

 winmostar チュートリアル

LAMMPS Kremer-Grestモデル

V11.7.0

2024年1月17日 株式会社クロスアビリティ

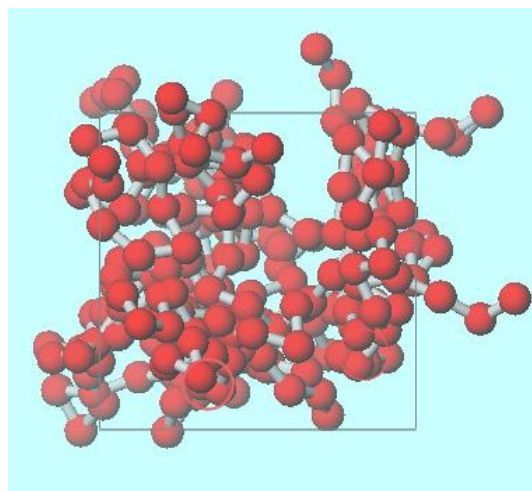
本書について

- 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

- 本チュートリアルの実施にはWinmostar V11プロフェッショナル版エリートが必要です。
- ポリマーメルトのKremer-Grestモデルによる計算の手順を示します。

参考文献: K. Kremer and G. S. Grest, J. Chem. Phys, 92, 5057, (1990).



注意点：

- 本書は短時間で動作確認することを目的としており、短い鎖長で計算しています。絡み合いなどのポリマーとしての個性がより強く出る領域を計算したい場合は鎖長を長く設定してください（100～）。
- プロフェッショナル版エコノミー、学生版では本書で紹介する機能をご利用頂けません。

動作環境設定

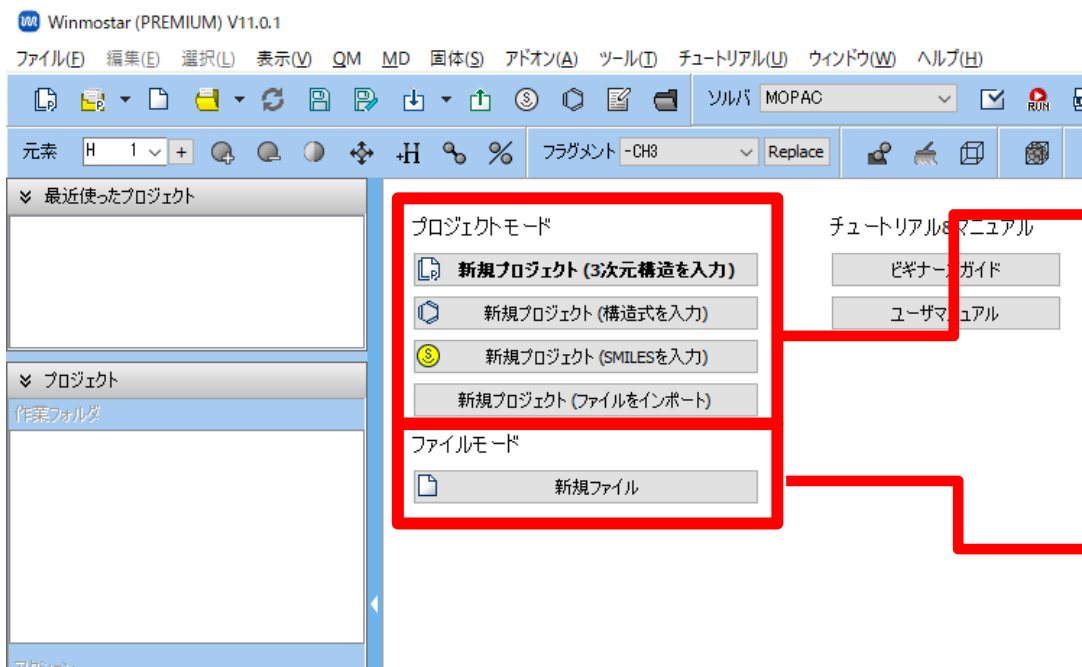
- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、[CygwinWM 2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定](#)してください。
 - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版LAMMPSが同梱されています。
- 上記に該当しない場合、または[推奨バージョン](#)以外のLAMMPSを利用したい方は、別途[Windows版LAMMPSのインストールと環境設定](#)が必要です。

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。

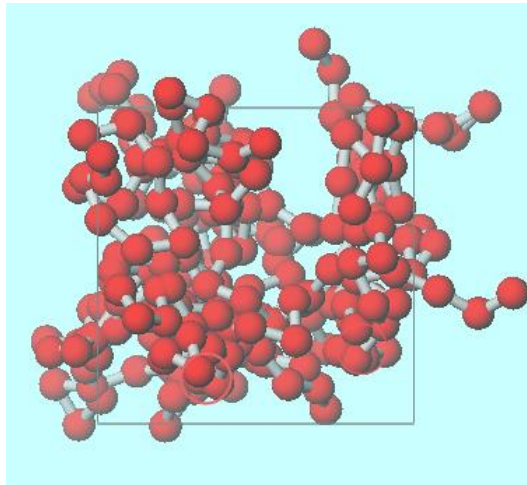
ファイルモード

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「kgmd_lammps」と入力して**保存**をクリックします。
2. **MD** | **LAMMPS** | **散逸粒子動力学法** | **DPDセルビルダ**をクリックします。
3. **Monomers Available**の**A**を選択し**Add**をクリックします。
4. **Enter Value**で「10」と入力し**OK**をクリックします。
5. **Monomers Used**の右の**Add**をクリックします。
6. **Enter Value**で「25」と入力し**OK**をクリックします。
7. **Build**をクリックし**Enter Value**に「0.85」と入力して**OK**をクリックするとメインウィンドウにポリマーがランダムに配置された構造が出現します。



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) をクリックします。
2. 「電荷が設定されていない分子が含まれます。電荷を設定しますか？」と聞かれたら **いいえ** をクリックします。
3. **パラメータファイルを使用（無機物系、ReaxFF、散逸粒子動力学法向け）** をチェックし **Next** をクリックします。
4. **Kremer-Grestモデルを使用して計算** をチェックし **OK** をクリックします。
5. 「力場が設定されました」と出たら **OK** をクリックします。
6. **Preset** を「Fluid/Amorphous/Crystal NVT Equilibration」に変更します。
7. **2nd job** の **Temperature** を「1」に変更します。
8. **1st job**、**2nd job** の **Precision** を「High」に変更します。
9. **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。

II. 計算の実行（本計算）

1. work1_LMP_MIN、work2_LMP_NVEの2つの**作業フォルダ**の状態が**END**または**END(-)**に変化したら、（**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. work2_LMP_NVEを選択し**OK**をクリックします。
4. **Preset**を「Fluid/Amorphous/Crystal NVT Production」に変更します。
5. **Temperature**を「1」に、**Simulation Time**を「7200」に、**Precision**を「High」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. 結果解析

1. work3_LMP_NVEの作業フォルダの状態が**END**または**END(-)**に変化したら、work3_LMP_NVEをクリックし、**アクションのEnergy Plot**をクリックします。
2. **Calc Ave**をクリックし、**First Frame**はデフォルト値のままで**OK**をクリックします。
3. **Press**の行に表示される圧力の値を確認します。

energy_ave.log - メモ帳

ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

# data	Average	Standard error
Temp (epsilon/kb)	1.000620868909504	0.000384283446857
PotEng (epsilon)	17.855336990278355	0.000512916461953
KinEng (epsilon)	1.494927577701245	0.000574119468960
TotEng (epsilon)	19.350264569301718	0.000772017628112
Econserve	19.350264569301718	0.000772017628112
Ecouple	0.000000000000000	0.000000000000000
Enthalpy (epsilon)	25.493338677184682	0.005205724158285
Press (epsilon/sigma ³)	5.221612989428379	0.004218375186754
Volume (sigma ³)	294.117650000028350	0.000000000000000
Density (m/sigma ³)	0.850000000000249	0.000000000000000
Lx (sigma)	6.650286599997501	0.000000000000000

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