

概要

このマニュアルでは、DEXCS-RDstr に組み込まれている LIGGGHTS の例題「conveyor」について解説します。この例題の内容は、コンベア上を 2 種類の粒子が移動するものです。また、このマニュアルでは図 1・図 2 のように粒子挙動の可視化を目指します。

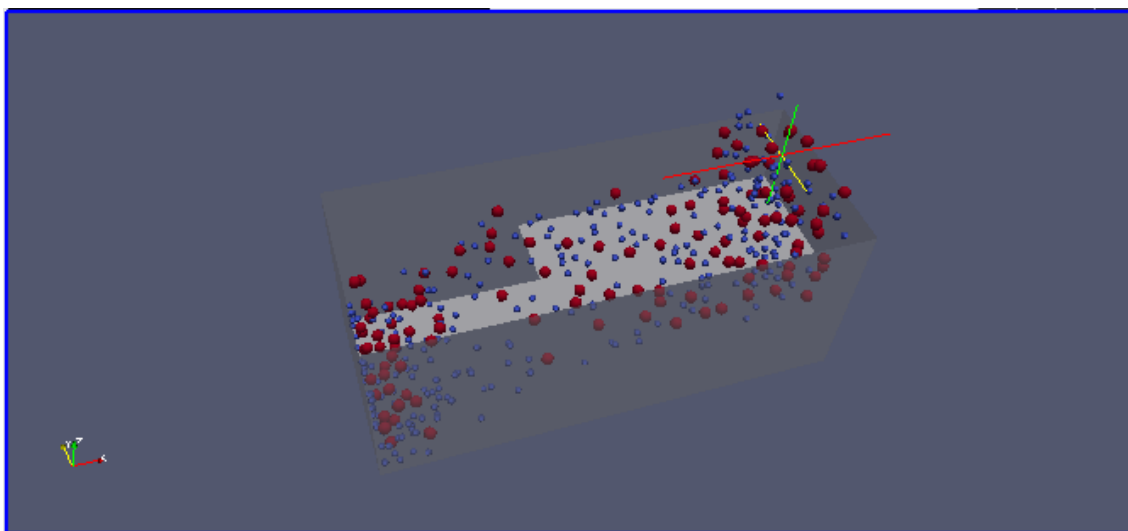


図 1

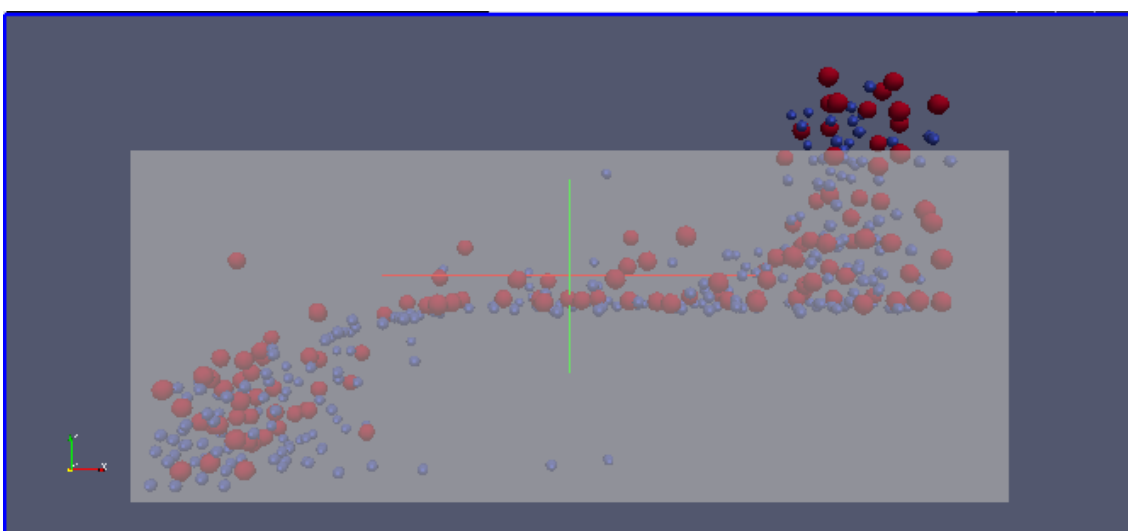
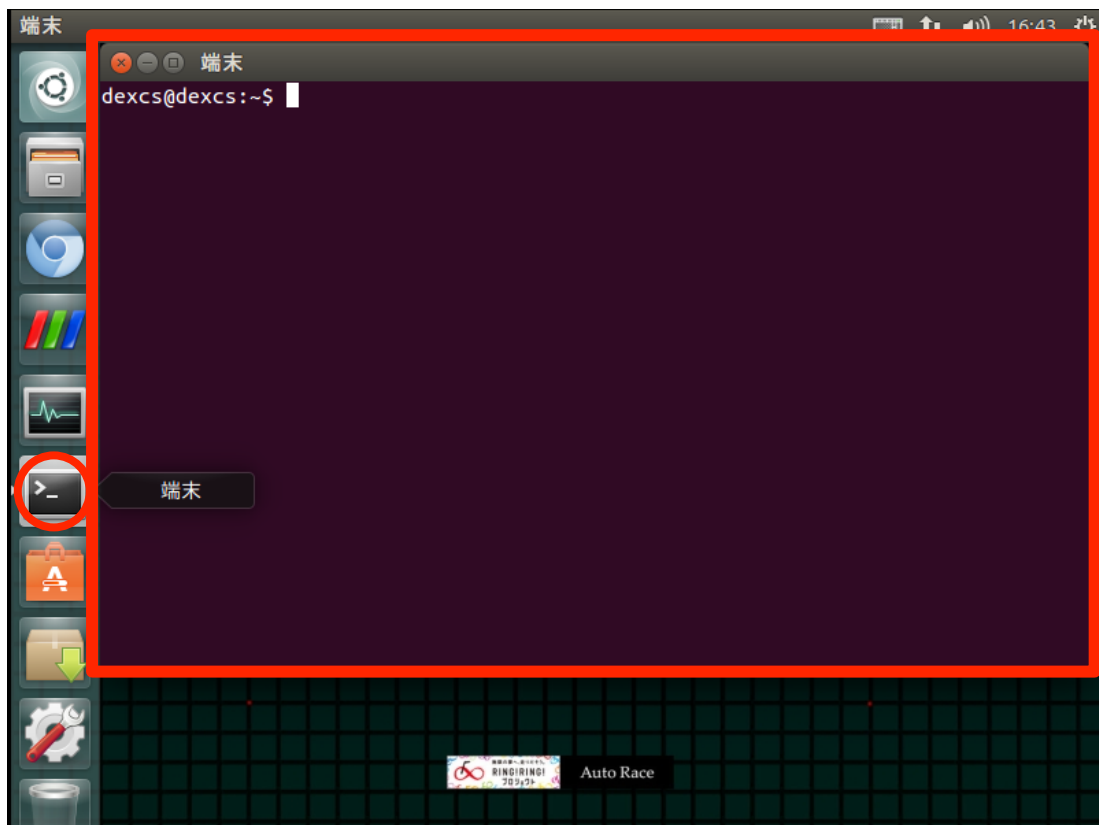


図 2

2. 端末の起動

図②-1 に示すアイコンをクリックすると、「端末」が起動します。次に、端末上で以下のコマンドを入力します。



図②-1 端末起動

コマンド入力

```
$ cd DEMwork/examples/LIGGGHTS/Tutorials_public/conveyor
```

コマンドを入力し、Enter を押したら、図②-2 のように表示を確認します。

```
dexcs@dexcs:~/DEMwork/examples/LIGGGHTS/Tutorials_public/conveyor$
```

図②-2

3. 計算実行

端末上で以下のコマンドを入力します。このとき、演算に使用する CPU の数を指定することができます。複数の CPU を使う並列計算を行う場合、X にはコア数を当てはめて下さい。

コマンド入力

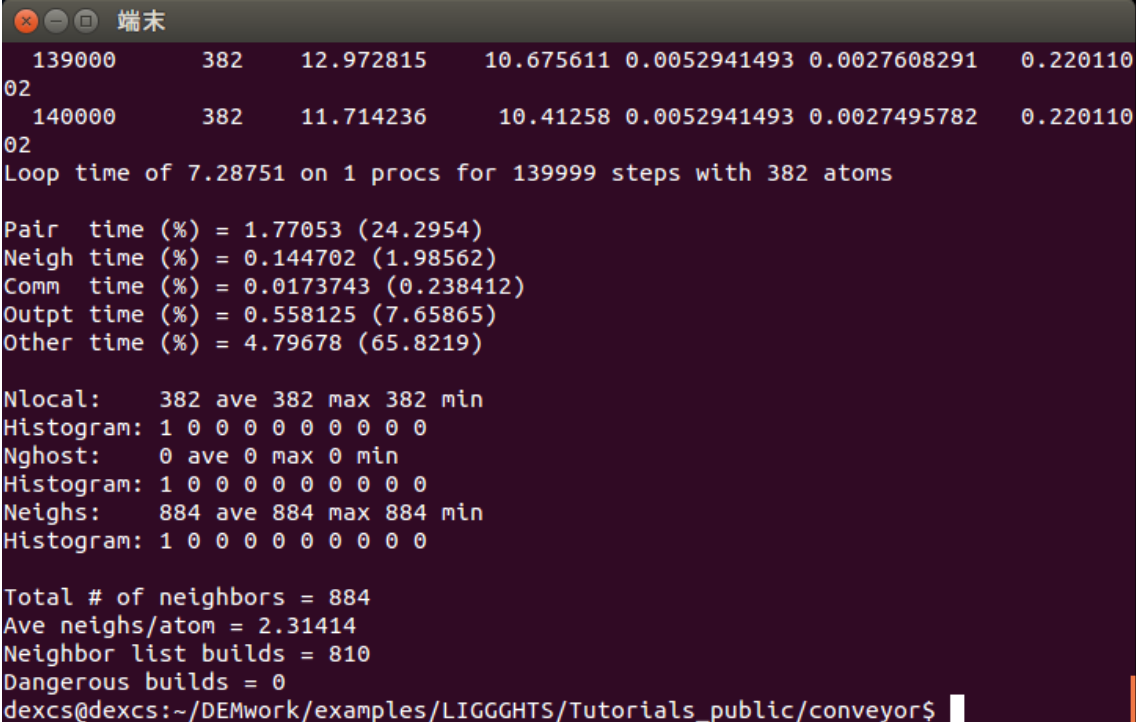
単独計算の場合

```
$ liggghts < in.conveyor
```

並列計算の場合

```
$ mpirun -np X liggghts < in.conveyor
```

コマンドを入力して **Enter** を押せば計算が実行されます。図③のように表示されれば、計算が完了したことが確認できます。



```
139000      382      12.972815      10.675611 0.0052941493 0.0027608291 0.220110
02
140000      382      11.714236      10.41258 0.0052941493 0.0027495782 0.220110
02
Loop time of 7.28751 on 1 procs for 139999 steps with 382 atoms

Pair time (%) = 1.77053 (24.2954)
Neigh time (%) = 0.144702 (1.98562)
Comm time (%) = 0.0173743 (0.238412)
Outpt time (%) = 0.558125 (7.65865)
Other time (%) = 4.79678 (65.8219)

Nlocal:      382 ave 382 max 382 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0
Nghost:      0 ave 0 max 0 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0
Neighs:      884 ave 884 max 884 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 884
Ave neighs/atom = 2.31414
Neighbor list builds = 810
Dangerous builds = 0
dexcs@dexcs:~/DEMwork/examples/LIGGGHTS/Tutorials_public/conveyor$
```

図③

4. 計算結果の可視化

計算結果のファイルは「post」という場所に保存されます。以下のコマンドを入力して、「post」へ移ります。図④-1のような表示になることを確認します。

コマンド入力

```
$ cd post
```

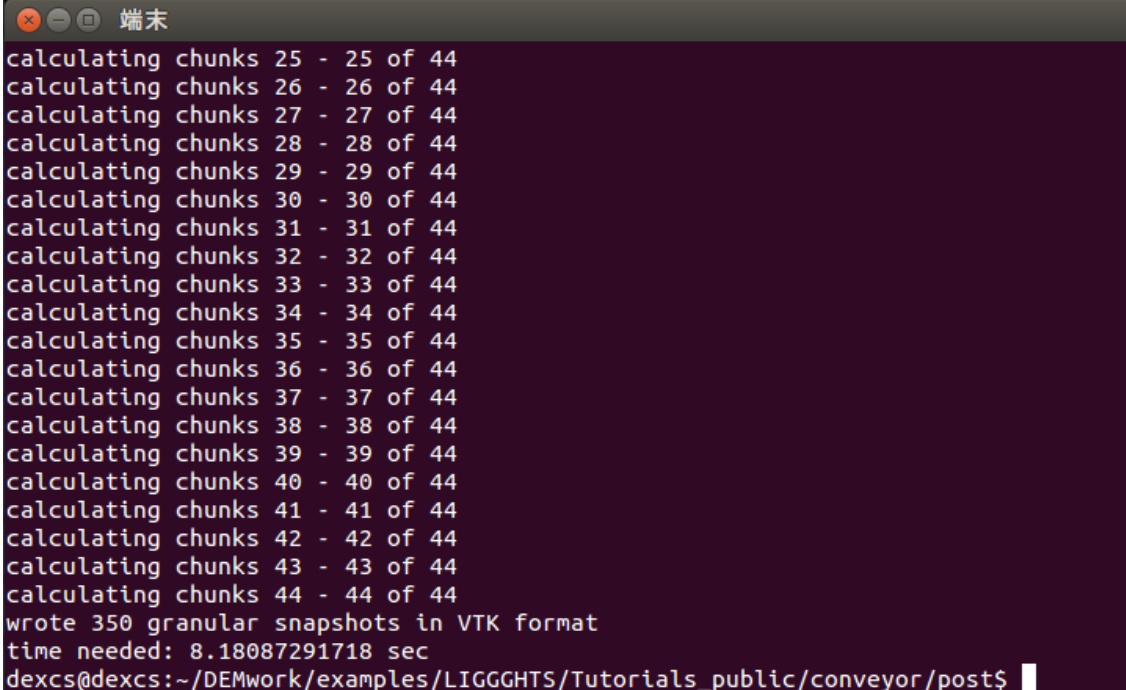
```
dexcs@dexcs:~/DEMwork/examples/LIGGGHTS/Tutorials_public/conveyor/post$
```

図④-1

次に、以下のコマンドを入力して **Enter** を押すと、計算結果が入ったファイルが。可視化用のファイルに変換されます。図④-2のように表示されれば、ファイル変換が完了したことが確認できます。

コマンド入力

```
$ lpp dump*
```



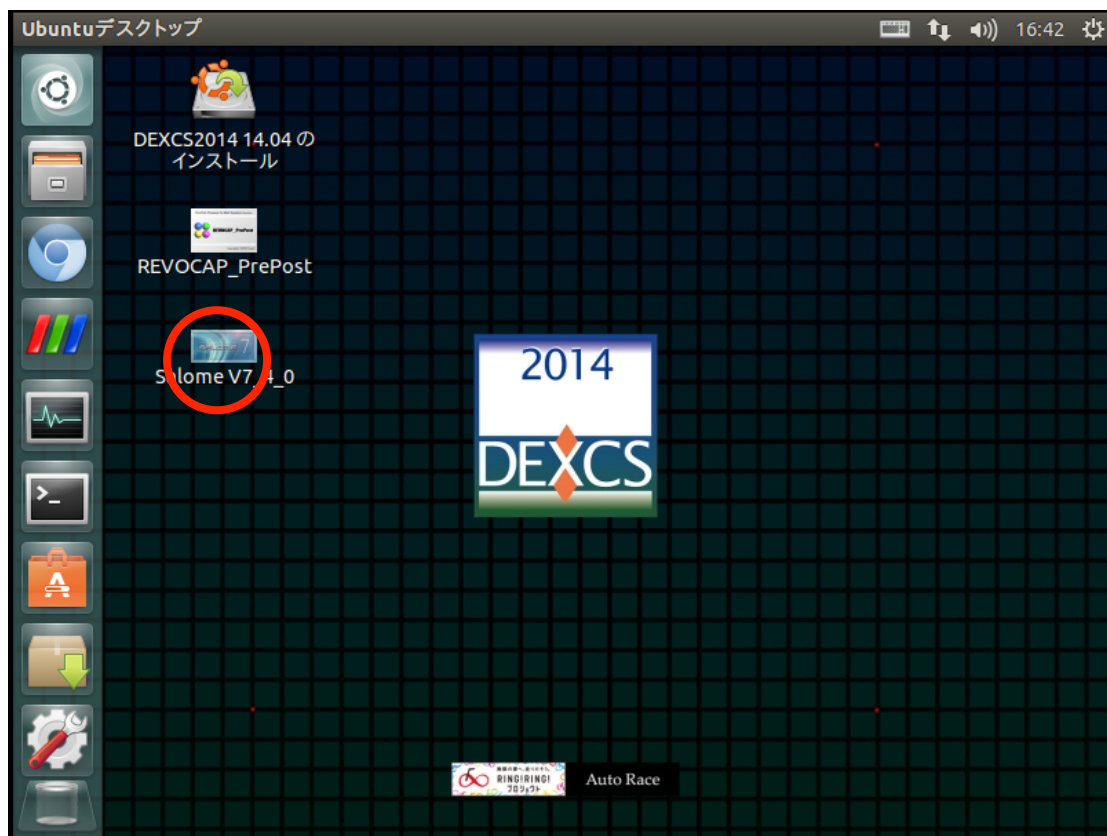
```
calculating chunks 25 - 25 of 44
calculating chunks 26 - 26 of 44
calculating chunks 27 - 27 of 44
calculating chunks 28 - 28 of 44
calculating chunks 29 - 29 of 44
calculating chunks 30 - 30 of 44
calculating chunks 31 - 31 of 44
calculating chunks 32 - 32 of 44
calculating chunks 33 - 33 of 44
calculating chunks 34 - 34 of 44
calculating chunks 35 - 35 of 44
calculating chunks 36 - 36 of 44
calculating chunks 37 - 37 of 44
calculating chunks 38 - 38 of 44
calculating chunks 39 - 39 of 44
calculating chunks 40 - 40 of 44
calculating chunks 41 - 41 of 44
calculating chunks 42 - 42 of 44
calculating chunks 43 - 43 of 44
calculating chunks 44 - 44 of 44
wrote 350 granular snapshots in VTK format
time needed: 8.18087291718 sec
dexcs@dexcs:~/DEMwork/examples/LIGGGHTS/Tutorials_public/conveyor/post$
```

図④-2

5. 結果の確認

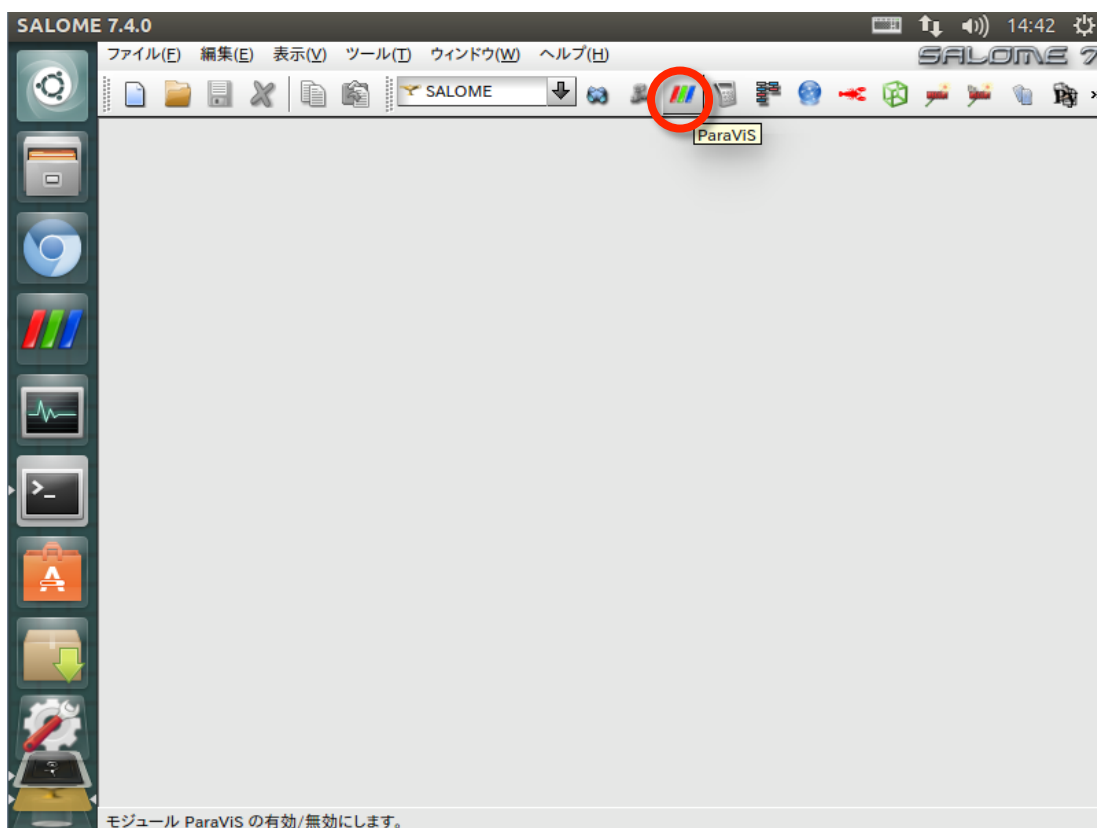
5-1. Salome、ParaVIS の起動

端末を閉じます。図⑤-1 に示すアイコンをダブルクリックし、Salome を起動します。

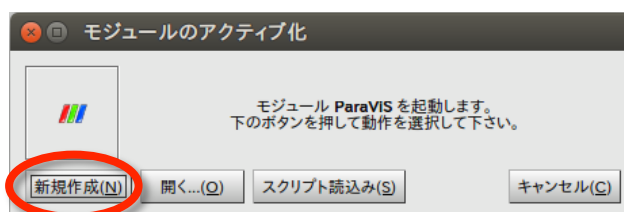


図⑤-1 Salome の起動

Salome の起動画面を起動すると、図⑤-2 のような画面になります。次に、赤丸で示す箇所をクリックし、ParaVIS モジュールを起動します。すると図⑤-3 のような画面が表示されるので、「新規作成」をクリックして画面が切り替わるまでしばらく待ちます。



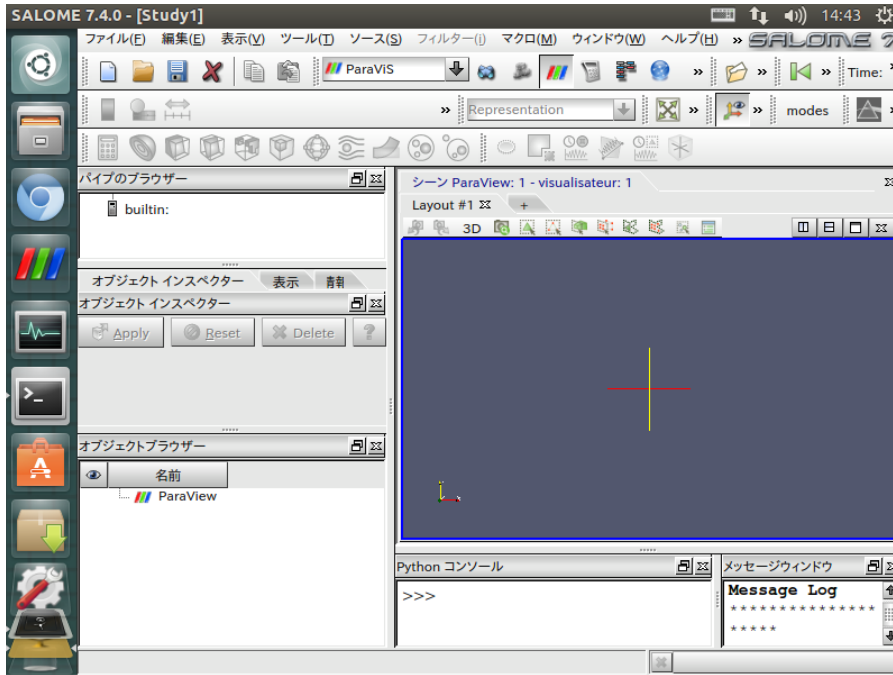
図⑤-2 Salome の起動画面



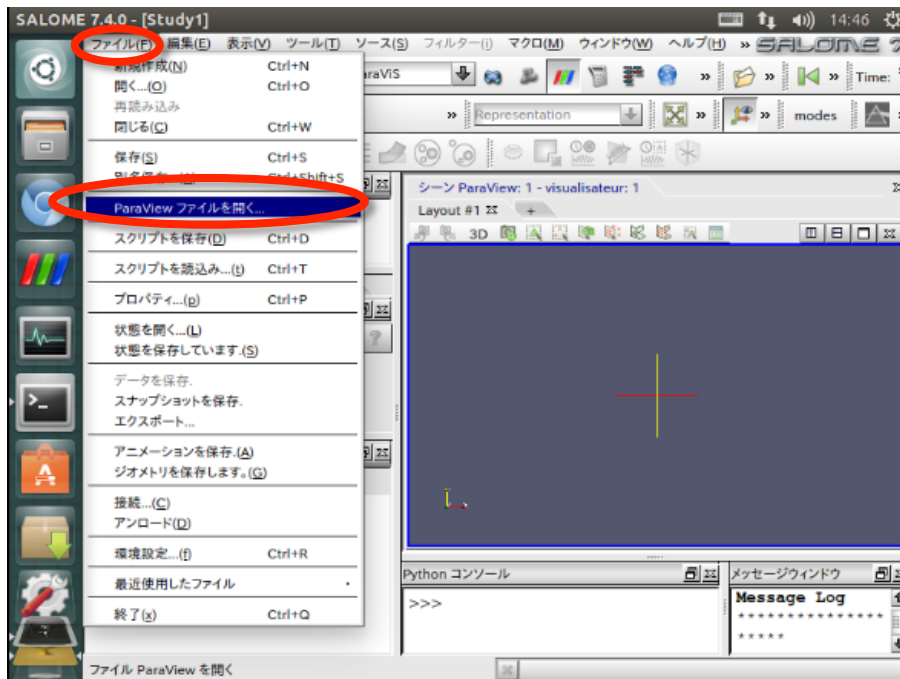
図⑤-3 ParaVIS モジュールの切り替え

5-2. ファイルの読み込み

しばらく待つと、図⑤-4のような画面に切り替わります。次に、図⑤-5に示すように画面左上の「ファイル」、「ParaView ファイルを開く...」の順にクリックします。

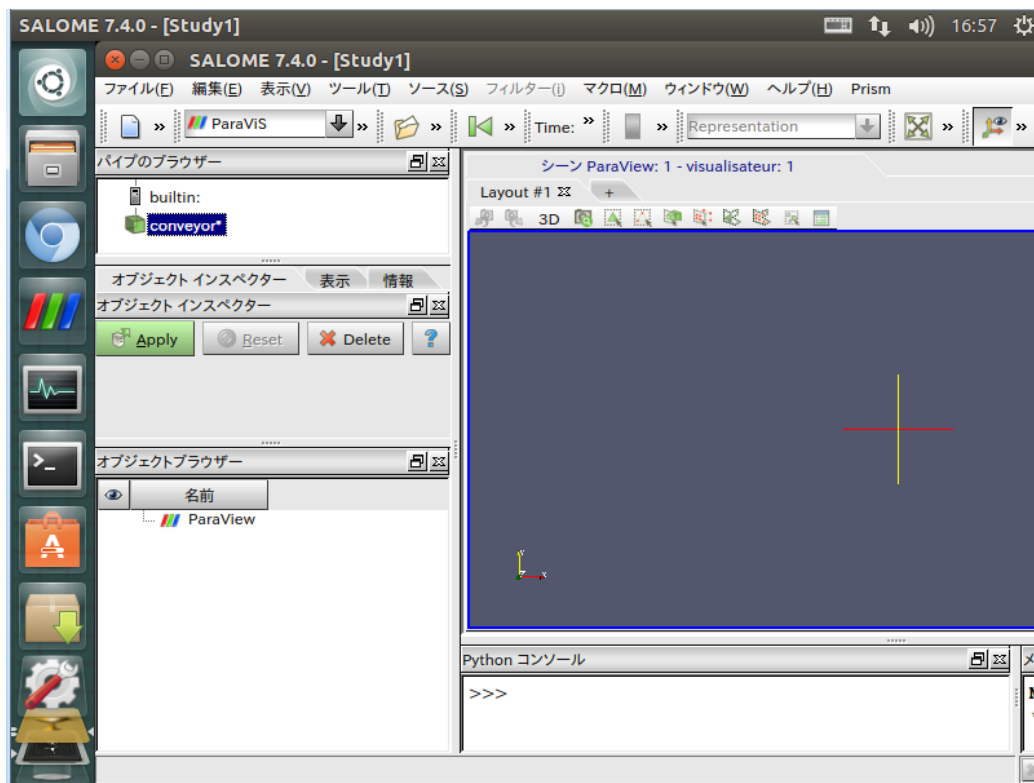


図⑤-4 ParaVIS モジュール画面



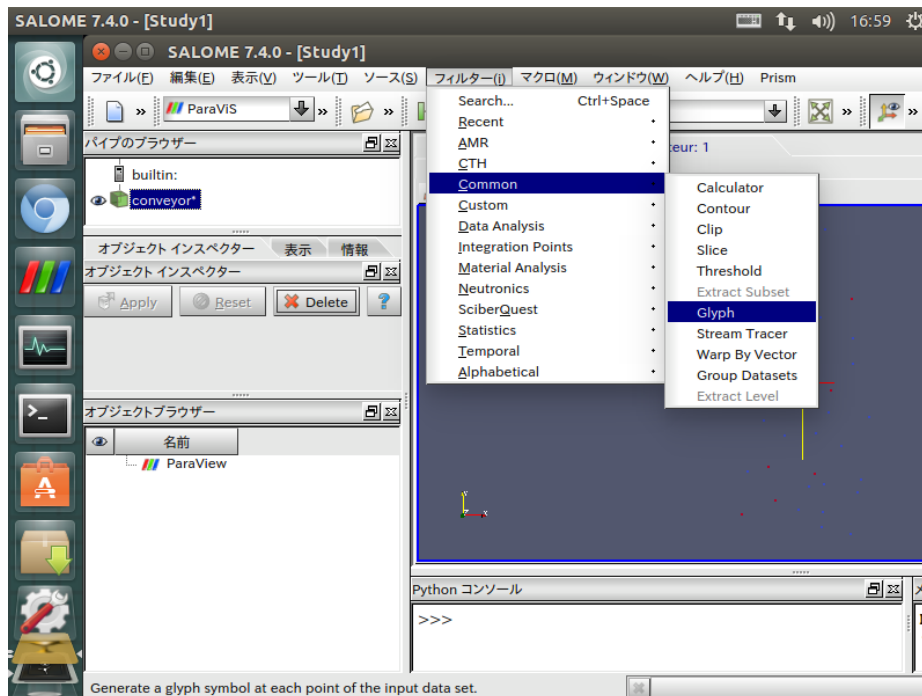
図⑤-5 ファイルの読み込み

「パイプのブラウザー」内に conveyor*が追加されたことを確認し、「Apply」をクリックします。このままでは



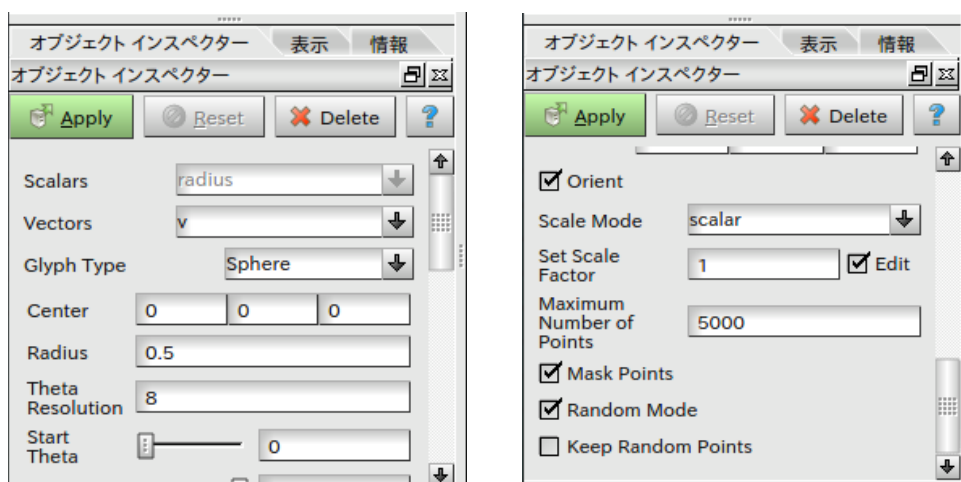
図⑤-8 conveyor ファイルの読み込み

結果を見やすくするための操作を行います。図⑤-9に示すように画面上部の「フィルター」→「Common」→「Glyph」を選択します



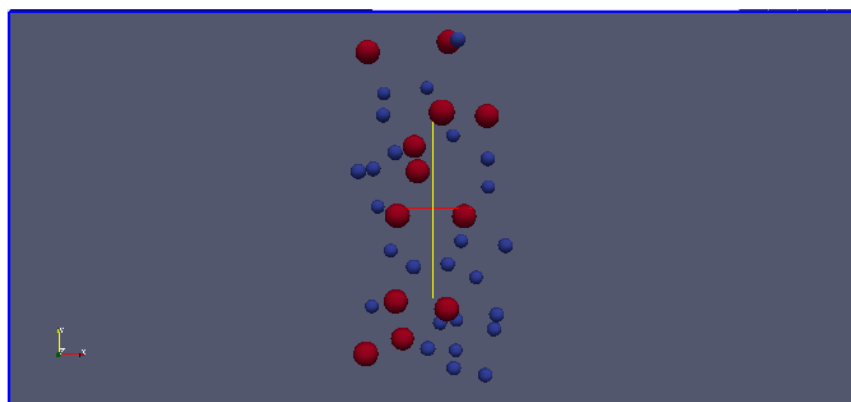
図⑤-9 フィルターの選択

パイプのブラウザー内に「Glyph1」が追加されたことを確認し、「オブジェクトインスペクター」内の各設定を変更します。「Vectors」「Glyph Type」「Scale Mode」「Set Scale Factor」を図⑤-10に示すように変更します。最後に Apply をクリックします。



図⑤-10 パラメータの変更

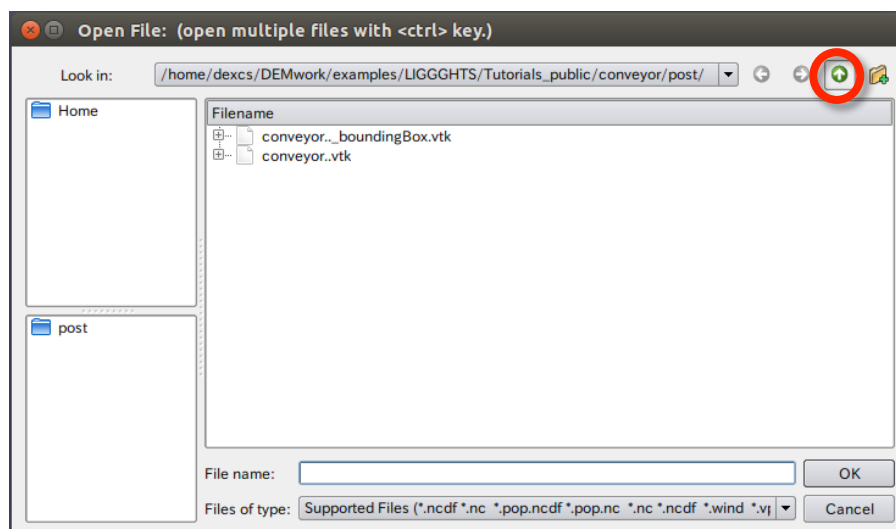
Glyph フィルターを使用したことで、図⑤-1 1 に示すようになりました。



図⑤-1 1 粒子の表示画面

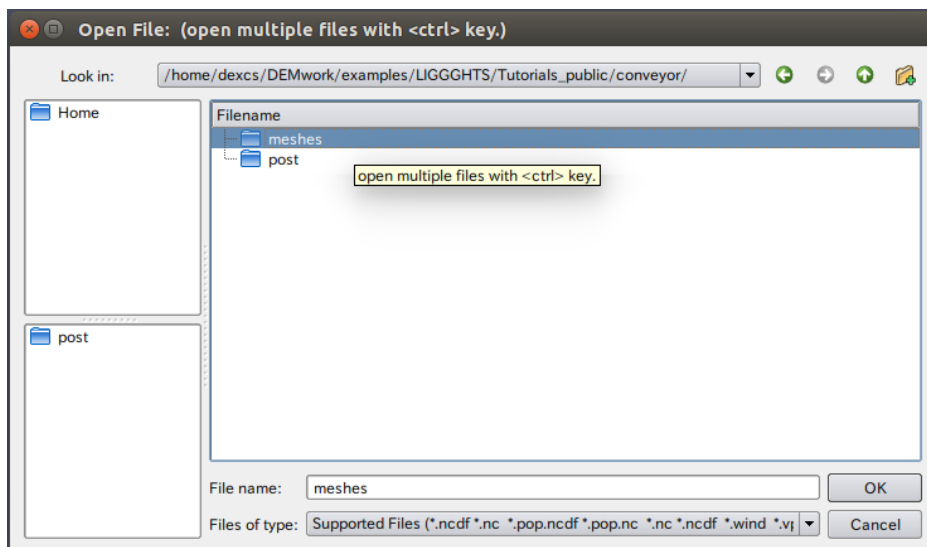
5-3. コンベアの読み込み

コンベアの形状ファイルを読み込みます。もう一度「ファイル」→「ParaView ファイルを開く...」をクリックします。図⑤-1 2 の赤丸で示す矢印をクリックします。



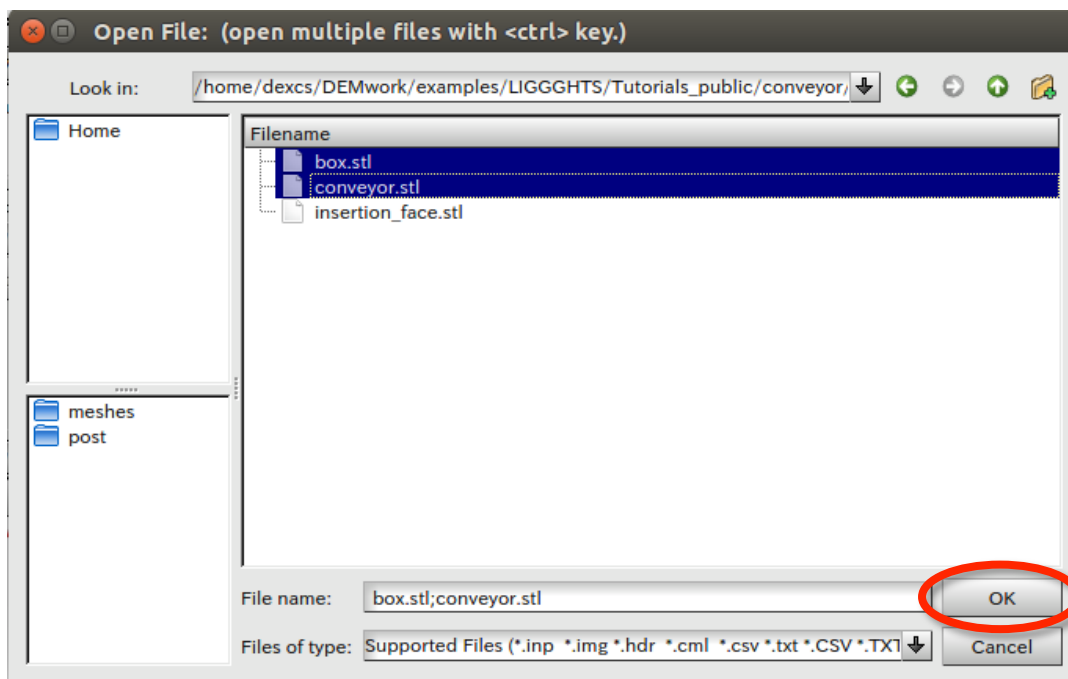
図⑤-1 2 ファイルの選択その3

「meshes」へ進みます。



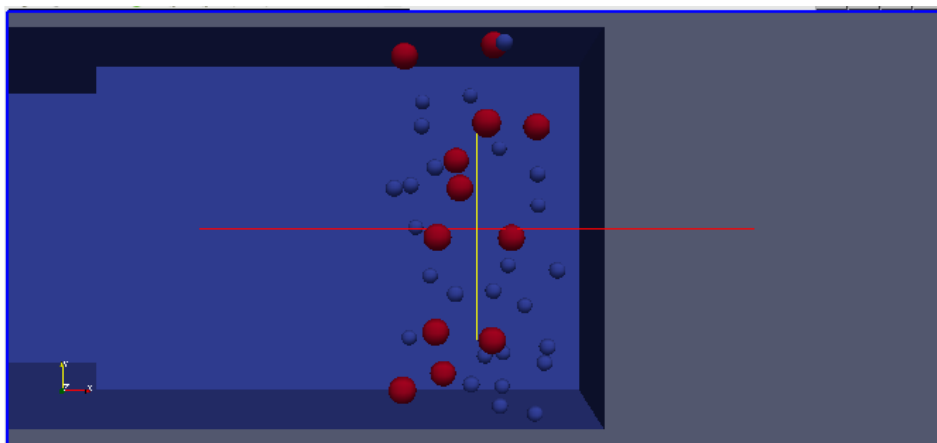
図⑤-13 ファイルの選択その4

図⑤-14のように「box.stl」と「conveyor.stl」の2つを選択して「OK」をクリックします。



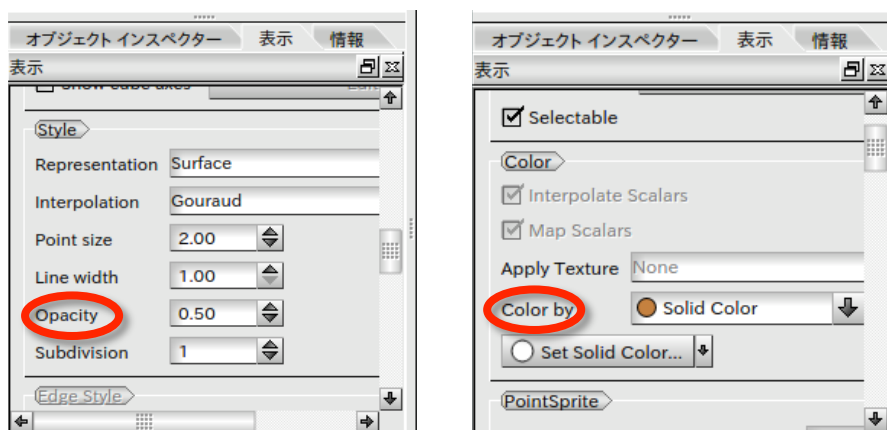
図⑤-14 ファイルの選択その5

図⑤-15のようなコンベアのモデルが読み込まれました。
最後に色を調整します。



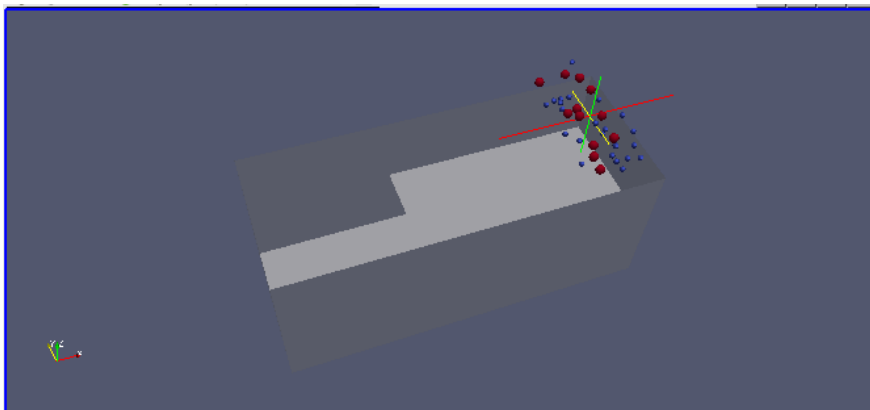
図⑤-15 コンベアの表示画面

「パイプのブラウザ」内で「box.stl」を選択し、真下の「表示」内の「Style」および「Color」欄の設定を変更します。「Style」内の「Opacity」および「Color」内の「Color by」を図⑤-16のように変更します。次に「conveyor.stl」を選択して同様の設定を行います。



図⑤-16 コンベアのパラメータの変更

図⑤-17のように表示されれば完了です。なお、結果の視点を変えたい場合、表①に示す操作を行うことで、カメラの操作が可能です。

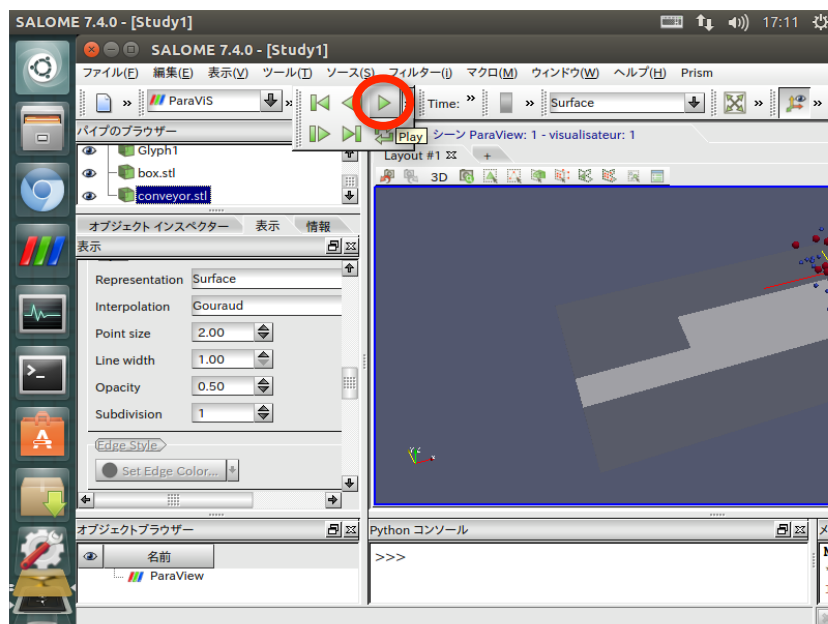


図⑤-17 調整後の結果画面

表① カメラ操作方法

| 操作 | 効果 |
|-------------------|---------|
| マウスのホイール | 拡大・縮小 |
| Ctrl + 右クリック+ドラッグ | 視点の回転 |
| Ctrl + マウスのホイール | 視点の平行移動 |

アニメーションを再生するには図⑤-18に示す「Play」をクリックします。



図⑤-18 アニメーションの再生