

 winmostar チュートリアル

LAMMPS基礎編

V11.1.0

2022年4月27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。

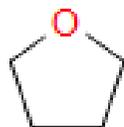
概要

- 常温常圧のテトラヒドロフラン（THF）液体の各種熱力学量、動径分布関数、自己拡散係数、比熱、圧縮率をLAMMPSによる分子動力学計算（GAFF、AM1-BCC電荷）から取得します。平衡化計算としてエネルギー極小化、温度一定MD、温度・圧力一定MDを実行した後、本計算として再度温度・圧力一定MDを実行します。

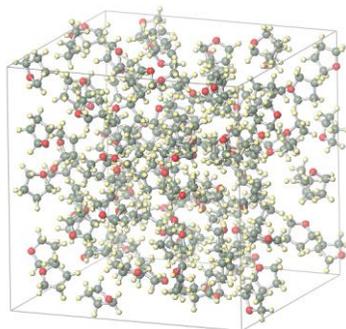
手順の概要：

I. 系のモデリング

- ① 1分子の作成
- ② 電荷の割り当て
- ③ 液相の作成



THF分子

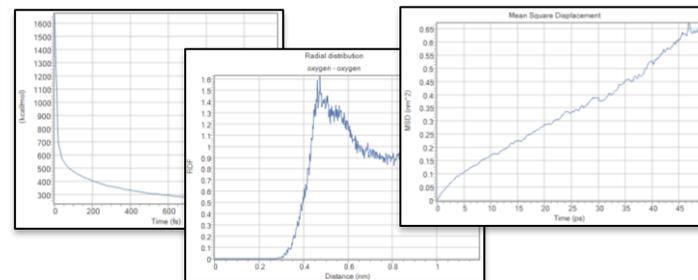


II. 計算の実行

- ① 力場の割り当て
- ② 平衡化計算
(エネルギー極小化→
温度一定MD→
温度・圧力一定MD)
- ③ 本計算
(温度・圧力一定MD)

III. 結果解析

各種熱力学量
動径分布関数
自己拡散係数
比熱、圧縮率



注意点：

- 系の種類、計算したい物性、目標とする精度に応じてステップ数・分子数は変化します。
- 力場、電荷の種類は計算結果に大きく影響します。

動作環境設定

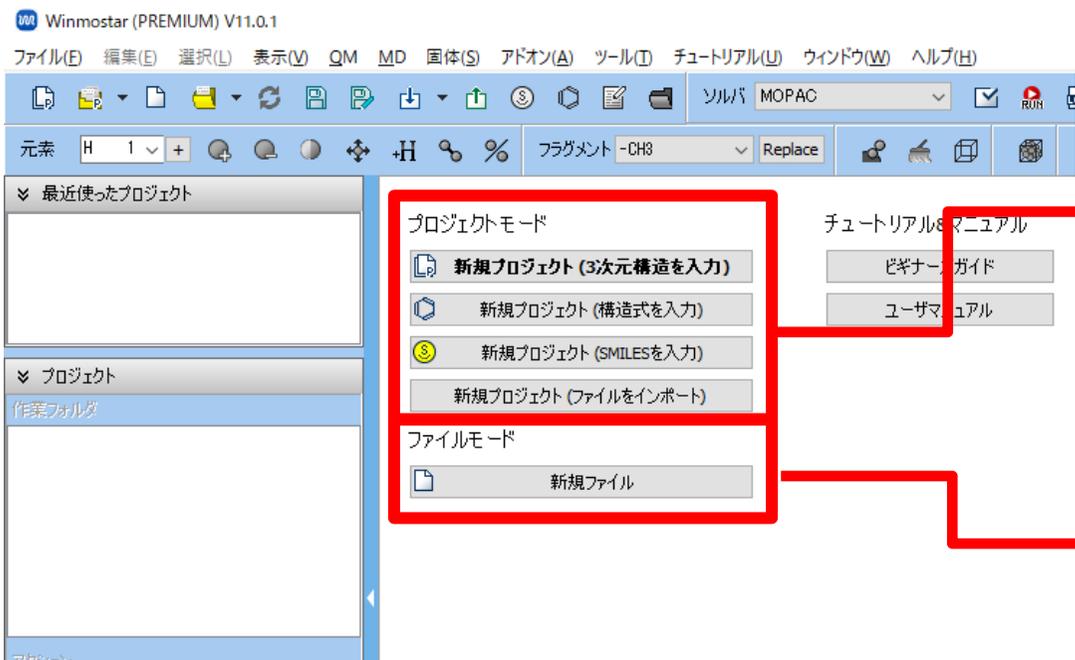
- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、[CygwinWM 2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定](#)してください。
 - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版LAMMPSが同梱されています。
- 上記に該当しない場合、または[推奨バージョン](#)以外のLAMMPSを利用したい方は、別途[Windows版LAMMPSのインストールと環境設定](#)が必要です。

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LAMMPS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

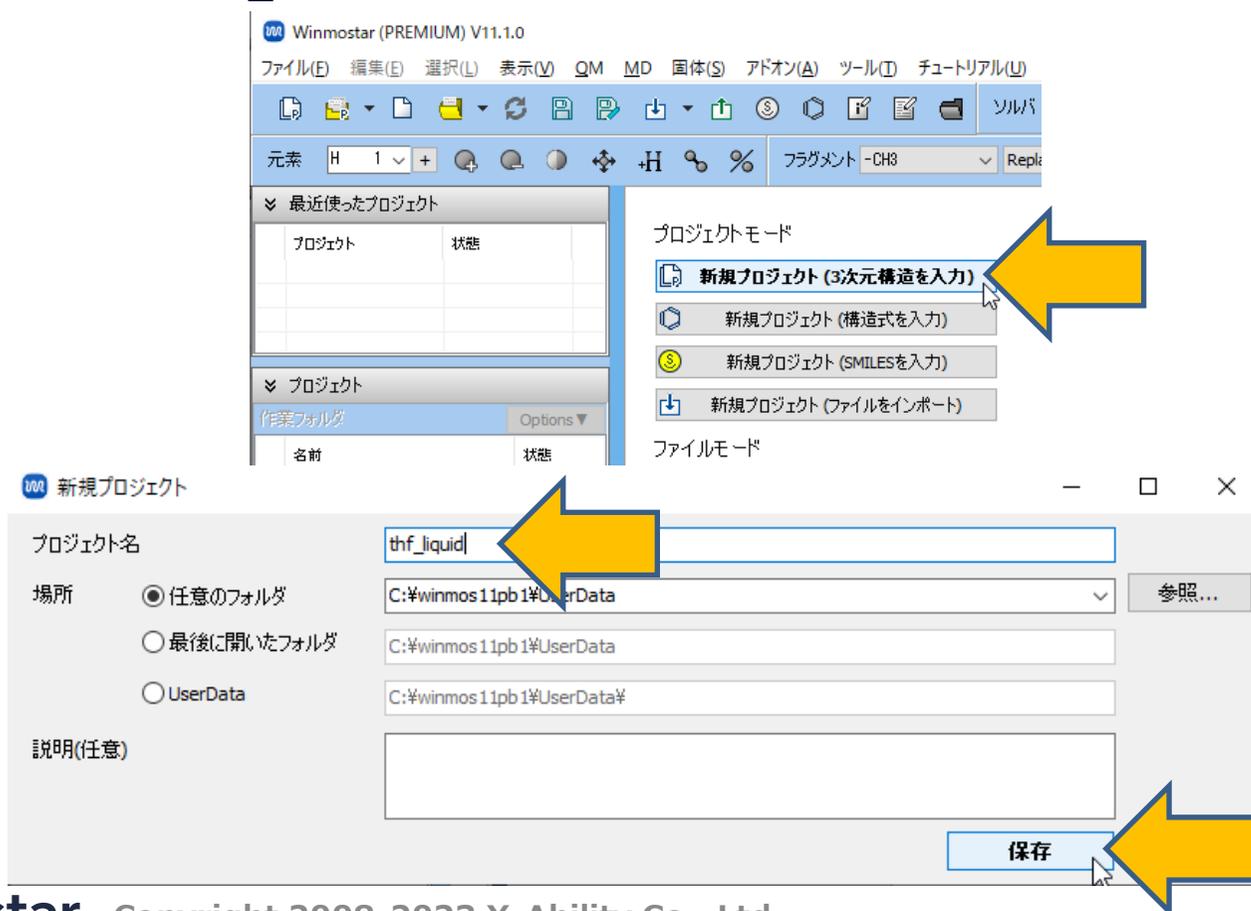
ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。基本的にこのモードを推奨します。

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 ① 1分子の作成

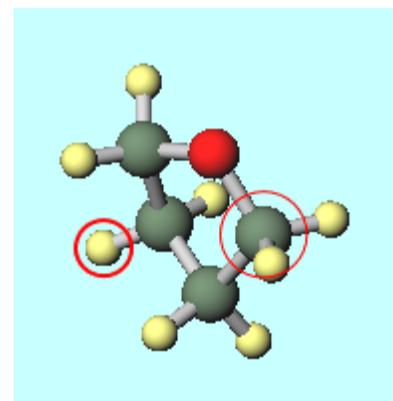
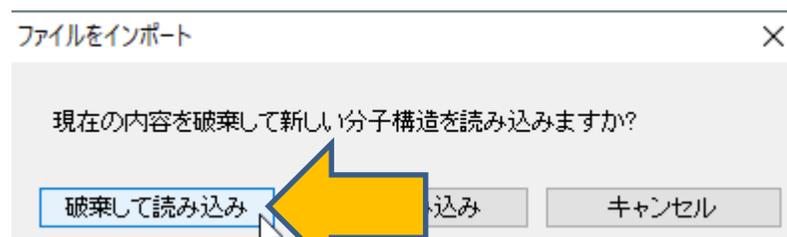
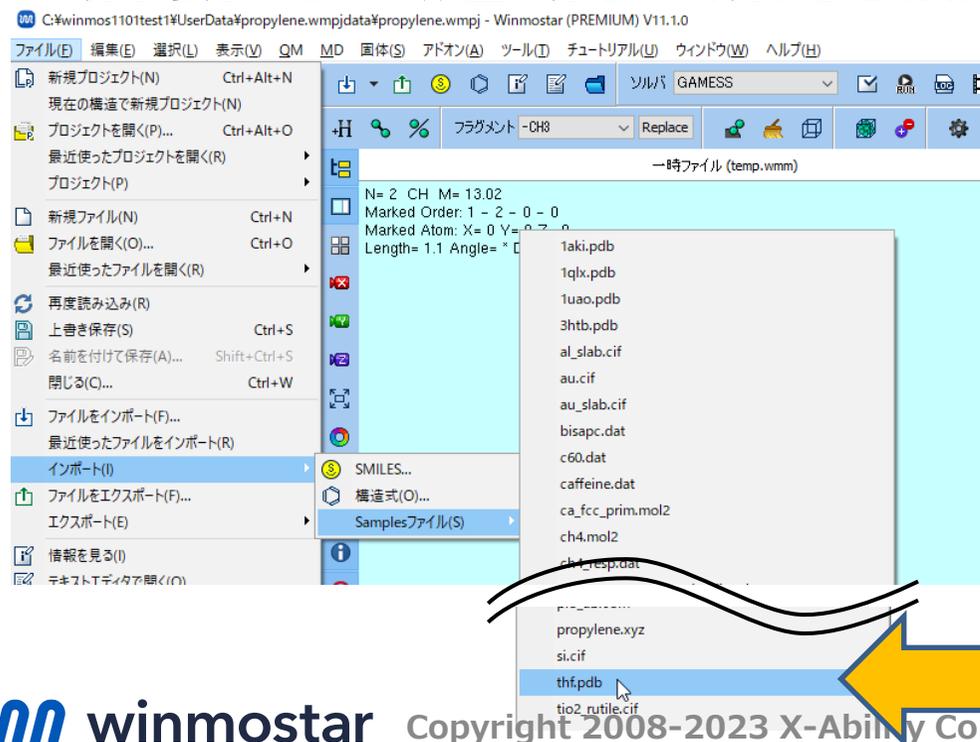
1. Winmostarを起動し、**新規プロジェクト (3次元構造を入力)** をクリックします。 (すでに起動している場合は先に**ファイル | 閉じる**をクリックします。)
2. **プロジェクト名**に「thf_liquid」と入力し**保存**をクリックします。



I. 系のモデリング ① 1分子の作成

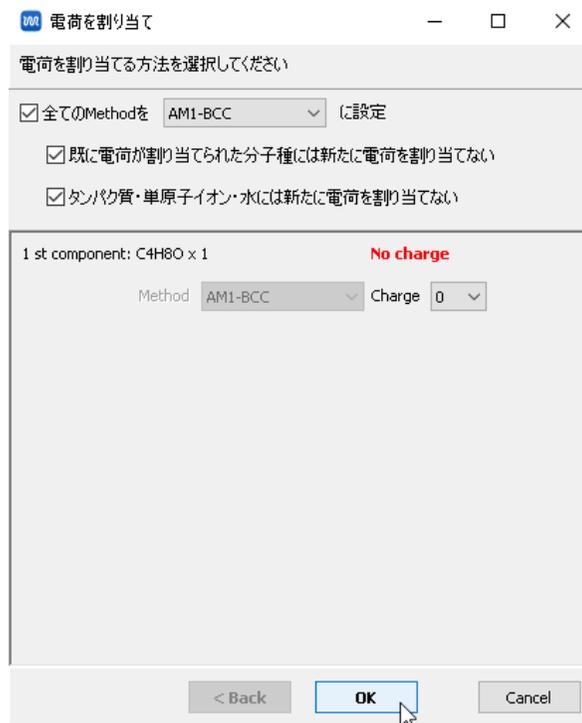
初期構造の作成方法の詳細は[分子モデリング有機分子編チュートリアル](#)を参照してください。
ここでは既存の分子構造ファイルを読み込ませます。

1. **ファイル | インポート | Samplesファイル | thf.pdb**をクリックします。
 - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりに**ファイル | ファイルをインポート**を使います。
2. **ファイルをインポート**ダイアログで**破棄して読み込み**をクリックします。
3. 分子表示エリアに所望の分子が出現することを確認します。



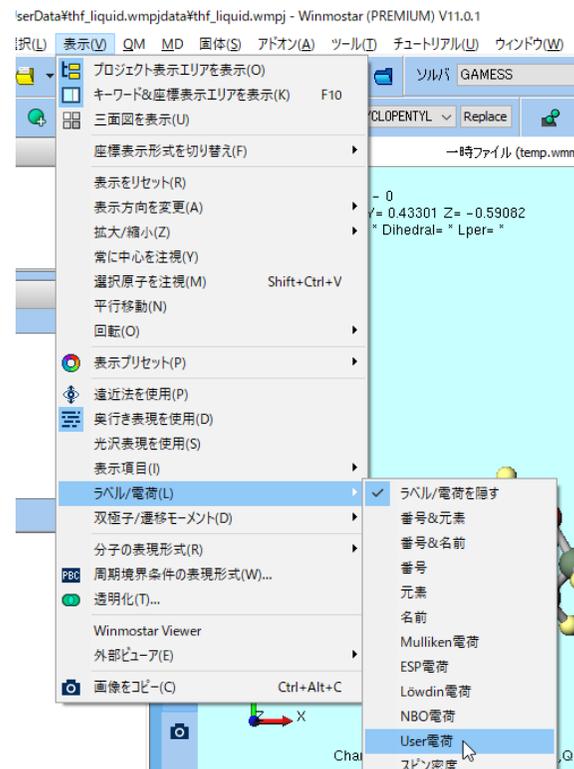
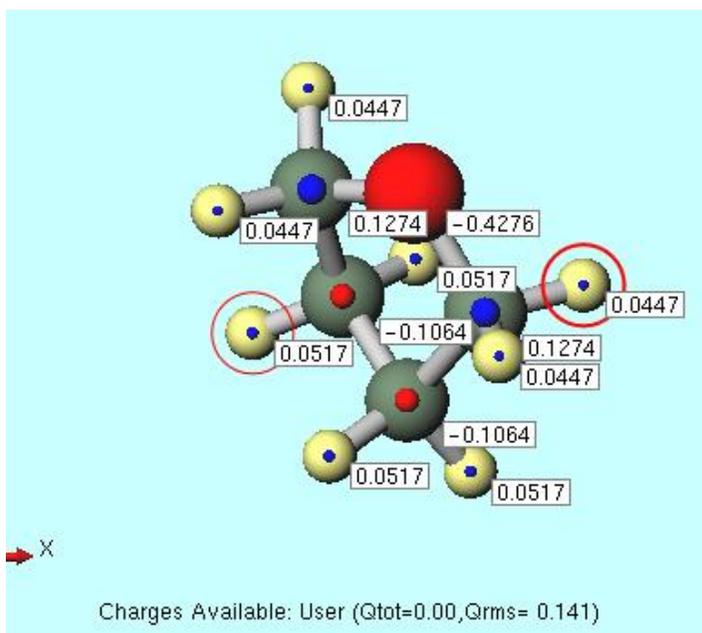
I. 系のモデリング ②電荷の割り当て

1. （自動で電荷を割り当て）をクリックします。
2. 電荷を割り当てウィンドウでOKをクリックします。
3. 黒いウィンドウが何度か出現した後、「正常に電荷が設定されました」と表示されたらOKをクリックします。



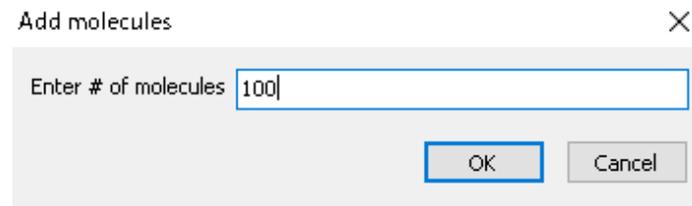
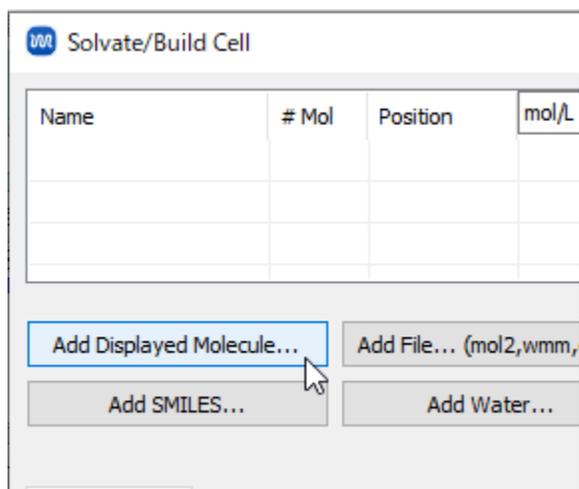
I. 系のモデリング ②電荷の割り当て

1. 分子表示エリア下部に「Charges Available: User (Qtot=0.00, Qrms=0.141)」と表示され、合計値が0かつ、各原子に0以外のUser電荷が割り振られたことを確認します。
2. 電荷をグラフィカルに表示したい場合は**表示 | ラベル/電荷 | User電荷**をクリックします。
3. 2を解除したいときは**表示 | ラベル/電荷 | ラベル/電荷を隠す**をクリックします。



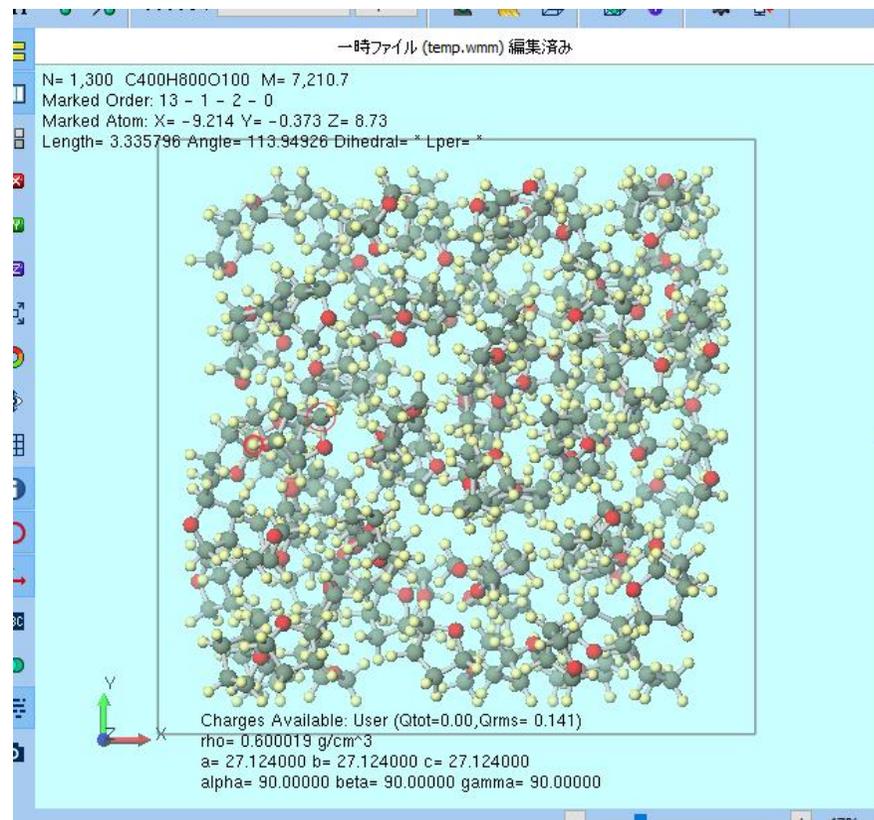
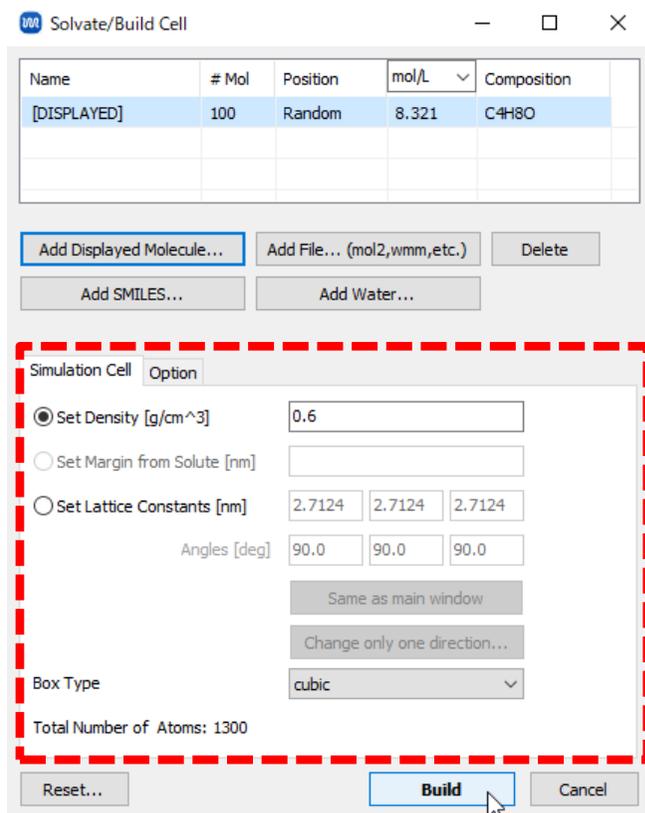
I. 系のモデリング ③液相の作成

1.  溶媒を配置/セルを構築ボタンをクリックします。
2. **Add Displayed Molecule**ボタンをクリックし、出現したダイアログで「**100**」と入力し**OK**ボタンをクリックします。



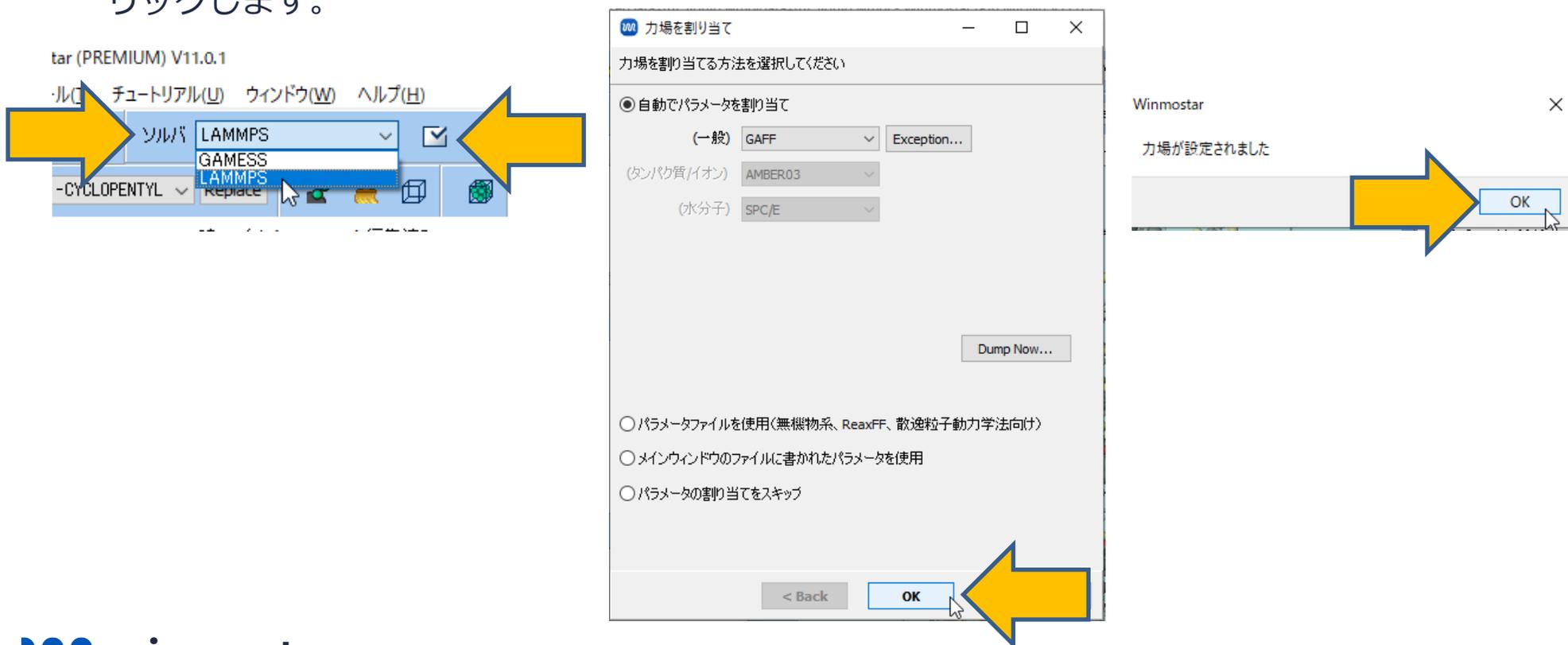
I. 系のモデリング ③液相の作成

1. **Simulation Cell**の設定内容を確認します。（本書では特に変更せず先に進みます。）
2. **Build**をクリックすると黒いターミナルウィンドウが数秒間出現し、処理に成功すると「**正常に処理が終了しました**」と表示されます。THFが 0.6 g/cm^3 で100個並んだ系が出現します。系のサイズ、密度は分子表示エリア下部に表示されます。



II. 計算の実行 ①力場の割り当て

1. ツールバーのソルバから**LAMMPS**を選択します。
2. **(ワークフロー設定)** をクリックします。
3. **力場を割り当て** ウィンドウが開いたら、右下の**OK**をクリックします。黒いターミナルウィンドウが数秒間出現し、処理に成功すると「**力場が設定されました**」と表示されるので**OK**をクリックします。



II. 計算の実行 ②平衡化計算

1. **LAMMPS Workflow Setup**ウィンドウで計算のフローを確認します。ここでは特に設定を変更しません。この設定では、エネルギー極小化 (**Minimize**)、温度一定MD (**NVT**)、温度・圧力一定MD (**NPT**) の合計3つのジョブが続けて実行されます。
2. 各計算のシミュレーション時間 (**Simulation time**) ・ 温度 (**Temperature**) ・ 圧力 (**Pressure**) を変更する場合は該当箇所を変更します。(本書では不要)

The screenshot shows the LAMMPS Workflow Setup window. At the top, the 'Preset' is set to 'Fluid/Amorphous NPT Equil'. The number of jobs is set to 3. Below this, there are three job configurations:

- 1st job:** Ensemble: Minimize, Temperature [K]: 300., Pressure [atm]: 1., Simulation time [ps]: 10., # of snapshots: 50, Initial velocity: From parent, Precision: Medium.
- 2nd job:** Ensemble: NVT, Temperature [K]: 300., Pressure [atm]: 1., Simulation time [ps]: 10., # of snapshots: 50, Initial velocity: Random, Precision: Medium.
- 3rd job:** Ensemble: NPT, Temperature [K]: 300., Pressure [atm]: 1., Simulation time [ps]: 50, # of snapshots: 50, Initial velocity: From parent, Precision: Medium.

At the bottom, there are buttons for 'Reset...', 'Import...', 'Export...', 'OK', and 'Cancel'.

II. 計算の実行 ②平衡化計算

1. 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**、**2nd job**、**3rd job**すべての**Precision**を「Low」に変更します。そうでない場合は次のページに進みます。

注：計算精度を落とさない場合、マシンスペックによっては数時間～半日程度掛かることがあります。落とすと数分程度になります。落とした場合は計算の安定性が低下することがあります。

LAMMPS Workflow Setup

Preset: Fluid/Amorpous NPT Equil (modified) # of Jobs: 3

Enable parameter scan Config...

1st job

Ensemble: Minimize Temperature [K]: 300. Pressure [atm]: 1.

Simulation time [ps]: 10. # of snapshots: 50 Initial velocity: From parent

Free boundary condition Precision: Low

2nd job

Ensemble: NVT Temperature [K]: 300. Pressure [atm]: 1.

Simulation time [ps]: 10. # of snapshots: 50 Initial velocity: Random

Free boundary condition Precision: Low

3rd job

Ensemble: NPT Temperature [K]: 300. Pressure [atm]: 1.

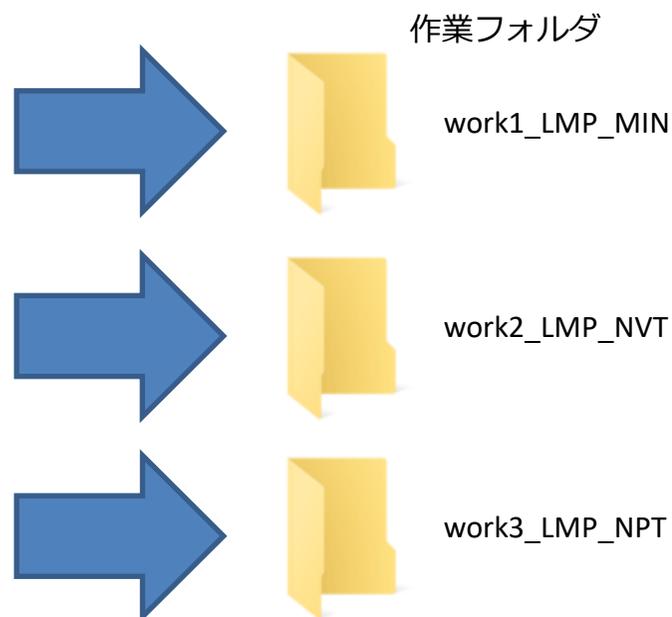
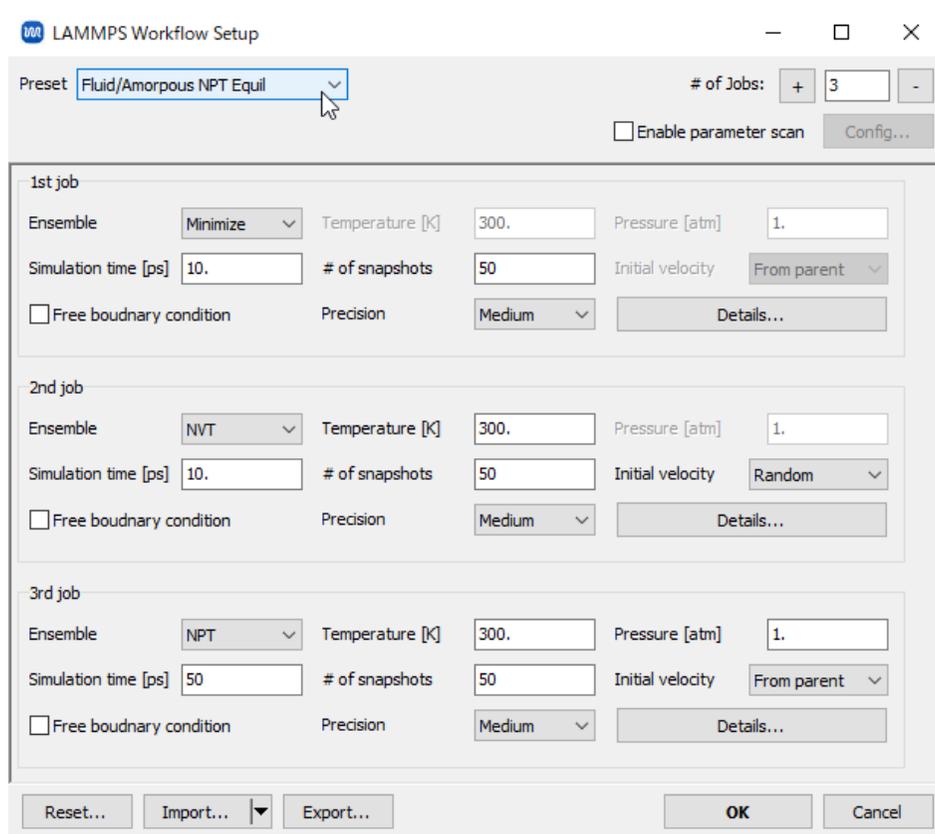
Simulation time [ps]: 50 # of snapshots: 50 Initial velocity: From parent

Free boundary condition Precision: Low

Reset... Import... Export... OK Cancel

補足 計算実行の流れ

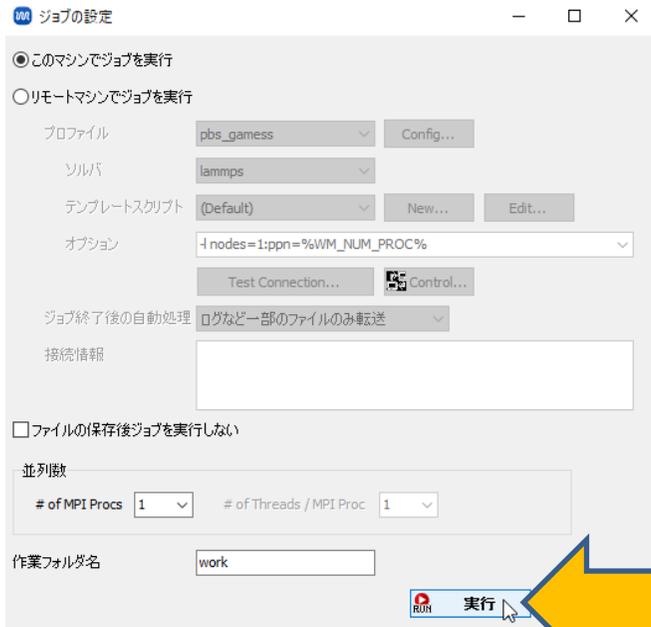
今回のケースでは、①Minimizeの計算が実行された後に②NVTの計算が実行されます。連続して実行される計算の間で原子座標・速度の情報は自動で引き継がれ、①の最終構造は②の初期構造と一致します。同様に②NVTの計算の後に③NPTの計算が実行されます。各計算は個別の作業フォルダの中で実行されます。



II. 計算の実行 ②平衡化計算

(リモートジョブの場合は先に[こちら](#)に進んでください。)

1. LAMMPS Workflow Setupウィンドウ右下の**OK**をクリックします。
2. ジョブの設定ウィンドウで**実行**をクリックします。バックグラウンドで**Winmostar Job Manager**が起動し、右図のような黒いコンソールウィンドウが出現し、計算が開始されます。



```
Winmostar/JM Exec 1 2022/01/16 0:33:48
C:\winmos11pb1\UserData\thf_liquid.wmp\data\Exec1>cd C:\winmos11pb1\UserData\thf_liquid.wmp\data\Exec1\
C:\winmos11pb1\UserData\thf_liquid.wmp\data\Exec1>cscript run_seqjob.vbs
Microsoft (R) Windows Script Host Version 5.812
Copyright (C) Microsoft Corporation. All rights reserved.

*****
** LAMMPS Start **
*****

C:\winmos11pb1\UserData\thf_liquid.wmp\data\Exec1>set dir=C:\winmos11pb1\UserData\thf_liquid.wmp\data\work1_LMP_MINI\
C:\winmos11pb1\UserData\thf_liquid.wmp\data\Exec1>cd C:\winmos11pb1\UserData\thf_liquid.wmp\data\work1_LMP_MINI\
C:\winmos11pb1\UserData\thf_liquid.wmp\data\work1_LMP_MINI>set CHERE_INVOKING=yes
C:\winmos11pb1\UserData\thf_liquid.wmp\data\work1_LMP_MINI>echo RUN 1>.STATUS
C:\winmos11pb1\UserData\thf_liquid.wmp\data\work1_LMP_MINI>set OMP_NUM_THREADS=1
C:\winmos11pb1\UserData\thf_liquid.wmp\data\work1_LMP_MINI>if exist Imp.restart (del /f /q "Imp.restart")
C:\winmos11pb1\UserData\thf_liquid.wmp\data\work1_LMP_MINI>set LAMMPS_POTENTIALS=C:\Program Files\LAMMPS 64-bit 20160309\potentials\
C:\winmos11pb1\UserData\thf_liquid.wmp\data\work1_LMP_MINI>"C:\Program Files\LAMMPS 64-bit 20160309\bin\Imp_serial.exe"
0<"Imp.in" | "C:\winmos11pb1\wm_system\bin\xtee" Imp.log
```

補足：入力ファイルを自分で修正したい場合やリモートサーバに自分でコピーして使用したい場合は、**ジョブの設定**ウィンドウで**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**実行**をクリックします。保存後に計算を実行したい場合は**ファイル | プロジェクト | 選択された作業フォルダ | Run**をクリックします。

II. 計算の実行 ②平衡化計算

1. メインウィンドウに戻ると（計算実行中でも構いません）、**プロジェクト表示エリア**に**LAMMPS Workflow Setup**ウィンドウの各ジョブに対応する3つの作業フォルダの親子関係がツリー状に表示されます。
2. 分子表示エリアには自動的に最初の作業フォルダ（work1_LMP_MIN）の入力ファイルが開かれます。**分子表示エリア**の上部でもそのことを確認できます。

winmostar (PREMIUM) V11.1.0
ファイル(F) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(T) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)

ソルバ LAMMPS

ラベル/電荷 (ラベル/電荷を隠す)

元素 H 1 +

フラグメント -CH3 Replace

最近使ったプロジェクト

プロジェクト	状態
thf_liquid	PEND(3/3)

プロジェクト

作業フォルダ (thf_liquid)	Options
名前	状態
work1_LMP_MIN	RUN
work2_LMP_NVT	PEND
work3_LMP_NPT	PEND

work1_LMP_MIN 入力ファイル (Imp.data)

N= 1,300 C400H800O100
Marked Order: 1300 - 1 - 13 - 2
Marked Atom: X= 20.9 Y= 3.31 Z= 2.36
Length= 26.269197 Angle= 112.71203 Dihedral= 144.14160 Lper= 0.57591

アニメーション

キーワード

座標

表示形式 XYZ Z-Matrix

Elem	X	Y	Z
1272 H	23.1400	2.9300	11.5000
1273 H	22.1100	1.6200	12.0500
1274 H	23.8200	1.5000	13.7500
1275 C	8.5900	16.8400	14.9800
1276 H	8.8400	17.8600	14.7000
1277 O	7.1900	16.6700	14.8800
1278 C	9.2100	15.8400	14.0000
1279 C	6.8500	15.8400	13.7900
1280 C	8.1100	15.7300	12.9400
1281 H	8.8900	16.6800	16.0000
1282 H	10.1600	16.1700	13.6100
1283 H	9.3600	14.8800	14.4800
1284 H	8.1700	16.5700	12.2500
1285 H	6.0100	16.2800	13.2700
1286 H	6.5500	14.8600	14.1800
1287 H	8.1500	14.8100	12.3800
1288 C	18.1500	2.5600	4.0900
1289 H	17.9400	1.5000	4.1500
1290 O	19.1100	2.9100	5.0700
1291 C	18.7700	2.9300	2.7400
1292 C	20.3500	3.2300	4.4800
1293 C	20.2600	2.7500	3.0300
1294 H	17.2300	3.1000	4.3000

アクション (work1_LMP_MIN)

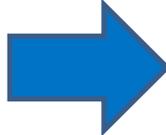
Coordinate (Initial)

Log

Log (Extracted)

II. 計算の実行 ②平衡化計算

1. 計算の進行状況に応じて、プロジェクト表示エリアで各作業フォルダの状態が**PEND (黒)** → **RUN (緑)** → **END (青)** と変化します。
2. 全ての作業フォルダの状態が**END (青)** に変化するまで待ちます。この際**最近使ったプロジェクト**の「thf_liquid」の状態も**ALL END (青)** に変化します。



最近使ったプロジェクト		
プロジェクト	状態	
thf_liquid	PEND(3/3)	

プロジェクト		
作業フォルダ (thf_liquid)	Options ▼	
名前	状態	
work1_LMP_MIN	RUN	
└ work2_LMP_NVT	PEND	
└ work3_LMP_NPT	PEND	

最近使ったプロジェクト		
プロジェクト	状態	
thf_liquid	ALL END	

プロジェクト		
作業フォルダ (thf_liquid)	Options ▼	
名前	状態	
work1_LMP_MIN	END	
└ work2_LMP_NVT	END	
└ work3_LMP_NPT	END	

II. 計算の実行 ②平衡化計算

1. 各計算のログの主要な内容を見たい場合は、プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる計算の作業フォルダをクリックして選択し、アクションのLog (Extracted)をクリックします。(プロフェッショナル版プレミアム限定の機能です)
2. 完全なログを見たい場合はLogをクリックします。

The screenshot displays the winmostar software interface. On the left, the '最近使ったプロジェクト' (Recently used projects) panel shows a project named 'thf_liquid' in a 'RUN(1)' state. Below it, the 'プロジェクト' (Project) panel shows a tree view of folders: 'thf_liquid' (selected), 'work1_LMP_MIN', 'work2_LMP_NVT', and 'work3_LMP_NPT'. A yellow arrow points to 'work1_LMP_MIN'. The 'アクション (work1_LMP_MIN)' (Actions) panel at the bottom left lists 'Coordinate (Initial)', 'Coordinate (Final)', 'Log', and 'Log (Extracted)'. A second yellow arrow points to 'Log (Extracted)'. The main window shows the 'Extracted Log' for 'work1_LMP_MIN' with the following content:

```
work1_LMP_MIN 入力ファイル (mp.data)
N= 1 300 C400H800O100 M= 7 210 7
Extracted Log (C:\winmos110\test1\UserData\thf_liquid.wmp\data\work1_LMP_MIN\mp.log)
LAMMPS (1 Mar 2016-ICMS)
using 1 OpenMP thread(s) per MPI task
1 by 1 by 1 MPI processor grid
Minimization stats:
Stopping criterion = energy tolerance
Energy initial, next-to-last, final =
1616.14847821 251.070628063 251.050313369
Force two-norm initial, final = 894.155 5.14499
Force max component initial, final = 250.485 0.771543
Final line search alpha, max atom move = 0.0166837 0.0128722
Iterations, force evaluations = 1076 2149
Dangerous builds = 0
Total wall time: 0:00:32
```

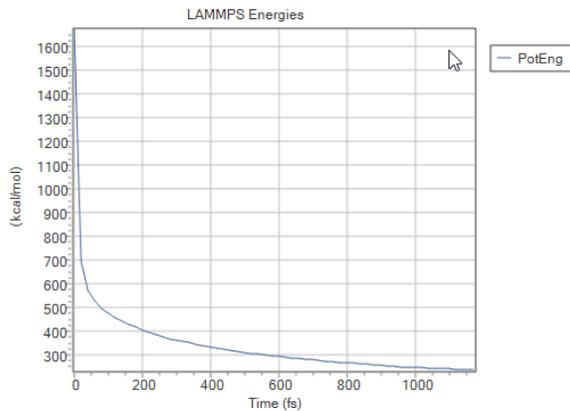
At the bottom of the interface, a 3D molecular model is visible, and a table of coordinates is shown on the right side of the window.

1288	C	18.1500	2.5600
1289	H	17.9400	1.5000
1290	O	19.1100	2.9100
1291	C	18.7700	2.9300
1292	C	20.3500	3.2300
1293	C	20.2600	2.7500
1294	H	17.2300	3.1000
1295	H	18.4000	2.3100
1296	H	18.5500	3.9700
1297	H	20.5300	1.7000

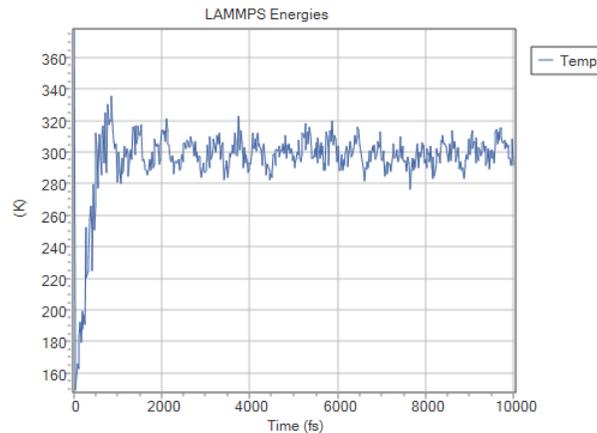
補足 平衡化計算における熱力学量の収束の確認

P.24の手順により、平衡化計算で温度・ポテンシャルエネルギー・圧力・密度などが収束していることを確認する必要があります。収束していない場合は、収束するまでP.21-22の手順で適宜計算条件を調整しながら追加で計算を実行します。

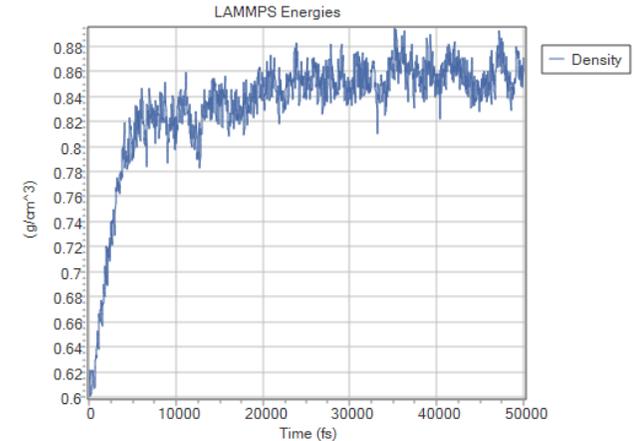
例：



work1_LMP_MIN
(エネルギー極小化) の
PotEng (ポテンシャルエネルギー)



work2_LMP_NVT
(温度一定MD) の
Temp (温度)



work3_LMP_NPT
(温度圧力一定MD) の
Density (密度)

※特に密度の収束は遅いことがあるので注意

II. 計算の実行 ③本計算

1. 継続元の作業フォルダ（ここではwork3_LMP_NPTとします）の状態が**END（青）**に変化したあと、（ワークフロー設定）をクリックします。
2. 情報ダイアログではいをクリックします。
3. ジョブの継続元の作業フォルダを選択で継続元の作業フォルダ（work3_LMP_NPT）を選択してからOKをクリックします。
4. Presetに「Fluid/Amorphous NPT Production」を選択します。
5. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合はPrecisionを「Low」に変更します。

情報

継続ジョブを実行しますか？
いいえの場合は表示中の構造で新規ジョブが作成されます。

はい(Y) いいえ(N) キャンセル

ジョブの継続元の作業フォルダを選択

ジョブの継続元の作業フォルダを選択してください

名前	状態	プロファイル	出力ファイル場所
work1_LMP_MIN	END	Local Job	Local
work2_LMP_NVT	END	Local Job	Local
work3_LMP_NPT	END	Local Job	Local

LAMMPS Workflow Setup

Preset: Fluid/Amorphous NPT Prod

of Jobs: 1

Continue: Fluid/Amorphous NPT Prod

1st job: Fluid/Amorphous/Crystal NVT Equil

Ensemble: Isolated system NVT Equil

Simulation: Isolated system NVT Prod

Temperature [K]: 300. Pressure [atm]: 1.

Number of snapshots: 250 Initial velocity: From parent

OK

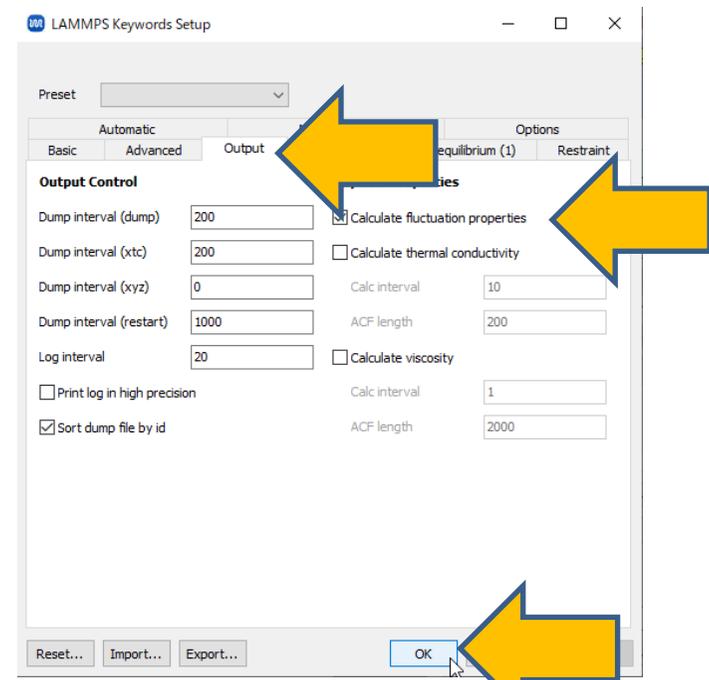
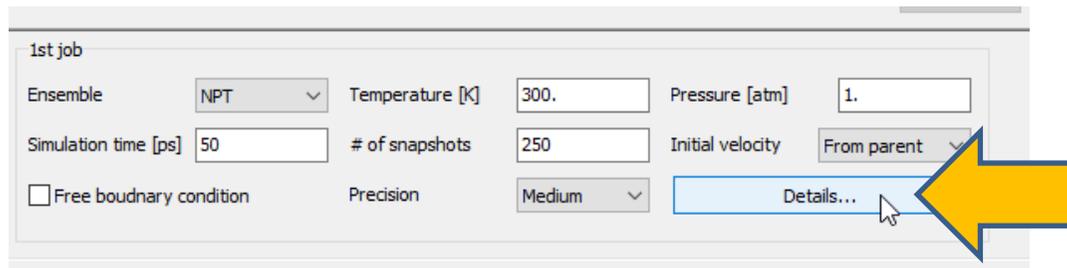
II. 計算の実行 ③本計算

1. 1st jobのDetailsをクリックし、LAMMPS Keyword SetupのOutputタブのCalc Fluctuation PropertiesをチェックしてからOKをクリックします（プロフェッショナル版エコノミーおよび学生版では使用できません）。

– P.26, 27の手順で定圧比熱、等温圧縮率がそれぞれCpmとbetatとして出力されます。

補足：ここで使われる比熱の計算方法では、量子効果が含まれないため計算値が実験値よりも高くなります。（J. Chem. Theory Comput., 2012, 8, 61-74など）また、本来これらの値の収束にはより長いステップ数が必要である点にご注意ください。

2. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで実行をクリックします。



III. 結果解析 アニメーション

以降、確認したい解析項目以外はスキップ可能です。

1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる作業フォルダ（ここでは work1_LMP_MINとします）をクリックします。
2. アクションでAnimationをクリックすると、メインウィンドウ右側にアニメーション表示エリアが出現します。▶ ボタンをクリックすると計算の様子がアニメーション表示されます。

The screenshot shows the winmostar software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a liquid structure. The left sidebar shows the project tree with 'work1_LMP_MIN' selected. The bottom-left action menu has 'Animation' highlighted. The right sidebar shows the animation control panel with a play button highlighted by a yellow arrow.

Project Information:
work1_LMP_MIN 入力ファイル (Imp.data)
N= 1,300 C400H800O100 M= 7,210.7
Marked Order: 1300 - 1 - 13 - 2
Marked Atom: X= 20.899991 Y= 3.309996 Z= 2.36
Length= 26.269181 Angle= 112.71199 Dihedral= 144.14154 Lper= 0.57591

Force Field: Available (LAMMPS)
Charges Available: User (Qtot=0.00,Grms= 0.141)
rho= 0.600019 g/cm³
a= 27.124000 h= 27.124000 c= 27.124000

表示形式	XYZ			Z-Matrix		
Elem	X	Y	Z			
1294 H	17.2300	3.1000	4.3000			
1295 H	18.4000	2.3100	1.9300			
1296 H	18.5500	3.9700	2.5000			
1297 H	20.5300	1.7000	2.9600			
1298 H	21.1400	2.7500	5.0400			
1299 H	20.5000	4.3000	4.5200			

III. 結果解析 エネルギー等の時間変化、平均値

1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる作業フォルダ（ここでは work1_LMP_MINとします）をクリックします。
2. アクションでEnergy plotをクリックすると、Energy Plotウィンドウが出現します。Energy Termsで可視化したい物理量（ここでは「PotEng（ポテンシャルエネルギー）」とします）にチェックを入れ、Drawをクリックすると時間変化のグラフが表示されます。

The image shows two screenshots from a software application. The left screenshot displays a project tree under 'プロジェクト' (Project) with a sub-folder '作業フォルダ (thf_liquid)'. The folder 'work1_LMP_MIN' is selected and highlighted with a yellow arrow. Below the tree, the 'アクション (work1_LMP_MIN)' (Actions) list includes 'Coordinate (Initial)', 'Coordinate (Final)', 'Log', 'Log (Extracted)', 'Animation', 'Energy plot', and 'Show in Explorer'. The 'Energy plot' action is highlighted with a yellow arrow. The right screenshot shows the 'Energy Plot' window. The main plot area is titled 'LAMMPS Energies' and shows a graph of energy in kcal/mol versus time in fs. The y-axis ranges from 300 to 1600, and the x-axis ranges from 0 to 1000. A single blue line labeled 'PotEng' shows the energy decreasing from approximately 1600 kcal/mol at 0 fs to about 250 kcal/mol at 1000 fs. To the right of the plot is a list of 'Energy Terms' with checkboxes: Temp, PotEng (checked), KinEng, TotEng, Enthalpy, Press, Volume, Density, Lx, Ly, Lz, Pxx, and Pyy. A yellow arrow points to the 'PotEng' checkbox. Below the list are options for 'Block Average' (unchecked) and 'Size: 10'. At the bottom of the window are buttons for 'Show Setting', 'Refresh', 'Options', 'Draw' (highlighted with a yellow arrow), and 'Close'.

III.結果解析 エネルギー等の時間変化、平均値

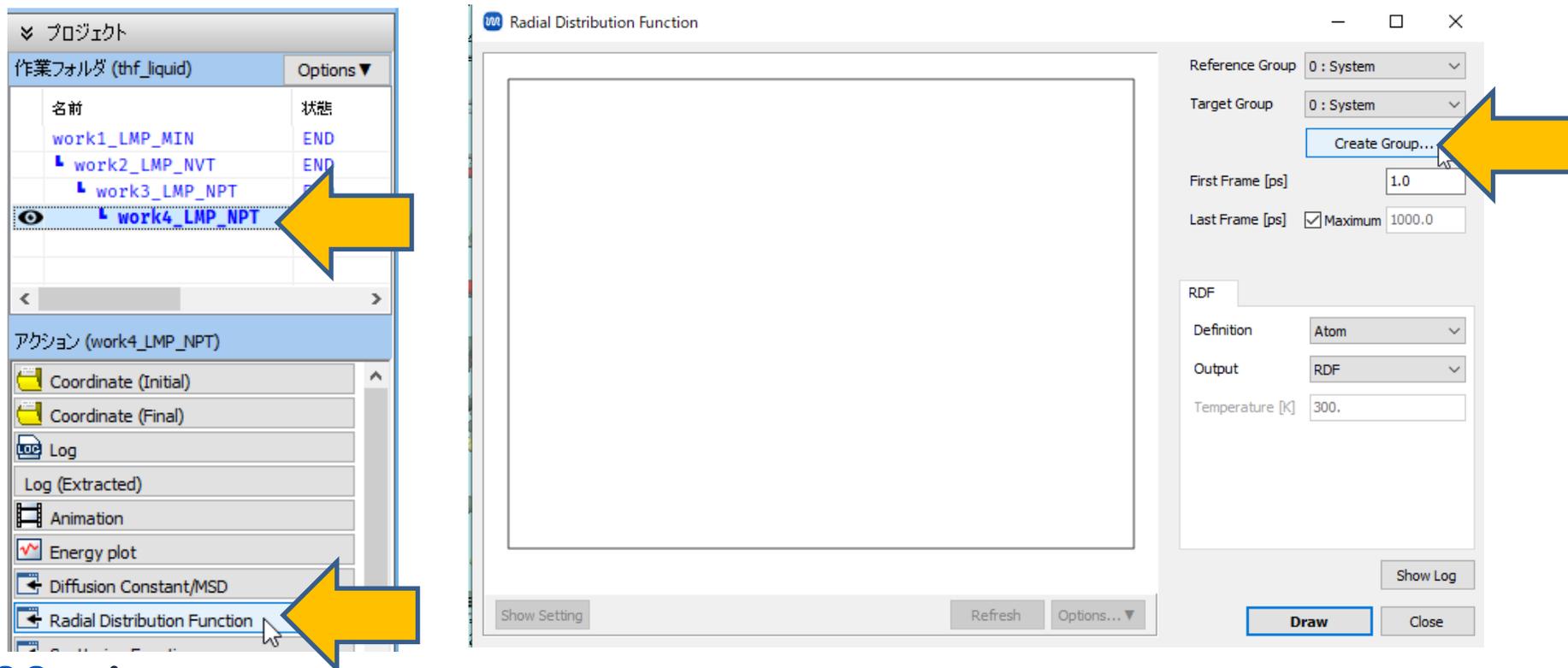
1. 平均値を確認したいときは**Calc Ave**をクリックします。テキストファイルが開き、そこには各種物理量の平均値と標準誤差が出力されます。平均値は、ある程度平衡化した後の計算（本書ではwork4_LMP_NPTに該当）以外は物理的に意味がない点にご注意ください。
2. 確認後で**Close**をクリックし**Energy Plot**ウィンドウを閉じます。

The screenshot displays two windows from the Energy Plot software. The left window, titled 'Energy Terms', has a list of physical quantities with checkboxes. 'PotEng' is checked, while others like Temp, KinEng, TotEng, Enthalpy, Press, Volume, Density, Lx, Ly, Lz, Pxx, and Pyy are unchecked. Below the list, there is a 'Block Average' checkbox and a 'Size' input field set to 10. At the bottom are buttons for 'Draw' and 'Close'. A yellow arrow points from the 'Draw' button to the 'Calc Ave' button in the right window. The right window, titled 'energy_ave.log - メモ帳', shows a table of average values and standard errors for various energy and physical parameters. A yellow arrow points from the 'Close' button in the left window to the 'Close' button in the right window.

# data	Average	Standard error
Temp (K)	0.000000000000000	0.000000000000000
PotEng (kcal/mol)	348.391234500000190	25.170539185458522
KinEng (kcal/mol)	0.000000000000000	0.000000000000000
TotEng (kcal/mol)	348.391234500000190	25.170539185458522
Enthalpy (kcal/mol)	200.348655016666660	75.040080094477274
Press (atm)	-508.685721616666620	177.661581027747230
Volume (Å ³)	19955.435000000032000	3.75728835565913E-012
Density (g/cm ³)	0.599994420000001	1.00330423315483E-016
Lx (Å)	27.124000000000019	2.75192018236753E-015
Ly (Å)	27.124000000000019	2.75192018236753E-015
Lz (Å)	27.124000000000019	2.75192018236753E-015
Pxx (atm)	-442.197806500000060	193.586135260033090
Pyy (atm)	-575.517229166666430	177.392421571822880
Pzz (atm)	-508.342117750000060	163.033870593444320
Pxy (atm)	18.319507023333341	25.137684096462102
Pxz (atm)	36.623633150833344	25.843877134202525
Pyz (atm)	8.364973538333332	7.240932608347771
GamNsurf (mN/m)	0.141650473333337	7.561892847632891
E_pair (kcal/mol)	-767.63187033333250	18.741399290349107
E_vdwl (kcal/mol)	-683.738154999999870	15.727903153816989
E_coul (kcal/mol)	1250.749386666666400	2.543026348188388
E_long (kcal/mol)	-1334.643090000000000	0.864374295300429
E_tail (kcal/mol)	0.000000000000000	0.000000000000000
E_mol (kcal/mol)	1116.023103333333000	6.839636803403122
E_bond (kcal/mol)	6.380519678333332	2.113790221979792
E_angle (kcal/mol)	334.106627500000060	5.739981166836300
E_dihed (kcal/mol)	775.535956500000000	1.240163455143242
E_impro (kcal/mol)	0.000000000000000	0.000000000000000

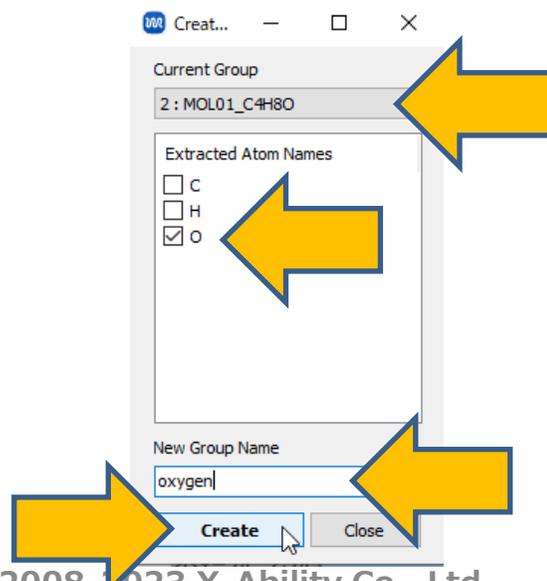
III. 結果解析 動径分布関数

1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる作業フォルダ（ここでは work4_LMP_NPT とします）をクリックします。
2. アクションで Radial Distribution Function をクリックすると、Radial Distribution Function ウィンドウが出現します。ここでは全原子間ではなく特定原子間の動径分布関数を取得するために Create Group をクリックします。



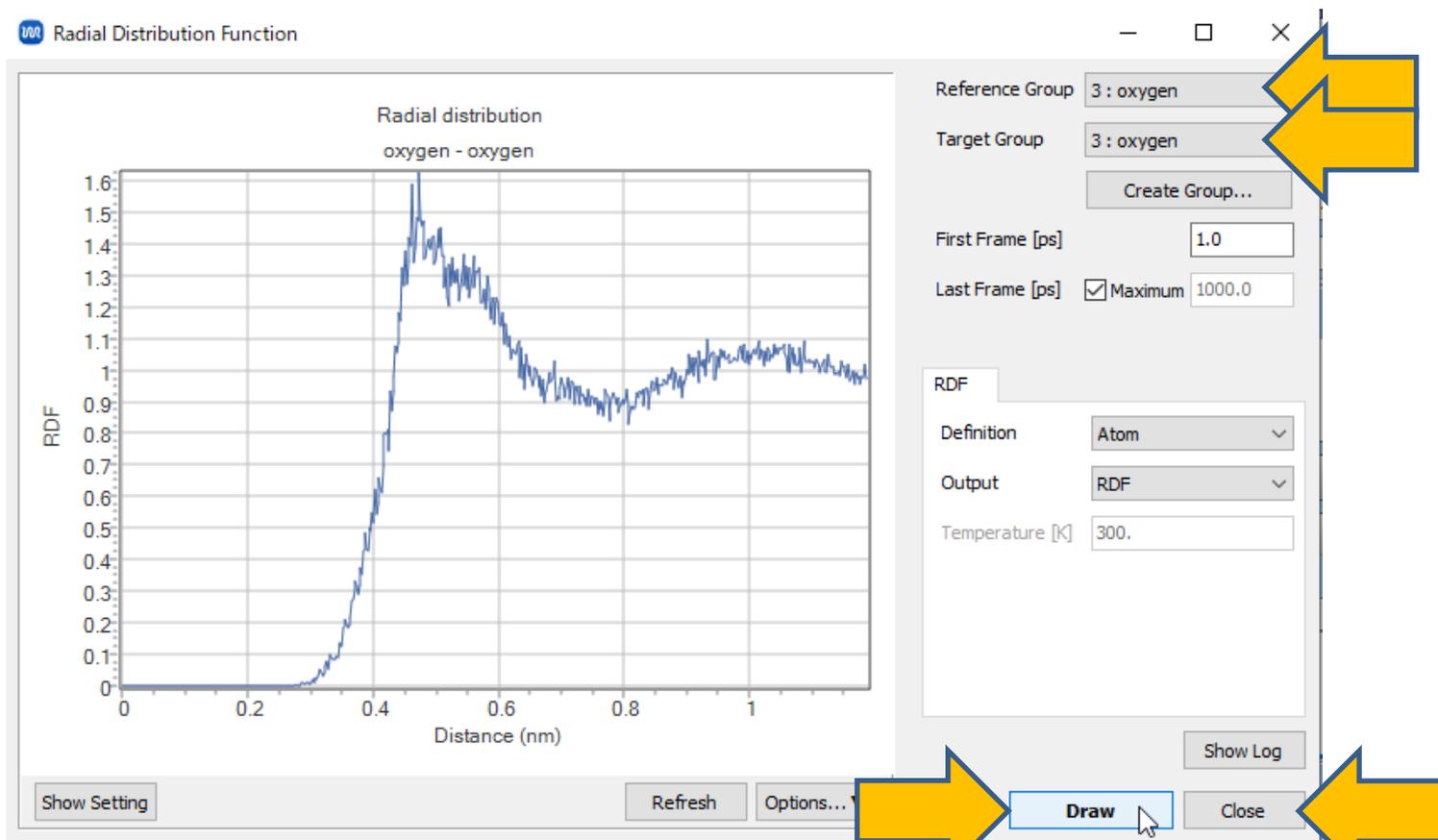
III.結果解析 動径分布関数

1. **Create Group**ウィンドウにおいて、**Current Group**で**2: MOL01_C4H8O**（今回はTHFを意味する）、**Extracted Atom Names**で**O**を選択し、**New Group Name**に**oxygen**と入力して**Create**をクリックします。
 - 事前にメインウィンドウで**表示 | ラベル/電荷 | 名前**をチェックしておくこと、分子表示エリアで各原子のAtom Nameを確認できます。
 - また、**MD | LAMMPS | 結果解析 | 動径分布関数**をクリックし、予め作成したndxファイルを選択すれば、解析対象グループをさらに細かく調整できます。ndxファイルはメインウィンドウの**選択**メニューで作成できます。（詳細はユーザマニュアルを参照）
2. ターミナルウィンドウが出現し処理が終了したら**Close**をクリックします。



III.結果解析 動径分布関数

1. **Reference Group**と**Target Group**の両方に先ほど作成した**oxygen**を選択し、**Draw**ボタンを押すと酸素-酸素間の動径分布関数が出力されます。
2. グラフを確認後**Close**をクリックします。



III. 結果解析 自己拡散係数

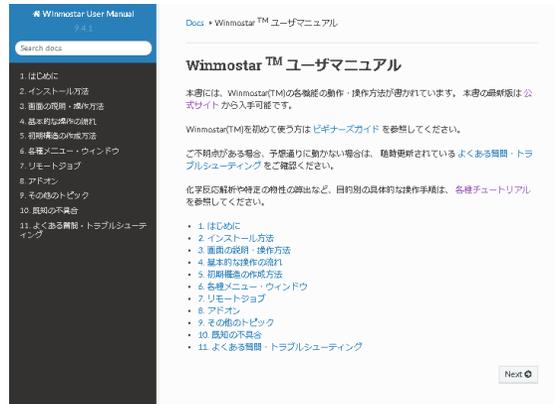
1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる作業フォルダ（ここでは work4_LMP_NPTとします）をクリックして選択します。
2. アクションでDiffusion Constant/MSDをクリックすると、Diffusion Constant/Mean Square Displacementウィンドウが出現します。Drawをクリックすると平均二乗変位のグラフと自己拡散係数（Diffusion Constant）が出現します。

補足：自己拡散係数は本来NVT計算から求める方が望ましいですが、本書では簡易的にNPT計算から求めています。（J. Chem. Phys. 153, 021101 (2020)など）

The screenshot shows the winmostar software interface. On the left, the 'プロジェクト' (Project) panel shows a list of folders under '作業フォルダ (thf_liquid)'. The folder 'work4_LMP_NPT' is selected, indicated by a yellow arrow. Below this, the 'アクション (work4_LMP_NPT)' panel lists various actions, with 'Diffusion Constant/MSD' selected, also indicated by a yellow arrow. The main window, titled 'Diffusion Constant/Mean Square Displacement', contains a graph of Mean Square Displacement (MSD) in nm² versus Time in ps. The graph shows a linear increase in MSD over time, reaching approximately 0.65 nm² at 45 ps. To the right of the graph is a control panel with a 'Target Group' dropdown set to '3 : oxygen', a 'Create Group...' button, 'First Frame [ps]' set to 1.0, and 'Last Frame [ps]' set to 'Maximum 1000.0'. At the bottom of the window, the 'Diffusion Constant' is displayed as 1.9404 (+/- 0.3038) 1e-5 cm²/s, with a yellow arrow pointing to it. A 'Draw' button is located at the bottom right of the window, also indicated by a yellow arrow.

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