

『LAMMPSによる分子動力学シミュレーション』 補足資料の使い方

この資料では、『LAMMPSによる分子動力学シミュレーション』（以後、書籍とよびます）の補足資料の使い方を手短かに説明します。計算原理や、LAMMPS入力スクリプトに関する説明は書籍をご参照ください。

この資料をご覧になっている方は、すでにLinuxをOSとする計算機にアカウントを持ち、その計算機には書籍第0章で示したLAMMPS（MPIで並列計算可能なもの）、Python3（および必要なモジュール）、Python2、gnuplotがインストール済みであるとします。この資料は、Ubuntu 24.04.2 LTSで動作する計算機を用いて作成しましたが、他のOSあるいはUnixなどでもほとんどの部分は流用可能だと思います。

書籍でも申し上げましたが、以下に示す手順は筆者が使用している計算機上で確認したものであるため、**読者の方々が使用されている計算機上での動作を保証することはできません**ので、その点ご注意ください。

まず、Linuxターミナルを起動し、作業用ディレクトリに移動し、以下のコマンドから補足資料をダウンロードします。`wget` を使えない環境であれば、他の手段をでファイルをダウンロードして、作業用ディレクトリに移動します。

```
$ wget https://x-ability.co.jp/lammps_book/md_lammps_handson.zip
```

次に、`md_lammps_handson.zip` を解凍します。

```
$ unzip md_lammps_handson.zip
```

解凍されたディレクトリ `md_lammps_handson` に移動（`cd`）して、`ls` コマンドで内容を確認します。

```
$ cd md_lammps_handson/  
$ ls  
ArgonGas    Dielectricity  Osmosis      Rubber        setting.gp  
BeadSpring  HenryConstant  Partition    VaporPressure
```

内容が確認できたら、「アルゴン気体の分子動力学シミュレーション」を実行してみます。`ArgonGas/Step1` に移動し、内容を確認します。

```
$ cd ArgonGas/Step1  
$ ls  
argon01.in
```

上のように、このディレクトリには `argon01.in` というLAMMPS入力スクリプト1個だけが含まれます。ここで、LAMMPSを実行します。

```
$ mpirun -np 4 lmp_mpi -in argon01.in -log argon01.log
```

ターミナル上にログが出力され、最後に以下のように表示されていれば計算は正常に終了しています。

```
Total # of neighbors = 291
Ave neighs/atom = 0.29100000
Neighbor list builds = 1137
Dangerous builds = 0
System init for write_data ...
Total wall time: 0:00:04
```

再度、ディレクトリの内容を確認すると、ログファイルとLAMMPSフォーマットのデータファイルが生成されています。ここで行った手順は、書籍3.2.1項に説明しているものに対応しています。書籍では、作業ディレクトリを `mkdir` コマンドで生成し、そこで `argon01.in` を読者ご自身でタイプして作成するというふうに記述しています。

```
$ ls
argon01.in argon01.log argon1000.data
```

続いて、`Step2` に移動し、今生成された `argon1000.data` をコピーしてから、内容を確認します。

```
$ cd ../Step2/
$ cp ../Step1/argon1000.data ./
$ ls
argon02.in argon1000.data fit02.gp plot02.gp
```

LAMMPS入力ファイル `argon02.in`、gnuplotスクリプト `fit02.gp`、`plot02.gp` および `argon1000.data` が確認できます。これらが確認できたら、以下のようにLAMMPSを実行します。

```
$ mpirun -np 4 lmp_mpi -in argon02.in -log argon02.log
```

ログ出力の最後の部分が、以下のように表示されていれば計算は正常に終了しています。

```
Total # of neighbors = 111
Ave neighs/atom = 0.11100000
Neighbor list builds = 1335
Dangerous builds = 0
Total wall time: 0:00:34
```

この計算により、以下のように `T200.out`、`T220.out`、`...`、`T400.out` というファイルが生成されます。

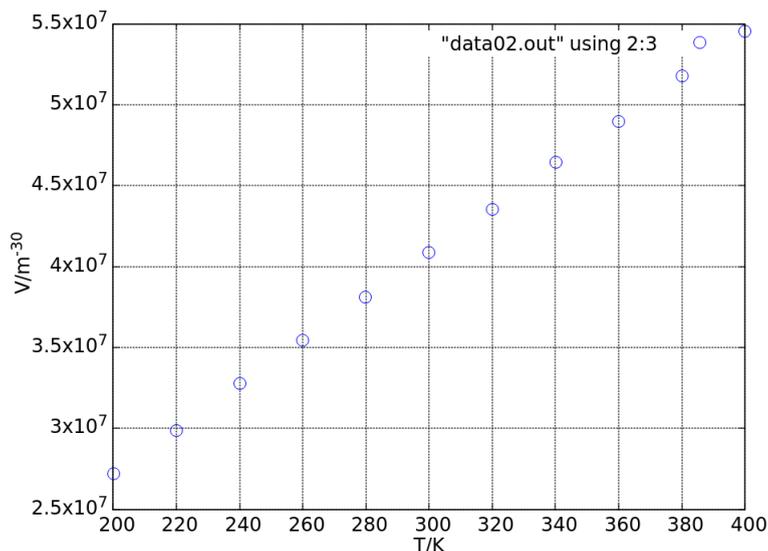
```
$ ls
T200.out T240.out T280.out T320.out T360.out T400.out argon02.log fit02.gp
T220.out T260.out T300.out T340.out T380.out argon02.in argon1000.data plot02.gp
```

ここで、以下のコマンドで `data02.out` というテキストファイルを作成します。

```
$ grep 50000 T*out > data02.out
```

続いて、以下のコマンドでgnuplotを実行すると `Step2` で行ったMD計算から得られたデータを用いて、アルゴン気体の温度と体積の関係をプロットできます。

```
$ gnuplot plot02.gp
```



さらに、以下のコマンドでgnuplotを実行すると、アルゴン気体の温度と体積の関係を互いに比例するものとしてフィッティングすることができます。

```
$ gnuplot fit02.gp
iter      chisq      delta/lim  lambda  a
  0  1.9195566237e+16  0.00e+00  3.07e+02  1.000000e+00
  1  1.3335592151e+14  -1.43e+07  3.07e+01  1.248861e+05
  2  5.3861443192e+10  -2.47e+08  3.07e+00  1.362290e+05
  3  5.3751476140e+10  -2.05e+02  3.07e-01  1.362393e+05
  4  5.3751476140e+10  -9.88e-09  3.07e-02  1.362393e+05
iter      chisq      delta/lim  lambda  a

After 4 iterations the fit converged.
final sum of squares of residuals : 5.37515e+10
rel. change during last iteration : -9.87891e-14

degrees of freedom (FIT_NDF) : 10
rms of residuals (FIT_STDFIT) = sqrt(WSSR/ndf) : 73315.4
variance of residuals (reduced chisquare) = WSSR/ndf : 5.37515e+09

Final set of parameters      Asymptotic Standard Error
=====
a = 136239 +/- 72.09 (0.05292%)
```

フィッティングの結果は非常に良好で、このことから一定圧力のもとで、アルゴン気体の温度と体積は比例すると考えてよいということになります。これは**シャルルの法則**として知られています。ここで得られた比例定数136239と理想気体の状態方程式を組み合わせると、ボルツマン定数を計算することができます。

$$\frac{136239 \times 10^{-30} \times 101325}{1000} = 1.3804416675 \times 10^{-23} \text{JK}^{-1}$$

SI単位系におけるボルツマン定数の値は $1.380649 \times 10^{-23} \text{JK}^{-1}$ なので、MD計算の結果と実測値は高い精度で整合していることが分かります。ここで行った手順は、書籍3.2.2項に説明しているものに対応しています。書籍では、作業ディレクトリを `mkdir` コマンドで生成し、LAMMPS入力スクリプトやgnuplotスクリプトを読者ご自身でタイプして作成するというふうに記述しています。

書籍では、この後、アルゴン気体の定積および断熱MDシミュレーション、そして他7個の課題について説明しています。それらにおいても、上の `Step1` および `Step2` と同じように、**補足資料を使うと、作業ディレクトリの作成、LAMMPS入カスクリプトやgnuplotスクリプト、そしてPythonを用いる課題では、Pythonスクリプトをタイプする作業をスキップできます。**

書籍で紹介している8個の課題は概ね独立しているので、読者の関心に応じて各課題を個別に実行することが可能ですが、**各課題内での手順はスキップすることは基本的にはできません**（例えば3.7節『粗視化分子動力学による高分子物質の粘弾性計算』の `BeadSpring` ディレクトリで `Step1` を実行せずに `Step2` を行うことなど）。

また、3.5節『分子動力学による分配係数計算』の `Step1` は、3.4節『分子動力学によるヘンリー定数計算』の `Step1` で得られるデータファイル `nvt.data` を利用している点に注意してください。

3.9節『粗視化分子動力学によるゴムの力学物性計算』で使用する `CL25.data` を `Step1` に含めておいたので、`md_lammps_handson.zip` を解凍して作業される方は、`CL25.data` のダウンロードは必要ありません。

書籍では、各種スクリプトの編集手順を示していることがありますが、補助資料の対応するディレクトリには編集済みのスクリプトが含まれているので、それらの編集作業なしに計算を実行できます。ただし、『粗視化分子動力学によるゴムの力学物性計算』の `Rubber/Step3` と `Rubber/Step5` では、それぞれ `Rubber/Step2` と `Rubber/Step4` で計算した弾性率 G_e を指定する部分があるので、これらについては、読者ご自身で計算して得られた値に書き換えてください。