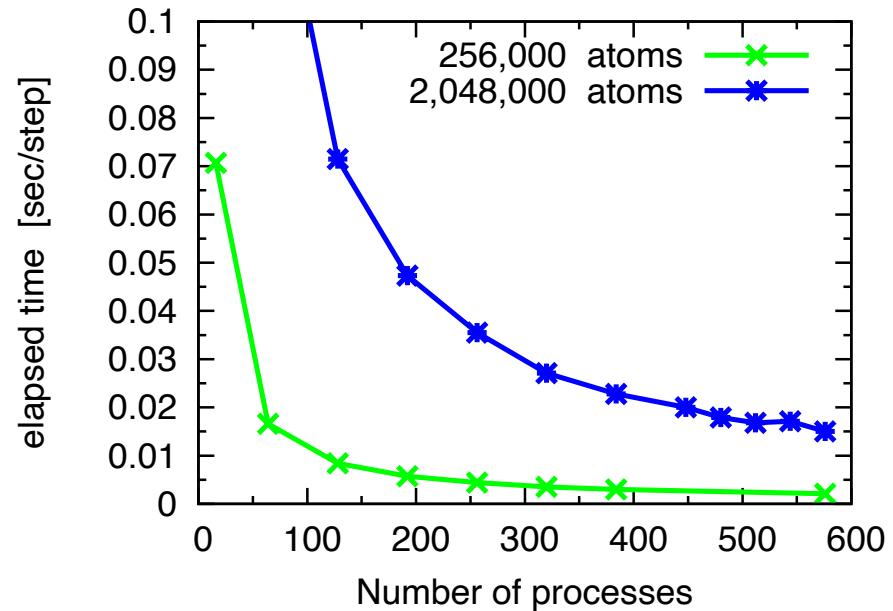
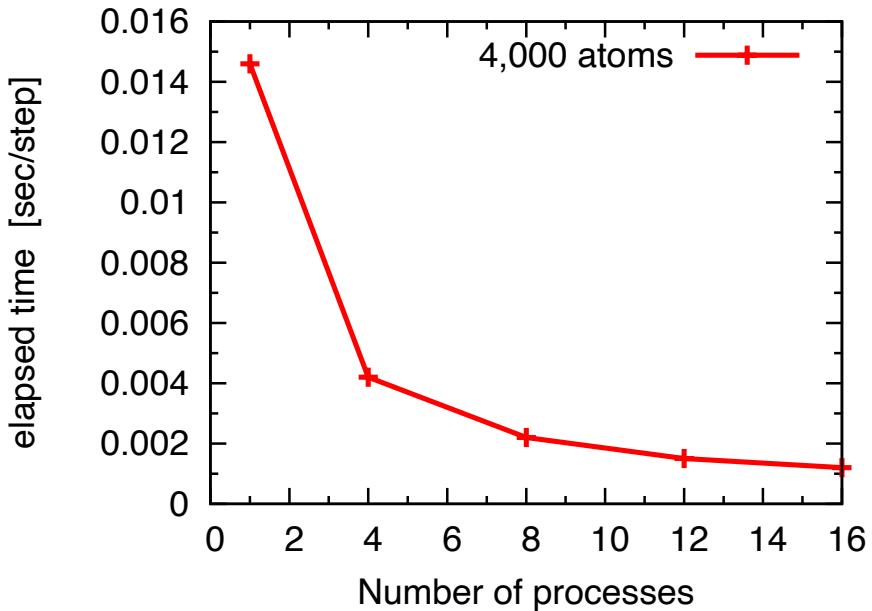
FX10		
16	256	576
0:00:01	0:00:05	
0:00:12	0:00:03	
0:01:11	0:00:04	0:00:02
0:11:47	0:00:44	0:00:21
0:08:56	0:00:36	0:00:15
1:28:35	0:05:55	0:02:30

- 主にプロセス数当たりの粒子数減少に伴う実行時間の減少
→ 計算規模(原子数など)が小さくて、プロセス数を増やすと、通信等により実行時間が増加する場合がある。
- 計算規模が大きくなる → [スパコン\(HPCI\)の利用へ](#)

サイズを大きくした計算(5)

examples/melt

フラットMPI(原子数:4,000、256,000、2,048,000)



4,000原子: ~16プロセス
 256,000原子: ~600プロセス
 2,048,000原子: 600プロセス以上