M 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

Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.



- 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<u>ユーザマニュアル</u>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。
 - <u>Winmostar基礎講習会</u>: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<u>よくある質問</u>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。



- 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-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。



- 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<u>推奨バージョン</u>以外のLAMMPSを利用したい方は、別途 <u>Windows版LAMMPSのインストールと環境設定</u>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。

Winmostar (PREMIUM) V11.0.1

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(D) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)



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、 [1] (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。

Eset Fluid/Amorphous NPT Equilib	ration for NVT \vee (mo	dified)	# of Jo	bs: + 6		
		E	nable parameter/strue	cture scan Config		
st job				+ -		
nsemble Minimize	✓ Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.		
mulation time [ps] 10.	# of snapshots (Every 0.20 ps)	50	Initial velocity	From parent \sim		
]Free boudnary condition	Precision	Medium	∨ Details			
nd job				+ -		
nsemble NVT ·	✓ Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.		
mulation time [ps] 10.	# of snapshots	50	Initial velocity	Random V		
Free boudnary condition	Precision	Medium	✓ Details			
d job				+ -		
NPT ·	✓ Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.		
mulation time [ps] 50	# of snapshots (Every 1.00 ps)	50	Initial velocity	From parent \sim		
Free boudnary condition	Precision	Medium	✓ Details			
h job				+ -		
NPT+Rescal	✓ Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.		
mulation time [ps] 100	# of snapshots (Every 2.00 ps)	50	Initial velocity	From parent \sim		

III.計算の実行(本計算)

- 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。

≫ プロジェクト								
作業フォルダ (water_qk)	Options 🔻	r	🕺 ジョブの継続元の作業ス	フォルダを選択			_	
名前	状態		ジョブの維続元の作業フォ	ルダを選択し	ってください			
work1_LMP_MIN	END							
work2_LMP_NVT	END		名前	状態	プロファイル	出力ファイル場所	説明	
work3_LMP_NPT	END		work1_LMP_MIN	END	Local Job	Local		
work4_LMP_NP	T END		work2_LMP_NVT	END	Local Job	Local		
work5_LMP.	END		work3_LMP_NPT	END	Local Job	Local		
🖸 🤚 🖬 🖕 🕒	END		work4_LMP_NPT	END	Local Job	Local		
/		>	work5_LMP_MIN	END	Local Job	Local		
アクション (work6_LMP_NVT) Coordinate (Initial) Coordinate (Final) Eva Log Log (Extracted) Animation		^						
Energy plot Energy plot Radial Distribution Funct Diffusion Constant/MSD	tion						ОК	キヤン

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。

M LAMMPS Workflow Setup				_		×
Preset Fluid/Amorphous/Crystal N	dified)	# of Jobs: + 1 -				
Continue from work6_LMP_NVT		Ena	ble parameter/stru	cture scan	Config	
1st job					+ -	
Ensemble NVT	✓ Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.		
Simulation time [ps] 1000	shots	250	Initial velocity	From par	ent 🗸	
Free boudnary condition	Precision	Medium \checkmark	De	tails		
Reset Import 🖛	Export		0	к	Cance	el

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 **M 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)

- 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

- 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 カし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)





• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>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