Winmostar V11

PFP 利用向けマニュアル

令和 7 年 5 月 3 日

株式会社クロスアビリティ

本書では Winmostar V11.12.1 を用いて、PFP 対応 LAMMPS のための入力ファイルを生成する手順を示します。本書で利用する機能はプロフェッショナル版エリートまたは無料トライアルで利用可能です。無償版、学生版、プロフェッショナル版エコノミー、プレミアムではご利用いただけません。Winmostar V11.12.0 以前を利用している場合は V11.12.1 以降にアップデートしてください。なお、本書記載の手順は本書執筆時点での手順であることをご了承ください。また、使用規約記載の通り、PFP (Matlantis)および PFP 対応 LAMMPS を含む Winmostar 本体以外のソフトウェアの動作については当社のサポート対象外です。

本書では 3 種類の利用方法を紹介します。

1. Winmostar を用いて data ファイルのみを生成する場合
2. Winmostar を用いて LAMMPS 向けの各種ファイルを一括生成する場合
3. Winmostar から直接 Matlantis サーバに接続してジョブを実行する場合

＜1. Winmostar を用いて data ファイルのみを生成する場合＞

① Winmostar V11.12.1 をインストールします。インストール手順は
https://winmostar.com/jp/installation/
に従います。手順 7 以降の実施は不要です。

② Winmostar を起動します。

③ **ファイル | 新規プロジェクト**をクリックし、プロジェクト名を入力し **OK** をクリックします。

④ PFP で計算したい初期構造を作成します。原子構造の作成方法の例は
LAMMPS 各種チュートリアル
https://winmostar.com/jp/tutorials/index.html#LAMMPS
詳細はユーザマニュアル
https://winmostar.com/jp/manual_jp/html/operation/createsystem.html
で確認できます。ひとまずサンプルデータで計算したい場合は**ファイル | インポート | Samples ファイル | Si.cif** をクリックします。

⑤ **ツール | 環境設定 | 計算 | MD | LAMMPS の pair_style, Potential file の入力を許可**にチェックを入れ **OK** をクリックします。

⑥ **ファイル | エクスポート | LAMMPS data File (for metal)**をクリックし、出力したい data ファイルの名前を入力し**保存**をクリックします。これらを Matlantis のサーバに転送して計算を実行します。

＜2. Winmostar を用いて LAMMPS 向けの各種ファイルを一括生成する場合＞

① Winmostar V11.12.1 をインストールします。インストール手順は

https://winmostar.com/jp/installation/
に従います。手順 7 以降の実施は不要です。

② Winmostar を起動します。

③ **ファイル | 新規プロジェクト**をクリックし、プロジェクト名を入力し OK をクリックします。

④ PFP で計算したい初期構造を作成します。原子構造の作成方法の例は
LAMMPS 各種チュートリアル
https://winmostar.com/jp/tutorials/index.html#LAMMPS
詳細はユーザマニュアル
https://winmostar.com/jp/manual_jp/html/operation/createsystem.html
で確認できます。ひとまずサンプルデータで計算したい場合は**ファイル | インポート | Samples ファイル** | Si.cif をクリックします。

⑤ **ツール | 環境設定 | 計算 | MD | LAMMPS の pair_style, Potential file の入力を許可**にチェックを入れ OK をクリックします。

⑥ **MD | LAMMPS | ワークフロー設定**をクリックします。

⑦ 「電荷を設定しますか？」と表示されたら**いいえ**をクリックします。

⑧ **パラメータファイルを使用**にチェックを入れ OK をクリックします。

⑨ **無機物系を計算**にチェックを入れ（有機物を計算する場合もこちらを選択）、**Pair style** に「pfp_api␣v(PFP のバージョン)␣(計算モード)」(「␣」はスペース、例えば「pfp_api␣v5.0.0␣CRYSTAL_PLUS_D3」)、**Potential file** に「species」と入力します。PFP が出力する原子電荷を取得したい場合は、**Atom style** を「atomic」から「charge」に変更します。そして OK をクリックします。「力場が設定されました」と表示されたら OK をクリックします。

⑩ **LAMMPS Workflow Setup** ウィンドウで適宜計算条件を設定します。計算条件の設定例は
LAMMPS 各種チュートリアル
https://winmostar.com/jp/tutorials/index.html#LAMMPS
設定の詳細はユーザマニュアル
https://winmostar.com/jp/manual_jp/html/winmos/md/winmos_lammps.html#md-lammps-workflow
で確認できます。

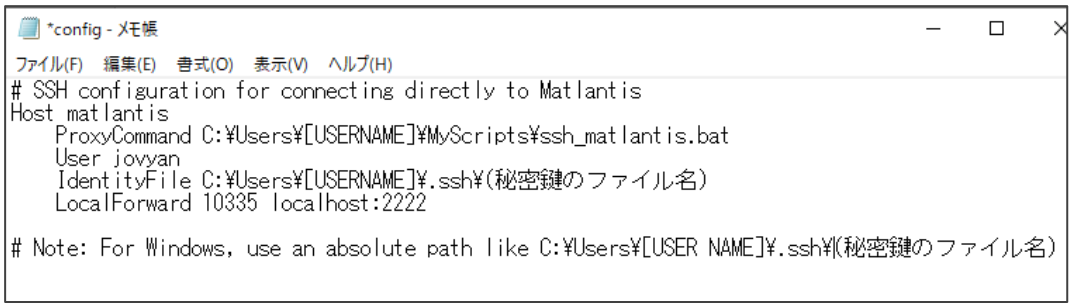
⑪ **LAMMPS Workflow Setup** ウィンドウでの設定が終わったら OK をクリックします。**ファイルの保存後ジョブを実行しない**にチェックを入れ**保存**をクリックします。「Potential file (species) was not found…」と表示されたら**はい**をクリックします。（連続ジョブの場合はジョブの回数分表示されるので、それらすべてに対し**はい**をクリックします。）「ファイルを保存しました」と表示されたら OK をクリックします。

⑫ メインウィンドウ左側の**プロジェクト**表示エリアの**作業フォルダ**で各作業フォルダを右クリックし、**Show in Explorer** をクリックします。表示されたファイルのうち lmp.data, lmp.in が

LAMMPS の計算に必要な入力ファイルです。これらを Matlantis のサーバに転送して計算を実行します。

＜3. Winmostar から直接 Matlantis サーバに接続してジョブを実行する場合＞

① Matlantis SSH 接続 設定方法のページ
https://matlantis.zendesk.com/hc/ja/articles/40524152374169-SSH%E6%8E%A5%E7%B6%9A-%E8%A8%AD%E5%AE%9A%E6%96%B9%E6%B3%95
の手順に従い、ターミナルソフト（例えば PowerShell）で Matlantis サーバに接続する SSH 環境を構築します。そして、C:¥Users¥[USERNAME]¥.ssh フォルダ内の config ファイルに
```
LocalForward 10335 localhost:2222
```
と追記をします。



② ターミナルソフトで
```
$ ssh matlantis
```
と入力し Matlantis サーバに接続されている状態で、ターミナルを追加で起動し、
```
$ ssh -p 10335 jovyan@localhost
```
と実行し、秘密鍵生成時に設定したパスワードを入力後、Matlantis サーバへ接続ができることを確認します。

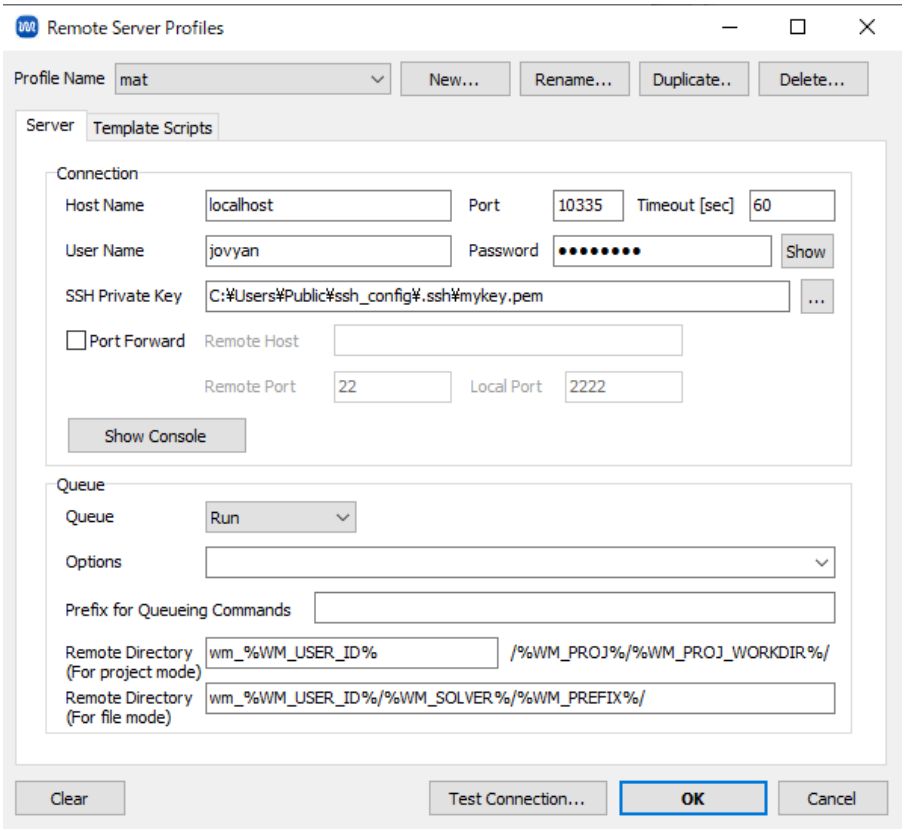
③ ＜2. Winmostar を用いて LAMMPS 向けの各種ファイルを一括生成する場合＞の①から⑩までを実行します。

④ **LAMMPS Workflow Setup** ウィンドウでの設定が終わったら **OK** をクリックします。

⑤ **ジョブの設定**ウィンドウで**リモートマシンでジョブを実行**にチェックを入れ、**プロファイル**の **Config...**ボタンをクリックします。⑥以降の手順を実行することで PFP を利用できますが、リモートジョブのより詳しい設定方法を知りたい場合は、リモートジョブプロジェクトモード向けチュートリアル
https://winmostar.com/jp/tutorials/RemoteJob_tutorial_1%28ProjectMode%29.pdf
設定の詳細はユーザマニュアル

https://winmostar.com/jp/manual_jp/html/operation/calc_import.html#calc-import-proj
でも確認することができます。

⑥ **Host Name** に「localhost」、**Port** に「10335」、**User Name** に「jovyan」、**Password** に①で秘密鍵生成時に設定したパスワード、**SSH Private Key** に①で作成した秘密鍵ファイルのパス、をそれぞれ入力します。その後 **Test Connection** をクリックし、**SSH 接続のみ**にチェックをいれ **OK** をクリックし、数秒後「テストが正常に終了しました」と表示されるのを確認します。テストが異常終了した場合は設定を見直します。



⑦ **Queue** に「Run」を選択します。その後 **Test Connection** をクリックし、**SSH 接続とジョブスケジューラ**にチェックをいれ **OK** をクリックし、数秒後「テストが正常に終了しました」と表示されるのを確認します。テストが異常終了した場合は設定を見直します。

⑧ **Remote Server Profiles** ウィンドウ右下の **OK** をクリックします。

⑨ **ジョブの設定**ウィンドウで**テンプレートスクリプト**の **New...**ボタンをクリックします。

⑩ 「Script name: lammps.」と表示されたら「matlantis」と入力します。次に、テキストエディタで開かれた lammps.matlantis.txt の「# Insert commands here」と「# Do not modify the followings」の間を次のように書き換え(Python3.9 でビルドした場合)、上書き保存します。

```
# Insert commands here
export PATH=/home/jovyan/.py39/bin:$PATH
```

```
export LD_LIBRARY_PATH=/usr/local/pyenv/versions/3.9.16/lib:$LD_LIBRARY_PATH
MPI_COMMAND=""
BIN_LAMMPS=lmp_serial
# Do not modify the followings
```

なお、`export LD_LIBRARY_PATH=…`の設定はビルド時の Python のバージョンにより変わります。上記設定で LAMMPS が正常に動作しない場合は、ターミナルソフトを起動して Matlantis サーバにログインします。そして、

`$ ldd $(which lmp_serial)`

と実行し not found となるライブラリを発見したら、

`$ find /usr -name` （not found となったライブラリの名前） `2>/dev/null`

と実行してそのライブラリのパスを特定します。ライブラリの置かれているディレクトリを上記のように `LD_LIBRARY_PATH` に追加します。

例えば、`libpython3.9.so.1` が not found となり、`$ find /usr -name "libpython3.9.so.1.0" 2>/dev/null` で `/usr/local/pyenv/versions/3.9.16/lib/libpython3.9.so.1.0` と表示されたら `export LD_LIBRARY_PATH=/usr/local/pyenv/versions/3.9.16/lib:$LD_LIBRARY_PATH` とします。

⑪ Winmostar に戻り、**ジョブの設定**ウィンドウの**# of MPI Procs** を「1」に変更し、**実行**をクリックします。「テンプレートスクリプトに…」と表示されたら**はい**をクリックします。「Potential file (species) was not found…」と表示されたら**はい**をクリックします。（連続ジョブの場合はジョブの回数分表示されるので、それらすべてに対し**はい**をクリックします。）

⑬ 通常の LAMMPS を用いた計算と同様に結果解析を進めます。解析手順の例は LAMMPS 各種チュートリアルにて確認できます。
https://winmostar.com/jp/tutorials/index.html#LAMMPS

以上