

 winmostar チュートリアル

LAMMPS

熱伝導率・粘度・誘電率計算

V11.8.6

2024年10月26日 株式会社クロスアビリティ

本書について

- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方は[ビギナーズマニュアル](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
 - [Winmostar導入講習会](#)：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
 - [Winmostar基礎講習会](#)：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
 - [個別講習会](#)：ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾なく、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。

概要・注意点

- 本チュートリアルでは、常温常圧の水の熱伝導率・粘度をGreen-Kubo式で計算する方法を紹介します。また系全体の双極子モーメントの揺らぎから誘電率も計算します。ここでは目標の温度・圧力でNVT一定計算を実行するための平衡化手順（以下）を適用します。
 1. エネルギー最小化 : 座標重なり除去
 2. NVT一定 : 粒子速度の平衡化
 3. NPT一定 : 密度の平衡化
 4. NPT一定 : 平均密度算出→系を平均密度にスケーリング
 5. エネルギー最小化 : 座標重なり除去
 6. NVT一定 : 粒子速度の平衡化
 7. NVT一定 : 本計算
- ターゲットとなる物質の種類、初期密度に応じて平衡化に必要なステップ数は変化します。特に緩和の遅い物質（高粘度物質など）では本手法で妥当な値が得られない場合があります。
- 相互作用の計算方法、力場、電荷の算出方法も結果に影響を与えます。
- チュートリアルという性質上、ここでは物理量の収束に十分なステップ数の計算を実施していません。相関関数計算のパラメータも調整の余地があります。

動作環境設定

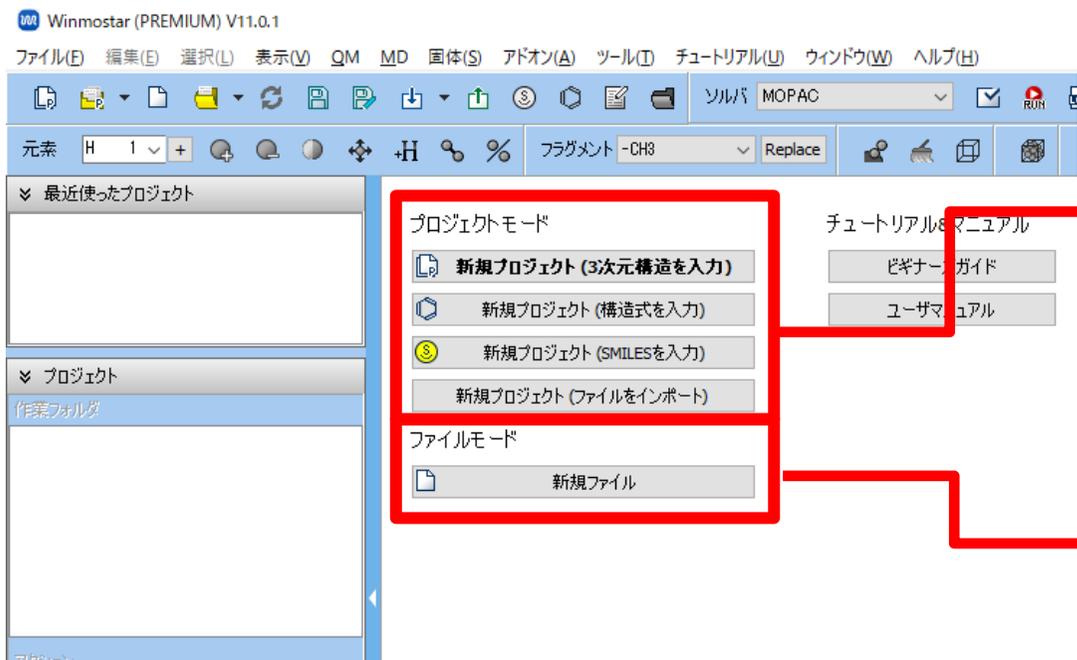
- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、[CygwinWM 2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定](#)してください。
 - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版LAMMPSが同梱されています。
- 上記に該当しない場合、または[推奨バージョン](#)以外のLAMMPSを利用したい方は、別途[Windows版LAMMPSのインストールと環境設定](#)が必要です。

Winmostar V11の動作モード

V11には**プロジェクトモード**と**ファイルモード**の2つの動作モードが用意されています。

本書ではプロジェクトモードでの操作方法を解説します。

ファイルモードの操作方法は[V10のチュートリアル](#)を参照してください。



プロジェクトモード **V11新機能**

ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。基本的にこのモードを推奨します。

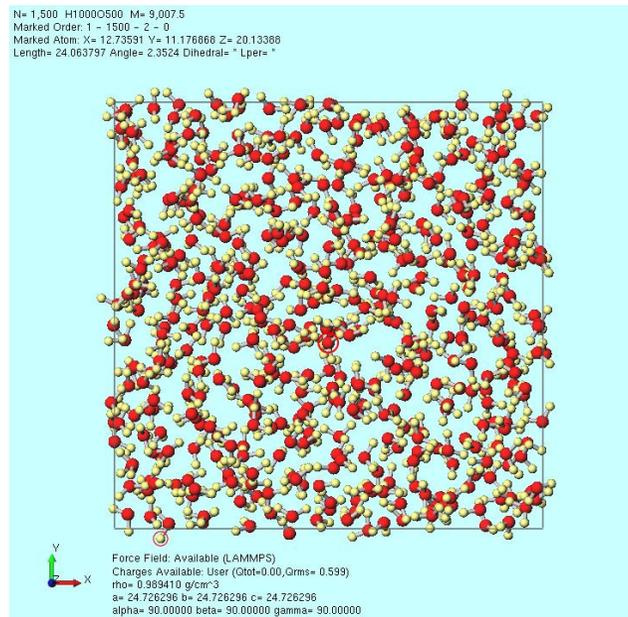
ファイルモード

ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

I. 系のモデリング

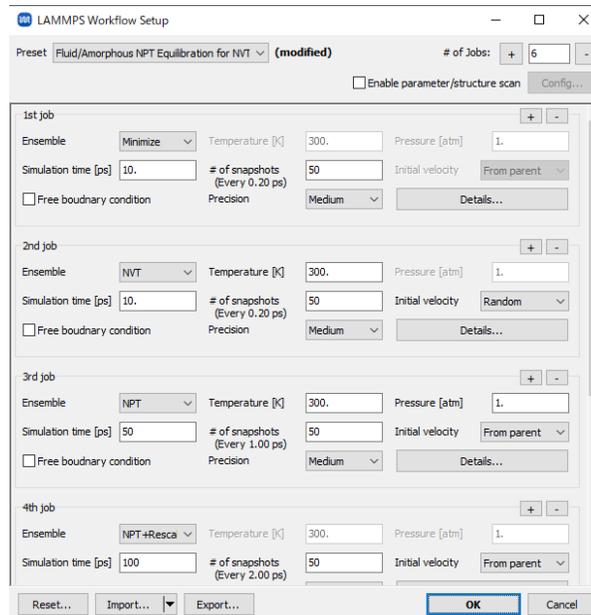
基本的な操作方法は[LAMMPS基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

1. **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**に「water_gk」と入力して**保存**をクリックします。
2.  **(溶媒を配置/セルを構築)**をクリックします。
3. **Add Water**をクリックし「500」と入力し**OK**をクリックします。
4. **Simulation Cell**の**Set Density**の右に「0.9」と入力し**Build**をクリックします。
5. 「系の作成に成功しました」と表示されたら**OK**をクリックします。



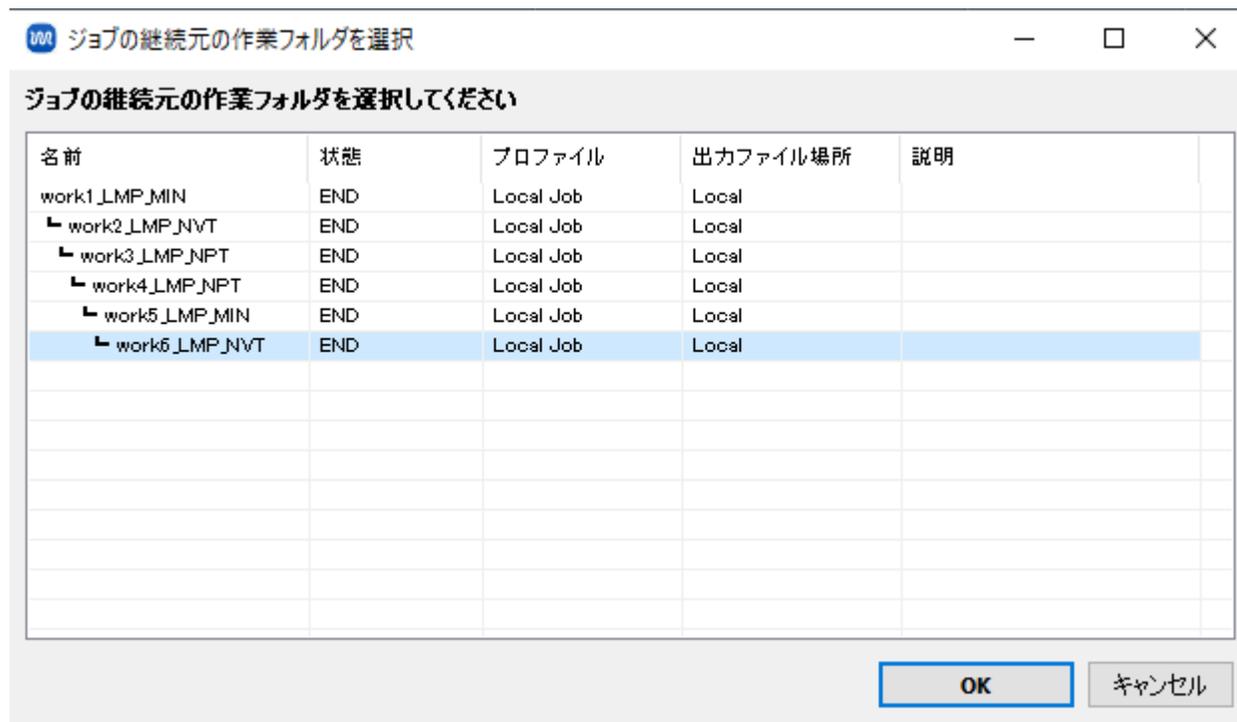
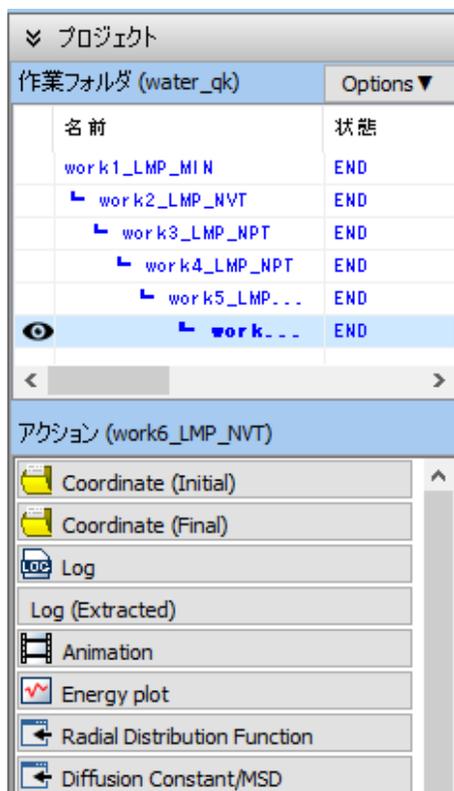
II. 計算の実行（平衡化）

1. ソルバからLAMMPSを選択し、 (ワークフロー設定)を開きます。
2. OKをクリックし、「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。
3. Presetを「Fluid/Amorphous NPT Equilibration for NVT」に変更します。
4. 4th jobのSimulation timeを「100」に変更します。
5. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は1st jobから6th jobまですべてのPrecisionを「Low」に変更します。
6. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。



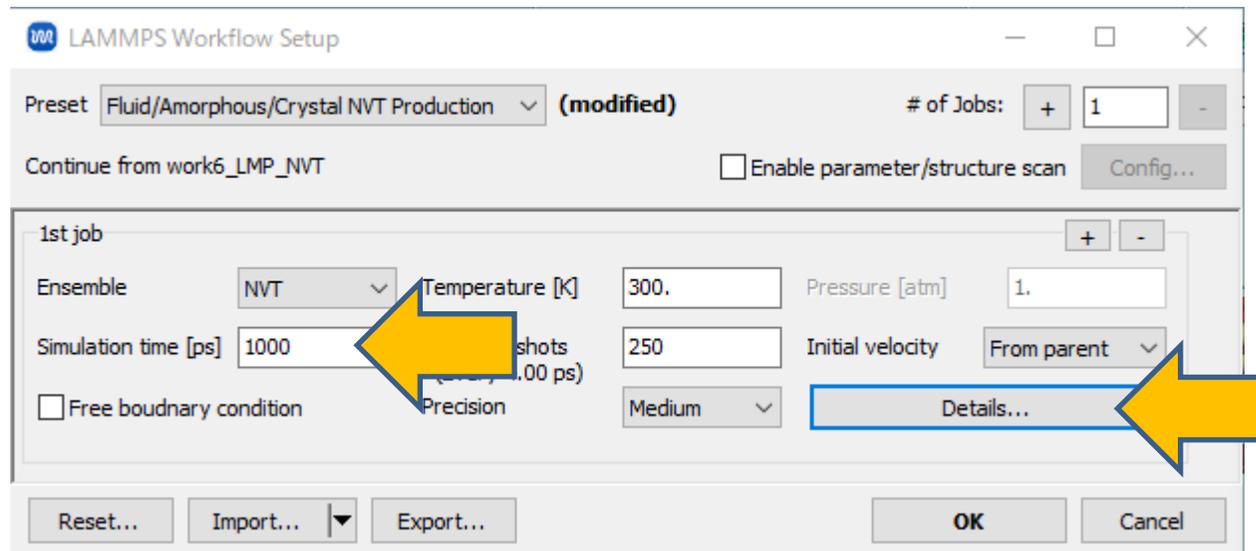
III.計算の実行（本計算）

1. work1_LMP_MINからwork6_LMP_NVTまでの6つの作業フォルダの**状態**が**END**または**END(-)**に変化したら、再び （**ワークフロー設定**）をクリックします。
2. 「継続ジョブを実行しますか？…」と表示されたら**はい**をクリックします。
3. work6_LMP_NVTを選択し**OK**をクリックします。



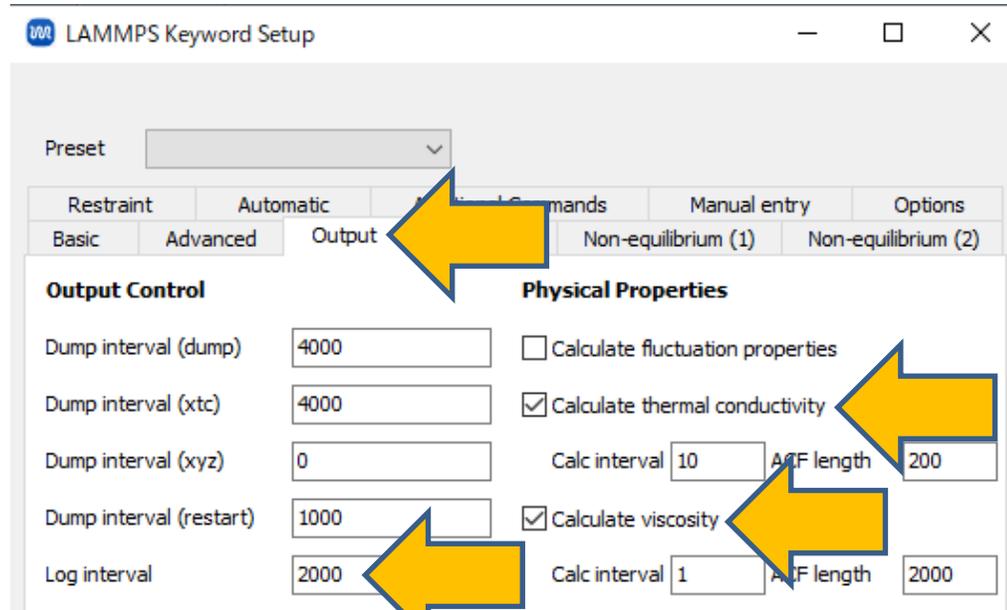
III.計算の実行（本計算）

1. **Preset**を「Fluid/Amorphous/Crystal NVT Production」に変更します。
2. **Simulation time**を「1000」（可能ならばより大きい値）に変更します。
3. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は**Precision**を「Low」、**Simulation time**を「50」に変更します。
4. **Details...**をクリックします。



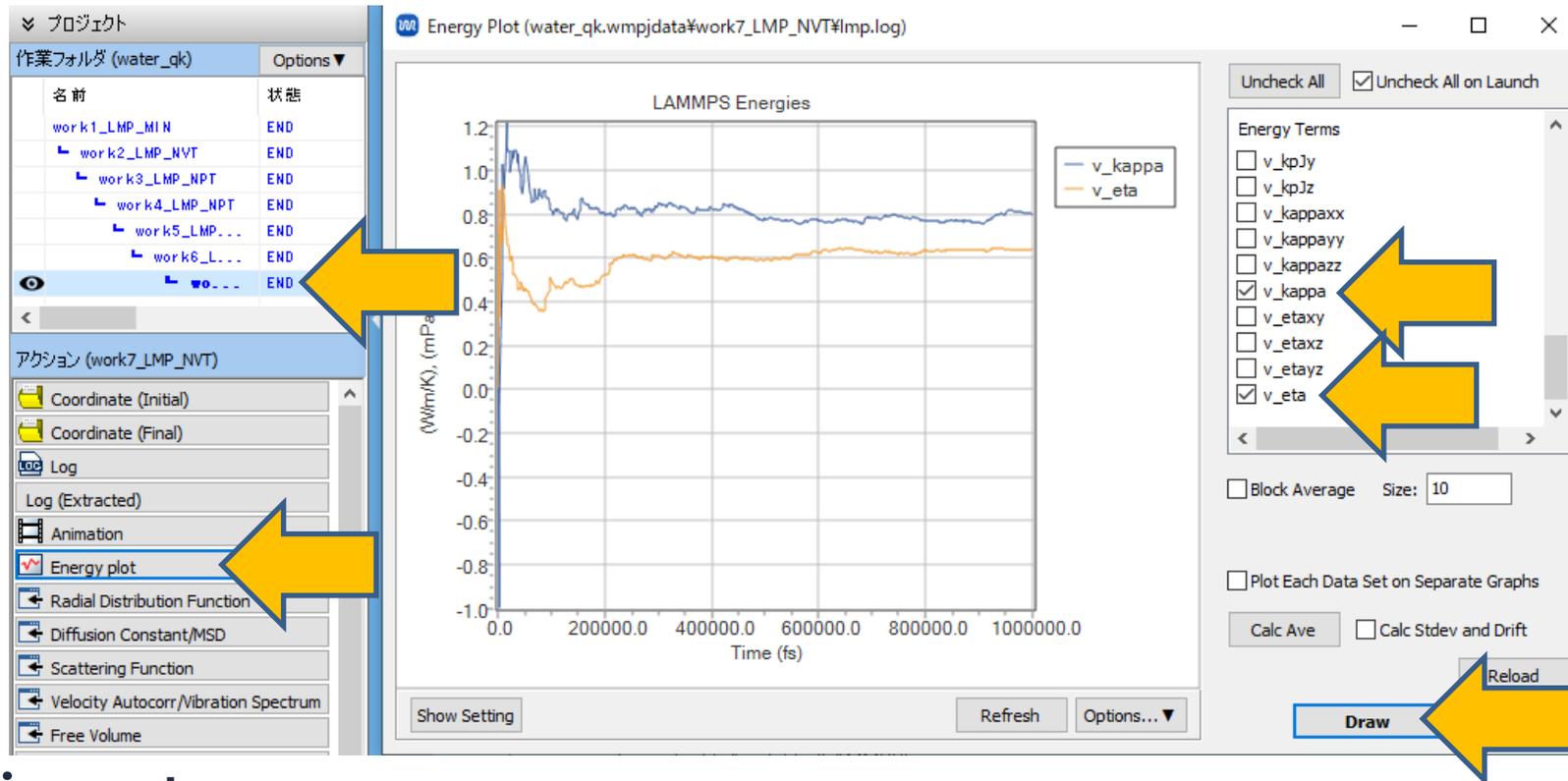
III.計算の実行（本計算）

1. **Output**タブをクリックし以下のように変更します。
 - **Log Interval**を**2000**に変更
 - **Calculate thermal conductivity**をチェック
 - **Calculate viscosity**をチェック
2. **OK**をクリックして**LAMMPS Keyword Setup**ウィンドウを閉じます。
3. **LAMMPS Workflow Setup**ウィンドウで**OK**をクリックします。
4. **ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定を変更し**実行**をクリックします。



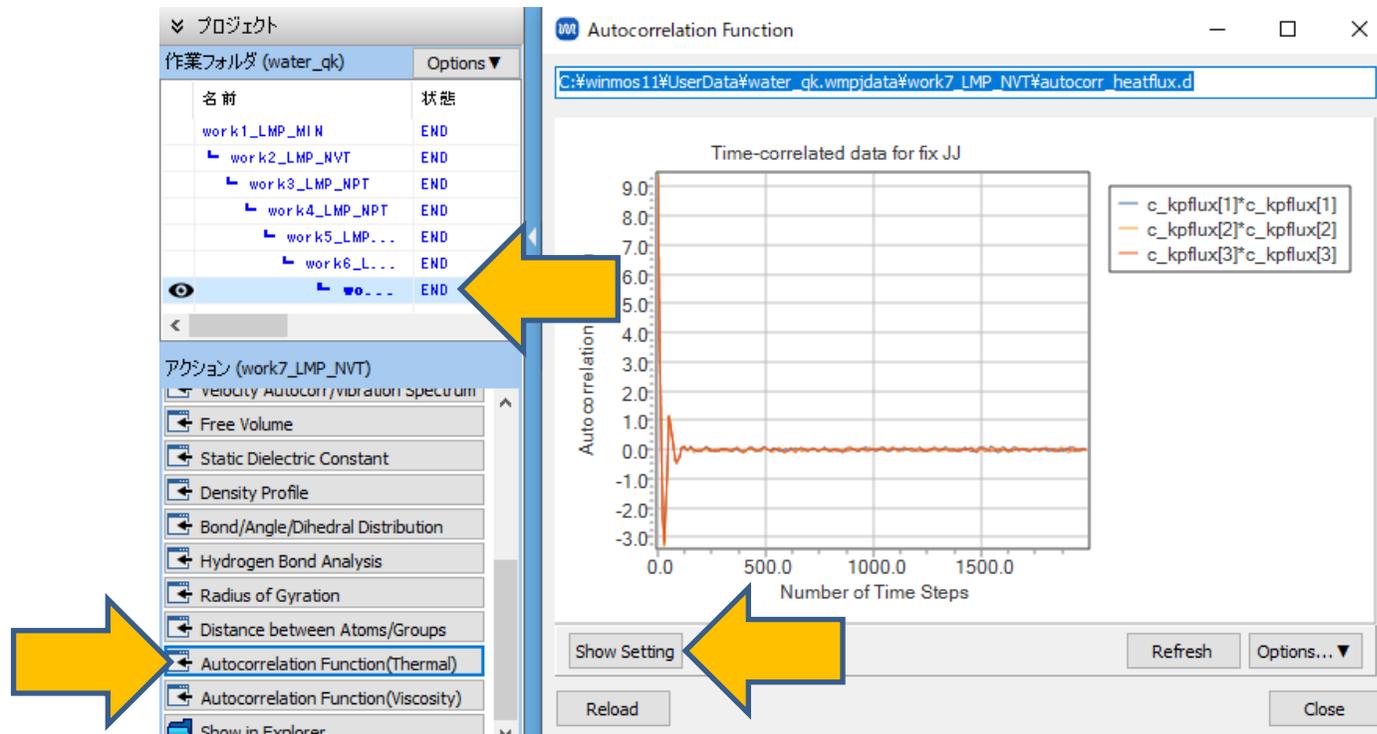
III.結果解析 熱伝導率、粘度

1. work7_LMP_NVTの作業フォルダの状態が**END**に変化したら、「work7_LMP_NVT」をクリックし、**アクション**で  **Energy plot**をクリックします。
2. **Energy Terms**にて熱伝導率の場合は**v_kappa**、粘度の場合は**v_eta**にチェックを入れ**Draw**をクリックします。出現したグラフは、Green-Kubo式に基づいて計算された熱伝導率または粘度の積算平均値の時間変化を示しています。



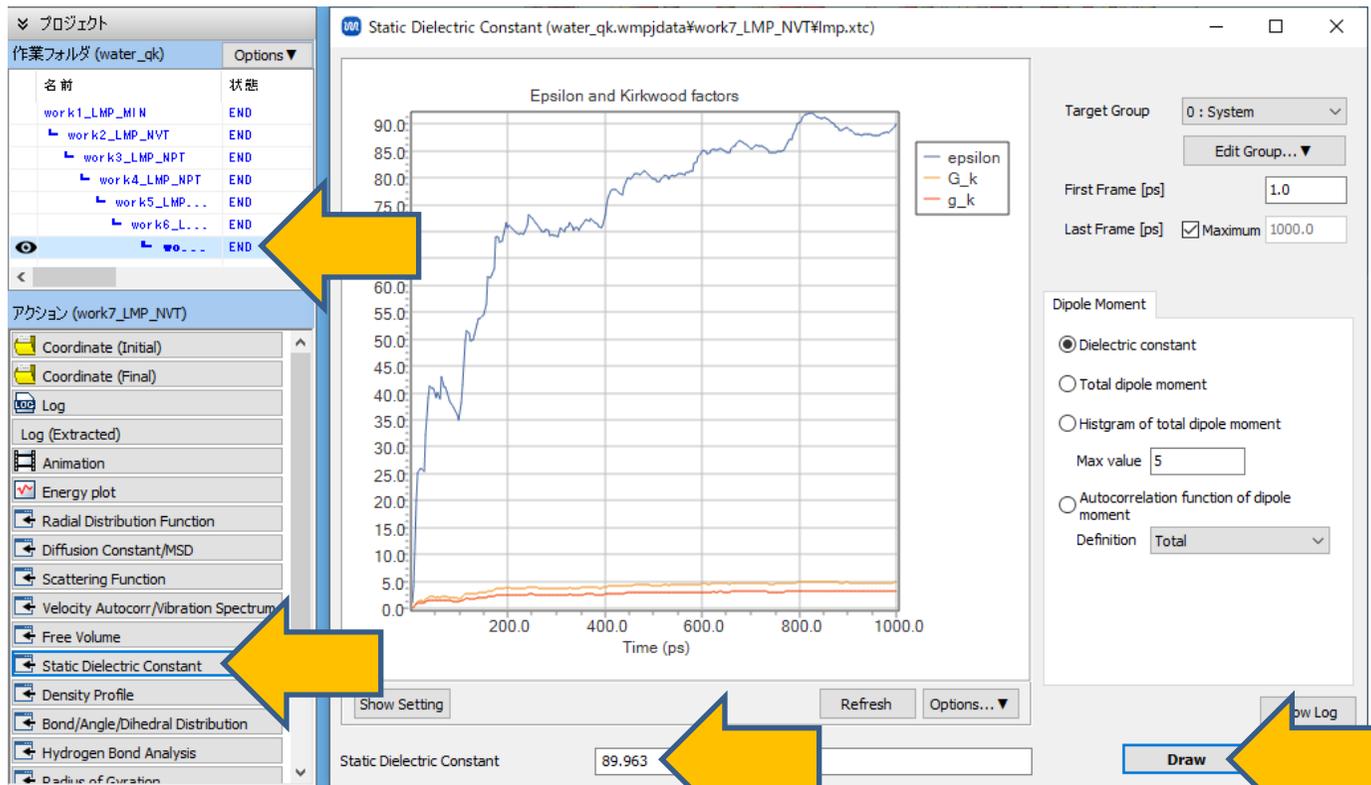
III.結果解析 自己相関関数（熱伝導率、粘度関係）

1. 作業フォルダで「work7_LMP_NVT」をクリックし、**アクション**で**Autocorrelation Function(Thermal)**（熱伝導率の場合）または**Autocorrelation Function(Viscosity)**（粘度の場合）をクリックします。
2. 熱伝導率または粘度の計算に係る自己相関関数が表示されるので、それらが十分0に収束する形になっているか確認します。必要に応じて**Show Setting**をクリックし**Logarithm**にチェックを入れ対数プロットで形を確認します。



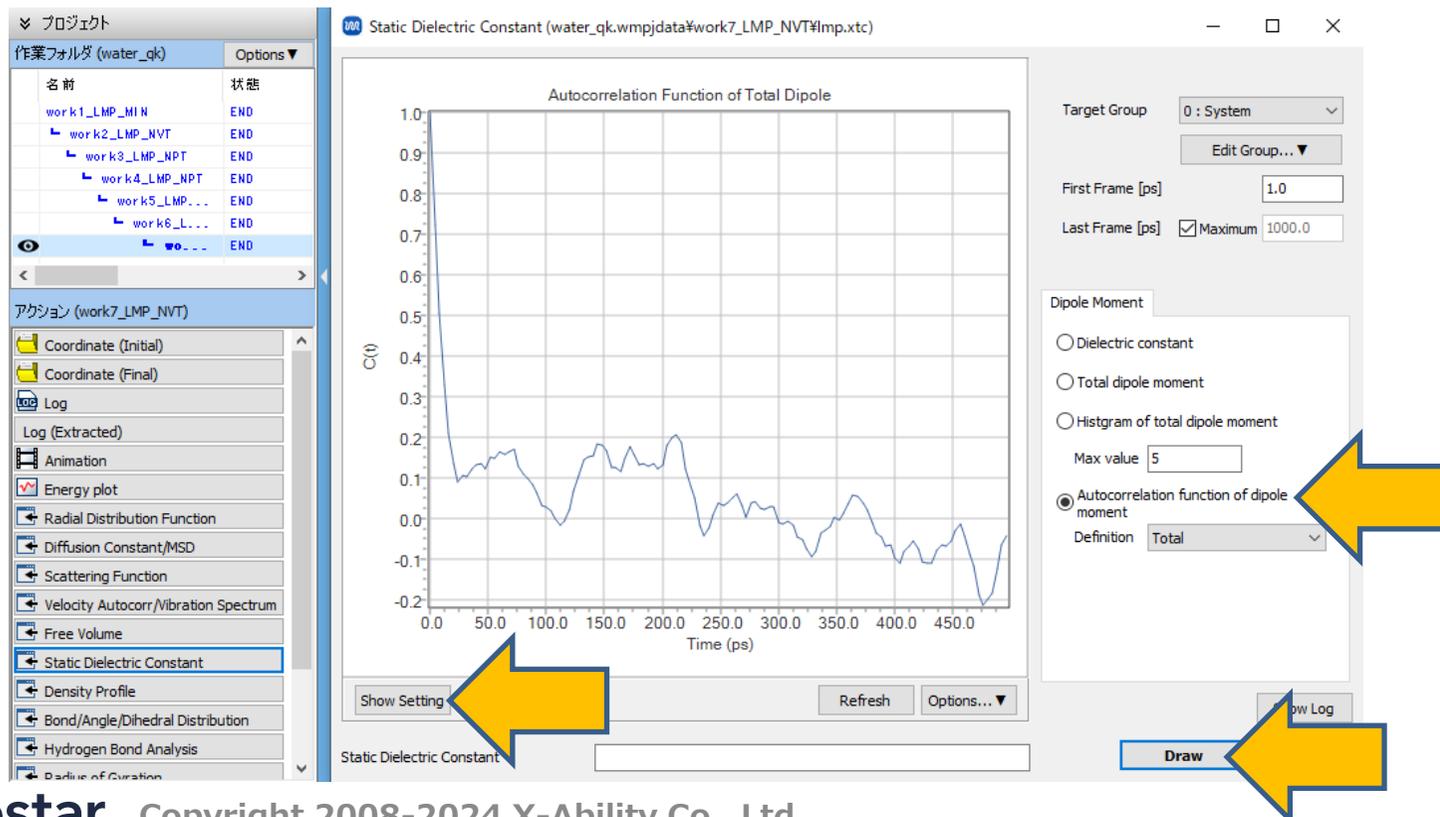
III.結果解析 誘電率

1. 作業フォルダで「work7_LMP_NVT」をクリックし、**アクション**で**Static Dielectric Constant**をクリックします。
2. **Draw**をクリックし「Enter Temperature」と表示されたら「300」（今回の目標温度）と入力し**OK**をクリックします。グラフ中の**epsilon**の最終値およびグラフ下の数値が比誘電率です。（今回の計算では十分収束しておらず、収束にはより長時間の計算が必要です）



III. 結果解析 自己相関関数（誘電率関係）

1. **Autocorrelation function of dipole moment**にチェックを入れ**Draw**をクリックします。
2. 双極子モーメントの自己相関関数が表示されます。これが十分0に収束するかは、誘電率計算の収束判定の一つの基準になります。必要に応じて**Show Setting**をクリックし**Logarithm**にチェックを入れ対数プロットで形を確認します。（今回の計算では十分収束しておらず、収束にはより長時間の計算が必要です）



最後に

- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。



[ユーザマニュアル](#)



[Winmostar 講習会](#)の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、[Winmostar 導入講習会](#)、[Winmostar 基礎講習会](#)、または[個別講習会](#)の受講をご検討ください。（詳細はP.2）
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上