

 winmostar チュートリアル

LAMMPS

非平衡MDによる粘度計算

V11.14.0

2025年11月6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、常温常圧の水の粘度をSLLOD法による非平衡MDで計算する方法を紹介します。
- **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。**
- より長時間での高精度な計算結果については[Winmostar計算事例：平衡および非平衡分子動力学計算による粘度の評価](#)を参照してください。

注意点：

- ターゲットとなる物質の種類、初期密度に応じて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。せん断ひずみ速度の範囲や点数も適宜調整してください。

動作環境設定

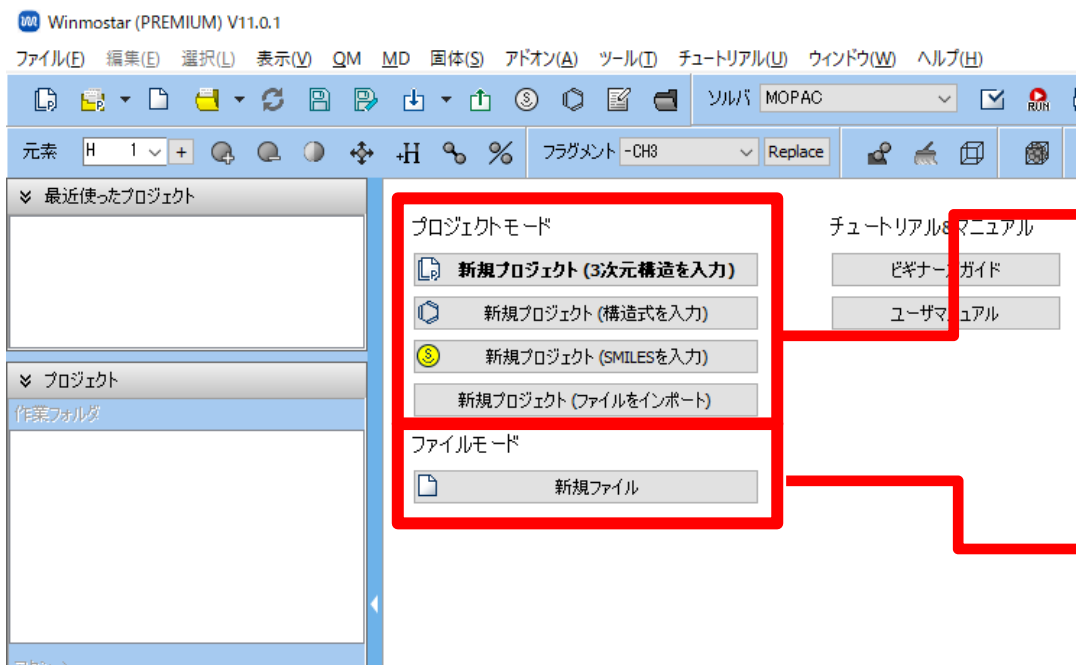
- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、[CygwinWM 2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定](#)してください。
 - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版LAMMPSが同梱されています。
- 上記に該当しない場合、または[推奨バージョン](#)以外のLAMMPSを利用したい方は、別途[Windows版LAMMPSのインストールと環境設定](#)が必要です。

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。

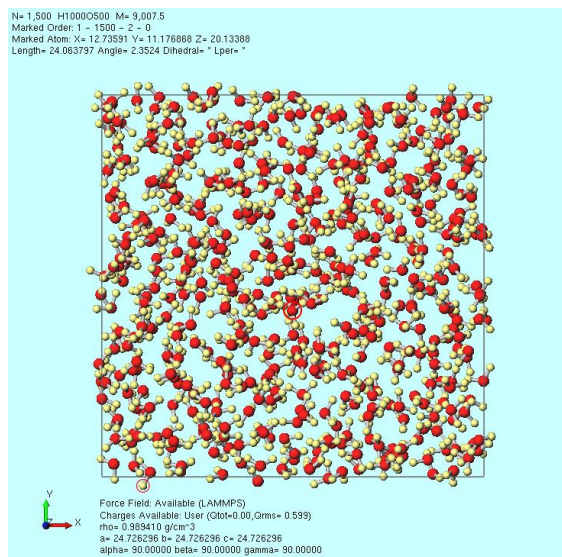
ファイルモード

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

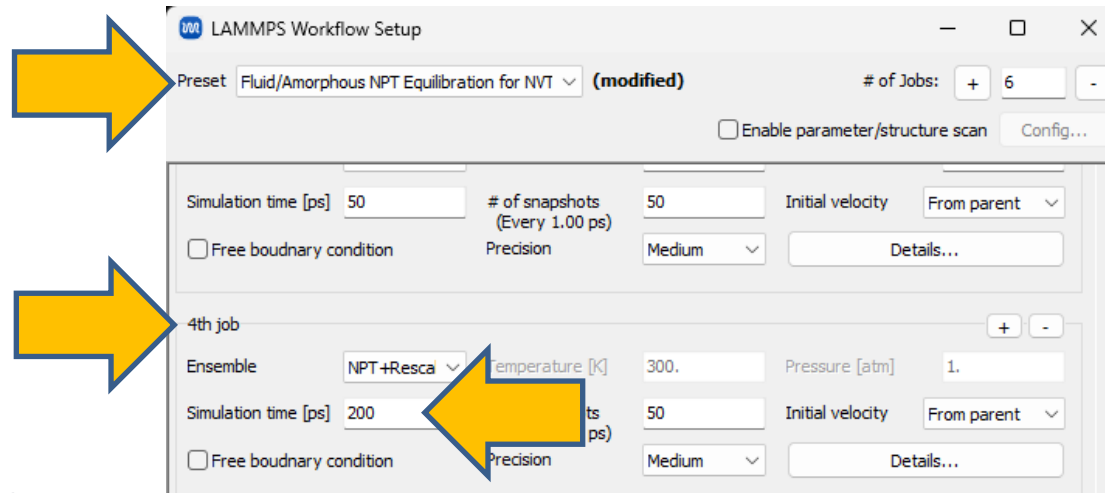
基本的な操作方法は[LAMMPS基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

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_sllod_lammps」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。
 - 計算精度を落として計算時間を短縮したい場合は「300」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。



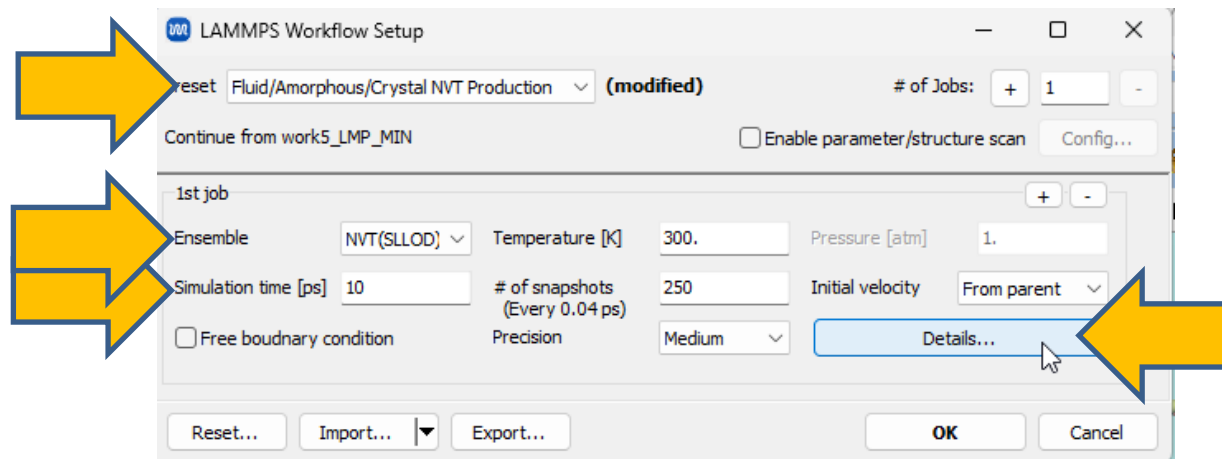
II. 計算の実行（平衡化）

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、**4th job** の **Simulation time**を「200」に変更します。
 - 計算精度を落として計算を早く終了したい場合は「Fluid/Amorphous NPT Equilibration」に設定し、**Simulation time**は変更せず、すべてのjobの**Precision**を「Low」に変更します。
 - work6_LMP_NVTの平均圧力が設定値から大きくずれる場合は**4th job**の**Simulation time**を長くします。
4. **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。



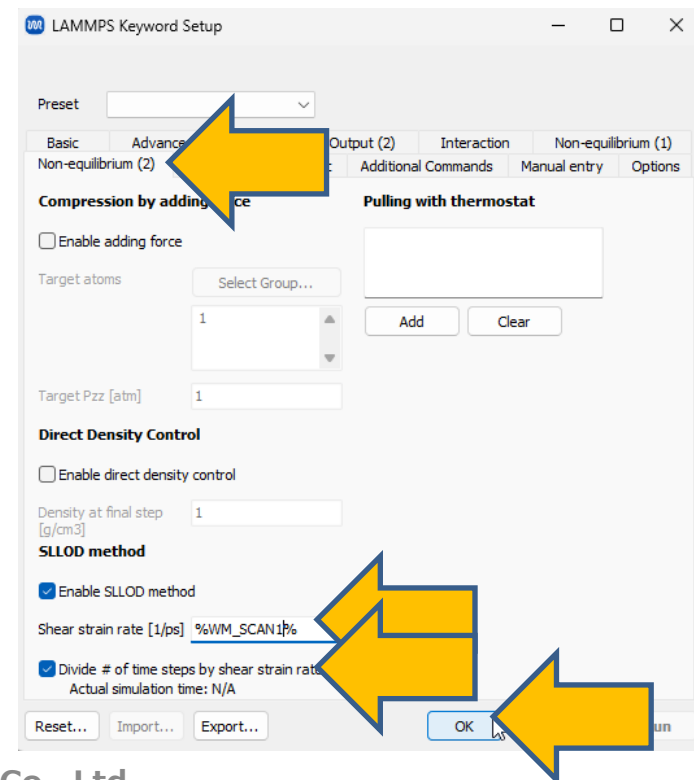
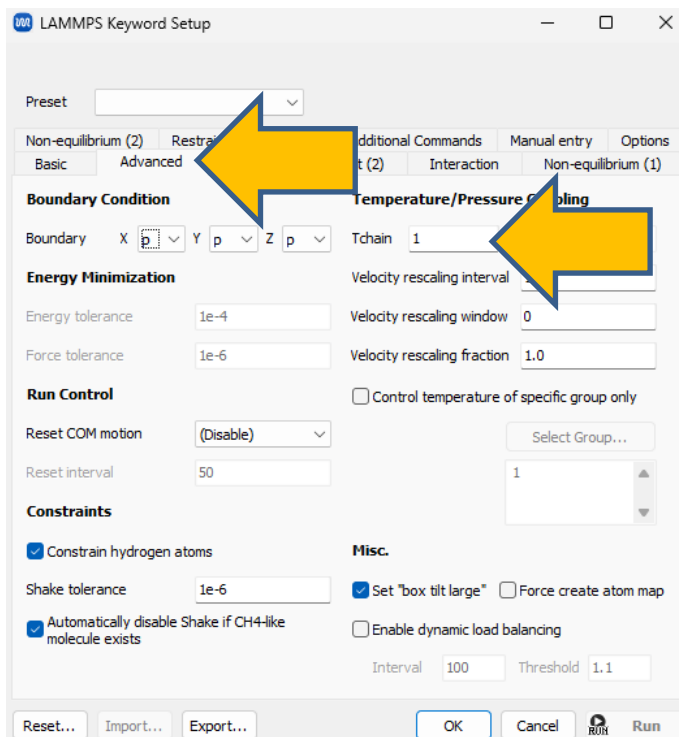
III.計算の実行（本計算）

1. すべての作業フォルダの**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. 最後の作業フォルダ（work6_LMP_NVTまたはwork3_LMP_NPT）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. **Ensemble**を「NVT(SLLOD)」、**Simulation time**を「10」に変更します。
 - 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「5」に変更します。
6. **Details...**をクリックします。



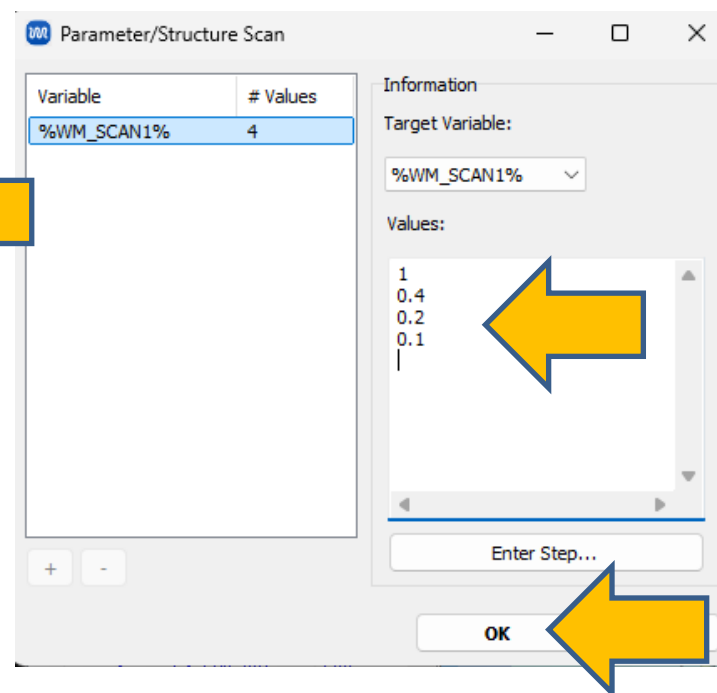
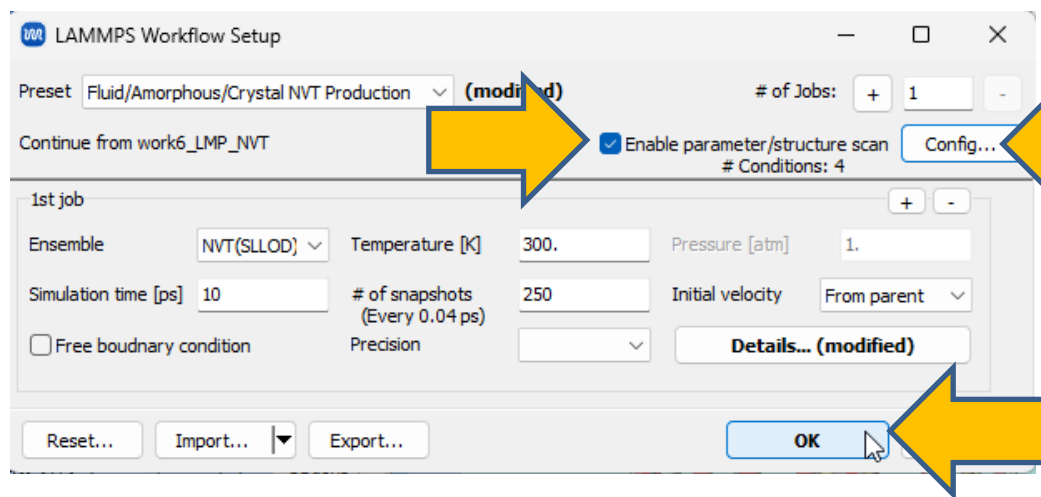
III.計算の実行（本計算）

1. **Advanced**タブの**Tchain**を「1」に変更します。
2. **Non-equilibrium(2)**タブの**Shear strain rate**に「%WM_SCAN1%」と入力し、**Divide # of time steps by shear strain rate**にチェックを入れます。
3. **OK**をクリックして**LAMMPS Keyword Setup**ウィンドウを閉じます。



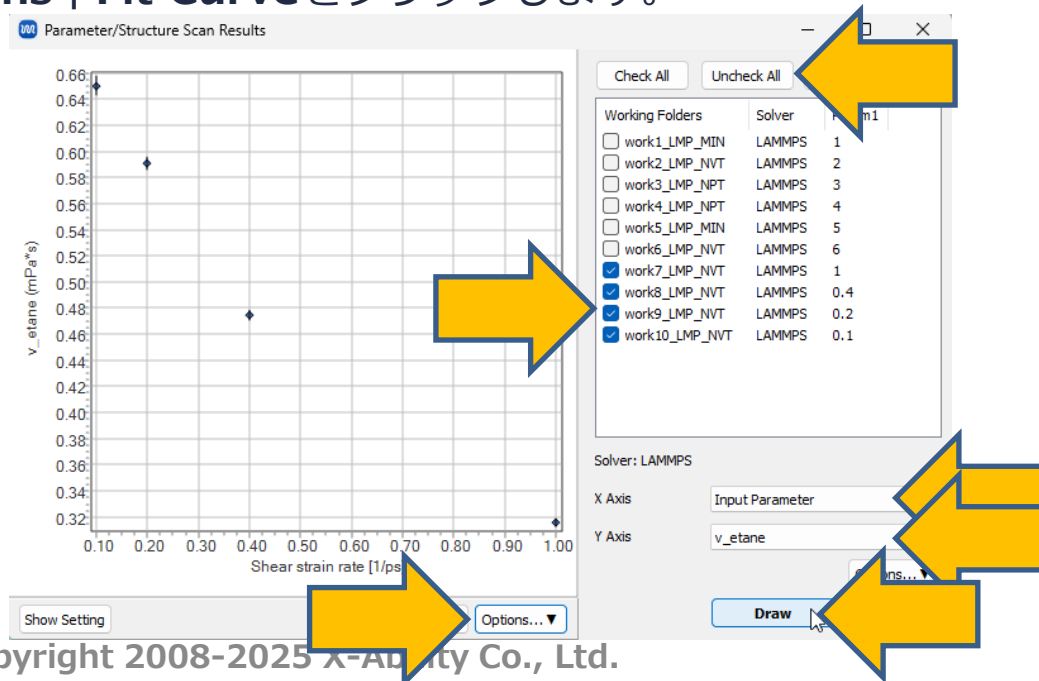
III.計算の実行（本計算）

1. **Enable parameter/structure scan**にチェックをいれ、その右の**Config**をクリックします。
2. **Values**に計算したいせん断ひずみ速度（単位は1/ps）を右下図のように列挙して入力し**OK**をクリックします。
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 粘度

1. すべての作業フォルダの状態が**END**に変化したら、**ファイル | プロジェクト | パラメータ/構造スキャン結果表示**をクリックします。
2. **Uncheck All**をクリックしてから、本計算で実施した作業フォルダ（work7_LMP_NVT～work10_LMP_NVT）にチェックを入れます。
3. **X Axis**を**Input Parameter**、**Y Axis**を**v_etane**に変更し、**Draw**をクリックします。
「Select parameter」と表示されたら「Shear strain rate [1/ps]」を選択し**OK**をクリックします。
4. グラフ右下の**Options | Fit Curve**をクリックします。

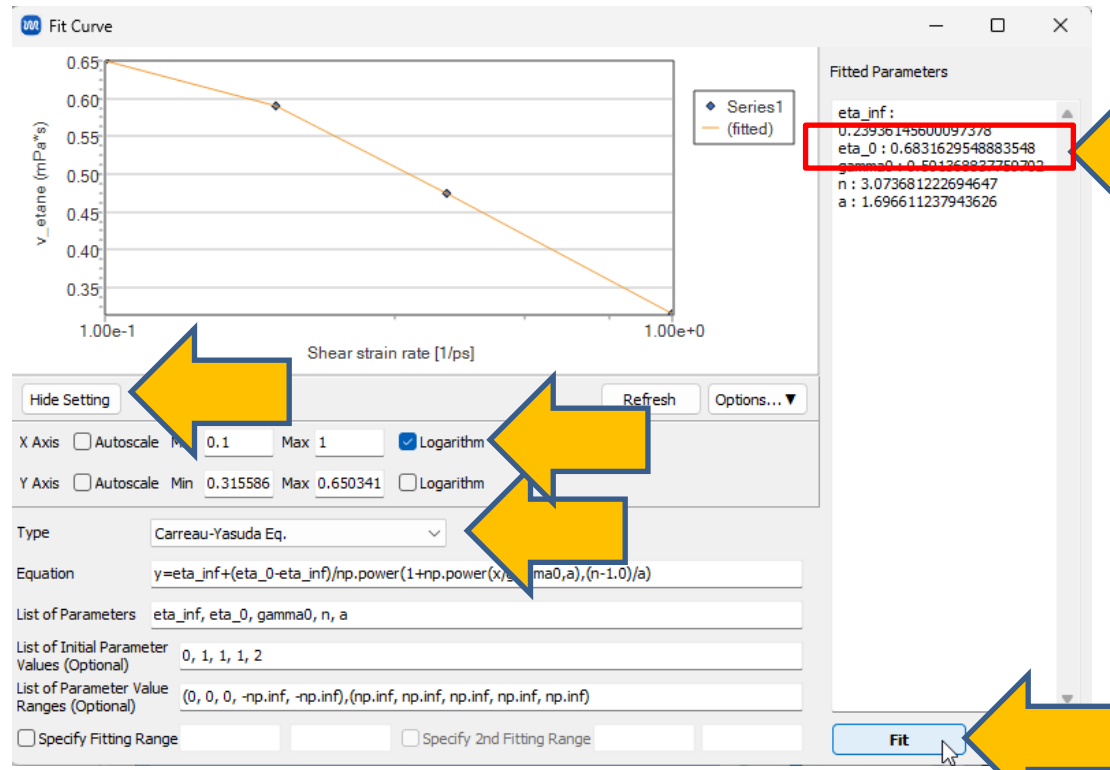


III.結果解析 粘度

1. **Type**を「Carreau-Yasuda Eq.」に変更し**Fit**をクリックします。

1. せん断ひずみ速度を対数で表示したい場合は**Show Setting**をクリックし**X Axis**の**Logarithm**にチェックを入れます。

2. **Fitted Parameters**の「eta_0 :」の値がこの計算から外挿された粘度（ゼロずり粘度）となります。



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