

LAMMPS講習会「遠隔（実習）受講」用 事前準備資料

PCに導入必要なソフトウェア

- Tera Term
<https://ja.osdn.net/projects/ttssh2/>
- WinSCP (Windowsのみ)
<https://winscp.net/eng/docs/lang:jp>
- ターミナル (Mac)
アプリケーション>ユーティリティ>ターミナル.app
- VMD
<https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>
- gnuplot
<https://sourceforge.net/projects/gnuplot/>
- Excel または LibreOffice
<https://ja.libreoffice.org/download/download/>
- Cisco AnyConnect Secure Mobility Client
<https://vpn.j-focus.jp/> (要FOCUSスパコンアカウント)

1. FOCUSスパコンへログイン

【参照】 SSL-VPN 利用の手引き
<https://www.j-focus.jp/sslvpn/>

(ログインに問題生じた場合の質問はお受けできませんのでご了承ください)

ログインできない場合は、
遠隔（実習）の受講はできません。
遠隔（聴講）に変更の旨、lecture@j-focus.or.jp までご連絡ください。

2. LAMMPS実行

FOCUSスパコンログイン後、ホームディレクトリから

- ・ディレクトリ `/home1/glew/share/LAMMPS_seminar/pre-test` をホームディレクトリへコピー

```
$ cp -r ../share/LAMMPS_seminar/pre-test/ .
```

- ・ディレクトリ移動し、ジョブ実行

```
$ cd pre-test
$ sbatch job01.sh
$ ls      (以下ファイルが存在すること確認)
data.chain
dump.chain.lammpstrj
in.chain  job01.sh
lmp_chain_e.xxxxxxx      (xxxxxxはジョブID)
lmp_chain_o.xxxxxxx
log.lammps
```

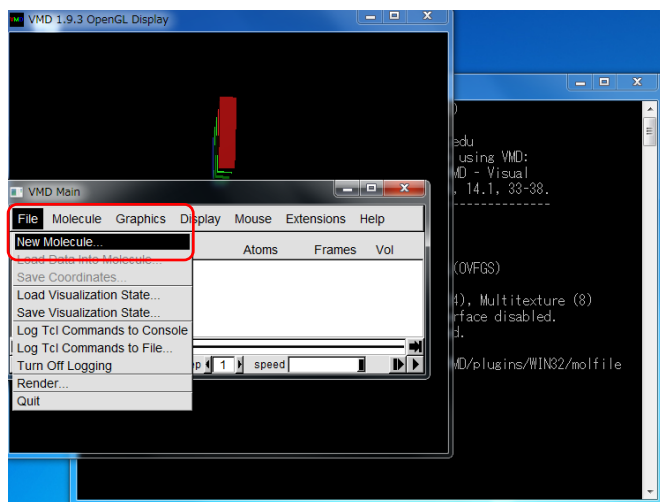
3. PCへのダウンロード/可視化

- dump.chain.lammpstrj をPCへダウンロード
- VMD起動後、ファイルをオープン（次ページ参照）

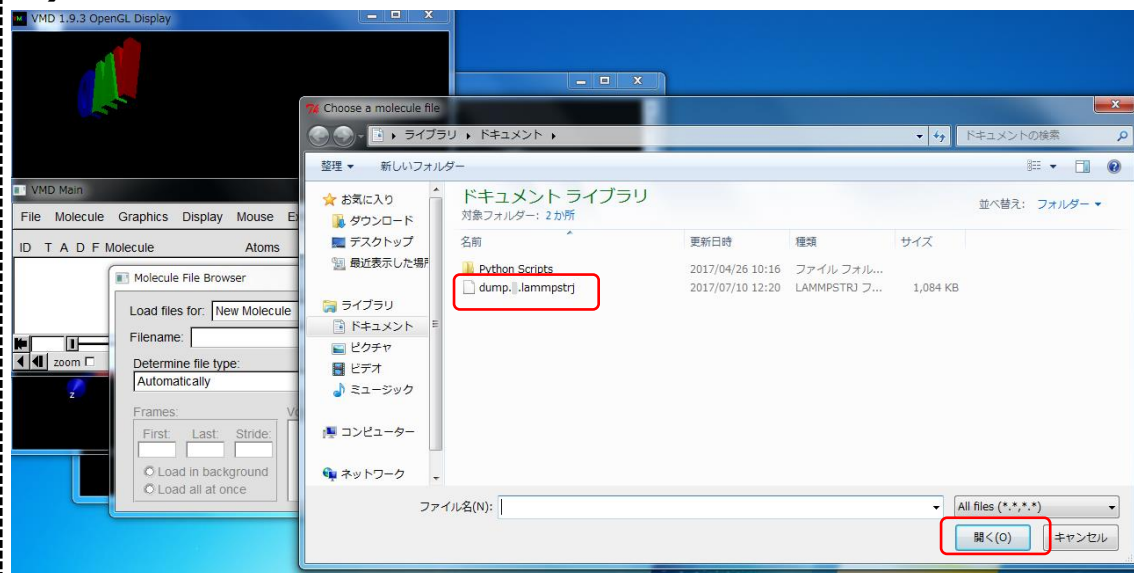
1) VMD Main画面

> File

> New Molecule

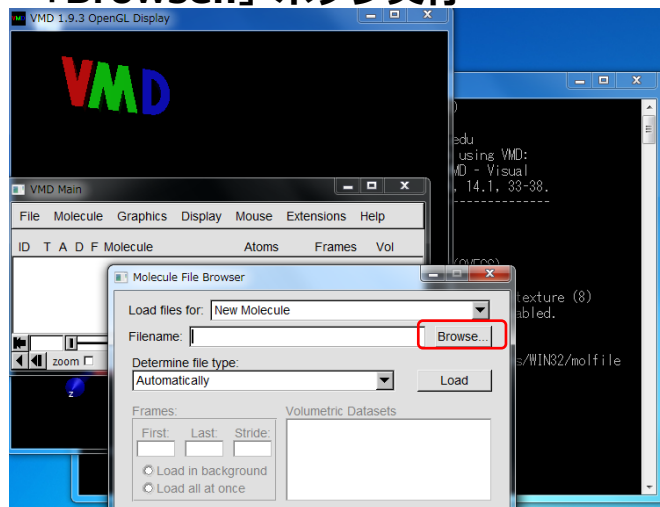


3) ファイルを選択し、「開く」ボタン実行



2) Molecule File Browser画面

「Browse..」ボタン実行



4) 適切なFile Typeを選択し、「Load」ボタン実行

