

shaping tomorrow with you

#### SCIGRESS ME 2.3 のLAMMPS連携機能のご紹介/体験実習

# 「SCIGRESS ME+LAMMPSを使ってみよう!」

## 2016年3月7日 富士通株式会社



# SCIGRESS ME 2.3 の LAMMPS 連携機能 ご紹介

## LAMMPSを使用する際の課題



◆ モデリング機能が不足しているため、複雑な構造作成が難しい。 ※コマンドでの構造生成、座標データの読み込みは可能。

#### ◆ ポテンシャル設定が煩雑である。

分子系では、結合・結合角・二面角・面外角を全て種類ごとに設定する必要がある。大きな分子では膨大な数の設定になる。

## SCIGRESS ME 2.3 のLAMMPS連携機能



SCIGRESS ME は、入力データ作成から結果解析まで行える分子動力学ソフトウェアです。 LAMMPS I/Fにより、LAMMPSと連携してMD計算を実行できます。

※LAMMPSのMD計算機能のみが対象となります。粗視化MD、DPD、Peridynamicsなどは対象外です。

SCIGRESS ME 2.3 LAMMPS I/Fの主な機能

入力データ作成	モデリング、計算条件設定、ポテンシャル設定、リスタートデータ生成
計算実行	逐次実行、バッチ計算
結果表示	アニメーション、軌跡、温度・圧力・体積等の時間変化グラフなど
二次解析	平均二乗変位、二体相関関数・積算配位数など

#### SCIGRESS ME 2.3 の動作環境

OS	Windows Vista, 7
CPU	Pentium 4 以上
メモリ	2GB以上(推奨)

モデリング



様々なモデルを作成するためのウィザードやツールが搭載されています。

#### 主なモデリング関連機能

MDセル作成	ウィザード(ランダム、テンプレート(結晶)、高分子、液晶)、 セルの貼り合わせ・積み重ねなど
編集	原子・分子のコピー、貼り付け、削除、挿入など
表示	回転、拡大・縮小、平行移動、正投影/透視投影、表示形 式(スペースフィリング、ボール&スティック等)など



計算条件設定



### アンサンブル、境界条件、応力印加等の基本的な設定ができます。

 	<u></u>					倍更:	<b>鬼(</b> 4	
	- ジミエロ 総ス	ノーション。(Fiell/ハー) (テップ数:	1000		[steps]	-98715	Lower	Upper
	時間	該)み幅:	0.1		[fs]	X	p 🔻	p 🔻
O NPH	出ナ	]間隔ステップ数:	10		[steps]	Y:	р <b>т</b>	р <b>т</b>
○ NTP	出力	コステップ数:	100		[steps]	Z:	p 🔻	p 🔻
温度				-MDセル				
Start:	298	[K]		<u> </u>	定 ステッ	グ間隔:	1	[steps
End:	298	[K]		) न	変 rema	ap:	none	_
Damp:	100	[fs]					Inone	÷
圧力				×	none			設定…
( <u> </u>	Ctort.	<u>ا</u>	.+m]	y:	none			設定…
🔘 tri	Start. End:		stm]	Z:	none			設定…
iso	Damp:	1000 Ff	s]	xy:	none			設定…
	- and			xz:	none			設定…
istress		- 該定			[			=

ポテンシャル設定



### LAMMPS添付のポテンシャルを選択して使用できます。 SCIGRESS MEのポテンシャルの一部も使用できます。

ポテンシャル		<b>×</b>
C LAMMPS	Ou_useam         Ag_useam         Aljnp.eam         Au_useam         Cu_smf7.eam         Cu_useam         Ni_smf7.eam         Ni_useam         Pd_useam         Pt_useam	OK キャンセル
SCIGRESS ME	対象原子名: Cu GTB1 GTB2 HaliciogluPound Kilo_LSGM Kilo_YSZ KS LJDreiding MAM	
	パラメータが見つからなかった相互作用はスクリ	リプトから除去する(E)

## 分子動力学計算の実行



#### SCIGRESS MEのメニューからLAMMPSのMD計算を実行できます。 入力データを登録し、バッチ計算を行えます。

S)	LAMMPS(L) 結果(R) ツール(T) ヘルプ(H	)
	計算条件の設定(C)	
	ポテンシャル関数の設定(P)	
-	計算実行(R)	
	バッチ計算(B)	- 9
	計算状況(S)	
		_

	バッチ計算			<b>—</b>
	ジョブの待ち行列(の	)):		
	タイトル	バス		追加(A)
	Ni	C:¥SGME¥Data¥Ni.lin		削除(R)
変紀版に中仁	Ag	C:#SGME#Data#Ag.lin		
<b>豆</b> 球順に 夫打				
	•			
	•	III	4	
	上へ(U)	下へ(D) 状態(S): 未実	<u>.</u>	「へルプ

結果表示



#### アニメーション表示、物性値の時間変化グラフなどの結果表示機能があります。



二次解析



- - -

#### 二体相関関数・積算配位数などの解析機能があります。

😥 2D-Graph

	ファイル(	F) 表	示(V)	グラフ(G)	コメント	•(C)	ツール(	г) 🔨	Jレプ(H)
	🖌 👼	6 ?	🗖	🛤 🗸 🖒	(   🛉 👕		<b>¤ </b>	• <b>‡</b> •	A <sub>A</sub> 💥
<ul> <li>Ni.sim - Pair Correlation Function &amp; Running Int</li> <li>□ ▼</li> <li>アイル(F) 解析(A) 表示(V) ヘルレプ(H)</li> <li>ジミュレーション         <ul> <li>全出力ステップ数 [ステップ] 100</li> <li>時間刻み幅 [fs]:</li> <li>2.000000e+001</li> </ul> </li> <li>解析開始時間         <ul> <li>50</li> <li>開始時間 [ps]:</li> <li>9.999999e=001</li> <li>解析系 7時間</li> <li>100</li> <li>終了時間 [ps]:</li> <li>2.000000e+000</li> <li>詳細設定</li> </ul> </li> </ul>	()6		·		r[A]				
レディ	レディ								

#### 解析条件設定画面

二体相関関数



## SCIGRESS ME 2.3 の LAMMPS 連携機能 体験実習



FUÏITSU

実習課題



### Niの一軸応力誘起相転移の分子動力学シミュレーション

- 1. Ni 結晶のモデリング
- 2. 計算条件設定(無応力)
- 3. ポテンシャルの設定
- 4. 計算実行
- 5. 結果表示(アニメーション、温度等の時間変化グラフ表示)
- 6. リスタートデータの作成
- 7. リスタート計算条件設定(応力印加)
- 8. リスタート計算実行
- 9. リスタートデータの作成2
- 10. リスタート計算条件設定2(応力印加)
- 11. リスタート計算実行2
- 12. リスタート結果表示(アニメーション、温度等の時間変化グラフ表示)
- 13. 二体相関関数の算出

(参考)Parrinello and Rahman, J Appl Phys, 52, 7182 (1981)







SCIGRESS MEの起動



### [スタート]メニューから [**すべてのプログラム**]→[SCIGRESS ME 2.3]→[SCIGRESS ME] の順に選択し、SCIGRESS MEを起動

Main Scigress Me	
	◆ プロパティ MDセル 原子・分子一覧 基本セル定数 a: 20.000001 [A] Alpha: 90.0000 [deg] b: 20.000001 [A] Beta: 90.0000 [deg] c: 20.000001 [A] Gamma: 90.0000 [deg] 基本セル定数の設定を適用(T) 密度(D) ③ 密度の設定を適用(N)
レディ	新規 原子 0 個 0.000000 g/cm**3

モデルの作成



## 「モデリング」⇒「MDセルの作成」を選択

Image: I		
ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 王ラ	<u> 「リング(M)」シミュレーション(S) LAMMPS(</u>	L) 結果(R) ツール(T) ヘルプ(H)
🛛 🗅 🚅 🖬 🖹 🎒 🎽 🖿	MDセルの作成(C)	E 0
💁 🖂   🎾 🎾 🖉 🖉 🖉 📗	MDセルの貼り合わせ(A)	
/ # <b>- 7</b> 🗟 🗣 🖓 🕂	MDセルの積み重ね(U)	<u></u> € <u></u> <sup>4</sup> <sup>2</sup>
	原子・分子の発生(M)	プロパティ MDセル 原子・分子一覧
	モンテカルロによる構造探索(R)	基本セル定数
		a: 20.000001 [A] Alpha: 90.0000 [deg]
		b: 20.00000 [A] Beta: 90.0000 [deg]
		c: 20.000001 [A] Gamma: 90.0000 [deg]
		基本セル定数の設定を適用(T)
		密度(D)
		0.000000 [g/cm**3]
		密度の設定を適用(N)
Z		
X Y		
」 新規にMDセルを作成する		新規   原子 0 個    0.000000 g/cm**3

モデルの作成



種類:「**テンプレート**」、グループ:「基本単位形」、テンプレート:「FCC(Ag)」を選択し、 「次へ」をクリック



モデルの作成



## 「原子」タブを選択し、リストから「Ni」を選択し、「完了」をクリック



モデルの作成



### 基本セル定数をa=b=c=3.524に設定し、「基本セル定数の設定を適用」をクリック



モデルの作成



### 「モデリング」⇒「MDセルの積み重ね」を選択

Martin M	
ファイル(F) 編集(E) 表示(V) [モデリング(M)] シミュレーション(S) LAMMPS(	L) 結果(R) ツール(T) ヘルプ(H)
D 🖆 🗟 🔮   🌡 🗎    MDセルの作成(C)	E 0
🎕 层   🍃 🍯 🎽 🎽 🎽 🎽 MDセルの貼り合わせ(A)	
📴 🗗 🕞 🕸 💿 🕂 MDセルの積み重ね(U)	<b>€ ∂</b> <sup>2</sup>
原子・分子の発生(M)	プロパティ MDセル 原子・分子一覧
モンテカルロによる構造探索(R)	基本セル定数
	a: 3.524000 [A] Alpha: 90.0000 [deg]
	b: 3.524000 [A] Beta: 90.0000 [deg]
	c: 3.524000 [A] Gamma: 90.0000 [deg]
	基本セル定数の設定を適用(T)
	密度(D)
	8.908423 [g/cm**3]
•	密度の設定を適用(N)
	·
2	
X Y	
MDセルを各方向に積み重ねる	新規 原子 4 個 8.908423 g/cm**3

モデルの作成



積み重ね数をa軸=b軸=c軸=8に設定し、「OK」をクリック



モデルの作成



「はい」をクリック



モデルの作成



#### ユニットセルを8×8×8に積み重ねたMDセルがメイン画面に表示される



モデルの作成



## 「ファイル」⇒「名前を付けて保存」を選択

Magentine Scigress Me		
ファイル(F) 編集(E) 表示(V) モデリング(M)	シミュレーション(S) LAMMPS(L) 結果(R) ツール(T) ヘルプ(H)	
新規作成(N) Ctrl+	N 🔒 🏭 🖾 🖌 🗗 🖉 🖺 🔳 🖉	
開<(0) Ctrl+	0	
上書き保存(S) Ctrl-	- <u>s</u> 💦 & 🔥 🔺 👗 🎆 🛛 🌜 🖗	
名前を付けて保存(A)	プロバティ MDセル 原子・分子一覧	
テンプレートとして保存(T)	サイヤルテ教	
リスタート(G)		
リスタート履歴(H)	a: 28.192001 [A] Alpha: 90.0000 [deg]	
インボート(I)	b: 28.192001 [A] Beta: 90.0000 [deg]	
SCIGRESS MEへようこそ!	c: 28.192001 [A] Gamma: 90.0000 [deg]	
印刷(P) Ctrl-	-P 基本セル定数の設定を適用(T)	
1 C:¥SGME¥Data¥zzzzzzzz.inp	● ● ● 32700+(D)	
2 C:¥SGME¥Data¥zzzzz.inp		
3 C:¥SGME¥Data¥zzzz.inp	0.300423 [g/cm**3]	
4 C:¥SGME¥Data¥zzz.inp	<ul> <li>● ● ●</li> <li>密度の設定を適用(N)</li> </ul>	
終了(X)		
	••••	
Z +	****	
<u>k</u> Y		
作業中のファイルを新しい名前で保存する	新規 原子 2048 個 8.908423 g/cm**3	

モデルの作成



ファイル名 Niを入力し、「保存」をクリック



計算条件設定



### 「LAMMPS」⇒「計算条件の設定」を選択



## 計算条件設定



アンサンブル:NTP、総ステップ数:10000、時間刻み幅:0.5、出力間隔ステップ数:100、 温度のDamp:50、圧力のDamp:500に設定し、「適用」、「OK」をクリック



## 引用元: http://lammps.sandia.gov/doc/fix\_nh.html

•温度制御 The Tdamp parameter is specified in time units and determines how rapidly the temperature is relaxed.

A good choice for many models is a Tdamp of around 100 timesteps. Note that this is NOT the same as 100 time units for most units settings.

## ·圧力制御

the Pdamp parameter operates like the Tdamp parameter, determining the time scale on which pressure is relaxed.

#### A good choice for many models is a Pdamp of around 1000 timesteps. Note that this is NOT the same as 1000 time units for most units settings.

ポテンシャルの設定



#### 「LAMMPS」⇒「ポテンシャル関数の設定」を選択。



ポテンシャルの設定



## 「LAMMPS」、「Ni\_u3.eam」を選択し、「OK」をクリック

ポテンシャル		<b>—</b>		
LAMMPS	Cu_u3eam Ag_u3eam Al_inp.eam Au_u3eam Cu_smf7eam Ni u3eam Pd_u3eam Pd_u3eam Pd_u3eam Pt I13eam	OK キャンセル		
⑦ SCIGRESS ME	Areon BSAO CeGdO CIM CMAS94 cvff_nocross_nomorse FlahiveGraham GTB1 GTB2			
■ パラメータが見つからなかった相互作用はスクリプトから除去する(E)				

計算実行



## 「LAMMPS」⇒「計算実行」を選択。



計算実行



## LAMMPSで分子動力学計算が実行されます

💷 C:¥Program Files¥LAMMPS 64-bit 20160216¥bin¥lmp_serial.exe				
3000 9.7812181 293.78516	-1639.3938	22670.02	-8948.6504	77. 🔺
734236 -9026.3846 -8971.847	-1241.101	-1655.7409	-2021.3394	490.
8058 138.48347 81.603758				
3100 10.108818 314.0541	1711.7105	22612.669	-8949.3092	83.
097306 -9032.4065 -8925.1506	2018.9346	1606.1845	1510.0123	68.08
5647 -324.95083 232.2951				
3200 10.452019 293.24806	-291.63692	22642.55	-8951.7282	77.
592122 -9029.3203 -8955.8497	-946.70214	-366.8896	438.68098	-396.1
2753 971.48049 -356.21263				
3300 10.764019 302.58804	-620.29837	22635.11	-8953.9474	80
.06344 -9034.0109 -8962.7108	-602.55444	-235.74326	-1022.5974	-176.7
2026 -674.96562 -429.47157				
3400 11.10722 283.47533	1895.7047	22606.845	-8956.4615	75.
006302 -9031.4678 -8929.7129	2086.8586	1868.0848	1732.1706	240.2
5008 -145.54235 362.94377				
3500 11.41922 292.2378	-1248.7171	22637.648	-8957.7566	
324812 -9035.0814 -8975.4001	-1027.5164	-1445.9414	-1272.6936	-636.5
2419 141.19892 266.63973				
3600 11.746821 279.97475	1387.4979	22609.377	-8958.4671	74.
080065 -9032.5471 -8938.8872	1111.5972	1284.2737	1766.6228	664.4
1568 224.76425 -284.58611				
3700 12.074422 284.91726	858.43186	22615.221	-8957.8256	75.
387829 -9033.2135 -8945.7086	398.23758	1583.0844	593.9736	747.9
b672 -347.51981 -324.75711				
1				-

結果表示



## ログを確認し、「OK」をクリック

	計算状況	<b>—</b>
計算時間 ————————————————————————————————————	ログ(L): 9700 29.390452 301.15085 1473.8652 22610.379 -8953.4046 9800 29.686852 293.12328 361.20021 22625.544 -8954.6262 9900 29.998853 297.95693 -1434.3041 22642.442 -8955.4873 10000 30.310854 298.27745 1176.5334 22607.025 -8956.0952 Loop time of 30.3109 pn 1 procs for 10000 steps with 2048 atoms Performance: 14.252 ns/day, 1.684 hours/ns, 329.915 timesteps/s 99.7% CPU use with 1 MPI tasks × 1 OpenMP threads MPI task timing breakdown: Section   min time   avg time   max time  %varavg  %total Pair   28.018   28.018   28.018   0.0   92.43 Bond   0   0   0   0   0.01 Neigh   0.0156   0.0156   0.0156   0.0   0.05	79.683165 77.559107 78.838069 78.922877
	Comm       [0.2028       [0.2028       [0.0]       0.67         Output       [1.0452       [1.0452       [0.0]       3.45         Modify       [0.9516       [0.9516       [0.0]       3.14         Other       [0.078       [0.026       [0.2028       [0.026         Nlocal:       2048 ave 2048 max 2048 min       [0.026       [0.078       [0.026         Nlocal:       2048 ave 2048 max 2048 min       [0.026       [0.026       [0.026         Nlocal:       2048 ave 2048 max 2048 min       [0.026       [0.026       [0.026         Nlocal:       2048 ave 2048 max 2048 min       [0.026       [0.026       [0.026         Nlocal:       2048 ave 2048 max 2048 min       [0.026       [0.026       [0.026         Nlocal:       2048 ave 2048 max 4035 min       [0.026       [0.026       [0.026         Nghost:       4035 ave 4035 max 4035 min       [0.026       [0.026       [0.026         Neighs:       136486 ave 136486 max 136486 min       [0.026       [0.026       [0.026         OK       [0.026       [0.026       [0.026       [0.026       [0.026	

結果表示



## ▶ をクリックし、アニメーションを実行します



結果表示



■ をクリックし、アニメーションを停止し、■■をクリックしてウインドウを閉じます



結果表示



#### 「結果」⇒「モニター変数」を選択



結果表示



#### 温度、圧力、体積の時間変化のグラフが表示されます


結果表示



### 「**グラフ」**⇒「表示項目」を選択



結果表示



# 「内部エネルギー」にチェックを入れ、「適用」、「閉じる」をクリック

表示項目				<b>—</b>
ファイル(F)				
パス				
🔽 1. Nisim (C:¥SGME¥Data¥Nisim)				フロット点(P)
縦車曲(∨)				
項目	表示名	単位	<u>^</u>	
☑ 温度	Т	[K]		
■ 圧力	P	[atm]		
	<u> </u>	[1]		
■ ハミルトニアン	H	[J]		
□ スケール変数	S		-	
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·			•	
時間 - Time [ns]			•	「軸の設定(2)
AURI Auro (bel			•	¥₩♥/8XAE()V
	(本田(人)	88		
	週用(H)	開じる		

結果表示



#### 内部エネルギーの時間変化のグラフが追加表示されます



結果表示



### 🔤 をクリックしてウインドウを閉じます



リスタートデータの作成1



### 「ファイル」⇒「リスタート」を選択

Mi.inp - SCIGRESS ME	
ファイル(F) 編集(E) 表示(V) モデリング(M	シミュレーション(S) LAMMPS(L) 結果(R) ツール(T) ヘルプ(H)
新規作成(N) Ctrl	-N 🗧 🇱 🖾 🖌 🖸 🗐 🗐 🔳 🗐
開<(0) Ctr	-0
上書き保存(S) Ctr	+S 🔽 🖧 🚓 🔺 🌋 🌌 🛛 🎸 🖑
名前を付けて保存(A)	プロバティ MDセル 原子・分子一覧
テンプレートとして保存(T)	基本セル字類
リスタート(G)	
リスタート履歴(H)	a: 28.192001 [A] Alpha: 90.0000 [deg]
インボート(I)	b: 28.192001 [A] Beta: 90.0000 [deg]
SCIGRESS MEへようこそ!	c: 28.192001 [A] Gamma: 90.0000 [deg]
印刷(P) Ctr	+P 基本セル定数の設定を適用(T)
1 Ni.inp	•••
2 aaa2.inp	
3 aaa1.inp	• • •
4 aaa.inp	<ul> <li>● ● ●</li> <li>密度の設定を適用(N)</li> </ul>
終了(X)	
• • • • • • • • • •	••••
• • • • • • • • • • •	• • • • •
2	• • • • • • ·
X Y	
 リスタート用のデータを生成する	新規   原子 2048 個   8.908423 g/cm**3

リスタートデータの作成1



リスタート		×
<b>リスタート</b> シミュレーションを ァイル名(拡張子)	リスタートするには、新たにリスタート用の入力ファイルを作成します。 なし)を入力し、[OK]ボタンをクリックします。	以下に、フ
ファイル名(N):	Ni_rst001	
	■ 新規ジョブとしてリスタートする(1)	
	OK キャンセル へり	レプ

FUĴĨTSU

リスタートデータの作成1



#### リスタートデータが生成されます



リスタートデータの作成1



# 「LAMMPS」⇒「計算条件の設定」を選択

Ki_rst001.inp - SCIGRESS ME	
ファイル(F) 編集(E) 表示(V) モデリング(M) シミュレーション(S) LAM	MPS(L) 結果(R) ツール(T) ヘルプ(H)
D 🚅 🖬 🕀   🎒   ¾ 🖻 🖻 🗙 🍂 📽   🗊 🛢 📰   그   🚺	計算条件の設定(C)
🛛 💁 🔜 🖄 🖉 🏹 🏹 🏹 🖓 🖼 📾 🖬	ポテンシャル関数の設定(P)
[# <b> ₱</b> ₫ ����� 🕂 🛛   其   🗸   ^ ∧ ∧ ஃ ۸ 🔺	計算事行(R)
	バッチ計算(B)
	計算状況(S)
	a: 28.192001 [A] Alpha: 90.0000 [deg]
	b: 28.192001 [A] Beta: 90.0000 [deg]
	c: 28,192001 [A] Gamma: 90,0000 [deg]
	基本セル定数の設定を適用(T)
	密度(D)
	8.908423 [#/cm**3]
	密度の設定を適用(N)
••••••	
x y	
	リスタート 原子 2048 個 8.908423 g/cm**3

リスタートデータの作成1

# アンサンブル:「NPH」、圧力:「stress」に設定し、「設定」をクリック

'昇榮件' 基本設定 外場	オプション				
アンサンブル の NEV の NTV の NPH の NTP	ーシミュレーション時間(X) - 総ステップ数: 時間刻み幅: 出力間隔ステップ数: 出力ステップ数:	10000 0.5 100 100	[steps] [fs] [steps] [steps]	境界条件 Lower X: p ▼ Y: p ▼ Z: p ▼	Upper
温度 Start: 24 End: 24 Damp: 56	98 [K] 98 [K] 0 [fs]	MD1 ©	Zル 一定 ステッ 可変 rema	プ間隔: 1 ap: none	[steps]
圧力 ① tri   S ② aniso   I ③ iso   I ④ stress	Start: 1 End: 1 Damp: 500 [設定]	[atm] z [atm] z [fs] × y	: none none y: none z: none z: none		設定… 設定… 設定… 設定… 設定…

All Rights Reserved, Copyright (C) FUJITSU LIMITED 2016

FUĴĨTSU

リスタートデータの作成1

FUjitsu

### Y欄でStart: 30000、End: 30000、Damp: 500に設定し、「OK」をクリック

Stress						<b>—</b>
- X			XY			
Start:	0	[atm]	Start:	0	[atm]	UK
End:	0	[atm]	End:	0	[atm]	キャンセル
Damp:	1000	[fs]	Damp:	1000	[fs]	
Y			xz			
Start:	30000	[atm]	Start:	0	[atm]	
End:	30000	[atm]	End:	0	[atm]	
Damp:	500	[fs]	Damp:	1000	[fs]	
Z			YZ			
Start:	0	[atm]	Start:	0	[atm]	
End:	0	[atm]	End:	0	[atm]	
Damp:	1000	[fs]	Damp:	1000	[fs]	

リスタートデータの作成1



# 「適用」、「OK」をクリック

 	 	<u>- いい時間(X)</u>				_ 请思言	冬件	
NEV	総ス5	デップ数:	10000		[steps]	-7671-3	Lower	Upper
© NTV	時間	刻み幅:	0.5		[fs]	X	p 🔻	p 🔻
NPH	出力	間隔ステップ数:	100		[steps]	Y:	p 🔻	p 🔻
O NTP	出力)	ステップ数:	100		[steps]	Z:	p 🔻	p 🔻
温度				-MDセル				
Start: 2	98	_ [K]		<u> </u>	<del>ल्ल</del> २.नः	/7問稿:	1	[steps]
		1 100				2 1631143	· · ·	
End: 2	98	_ кі		् () न	変 rema	ap:	none	
End: 2 Damp: 5	98 0	(K] [fs]		े () ग	変 rema	ab:	none	Ŧ
End: 2 Damp: 5 圧力	98	(K] (fs]		© न ×	変 rema	ap:	none	▼ ■ ■ 認定…
End: 2 Damp: 5 圧力	98 0 Start	(K] (fs]	+m]	ि न × y:	変 rema none none	3D:	none	▼ 〕 〕 〕 〕 〕 〕 〕 〕 〕 〕 〕 〕 〕
End: 2 Damp: 5 圧力 ① tri 3	98 0 Start:	[K] [fs] [1 [a	itm]	ा ज () ज () () () () () () () () () () () () ()	変 rema none none none	ap:		▼ 設定… 設定… 設定…
End: 2 Damp: 5 圧力 ① tri 3 ② aniso	98 0 Start: End: Damp:	[K] [fs] 1 [a [500 [fs]	ıtm] ıtm] s]	े न ×: y: z: xy:	変 rema none none none none	ap:		▼ 設定… 設定… 設定…
End: 2 Damp: 5 圧力 ① tri 3 ② aniso ③ iso ④ stress	98 0 Start: End: Damp:	[K] [fs] 1 [a 500 [f:	ıtm] ıtm] s]	ि न >: y: z: xy: xz:	変 rema none none none none none	ap:		▼ 設定… 設定… 設定… 設定…

リスタート計算の実行1



# 「LAMMPS」⇒「計算実行」をクリック



リスタート計算の実行1



### LAMMPSでリスタート計算が実行されます

C:¥Program Files¥LAMMPS 64-bit 20160216	¥bin¥lmp_serial.ex	e		
12700 9.5628171 297.38803	9499.1005	22517.543	-8948.1007	78. 🔺
687541 -9026.7883 -8814.5971	18.612375	28921.818	-443.12846	-28.37
2455 79.705266 201.60496				-
12800 9.90601/1 296.00619	9245.3427	22522.47	-8948.1/64	/8.
321912 -9026.4983 -8818.2107	-783.37158	28/34.853	-215.45347	498.9
/04/ -246./0812 -400.3/953	10000 014	00500 300	00.47 0000	70
	1407 7714	22506.722	-8947.9032	/6. 11.00
989669 -9024.8929 -8795.6749	1437.7714	29999.578	1072.4923	-11.98
12000 10 502410 205 40005	0000 007E	22527 026	-0017 0700	70
105242 -0026 0577 -0021 0702	-0300.3375 -015 RORR5	22027.020	-781 85010	70. 215 5 -
6997 -403 07129 -234 56612	315.03005	20303.343	704.00040	215.5
	9960 4716	22514 798	-8947 4296	78
361597 -9025.7912 -8807.4588	538, 15183	29476.362	-133.09954	318.0
2466 12.454951 324.19586		20110.002		0.010
13200 11.26322 298.61534	9053.9618	22524.989	-8947.2857	79.
012281 -9026.298 -8819.9961	-1180.0645	29034.773	-692.82292	-396.1
5206 1011.362 92.996281				
13300 11.60642 297.32828	8936.4197	22527.124	-8947.2377	78.
671729 -9025.9094 -8821.5887	-1517.5539	29070.907	-744.09368	-606.2
7458 872.19333 13.284026			~~	=
13400 11.949621 299.18254	9228.8156	22521.535	-8947.3399	/9.
	-679.26883	29156.545	-790.82928	-17.07
8683 -137.68922 164.1893				
				*

リスタート計算結果1



# 「OK」をクリック

計算状況
ログ(L):
atom_style full units metal boundary ppp
read_restart Nirestart.10000 triclinic box = (-0.0412546 -0.0399374 -0.0444666) to (28.2333 28.2319 28.2365) with ti 1 by 1 MPI processor grid 2048 atoms
0 = max # of 1-2 neighbors 0 = max # of 1-3 neighbors 0 = max # of 1-4 neighbors 1 = max # of special neighbors
pair_style eam pair_coeff 1.1 Ni_u3.eam Reading potential file Ni_u3.eam with DATE: 2007-06-11
timestep 0.0005
run_style verlet atom_modify sort 0 0
fix 1 all nph x 0 0 1.0 y 30397.5 30397.5 0.5 z 0 0 1.0 yz 0 0 1.0 xz 0 0 1.0 xy 0
compute 1 all pe/atom
ОК

リスタート計算結果1



### ■ をクリックしてウインドウを閉じます



リスタートデータの作成2



### 「ファイル」⇒「リスタート」を選択

Mi_rst001.inp - SCIGRESS ME	
ファイル(F) 編集(E) 表示(V) モデリング(M) シミュレー	-ション(S) LAMMPS(L) 結果(R) ツール(T) ヘルプ(H)
新規作成(N) Ctrl+N	
開<(0) Ctrl+0	
上書き保存(S) Ctrl+S S	→ 🛧 🔺   💑 💹   🌜 🖓
名前を付けて保存(A)	プロバティ MDセル 原子・分子一覧
テンプレートとして保存(T)	# the state
リスタート(G)	
リスタート履歴(H)	a: 28.192001 [A] Alpha: 90.0000 [deg]
インボート(I)	b: 28.192001 [A] Beta: 90.0000 [deg]
SCIGRESS MEへようこそ!	c: 28.192001 [A] Gamma: 90.0000 [deg]
印刷(P) Ctrl+P	基本セル定数の設定を適用(T)
1 Ni_rst001.inp • •	• 密度(D)
2 Ni.inp	8 908423 [= /owww2]
3 aaa2.inp	• [E/Ciliwero]
4 aaa1.inp	<ul> <li>密度の設定を適用(N)</li> </ul>
終了(X)	
•••••••••••	•
	•
Ζ	- <b>-</b> -
<u>X</u> Y	
リスタート用のデータを生成する	リスタート 原子 2048 個 8.908423 g/cm**3 。

リスタートデータの作成2



「OK」をクリック

リスタート	
<b>リスタート</b> シミュレーションを ァイル名(拡張子	リスタートするには、新たにリスタート用の入力ファイルを作成します。 以下に、フ なし)を入力し、[OK]ボタンをクリックします。
ファイル・名(N):	Nijrst002
	OK キャンセル ヘルプ

リスタートデータの作成2



#### リスタートデータが生成されます



リスタートデータの作成2



# 「LAMMPS」⇒「計算条件の設定」を選択

Ki_rst002.inp - SCIGRESS ME	
ファイル(F) 編集(E) 表示(V) モデリング(M) シミュレーション(S) LAMMPS(L	<u>.) 結果(R) ツール(T) ヘルプ(</u> H)
□ 🖆 🖬 🔮   🎄 🖻 🖻 🗙 🍂 💱   🗰 🛢   ユ   Ū 🔡 📑 第	6件の設定(C)
🛛 💁 🔙 🐚 🐚 🐚 🐚 🐚 🐿 🔛 🔜 🖬 🖬 🖬	νシャル関数の設定(P)
[# <b>[] ]</b> [] (\$ (\$ (\$ (\$ (\$ (\$ (\$ (\$ (\$ (\$ (\$ (\$ (\$	≦í∓(R)
/「いチ	·計算(B)
計算状	況(S)
	a: 28.192001 [A] Alpha: 90.0000 [deg]
	b: 28.192001 [A] Beta: 90.0000 [deg]
	c: 28.192001 [A] Gamma: 90.0000 [deg]
• • • • • • • • • • • • • • • • • • • •	基本セル定数の設定を適用(T)
	密度(D)
	8.908423 [#/cm**3]
• • • • • • • • • • • • • • • • • • • •	
	密度の設定を適用(N)
• • • • • • • • • • • • • • • • • • • •	
7	
XY	
	リスタート 原子 2048 個 8.908423 g/cm**3 🦼

リスタートデータの作成2



「設定」をクリック

計算条件					×
基本設定 外場	オプション				
- アンサンブル	」 シミュレーション時間(X) —			境界条件	
○ NEV	総ステップ数:	10000	[steps]	Lower	Upper
© NTV	時間刻み幅	0.5	[fs]	X: p 🗸	p 🔻
NPH	出力間隔ステップ数:	100	[steps]	Y: p 🔻	p 🔻
© NTP	出力ステップ数:	100	[steps]	Z: p 🔻	p 🔻
温度		- MDセル	,		
Start: 29	98 [K]	• -	ट रज्य	7間隔: 1	[steps]
End: 29	98 [K]	0 1	変 remap	none	-
Damp: 50	) [fs]				
		×:	none		設定
	Hart I	y:	none		設定…
	ind: 1	tm]	none		設定
ico [	.no	al XV:	none		設定
stress		XZ:	none		設定
		yz:	none		[設定]
		ОК	キャンセル	適用(A)	ヘルプ

リスタートデータの作成2



### Y欄でStart: 60000、End: 60000に設定し、「OK」をクリック

Str	ess						×
l r	х			XY			
	Start:	0	[atm]	Start:	0	[atm]	
	End:	0	[atm]	End:	0	[atm]	キャンセル
	Damp:	1000	[fs]	Damp:	1000	[fs]	
	Y			xz			
	Start:	60000	[atm]	Start:	0	[atm]	
	End:	60000	[atm]	End:	0	[atm]	
	Damp:	500	[fs]	Damp:	1000	[fs]	
	z			YZ			
	Start:	0	[atm]	Start:	0	[atm]	
	End:	0	[atm]	End:	0	[atm]	
	Damp:	1000	[fs]	Damp:	1000	[fs]	

リスタートデータの作成2



「OK」をクリック

	オブション			(4日 2 /4	
- アンサンフル —	ーンミュレーション時間(X) 総ステップ数:	10000	[steps]	─ 境界条件 Lower	Upper
○ NTV	時間刻み幅	0.5	[fs]	X: p 🗸	• p •
NPH	出力間隔ステップ数:	100	[steps]	Y: p 🔻	• p •
NTP	出力ステップ数:	100	[steps]	Z: p -	• p •
			Dセル		
Start: 💈	98 [K]		◎ 一定 ステッ	ブ間隔: 1	[steps]
End:	198 [K]		○可変 rema	ip: none	
Damp: [	i0 [fs]			1010	
_ 圧力			x: none		設定
	Start: 1	[atm]	y: none		設定
, materi		Forcing			
🔘 tri	End: 1	[atm]	z: none		設定…
◯ tri ◯ aniso ◯ iso	End: 1 Damp: 500	[atm] [fs]	z: none <sub>XY</sub> : none		
◯ tri ◯ aniso ◯ iso ම stress	End: 1 Damp: 500	[atm] [fs]	z:         none           xy:         none           xz:         none		

リスタート計算の実行2



## 「LAMMPS」⇒「計算実行」を選択



リスタート計算の実行2



### LAMMPSでリスタート計算が実行されます

C:¥Program Files¥LAMMPS 64-bit 20160216	i¥bin¥lmp_serial.ex	e		
22200 8.2836151 383.13354	21578.792	22561.207	-8847.2644	101 🔺
.37542 -8948.6398 -8543.4005	15451.971	32306.5	16977.904	-657.6
5606 -951.94784 696.70362				
22300 8.642416 381.18164	21147.743	22600.632	-8845.1048	100
.85895 -8945.9637 -8546.7904	16529.692	28701.68	18211.855	1171.
9499 -98.938659 3098.3822				
22400 9.0012159 378.3716	20992.105	22626.012	-8842.7414	100
.11543 -8942.8568 -8546.2899	12463.733	35637.747	14874.835	93.82
0634 -50.513243 2251.567				
22500 9.3600171 381.20236	11619.582	22759.266	-8840.6281	100 ≡
.86444 -8941.4925 -8675.5694	-3804.0265	40858.35	-2195.5768	-1951.
0753 -1669.035 3124.6338				
22600 9.703217 395.58143	4775.5035	22845.251	-8840.0826	104
.66907 -8944.7517 -8771.9892	-10264.465	39595.583	-15004.608	-853.0
3686 -841.08/38 945.79241				
22/00 10.046418 392.10408	/210.542	22812.355	-8840.3869	103
./4898 -8944.1359 -8/3/./206	-4505.9009	42052.662	-15915.135	618.9
3388 222.43887 141.49876	7501 7001	~~~~~~		100
22800 10.389619 379.87158	/521./001	22810.374	-8841.9412	100
	-3206.8137	38905.022	-13133.108	263.2
	0057 050	00705 407	0041 10	110
	9357.858	22765.427	-8841.19	110
	-773.5316	37313.486	-8466.3799	66Z.
3203 110.36347 319.69226				
				· · ·

リスタート計算結果2



# 「OK」をクリック

計算状況
ログ(L):
atom_style full units metal boundary ppp
read_restart Ni_rst001restart.20000 triclinic box = (-0.272342_0.4596030.277525) to (28.4643_27.7324_28.4695) with tilt (-( 1 by 1 by 1 MPI processor grid
0 = max # of 1-2 neighbors 0 = max # of 1-3 neighbors 0 = max # of 1-4 neighbors 1 = max # of special neighbors
pair_style eam pair_coeff 1 1 Ni_u3eam Reading potential file Ni_u3eam with DATE: 2007-06-11
timestep 0.0005
run_style verlet atom_modify sort 0 0
fix 1 all nph x 0 0 1.0 y 60795 60795 0.5 z 0 0 1.0 yz 0 0 1.0 xz 0 0 1.0 xy 0 0 1 Resetting global state of Fix 1 Style nph from restart file info
compute 1 all pe/atom 👻
ОК

リスタート計算結果2



## 「表示」⇒「ビューの詳細設定」を選択



リスタート計算結果2



「左から」、「適用」をクリックし、 🔤 をクリックしてウインドウを閉じます

ビューの詳細設定	×
<ul> <li>✓ スケルトン表示で高速モード(F)</li> <li>XY面(X)</li> </ul>	上から(T) をから(L) 右から(R)
YZ面(Y) ZX面(Z)	下から(B)
数值指定。	
角度(G):	20 [deg]
クリッピング範囲(C):	20 倍 拡大·縮小
回転角度(O) 移動	□量(M) 拡大量(S)
H: 0 H:	0 1
V: 90 V:	0 適用(A)
D: 0 D:	0 Utzット(E)

リスタート計算結果2



# ▶ をクリックし、アニメーションを実行します



リスタート計算結果2



# ■ をクリックし、アニメーションを停止します



リスタート計算結果2



#### 「描画」⇒「軌跡」を選択



リスタート計算結果2



### 原子の軌跡が表示されます



リスタート計算結果2



### 🔜 をクリックしてウインドウを閉じます



リスタート計算結果2



#### 「**結果**」⇒「モニター変数」を選択

Mi_rst002.inp - SCIGRESS ME	
	E 原子配置 (3D-Atomic Configuration)
	モニター変数 (Monitoring)
▋▆▐▋▋▕\$ ♥ ♥ ♥ ₽   其   ╯   ^ (^ & & ▲   & @ ]	C 二次解析(A) ▶
	プロパティ MDセル 原子・分子一覧
	基本セル定数
	a: 28.192001 [A] Alpha: 90.0000 [deg]
	b: 28.192001 [A] Beta: 90.0000 [deg]
	c: 28.192001 [A] Gamma: 90.0000 [deg]
	基本セル定数の設定を適用(T)
	密度(D)
	8.908423 [g/cm**3]
	密度の設定友適用(N)
• • • • • • • • • • • • • • • • • •	
• • • • • • • • • • • • • • • •	
2	
<u>X</u> Y	
) 計算した結果のモニター変数	リスタート 原子 2048 個 8.908423 g/cm**3 🦼

リスタート計算結果2



#### 温度、圧力、体積の時間変化のグラフが表示されます



リスタート計算結果2



### 🔤 をクリックしてウインドウを閉じます



二次解析(二体相関関数)



### 「結果」⇒「二次解析」⇒「二体相関関数・積算配位数」を選択

Ri_rst002.inp - SCIGRESS ME	
ファイル(F) 編集(E) 表示(V) モデリング(M) シミュレーション(S) LAMMPS(L)	(結果(R) ツール(T) ヘルプ(H)
D 🗳 🖬 🕀   🎒   X 🖻 🛍 🗙 🍂 💱   🗰 🔳   그   🗗 🖉   🖺 🗉	原子配置 (3D-Atomic Configuration)
🍕 🔙 🐚 🐚 🐚 🐚 🕷 🖉 📕 📾 🔚	モニター変数 (Monitoring)
🛛 🖉 🗗 🗗 ଢ 💿 🕂 🖬 🔤 平均二垂変位(M)	二次解析(A)
二体相関関数・積算配位数(P)	プロパティ MDセル 原子・分子→暫
干渉関数(I)	基本セル定数
ホロノイ多面体(V)	
分子内座標(C)	a: 28.192001 [A] Alpha: 90.0000 [deg]
速度目己相関関数・スペクトル(S)	b: 28.192001 [A] Beta: 90.0000 [deg]
	c: 28.192001 [A] Gamma: 90.0000 [deg]
	「基本セル宗教の設定を決田(工)」
	本41277年秋7月末之週用(1)
● 12/J1±テ+1iil(「)	密度(D)
	8.908423 [g/cm**3]
	変度の設定を適用(N)
• • • • • • • • • • • • • • • • • • • •	
••••••••••	
Ζ.	
KY	
 二体相関関数と積算配位数の計算	リスタート 原子 2048 個 8.908423 g/cm**3
二次解析(二体相関関数)



## 解析開始時間:51、解析終了時間:100 を設定し、 建 をクリック

📡 Ni_rst002.sim - Pair Correlation Function & Run 👝 📼 🕰
ファイル(F) 解析(A) 表示(V) ヘルプ(H)
全出力ステップ数 [ステップ] 100
時間刻み幅 [fs]: 2.000000e+001
解释析開始時間
51
開始時間 [ps]: 1.020000e+000
解析終了時間
100
終了時間 [ps]: 2.000000e+000
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
【iiii和:1:1:1:1:1:1:1:1:1:1:1:1:1:1:1:1:1:
レディ

二次解析(二体相関関数)



「OK」をクリック

出力ファイル名	<b>—</b>	
出力ファイル名:	Ni_rst0020000	
ファイル名を変更する場合は、拡張子を付けずに入力し てください。		
ОК	キャンセル	

二次解析(二体相関関数)



# プログレスバーが100%になったら、「**閉じる**」をクリック

Pair Correlation Function		
MD出力ファイル:	Ni_rst002.sim	
解析開始時刻:	17:54:43	
経過時間[秒]:	3	100 %
残り時間[秒]:	0	
計算終了		
	<b>閉じる</b>	

二次解析(二体相関関数)



💵 をクリック

🔊 Ni_rst002.sim - Pair Correlation Function & Run 👝 💷 💌
ファイル(F) 解析(A) 表示(V) ヘルプ(H)
シュレーション 全地力ステップ数「ステップ100
時間刻み幅 [fs]: 2.000000e+001
解析開始時間
51
開始時間 [ps]: 1.020000e+000
解析終了時間
終了時間 [ps]: 2.000000e+000
· 詳細設定…
レティ

二次解析(二体相関関数)



## 二体相関関数のグラフが表示されます



二次解析(二体相関関数)



## 「**ツール**」→「プロット点情報」を選択



二次解析(二体相関関数)



### 「プロット点の選択」をクリックし、十字の中心を第1ピークの位置に合わせクリック





※十字線を消すには、グラフ内で右クリック

二次解析(二体相関関数)



第1ピークの座標値が表示されます。

プロッ	卜点情報	×
─座標	值	
X	2.450000e+000	
Y:	6.742770e+000	
ブ	ロット点の選択(P)	閉じる ヘルゴ

二次解析(二体相関関数)



## 「閉じる」をクリック。 をクリックしてウインドウを閉じます。

שםל	ト点情報
- 座標(	值
X	2.450000e+000
Y:	6.742770e+000
ブ	ロット点の選択(P) 閉じる ヘルプ



# (参考)SCIGRESS MEが生成したLAMMPS入力データ Ni.lin FUJITSU

# Created by SCIGRESS ME

variable FileName string Ni

log \${FileName}.log

atom\_stylefullunitsmetalboundaryp p p

read\_data Ni.ldt

pair\_style eam pair\_coeff 1 1 Ni\_u3.eam

timestep 0.0005 velocity all create 298 4928459

run\_style verlet atom modify sort 0 0

fix 1 all npt temp 298 298 0.1 tri 1.01325 1.01325 0.5

compute 1 all pe/atom

thermo\_style custom step cpu temp press vol etotal ke pe enthalpy pxx pyy pzz pxy pyz pxz thermo 100 dump 1 all custom 100 \${FileName}.dmp id mol type q xsu ysu zsu vx vy vz c\_1 dump\_modify 1 sort id

restart 10000 \${FileName}.restart

run 10000

# (参考)SCIGRESS MEが生成したLAMMPS入力データ Ni.ldt FUJITSU

Created by SCIGRESS ME

2048 atoms

1 atom types

0.00000000 28.19200000 xlo xhi 0.00000000 28.19200000 ylo yhi 0.00000000 28.19200000 zlo zhi 0.00000000 0.00000000 0.00000000 xy xz yz

#
# SCIGRESS Molecule Types
#
# 1 Ni
#
# SCIGRESS Atom Types
#
# 1 Ni
#
# SCIGRESS Bond Types
#
#

1 58.69340000

#### Atoms

. . .

- $2 \quad 1 \quad 1 \ +0.000000 \ +1.76200000 \ +1.76200000 \ +0.00000000 \\$
- $3 \quad 1 \quad 1 \ +0.000000 \ +1.76200000 \ +0.00000000 \ +1.76200000 \ \\$

# LAMMPSに関するお問合せについて

# ◆ サポートの範囲:

SCIGRESS ME のLAMMPS連携機能の使用方法に関するお問合せ ※サポート製品をご購入いただく必要がございます。

# ◆サポートの範囲外:

LAMMPSは弊社製品ではないため、 以下のお問合せはサポート製品の対象外となります。

- LAMMPSの入手方法、インストール方法
- ▶ LAMMPSの計算方法や理論(手法、ポテンシャル、等)
- ➢ LAMMPSによる計算のノウハウ、事例、精度比較、等
- ▶ コマンドラインでのLAMMPSの実行方法等

### ※受託計算や計算方法の調査等はサポートとは別費用(個別見積)となります。



# shaping tomorrow with you