

2017年7月13日(木) 計算科学振興財団

LAMMPSの基礎的利用セミナー LAMMPSのexamplesの実施

高度情報科学技術研究機構(RIST)
利用支援部 吉澤香奈子

Outline

LAMMPSのexamplesの実施

LAMMPSパッケージ: lammps-30Jul16/examples

- melt, micelle, colloid を実行する
- 計算結果をVMDで可視化する
- micelle と colloid の3次元化の課題

LAMMPSのexamplesについて

http://lammps.sandia.gov/doc/Section_example.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
melt	rapid melt of 3d LJ system
micelle	self-assembly of small lipid-like molecules into 2d bilayers
colloid	big colloid particles in a small particle solvent, 2d system
peptide	dynamics of a small solvated peptide chain (5-mer)

高分子物理向けのexamples

- melt: FCC格子状に並んだ LJ 粒子が溶けて拡散
- micelle: 3要素からなるミセル系。会合していく
2次元の計算(→ 3次元への拡張を考える)
- colloid: 大きいコロイド粒子と小さい LJ 粒子の系
2次元の計算(→ 3次元への拡張を考える)
※ COLLOID package のインストールが必要

examples/melt(1)

melt: FCC格子状に並んだLJ粒子が溶けて拡散

入力ファイル: in.melt

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

units	lj	Lennard-Jones(LJ)
atom_style	atomic	古典粒子
lattice	fcc 0.8442	格子定数: FCC 0.8442
region	box block 0 10 0 10 0 10	シミュレーションボックスの指定
create_box	1 box	
create_atoms	1 box	
mass	1 1.0	
velocity	all create 3.0 87287	速度の設定
pair_style	lj/cut 2.5	力場パラメータの設定
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	NVEアンサンブル

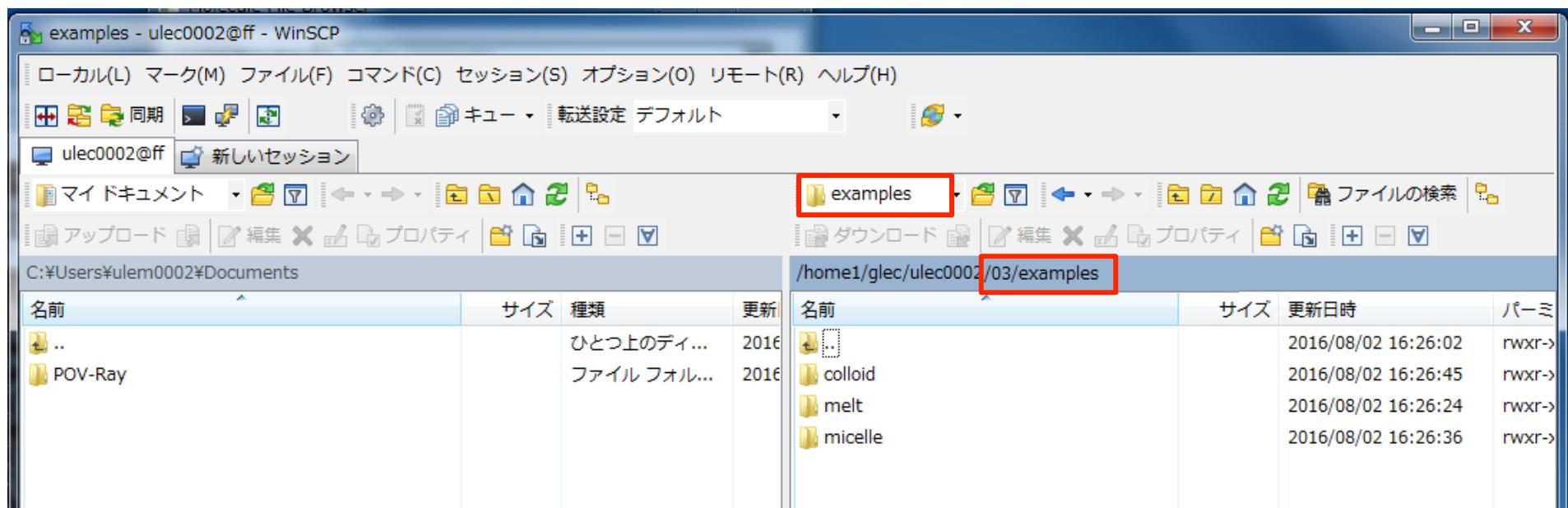
examples/melt(2)

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 &  
#       axes yes 0.8 0.02 view 60 -30          # は、コメントアウト  
#dump_modify 2 pad 3                            dump:出力形式の指定  
  
#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  
run        250                                  計算実行(step)数
```

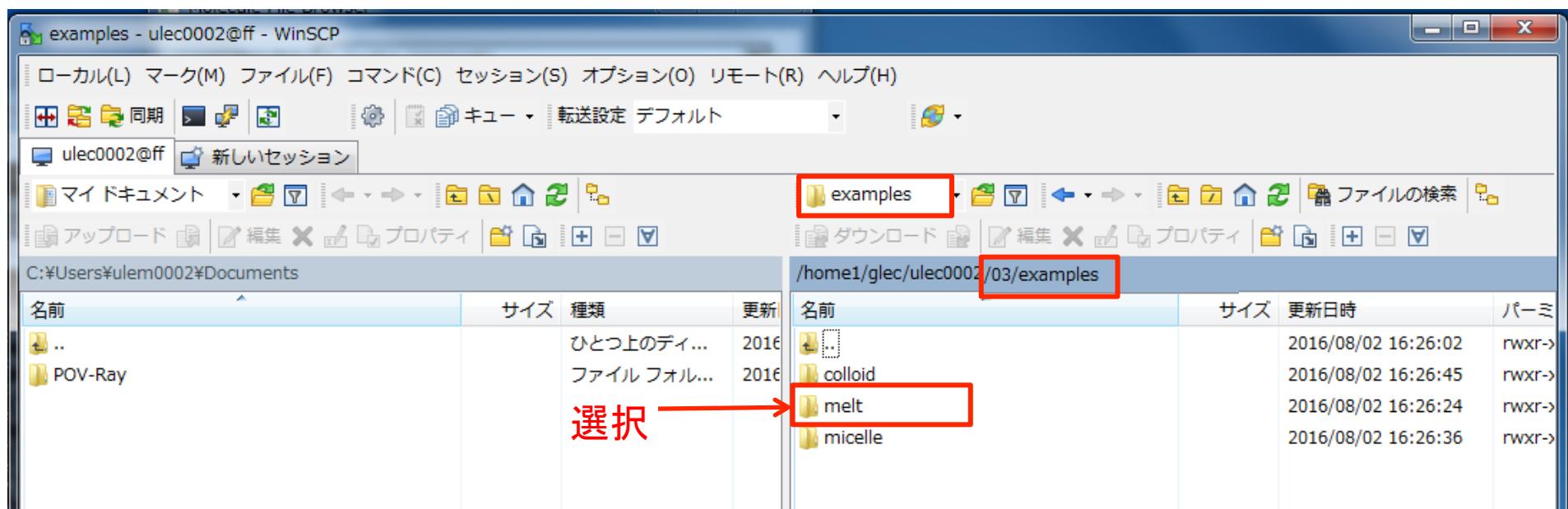
examplesの実行

- FOCUSスパコンへログイン
- WinSCPの起動
- \$HOME/03/examples へ移動



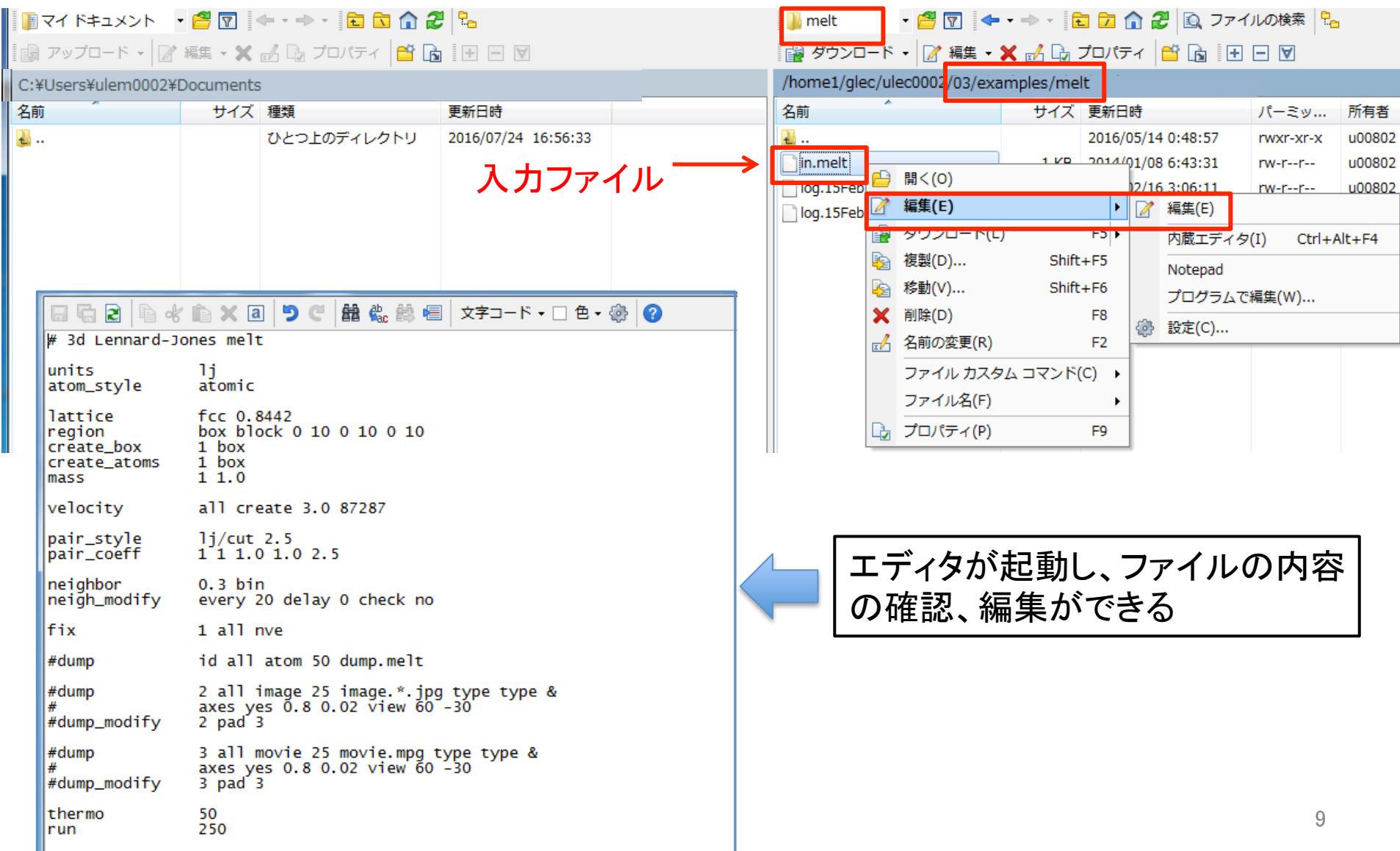
meltの実行(1)

- melt へ移動



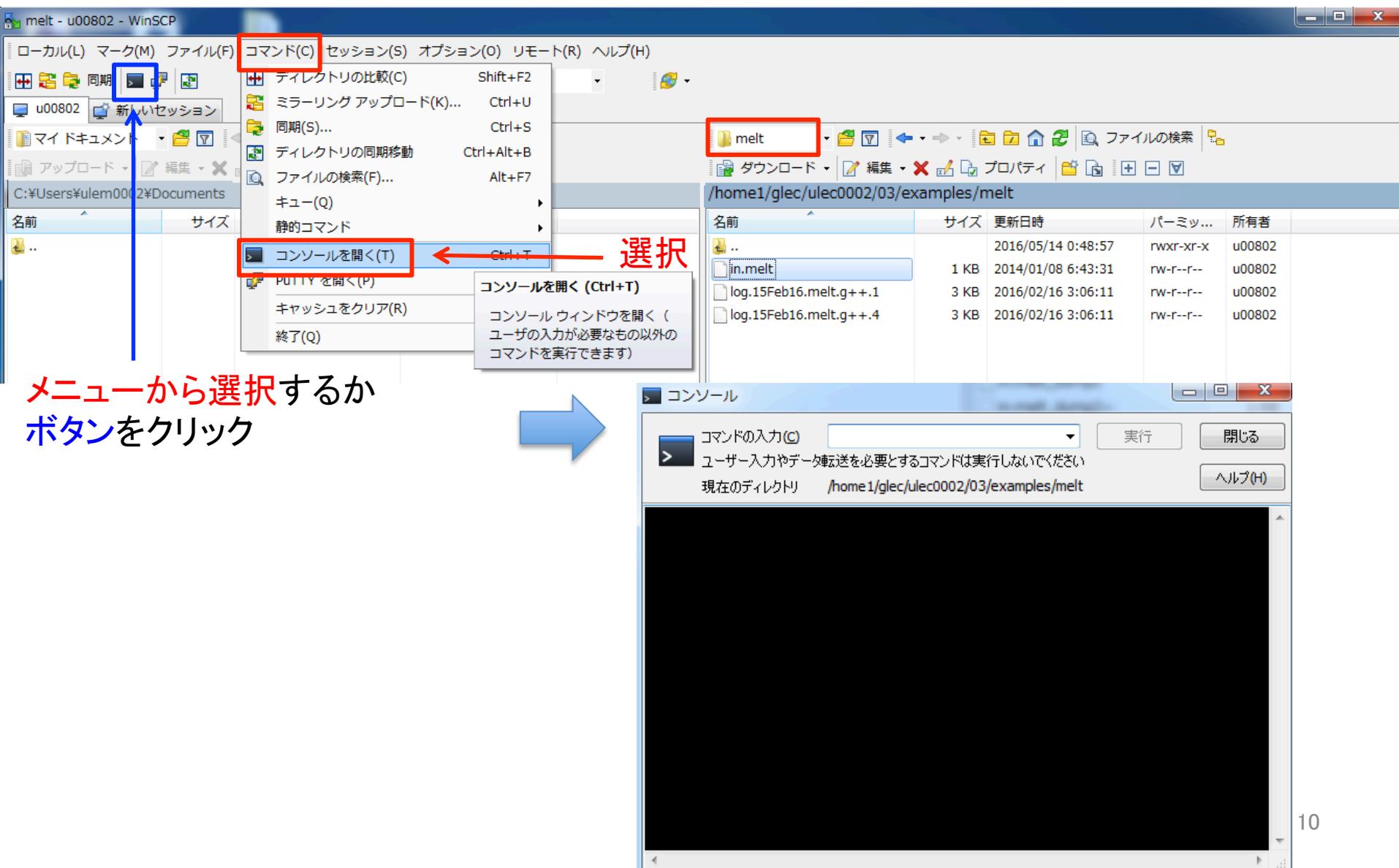
meltの実行(2)

- melt の入力ファイル in.melt を開く(中身の確認)



meltの実行(3)

- コンソールの起動



meltの実行(4)

- バッチスクリプト(job_melt.sh)の確認

```
#!/bin/bash
#SBATCH -p e001h_lec
#SBATCH -n 12
#SBATCH -J Imp
#SBATCH -o Imp_o.%J
#SBATCH -e Imp_e.%J

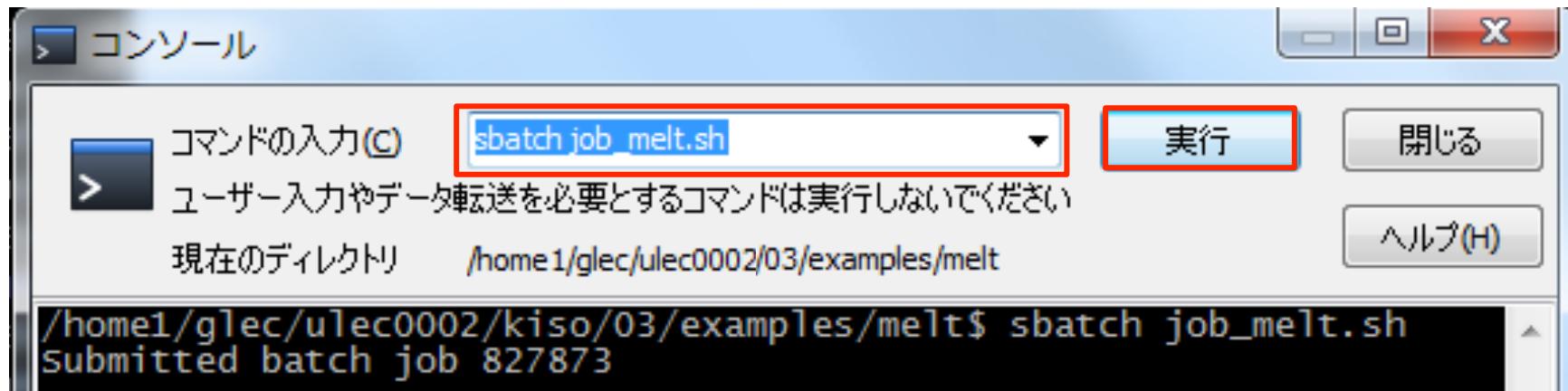
module load PrgEnv-intel
module load impi

export EXE=/home1/share/LAMMPS/
lammps-30Jul16/src/Imp_mpi

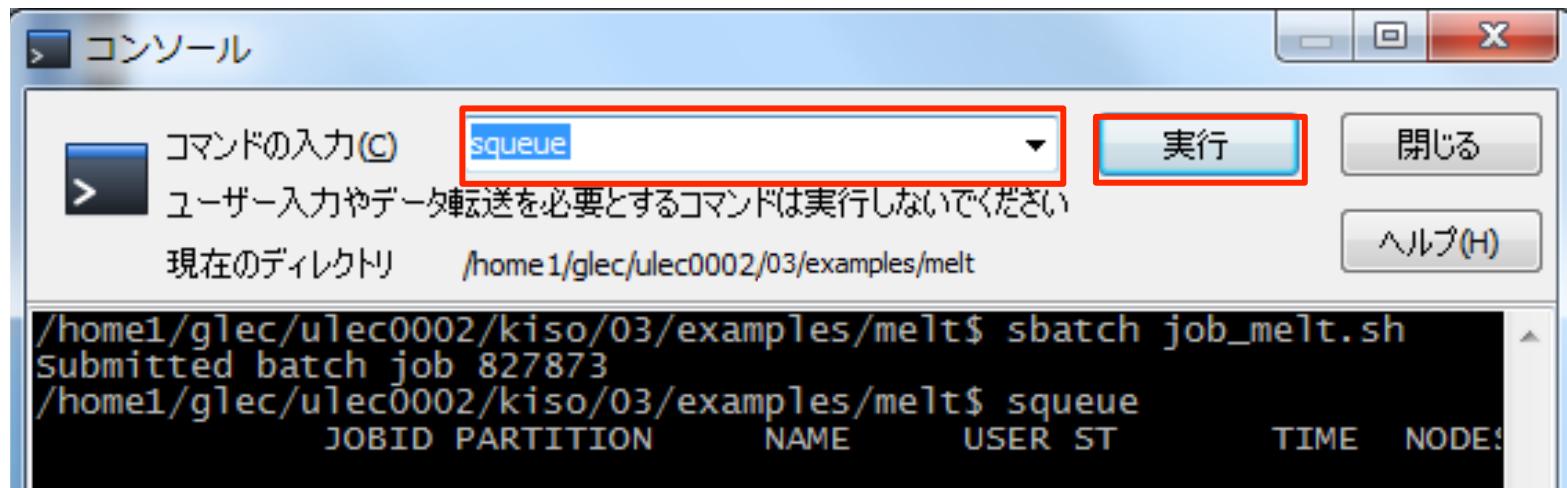
mpirun -np ${SLURM_NTASKS} $EXE < in.melt
```

meltの実行(5)

- \$ sbatch job_melt.sh
を実行

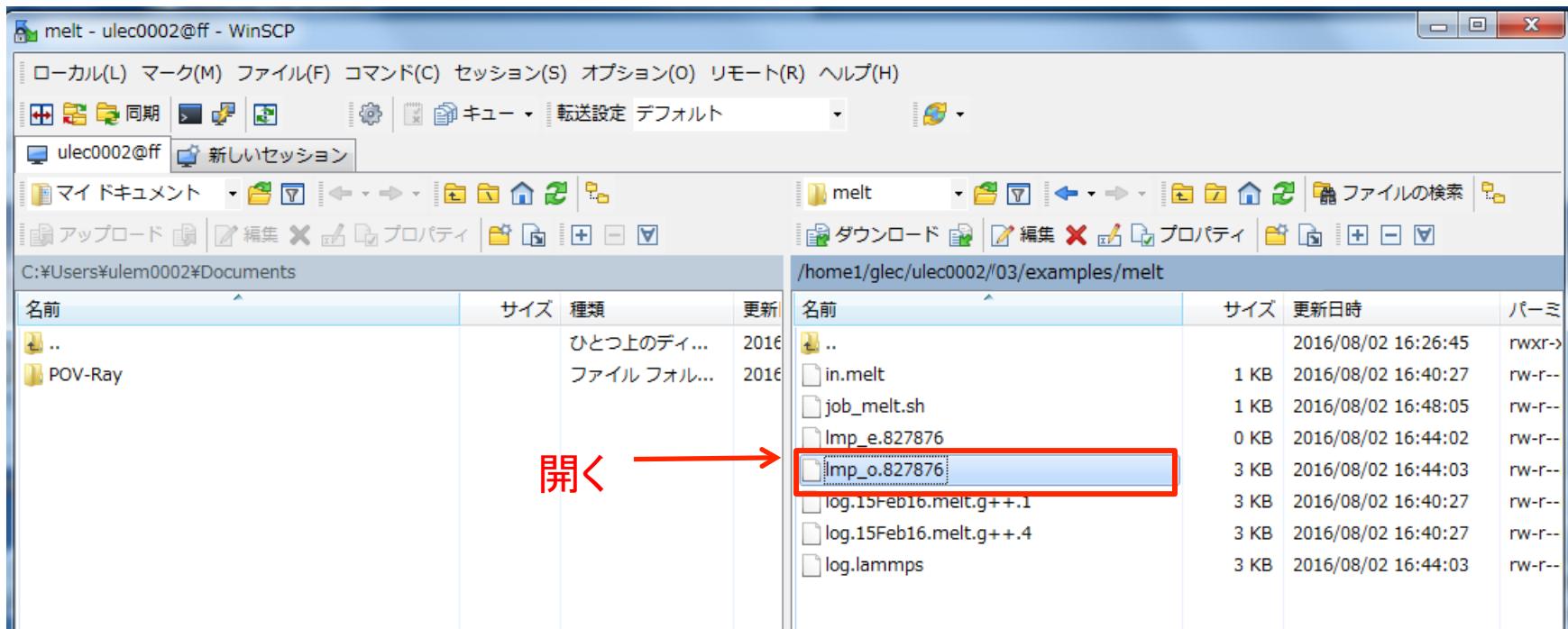


- 投入したジョブ状態の確認
\$ squeue



meltの実行(6)

- 実行結果の確認



meltの実行(7)

- 実行結果

```
/home1/glec/ulec0002/kiso/03/examples/melt/lmp_0.827876 - ulec0002@ff - エディタ - WinSCP
LAMMPS (16 Feb 2016)
Lattice spacing in x,y,z = 1.6796 1.6796 1.6796
Created orthogonal box = (0 0 0) to (16.796 16.796 16.796)
  2 by 2 by 3 MPI processor grid
Created 4000 atoms
Neighbor list info ...
  1 neighbor list requests
  update every 20 steps, delay 0 steps, check no
  max neighbors/atom: 2000, page size: 100000
  master list distance cutoff = 2.8
  ghost atom cutoff = 2.8
  binsize = 1.4, bins = 12 12 12
Setting up Verlet run ...
  unit style : lj
  Current step: 0
  Time step   : 0.005
Memory usage per processor = 2.05293 Mbytes
Step Temp E_pair E_mol TotEng Press
      0      3    -6.7733681      0    -2.2744931   -3.7033504
     50    1.6746937   -4.7940546      0    -2.282642   5.5845586
    100    1.6510577   -4.7567887      0    -2.2808214   5.8208747
    150    1.6430747   -4.7443111      0    -2.2803153   5.8846894
    200    1.6393075   -4.7404901      0    -2.2821436   5.9139187
    250    1.6733412   -4.790949      0    -2.2815647   5.6864593
Loop time of 0.125969 on 12 procs for 250 steps with 4000 atoms

Performance: 857356.818 tau/day, 1984.622 timesteps/s
98.9% CPU use with 12 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:
Section | min time | avg time | max time | %varavg | %total
-----+-----+-----+-----+-----+-----+
Pair    | 0.082163 | 0.086503 | 0.089167 | 0.7 | 68.67
Neigh   | 0.010957 | 0.0113 | 0.011716 | 0.2 | 8.97
Comm    | 0.022094 | 0.025004 | 0.029783 | 1.5 | 19.85
Output   | 0.00019717 | 0.00022634 | 0.00043607 | 0.4 | 0.18
Modify   | 0.001812 | 0.0019721 | 0.0020609 | 0.1 | 1.57
Other    | 0.000963 |          |          |          | 0.76

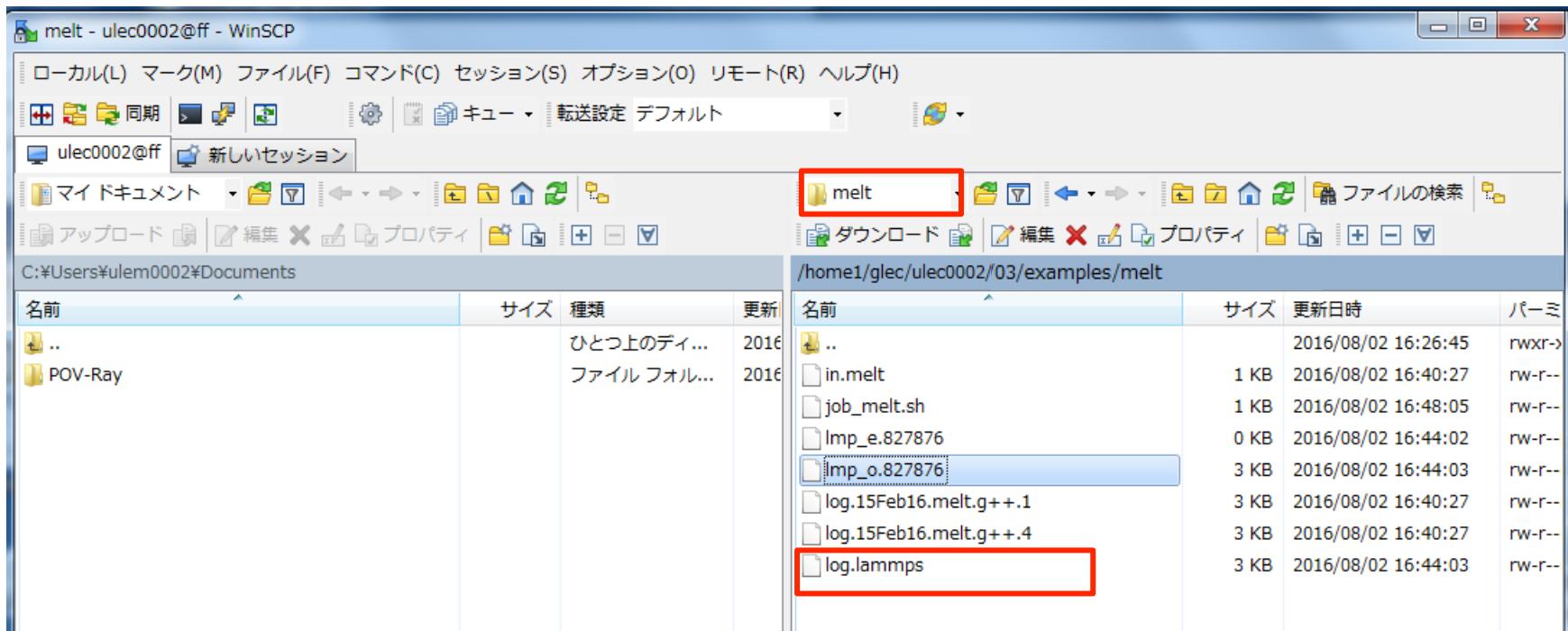
Nlocal: 333.333 ave 346 max 324 min
Histogram: 2 1 2 1 2 2 0 0 0 2
Nghost: 1518 ave 1539 max 1501 min
Histogram: 2 0 1 2 3 1 1 1 0 1
Neighs: 12623.3 ave 13694 max 12118 min
Histogram: 2 1 5 1 1 0 1 0 0 1

Total # of neighbors = 151480
Ave neighs/atom = 37.87
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

meltの実行(8)

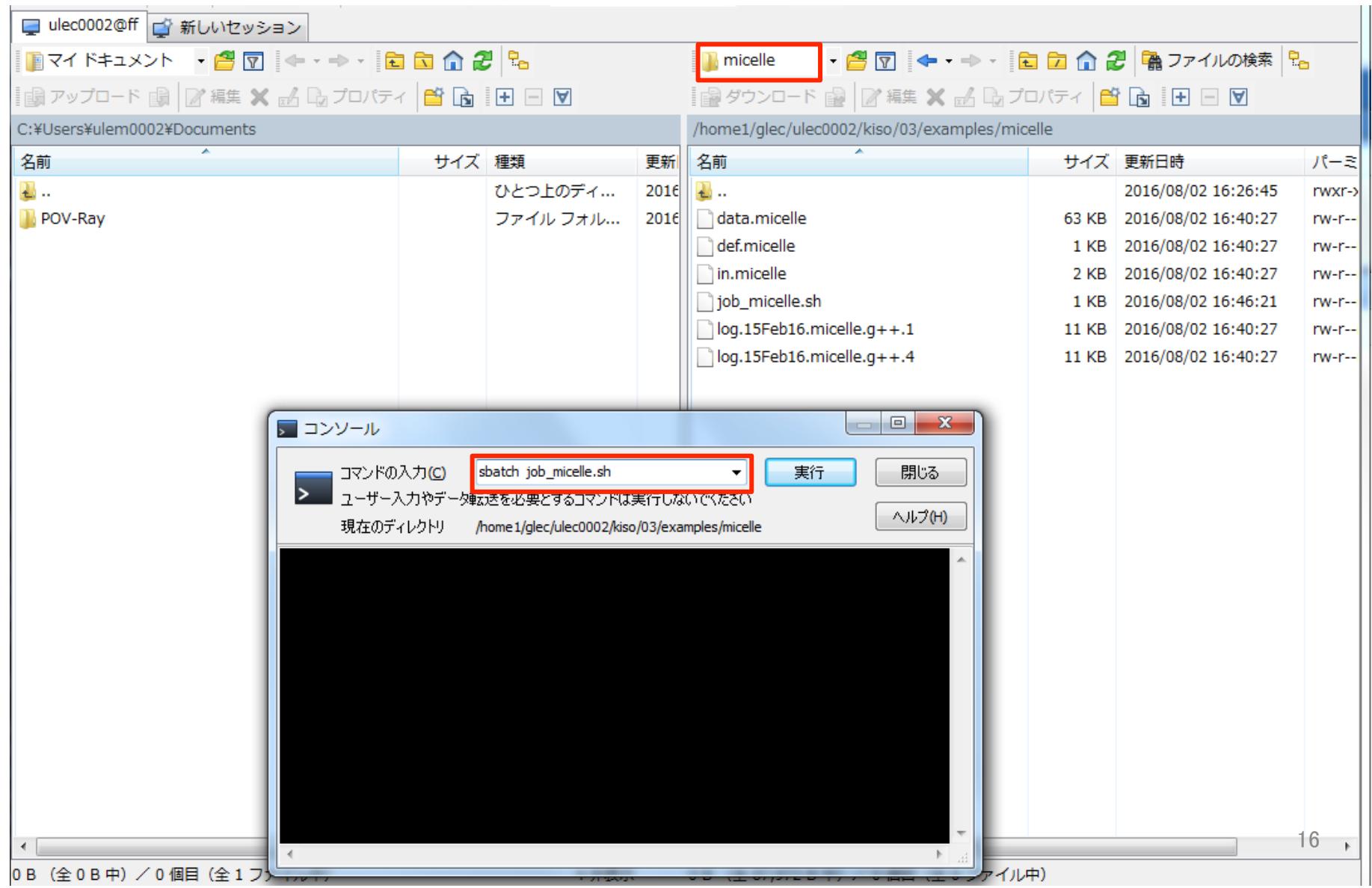
- 実行後、ログファイルも出力される



ログファイル

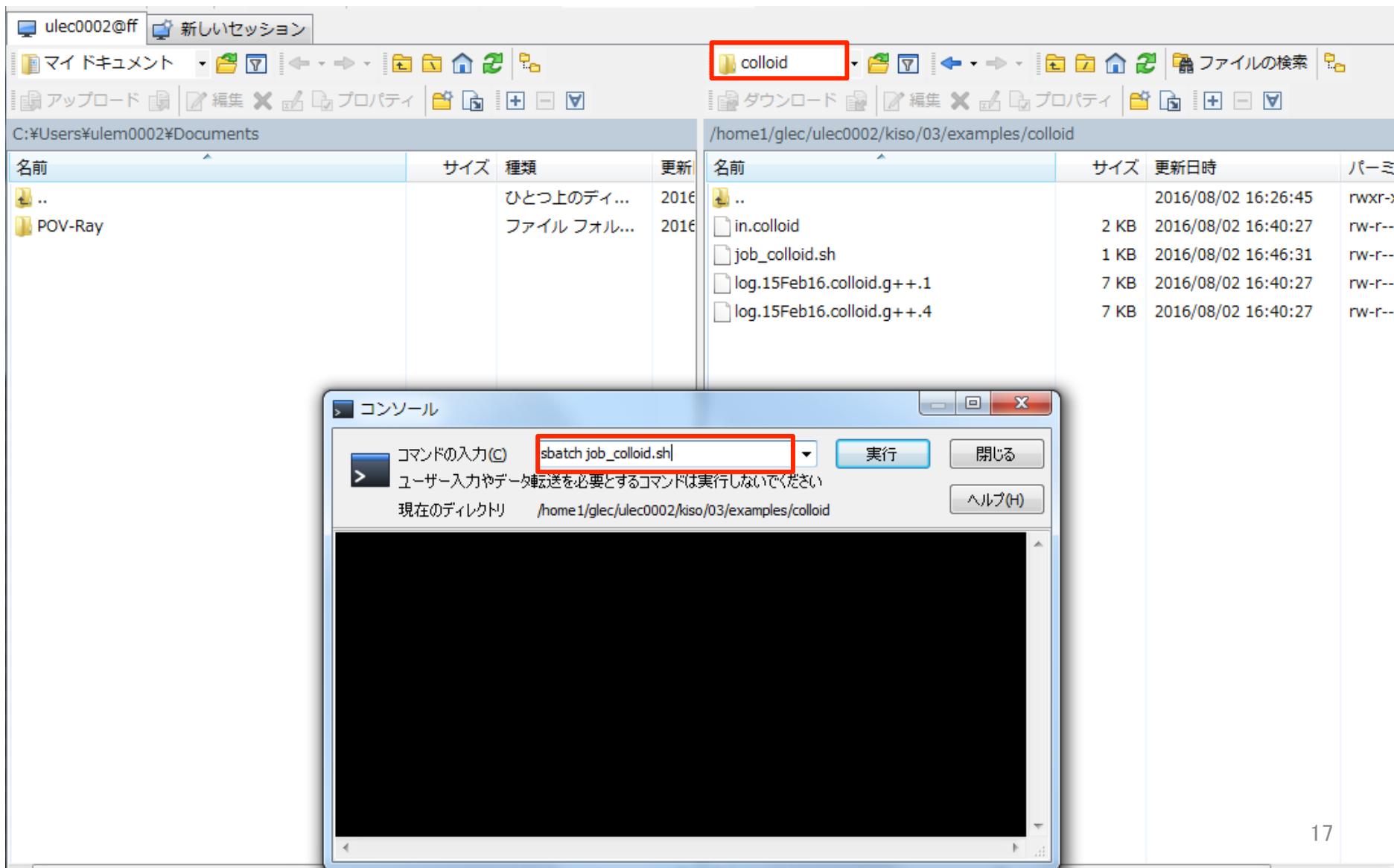
micelleの実行

- micelle へ移動 → melt と同様の操作



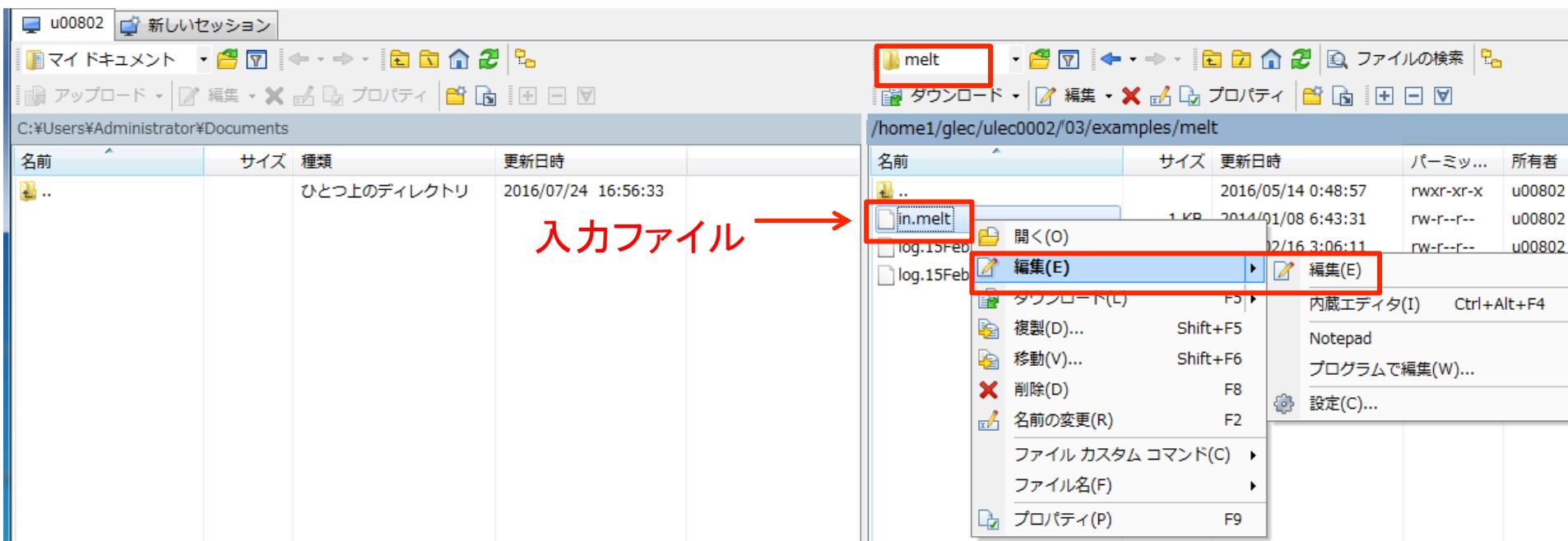
colloidの実行

- colloid へ移動 → melt, micelle と同様の操作



VMDで可視化する(1)

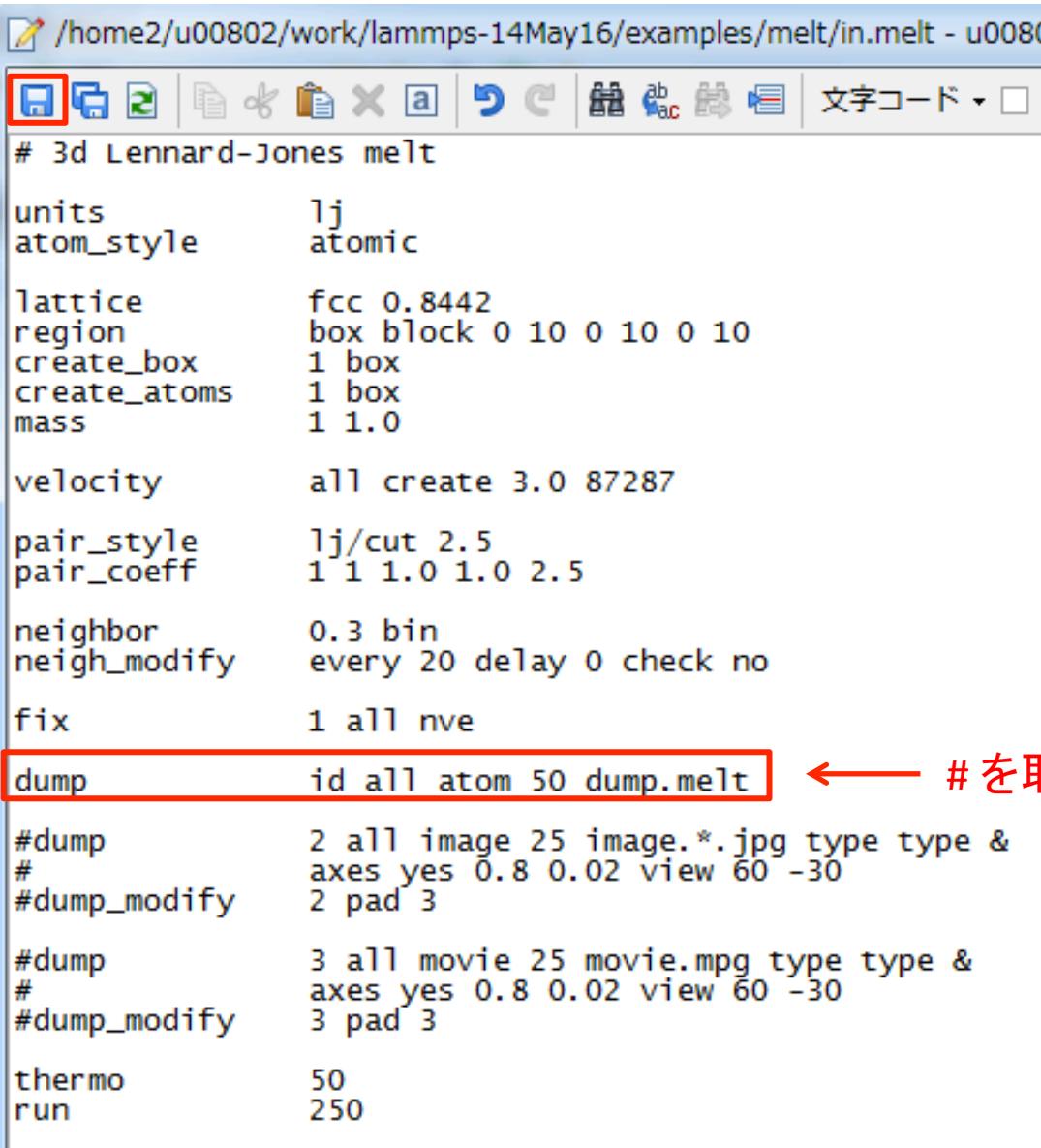
- LAMMPSでdumpファイルの出力 → 入力ファイルの編集
- `$HOME/03/examples/melt` へ移動
- melt の入力ファイルを開く



VMDで可視化する(2)

- melt の入力ファイルの編集

編集が終わったら、保存



```
/home2/u00802/work/lammps-14May16/examples/melt/in.melt - u0080
# 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      ← #を取る
#dump         2 all image 25 image.*.jpg type type &
#               axes yes 0.8 0.02 view 60 -30
#dump_modify  2 pad 3

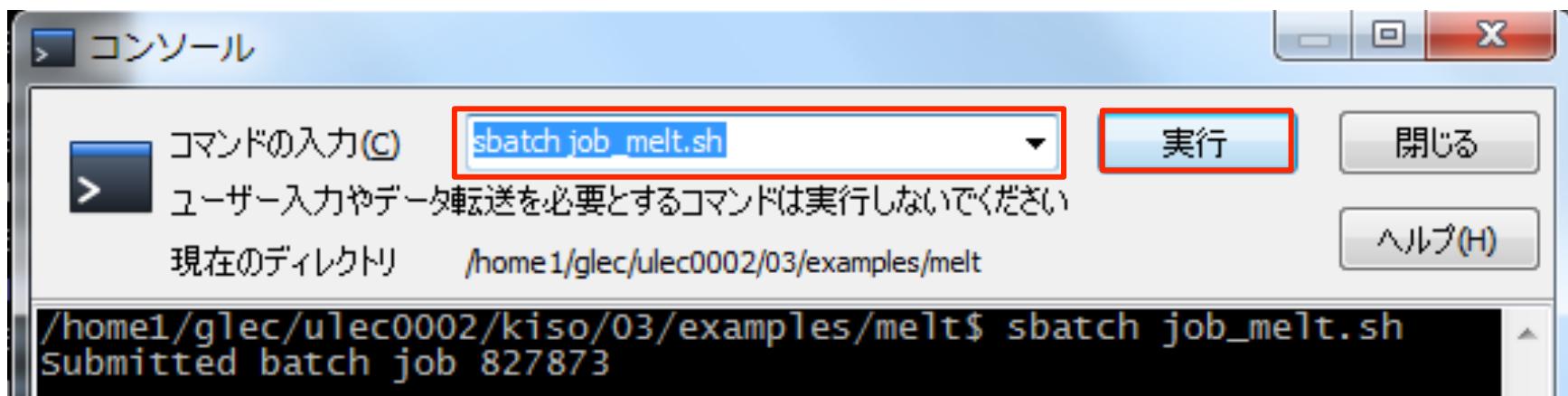
#dump         3 all movie 25 movie.mpg type type &
#               axes yes 0.8 0.02 view 60 -30
#dump_modify  3 pad 3

thermo        50
run           250
```

VMDで可視化する(3)

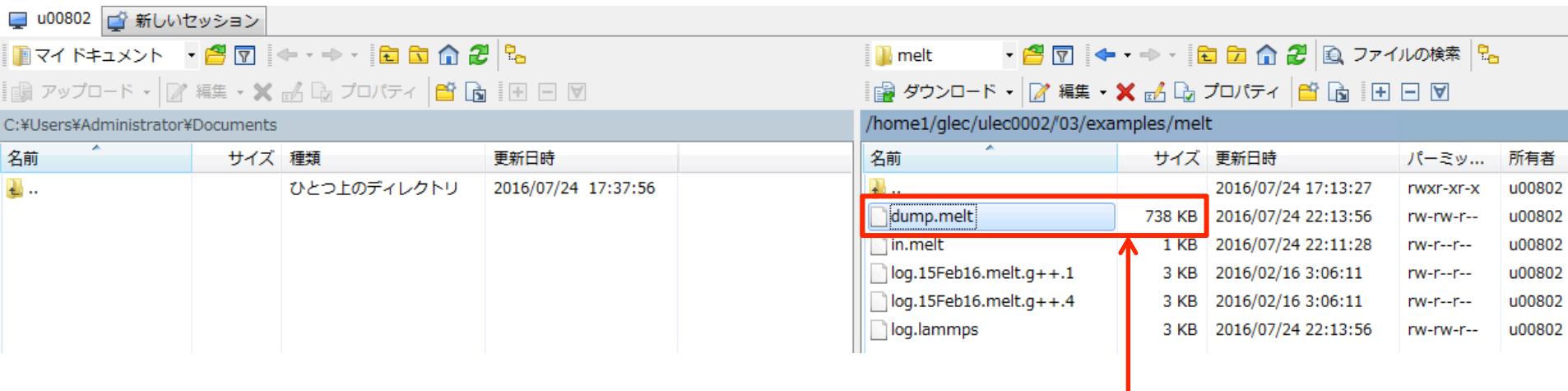
- 再びコンソールを起動して

```
$ sbatch job_melt.sh  
を実行
```



VMDで可視化する(4)

- meltの実行結果



dump.melt というファイルが
出来ている

```
Performance: 857356.818 tau/day, 1984.622 timesteps/s
98.9% CPU use with 12 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:
Section | min time | avg time | max time | %varavg| %total
-----+-----+-----+-----+-----+-----+
Pair    | 0.082163 | 0.086503 | 0.089167 | 0.7 | 68.67
Neigh   | 0.010957 | 0.0113 | 0.011716 | 0.2 | 8.97
Comm    | 0.022094 | 0.025004 | 0.029783 | 1.5 | 19.85
Output   | 0.00019717 | 0.00022634 | 0.00043607 | 0.4 | 0.18
Modify   | 0.001812 | 0.0019721 | 0.0020609 | 0.1 | 1.57
Other    | 0.000963 | 0.000963 | 0.000963 | 0.76 | 0.76

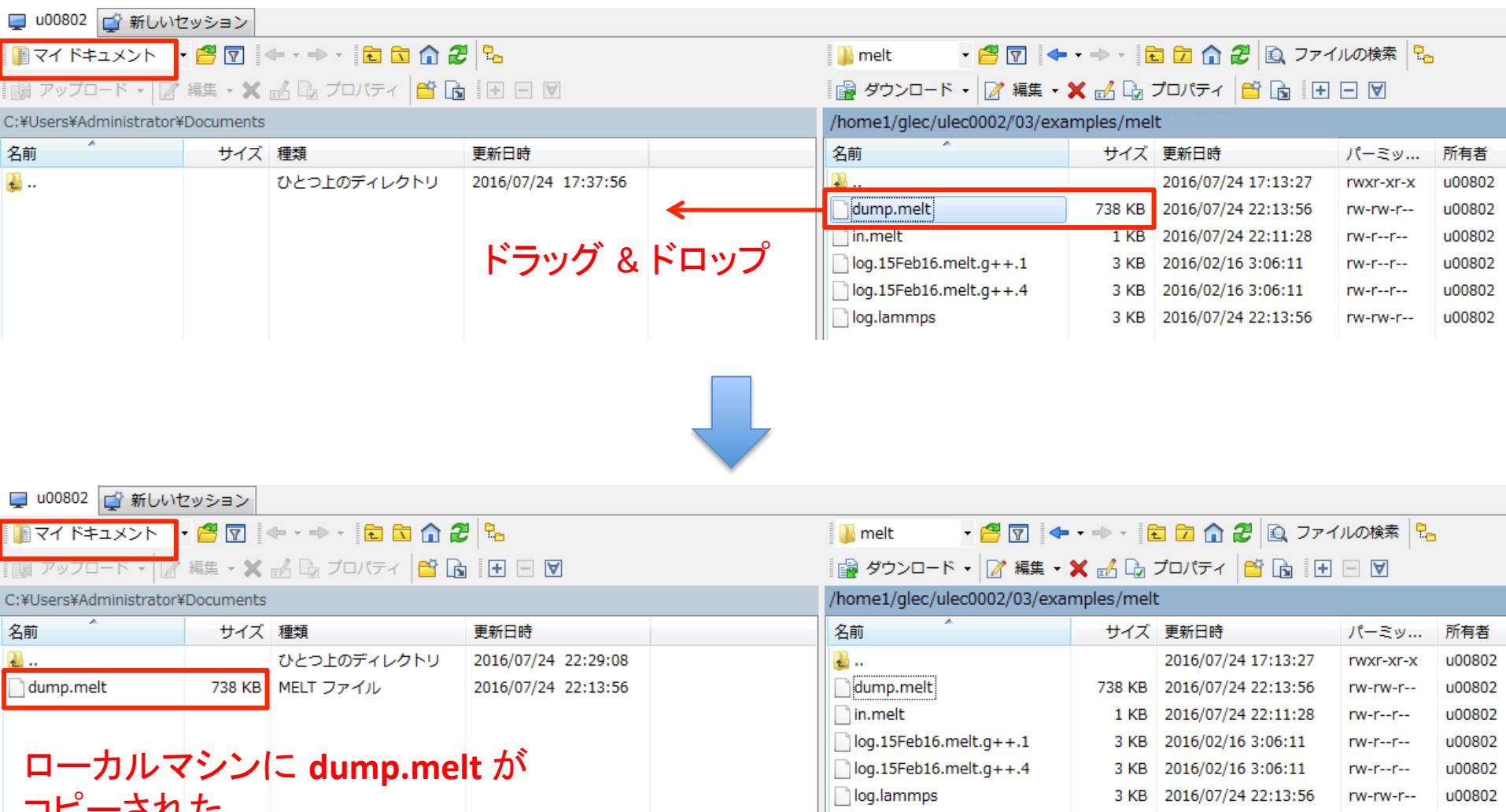
Nlocal: 333.333 ave 346 max 324 min
Histogram: 2 1 2 1 2 2 0 0 0 2
Nghost: 1518 ave 1539 max 1501 min
Histogram: 2 0 1 2 3 1 1 1 0 1
Neighs: 12623.3 ave 13694 max 12118 min
Histogram: 2 1 5 1 1 0 1 0 0 1

Total # of neighbors = 151480
Ave neighs/atom = 37.87
Neighbor list builds = 12
Dangerous builds not checked
Total wall time: 0:00:00
```

正常終了

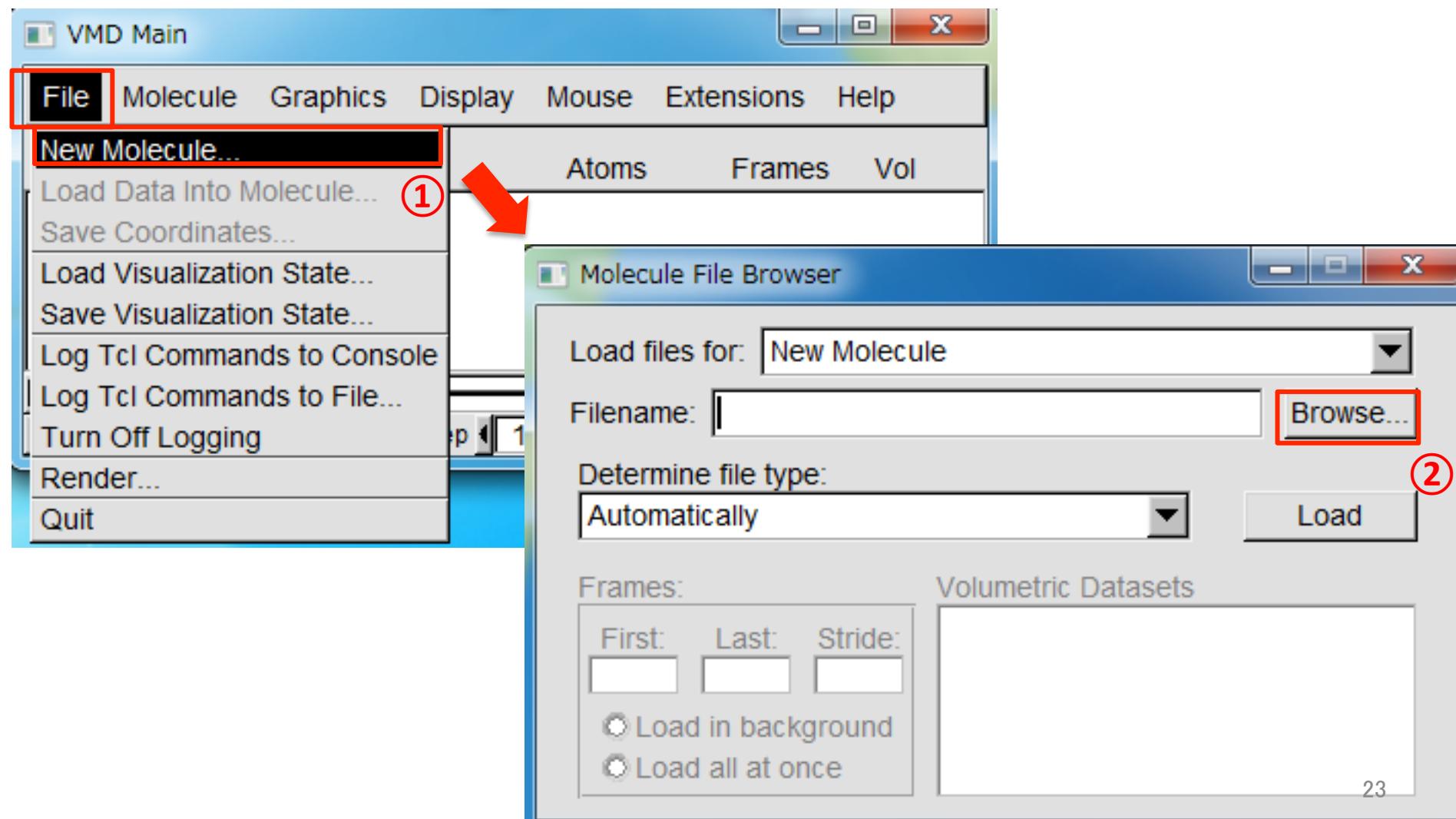
VMDで可視化する(5)

- dump.melt をローカルマシンへ ftp



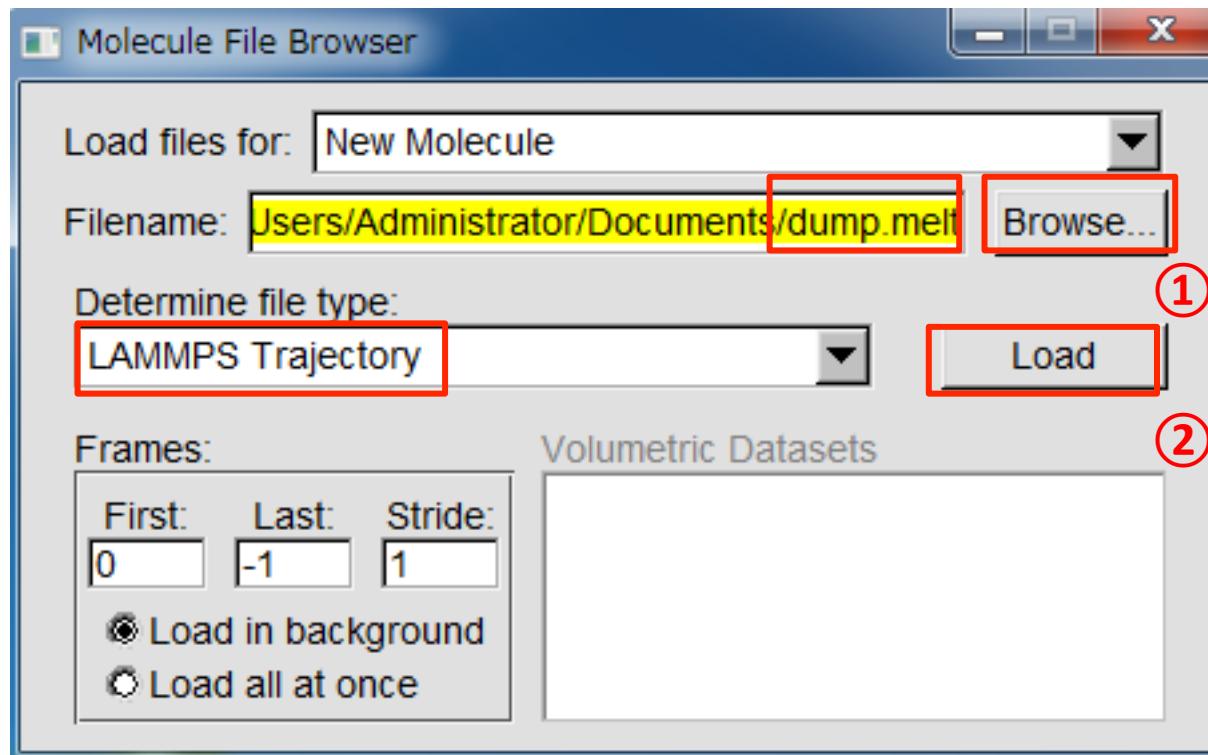
VMDで可視化する(6)

- VMDの起動
- dump.melt を開く



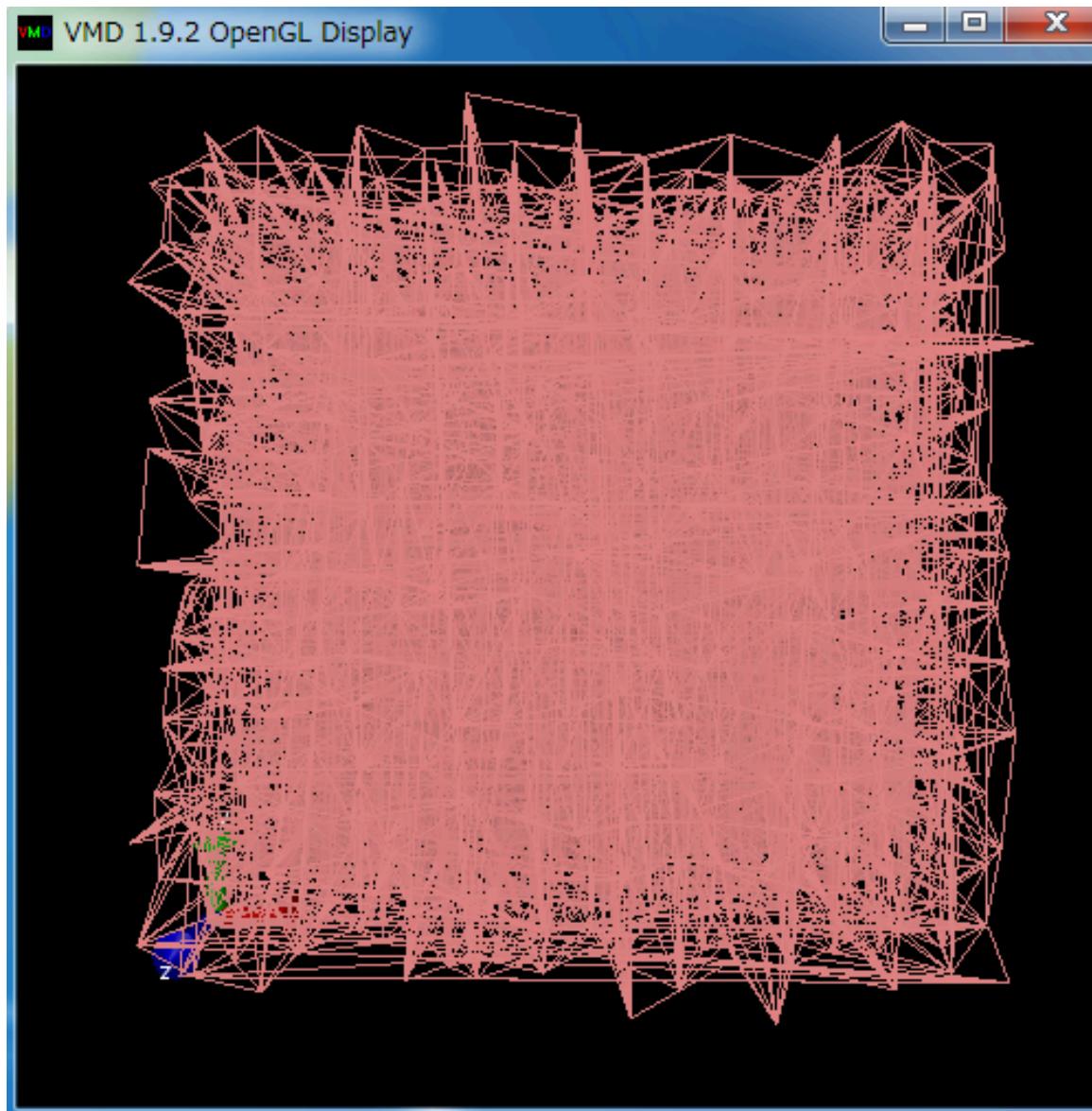
VMDで可視化する(7)

- ファイルタイプの選択 → 「LAMMPS Trajectory」



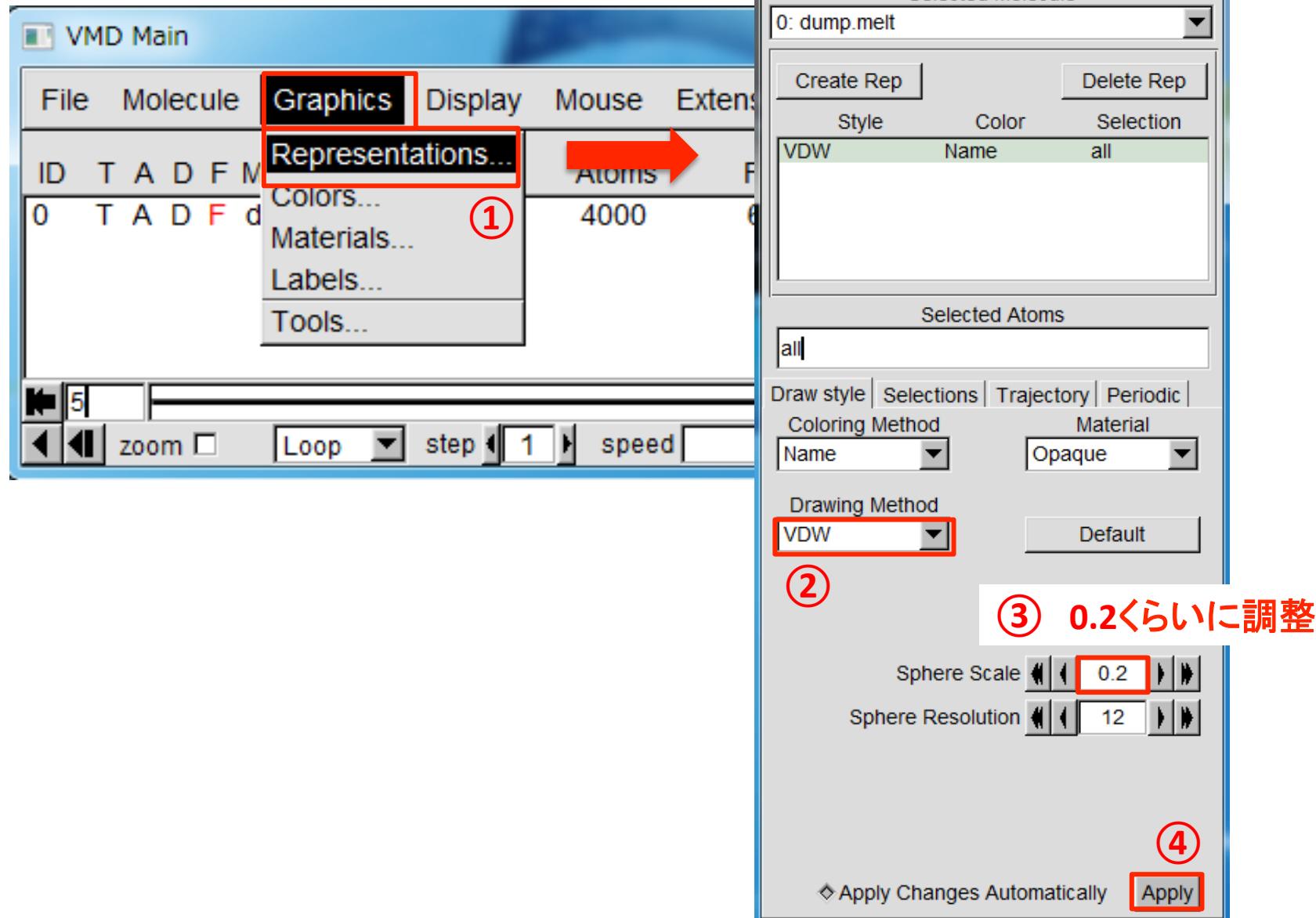
VMDで可視化する(8)

- ディスプレイの起動(Linesの表示)



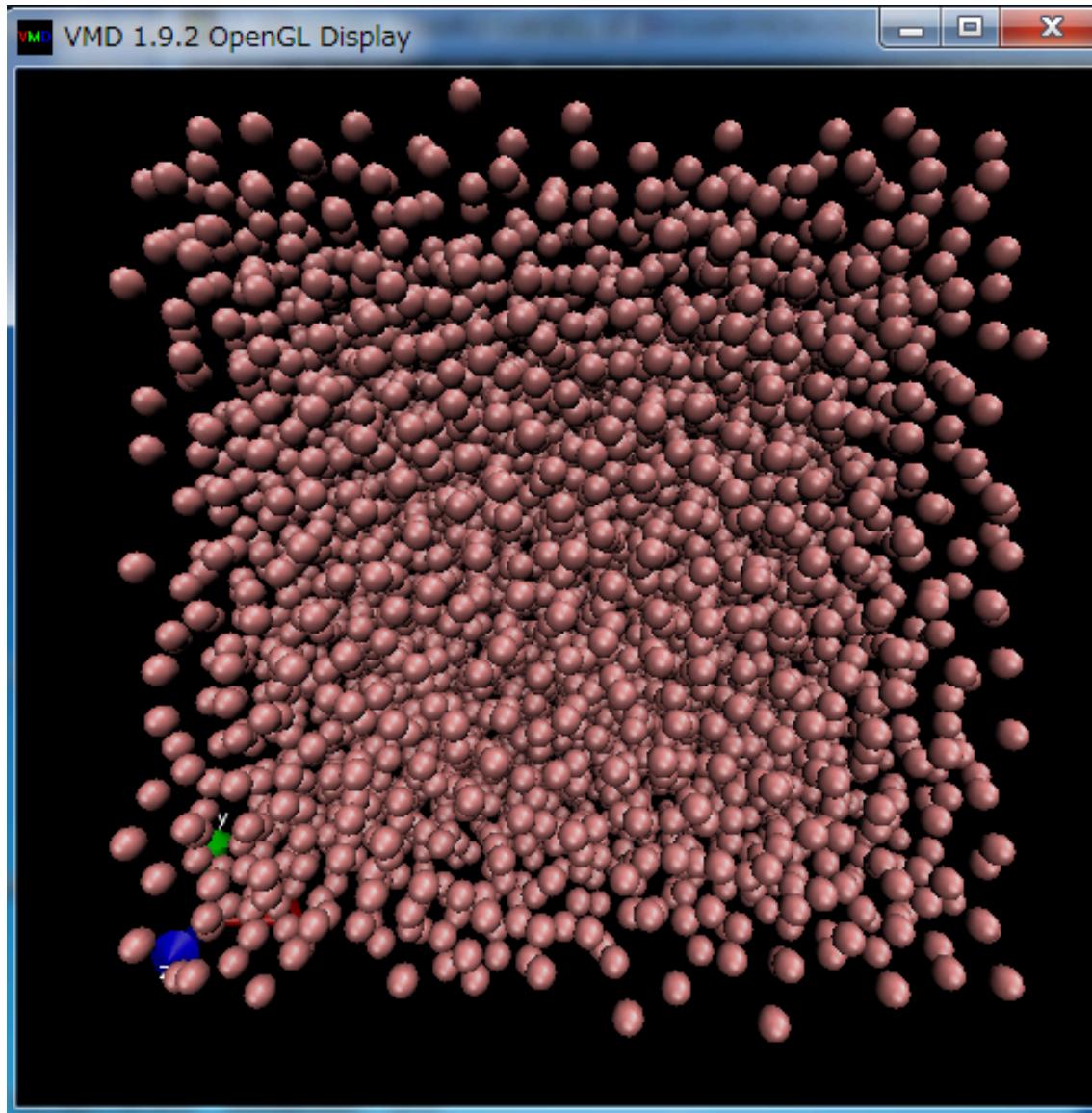
VMDで可視化する(9)

- 表示形式の調整



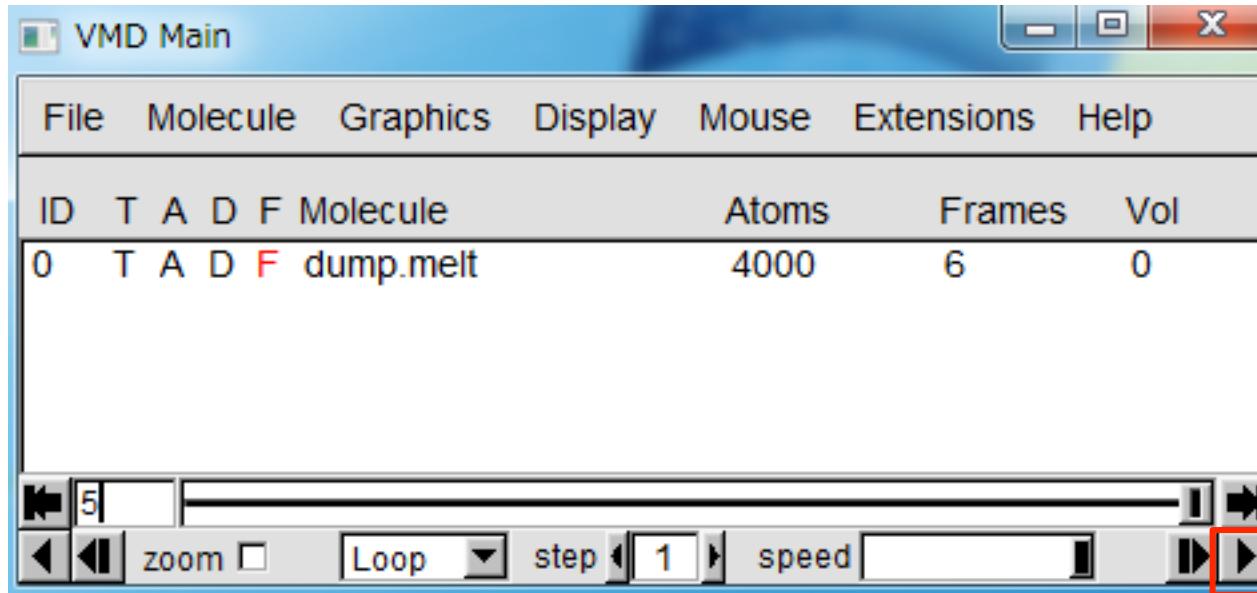
VMDで可視化する(10)

- ディスプレイ(VDWの表示)



VMDで可視化する(11)

- MDスタート



ここをクリック

VMDの課題

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

micelle と colloid の3次元化の課題

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

micelleの3D化について(1)

- 変更点 (in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
- 変更点 (data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化について(2)

in.micelle(入力ファイル)

```
# 3d micelle simulation
```

```
# dimension 2
```

```
neighbor 0.3 bin
```

```
neigh_modify delay 5
```

```
atom_style bond
```

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

```
read_data data.micelle
```

```
replicate 1 1 36
```

```
special_bonds fene
```

```
pair_style soft 1.12246
```

```
pair_coeff * * 0.0 1.12246
```

```
bond_style harmonic
```

```
bond_coeff 1 50.0 0.75
```

```
velocity all create 0.45 2349852
```

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

```
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
```

```
thermo 50
```

```
run 1000
```

```
unfix 3
```

2次元の設定の
コメントアウト
→ 3次元

data.micelle
のデータファイル
が読み込まれる

z方向に36個
複製する

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化について(3)

in.micelle(入力ファイル)

→ 続く

Main run

pair_style lj/cut 2.5

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

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

solvent/tail - full-size and repulsive

pair_coeff 1 3 1.0 1.0 1.12246

pair_coeff 1 4 1.0 1.0 1.12246

thermo 1000

dump 1 all atom 2000 dump.micelle

#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 60000

micelleの3D化について(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

Masses

colloidの3D化について(1)

- 変更点
 - Dimension文 コメントアウト
 - Latticeコマンド → lattice sc 0.001
 - 濃度を下げて、オーバラップを解除
 - Regionコマンドを変更。
region box block 0 30 0 30 0 30
 - Fix-enforce2dを、コメントアウト

colloidの3D化について(2)

In.colloid(入力ファイル)

```
# Big colloid particles and small LJ particles
units      lj
atom_style sphere
# dimension 2
lattice    sc 0.001
region     box block 0 30 0 30 0 30
create_box 2 box
create_atoms 1 box
set        group all type/fraction 2 0.96 23984
set        type 1 mass 9
set        type 2 mass 1
velocity   all create 1.44 87287 loop geom
# multi neighbor and comm for efficiency
neighbor   1 multi
neigh_modify delay 0
comm_modify mode multi
# colloid potential
pair_style colloid 12.5
pair_coeff 1 1 1.0 1.0 5.0 5.0 12.5
pair_coeff 1 2 5.0 1.0 5.0 0.0 7.0
pair_coeff 2 2 10.0 1.0 0.0 0.0 2.5
fix        1 all npt temp 2.0 2.0 1.0 iso 0.0 1.0 10.0
drag 1.0 &
mtk no pchain 0 tchain 1
# fix      2 all enforce2d
dump       1 all atom 1000 dump.colloid
→ 続く
```

colloidの3D化について(3)

In.colloid(入力ファイル)

→ 続く

```
#dump      2 all image 1000 image.*.jpg type  
type &  
#          zoom 1.5 center d 0.5 0.5 0.5  
#dump_modify 2 pad 5 adiam 1 5.0 adiam 2 1.5  
  
#dump      3 all movie 1000 movie.mpg type type  
&  
#          zoom 1.5 center d 0.5 0.5 0.5  
#dump_modify 3 pad 5 adiam 1 5.0 adiam 2 1.5  
  
thermo_style custom step temp epair etotal  
press vol  
thermo      1000  
  
timestep    0.005  
  
run         50000
```