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

Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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：

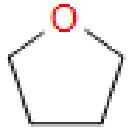
**I. 系のモデリング**
①1分子の作成
②電荷の割り当て
③液相の作成

→

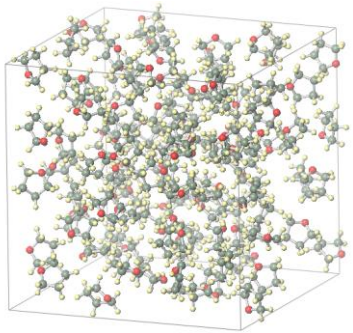
**II. 計算の実行**
①力場の割り当て
②平衡化計算
（エネルギー極小化→
温度一定MD→
温度・圧力一定MD）
③本計算
（温度・圧力一定MD）

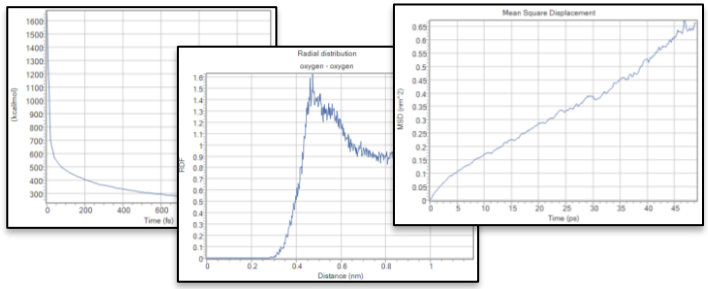
→

**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



THF分子






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。


Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 動作環境設定

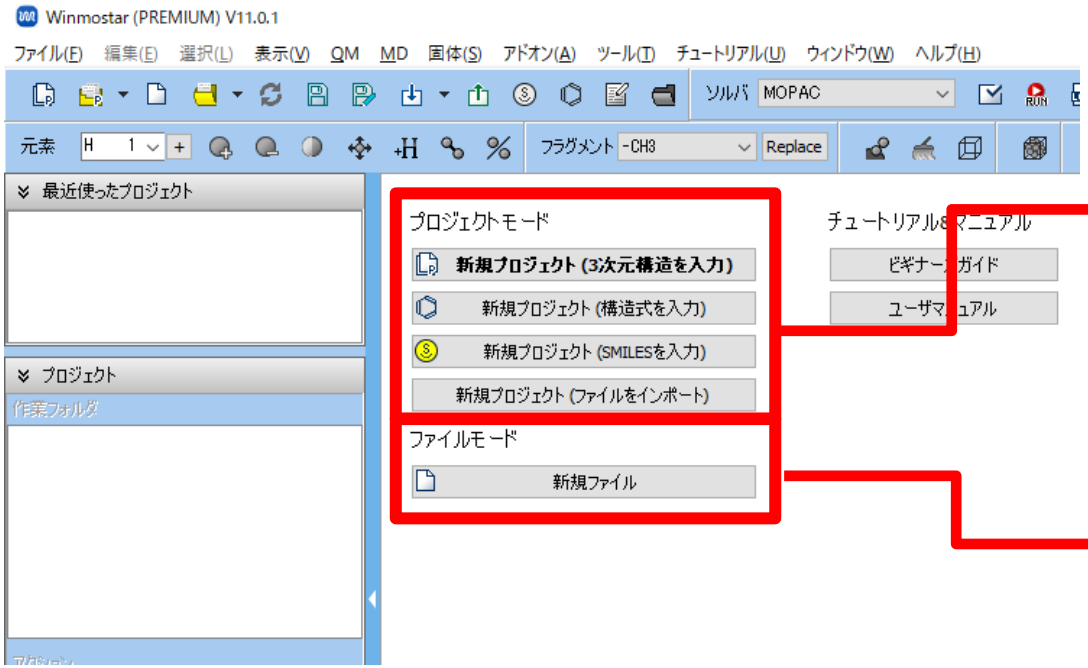
- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、CygwinWM 2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定してください。
  - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版LAMMPSが同梱されています。

- 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。


Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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。



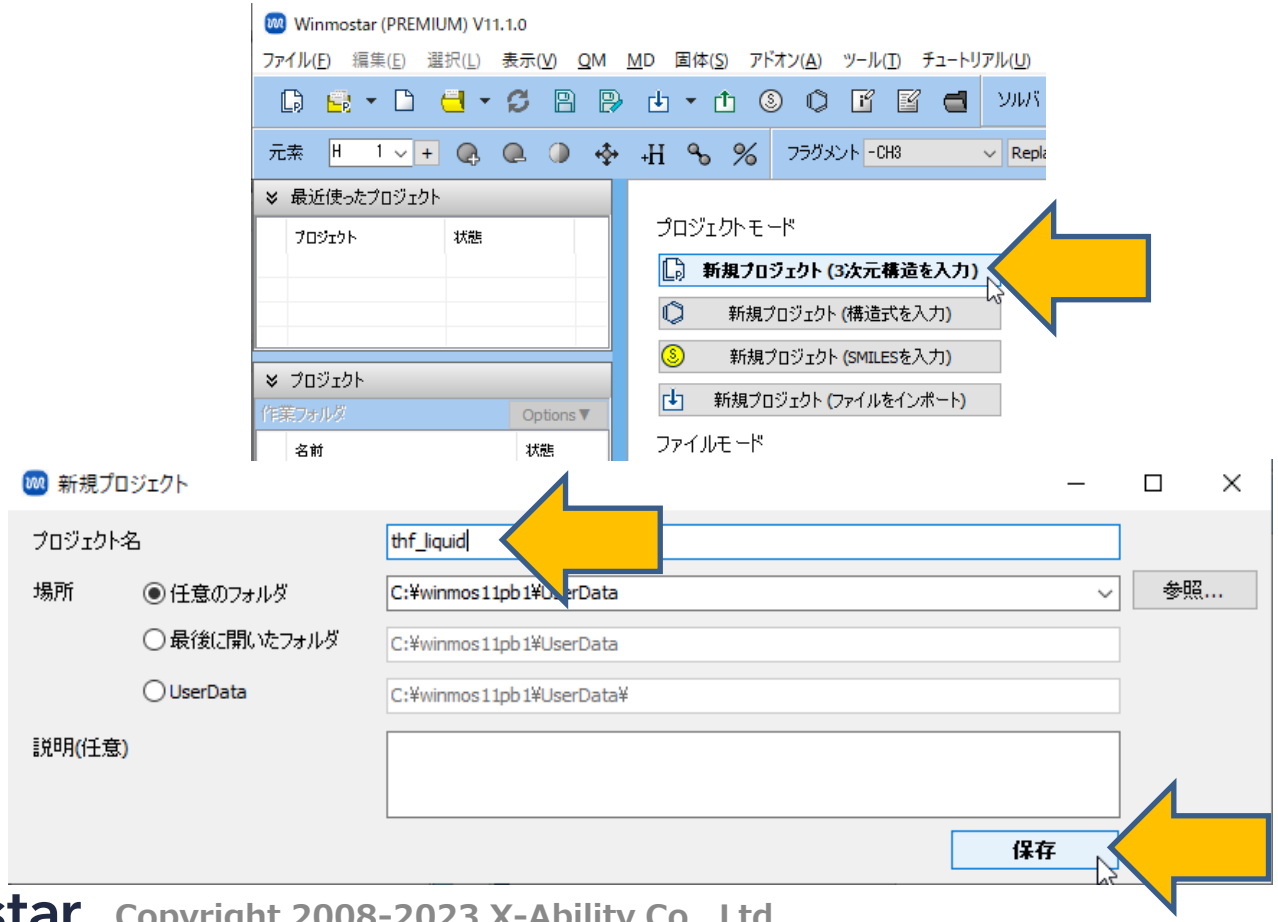

**プロジェクトモード** **V11新機能**
ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。
基本的にこのモードを推奨します。

**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。


Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# I. 系のモデリング　①1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。





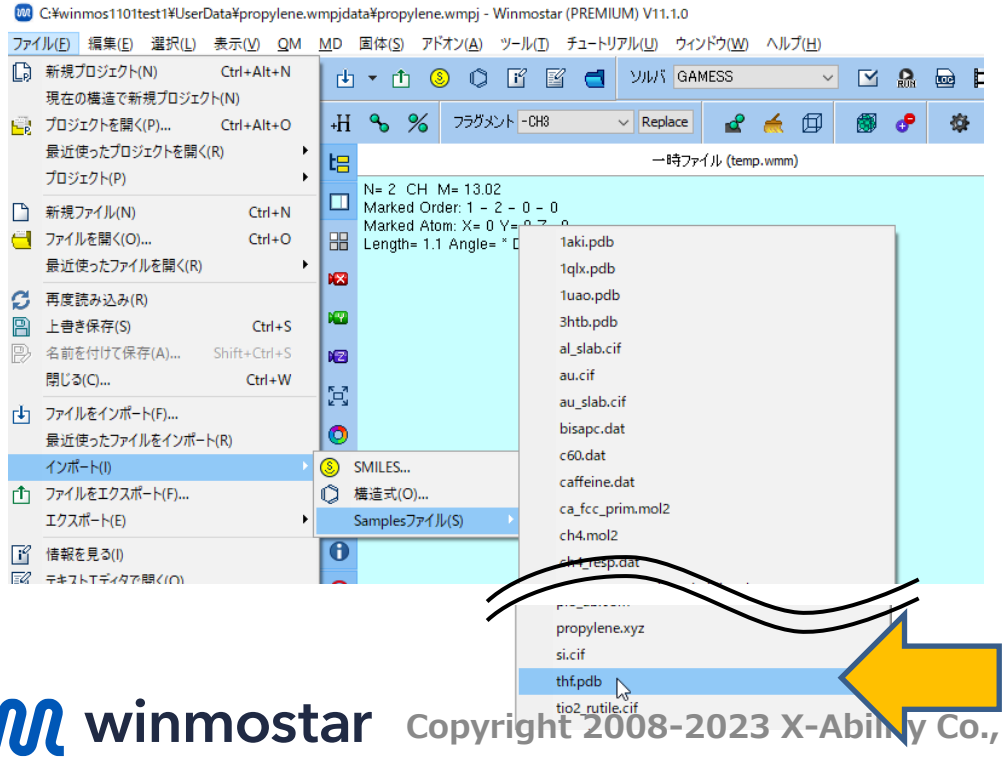
Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

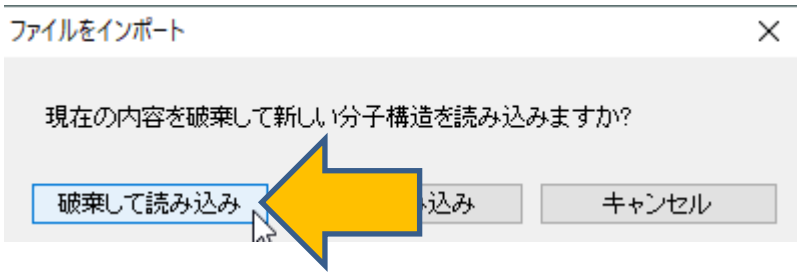
# I. 系のモデリング　①1分子の作成

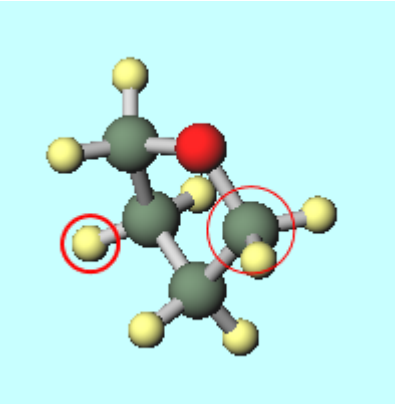
初期構造の作成方法の詳細は分子モデリング有機分子編チュートリアルを参照してください。

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。



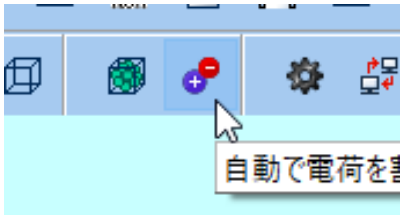



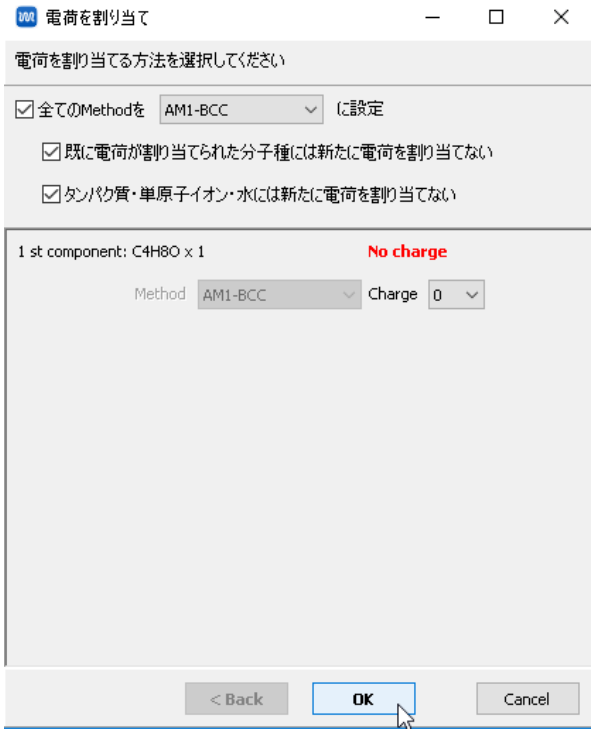



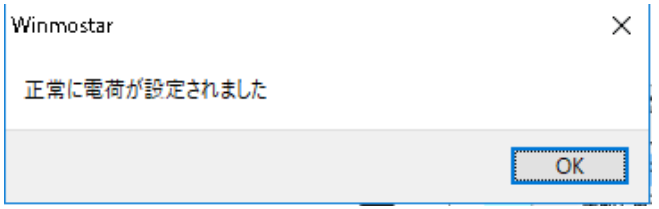

Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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**ウインドウで**OK**をクリックします。
3. 黒いウィンドウが何度が出現した後、「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。



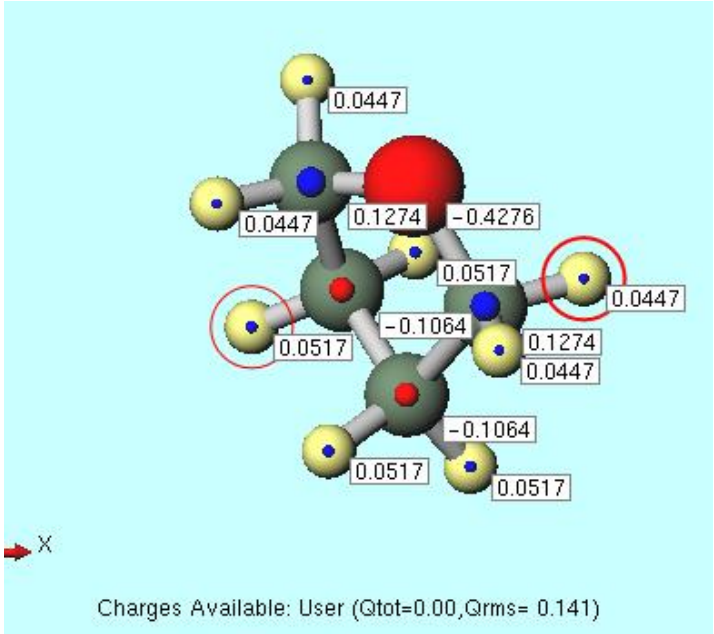



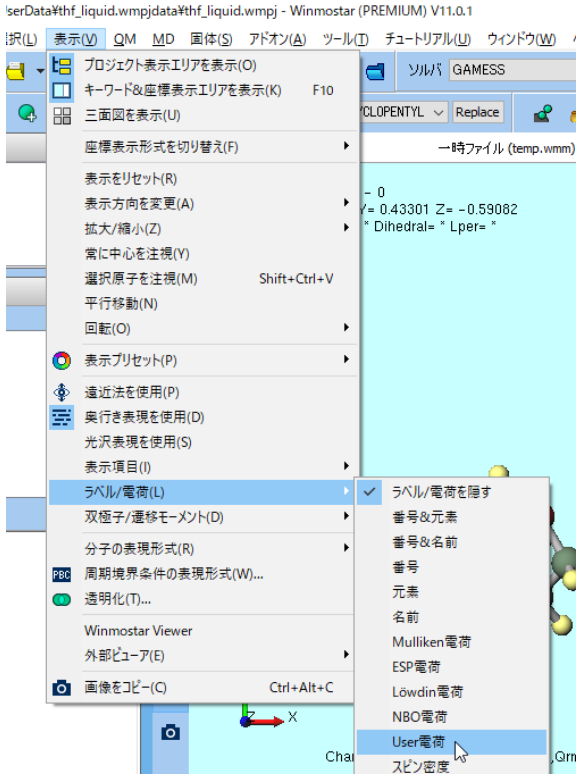


Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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。



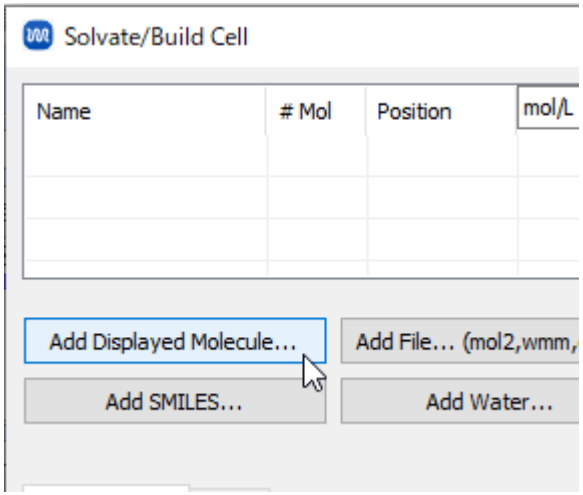



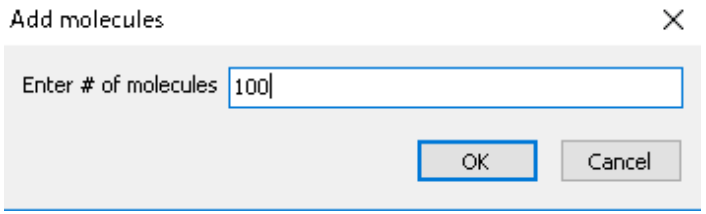


Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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。



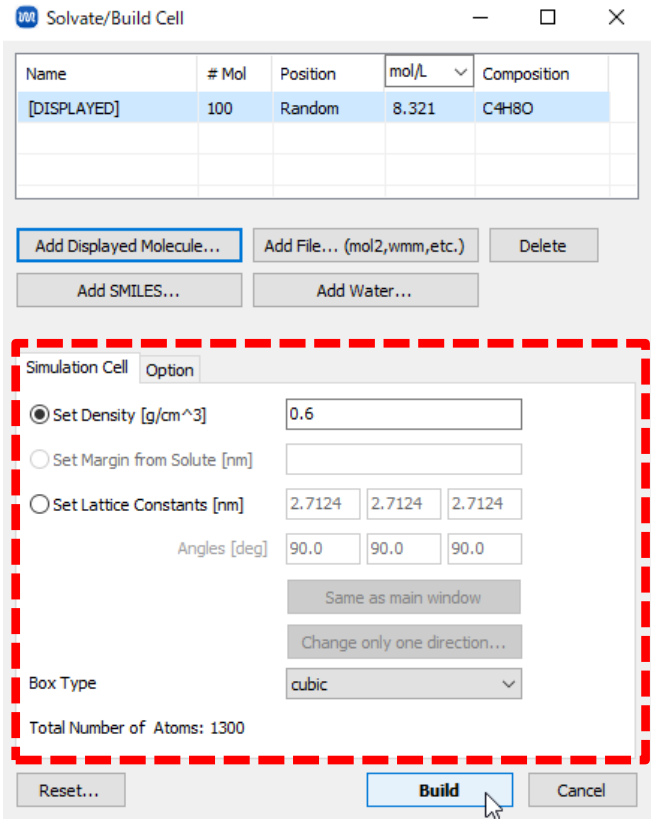



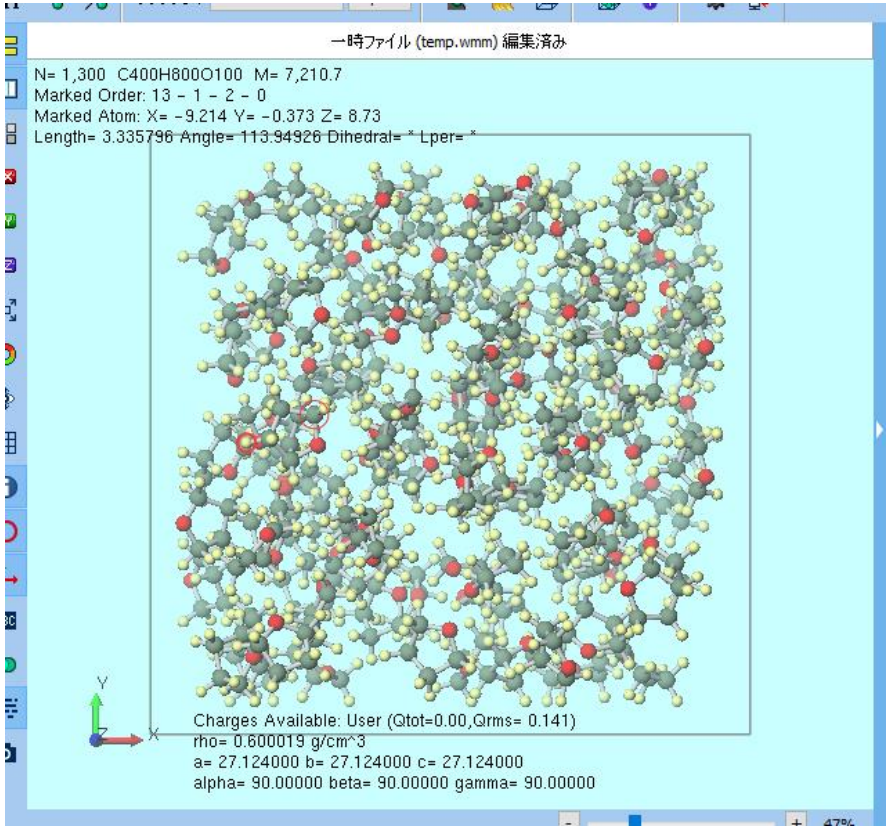


Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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イ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。



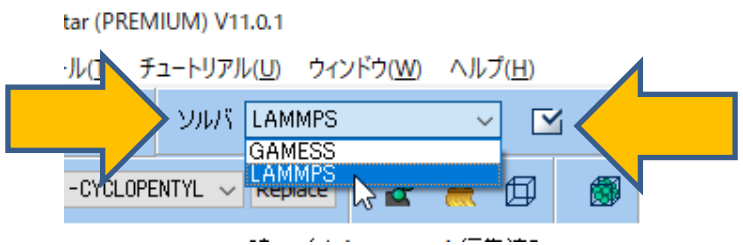



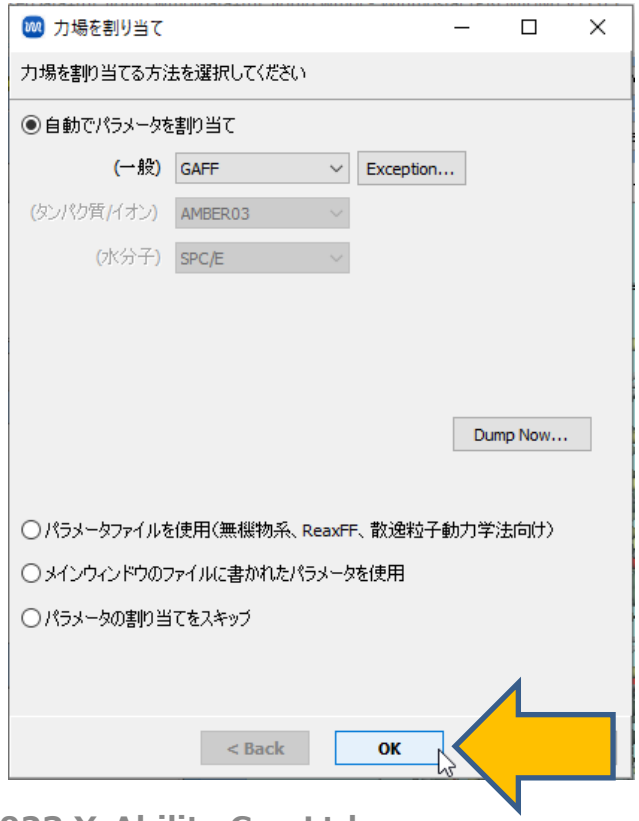


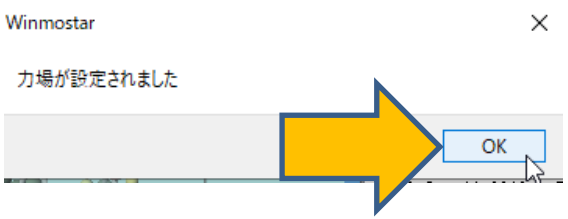
Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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**ウインドウが開いたら、右下の**OK**をクリックします。黒いターミナルウイ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。



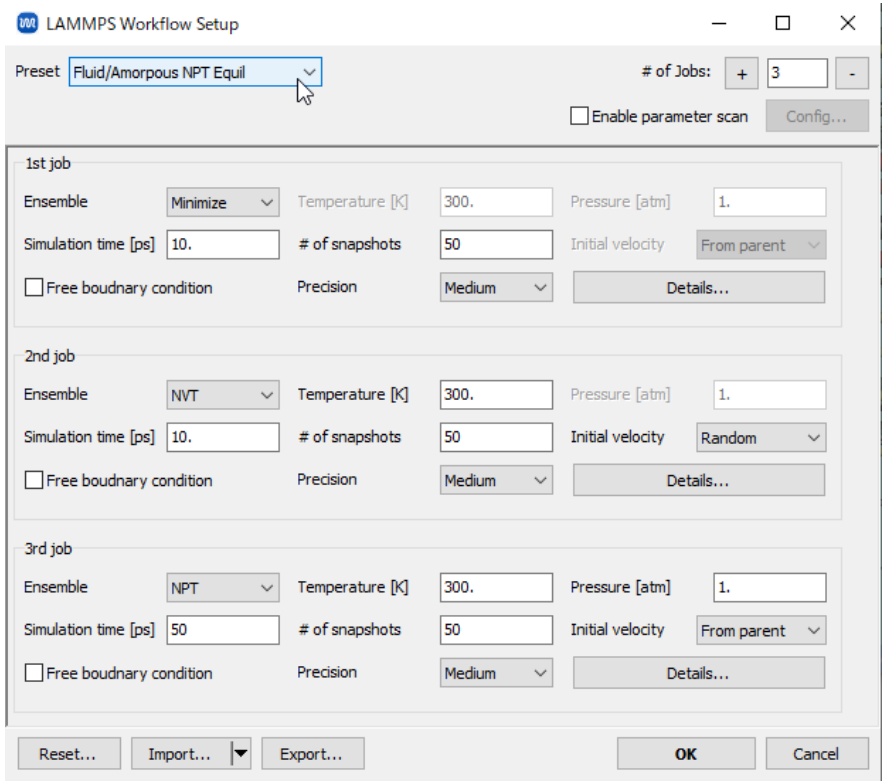





Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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）



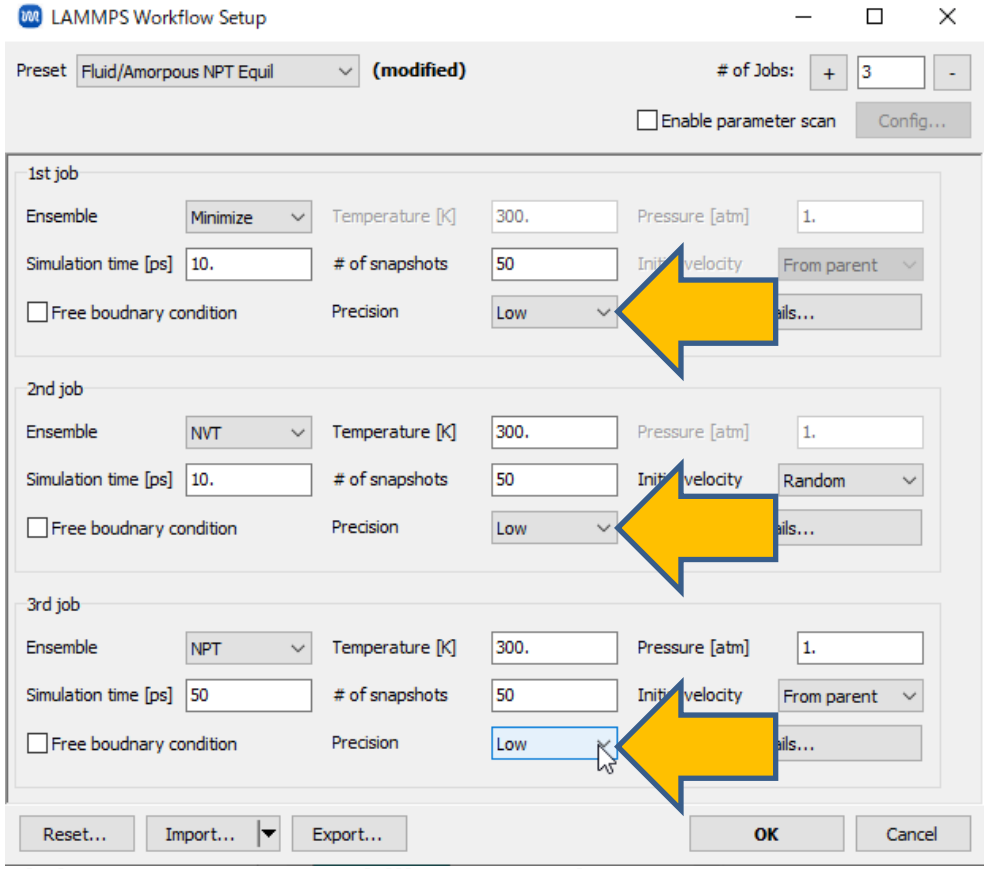


Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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が、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。

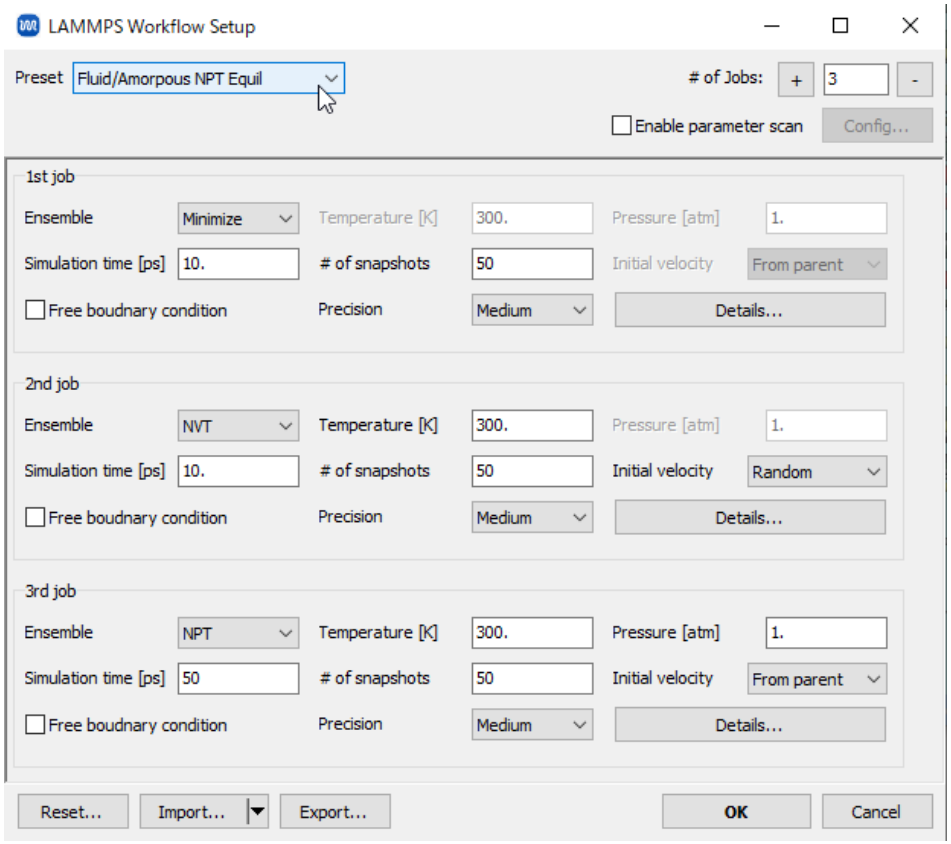


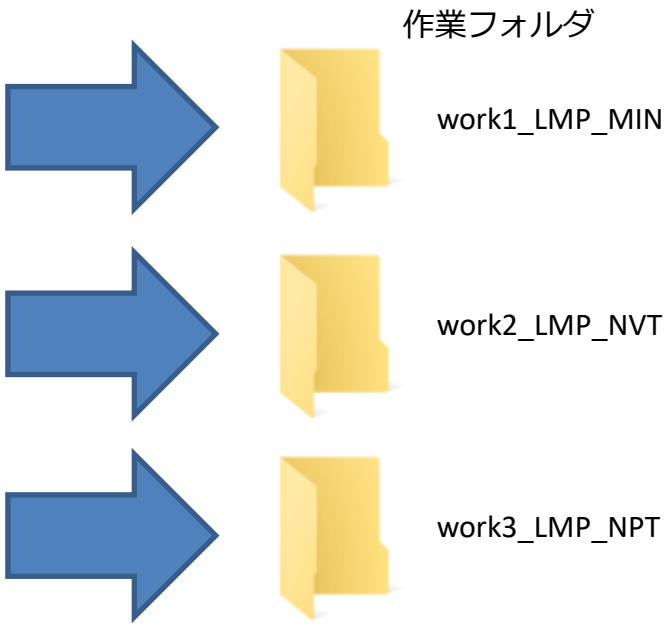


Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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。



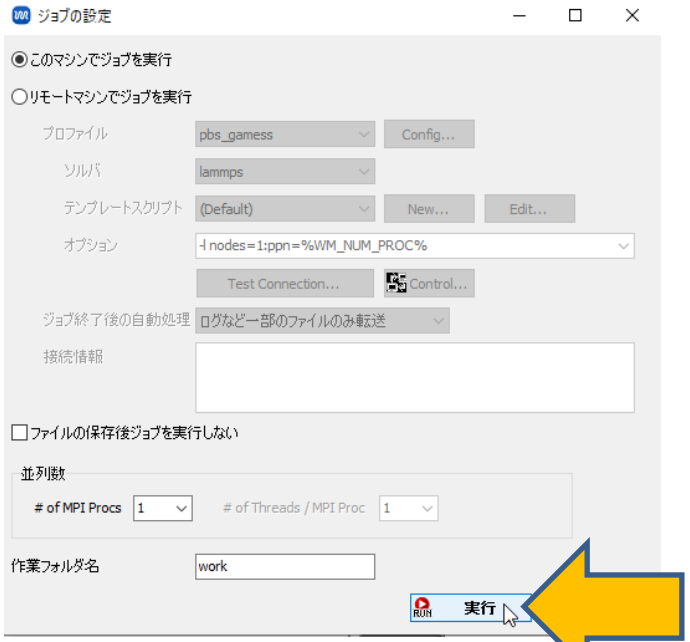


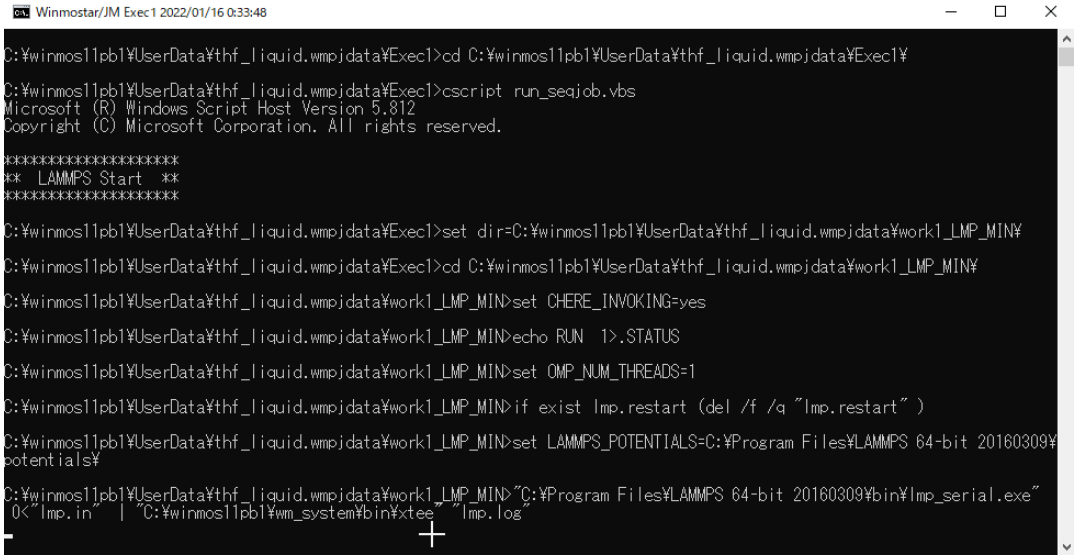
Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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。



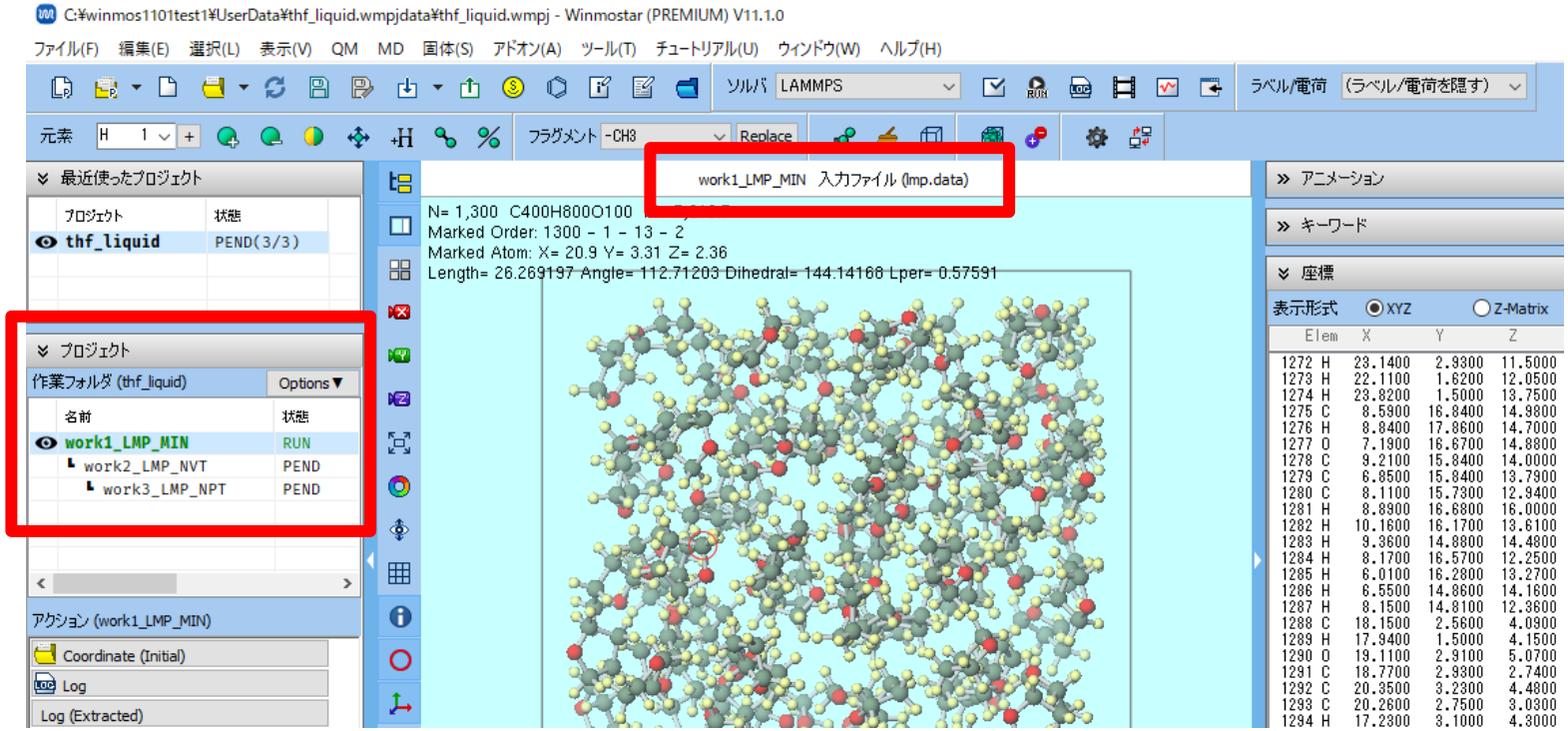




補足：入力ファイルを自分で修正したい場合やリモートサーバに自分でコピーして使用したい場合は、**ジョブの設定**ウィンドウで**ファイルの保存後ジョブを実行しない**にチェックを入れ**実行**をクリックします。保存後に計算を実行したい場合は**ファイル｜プロジェクト｜選択された作業フォルダ｜Run**をクリックします。


Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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。

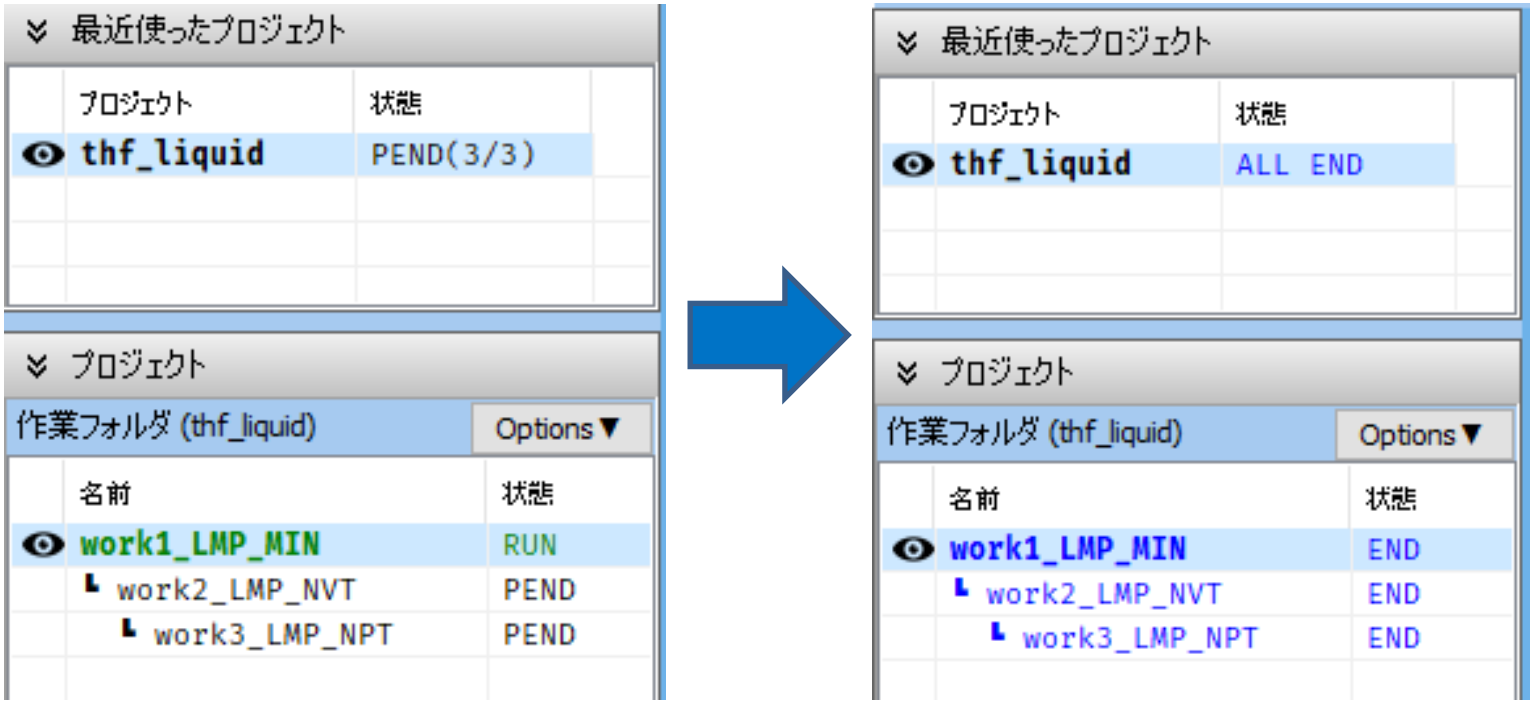




Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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。

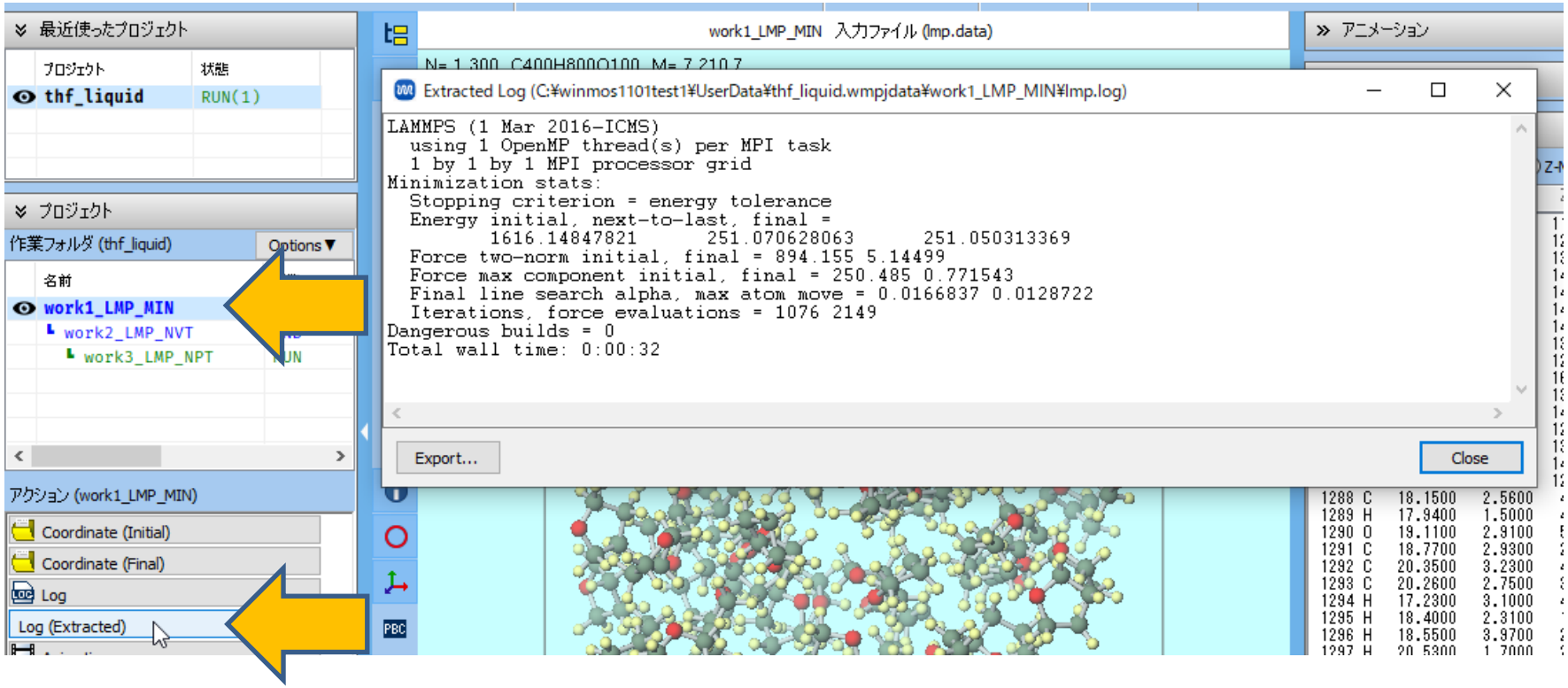




Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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エリート及び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。



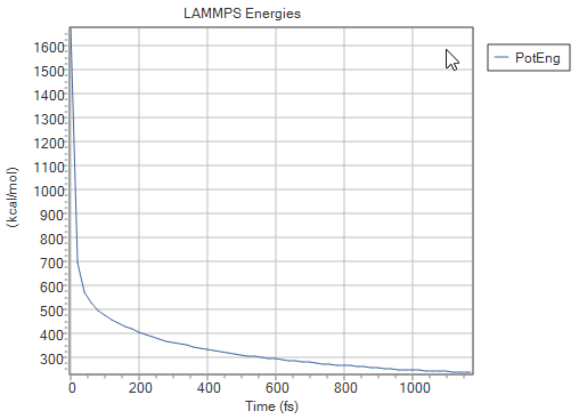


Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

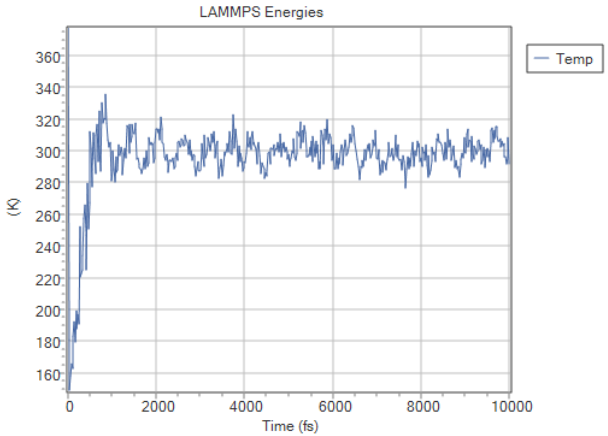
# 補足　平衡化計算における熱力学量の収束の確認

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。

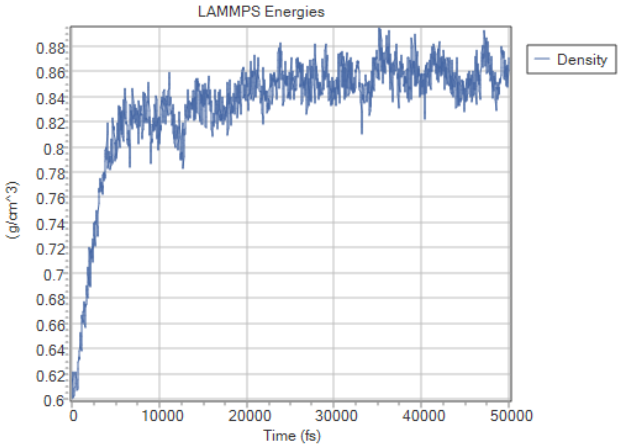
例：




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）



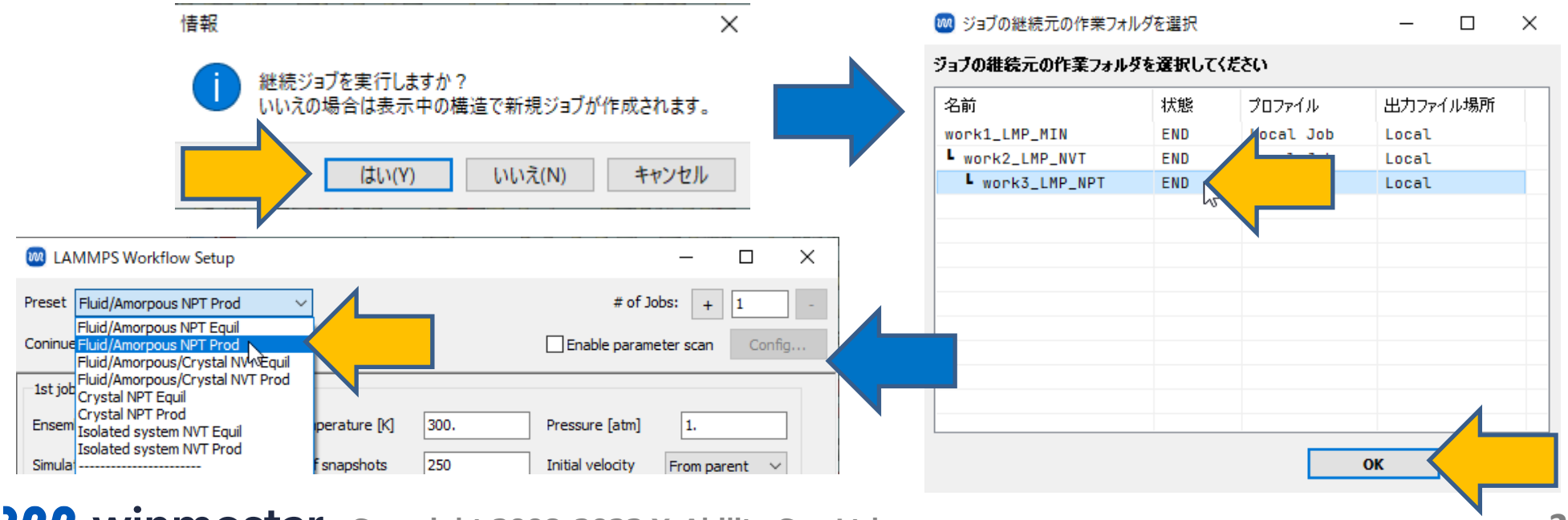

work3_LMP_NPT
（温度圧力一定MD）の
Density（密度）

※特に密度の収束は遅いことがあるので注意


Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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。



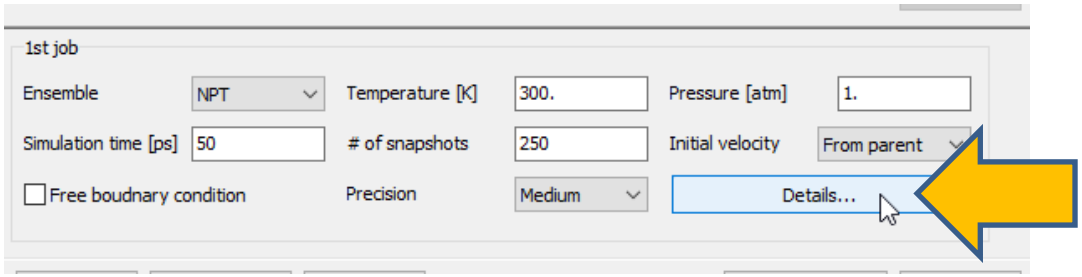


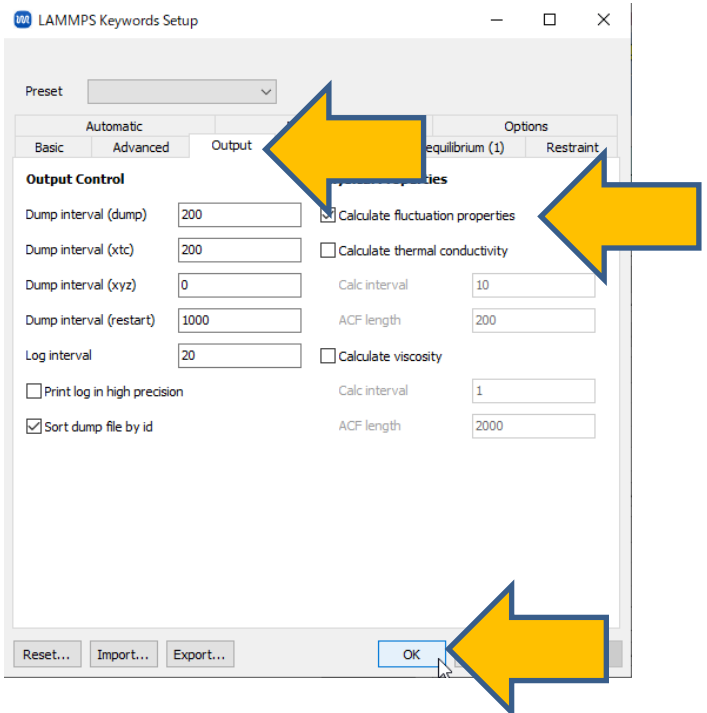
Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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。



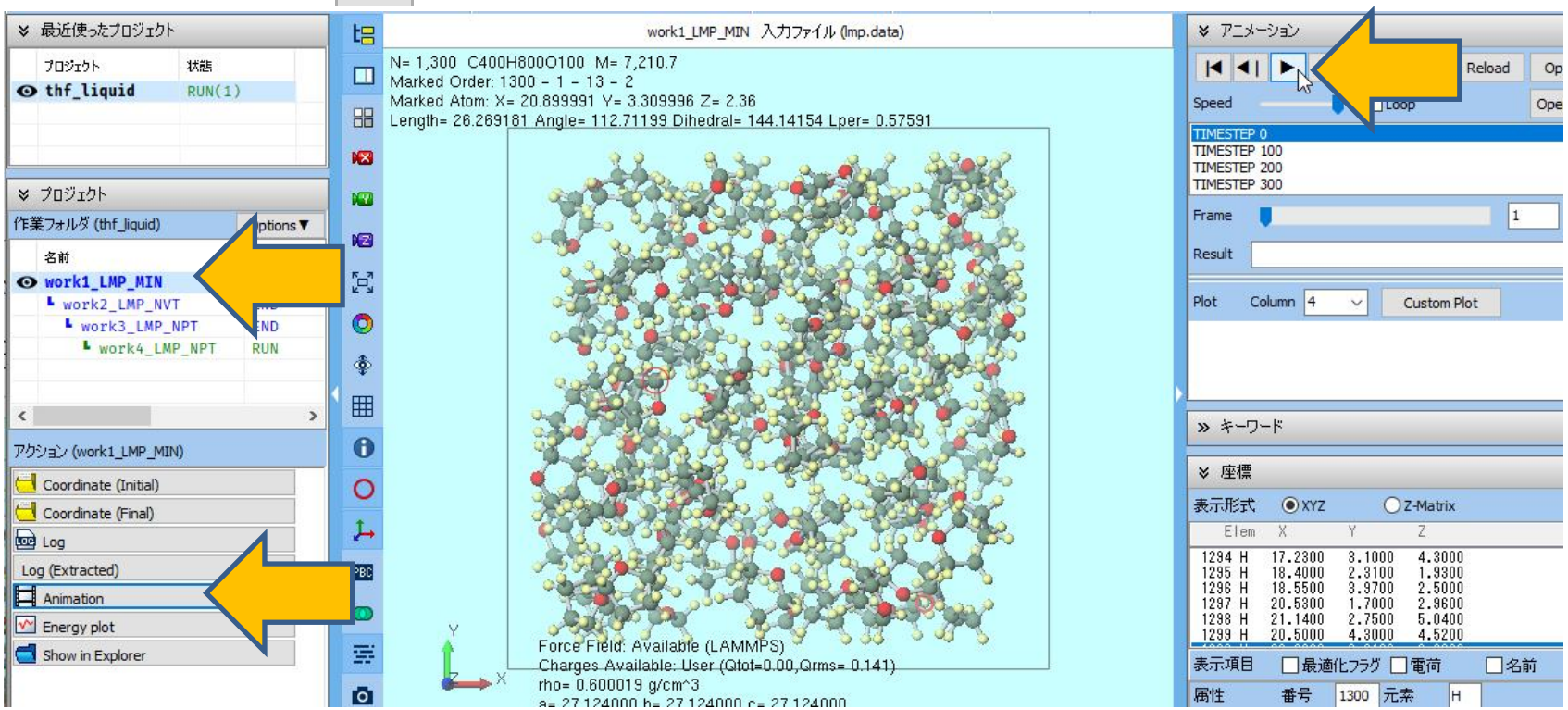


Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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。

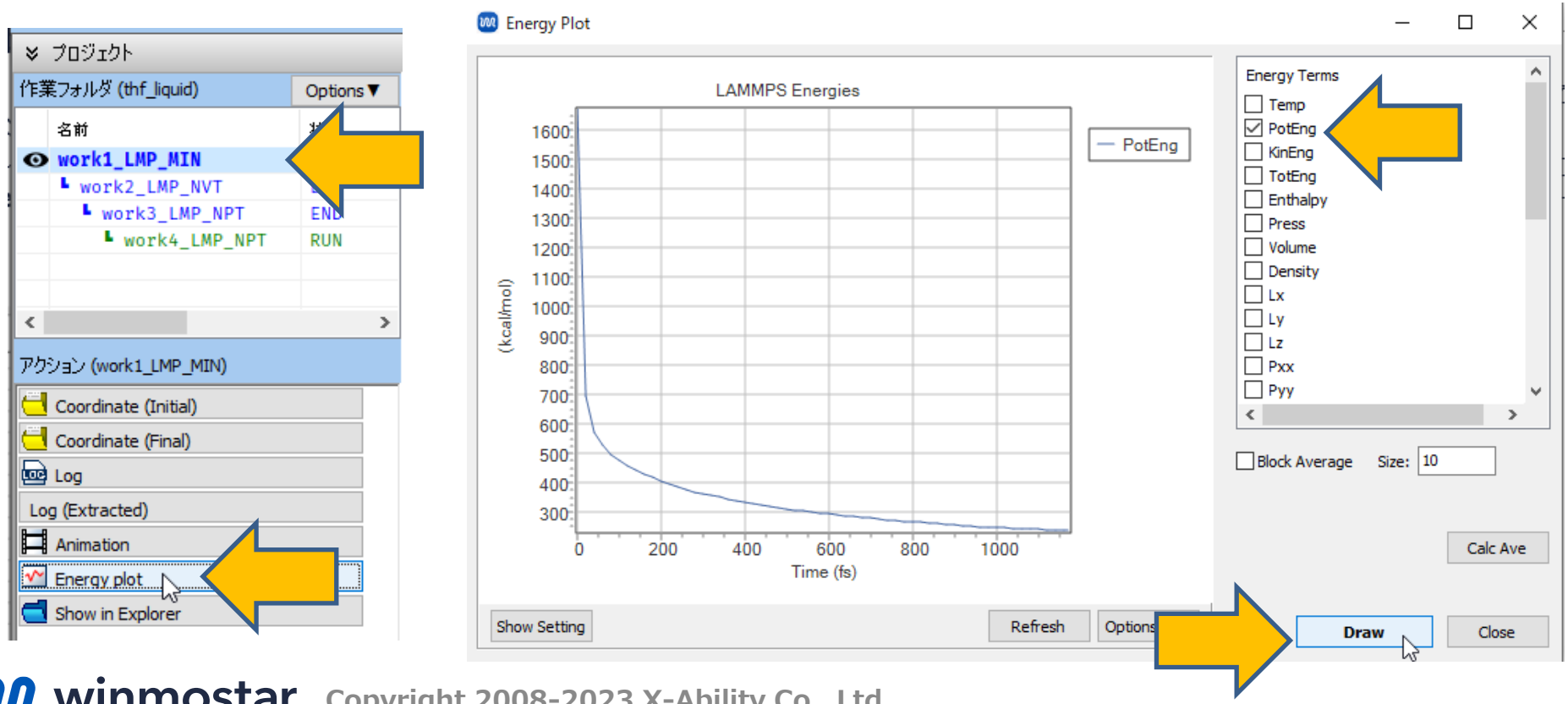




Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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。

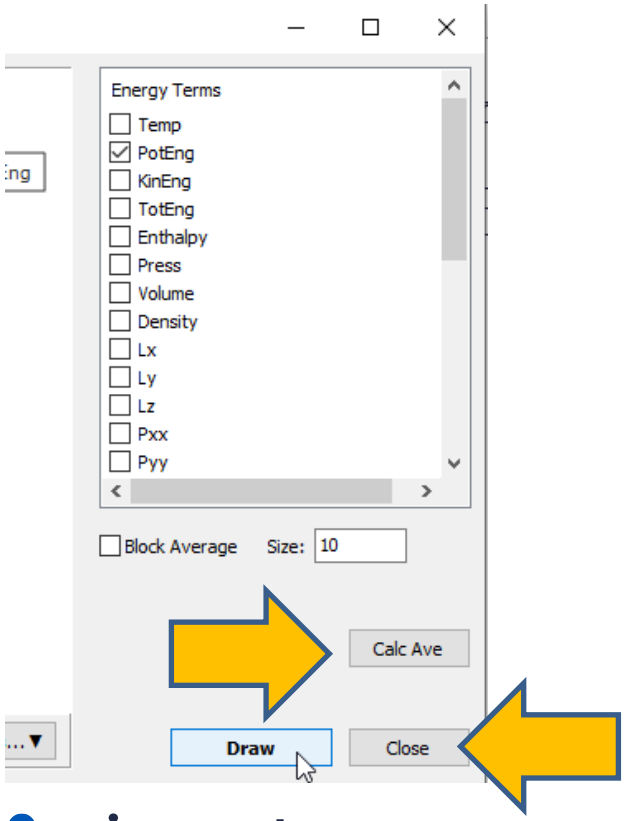




Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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。

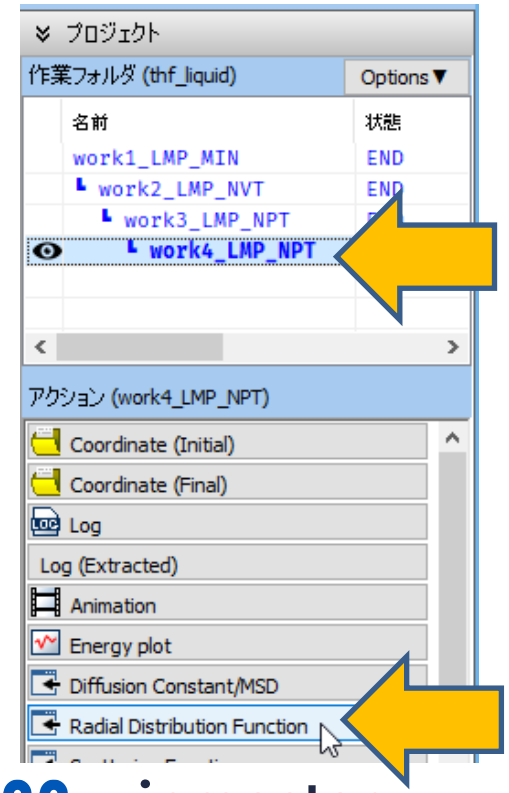


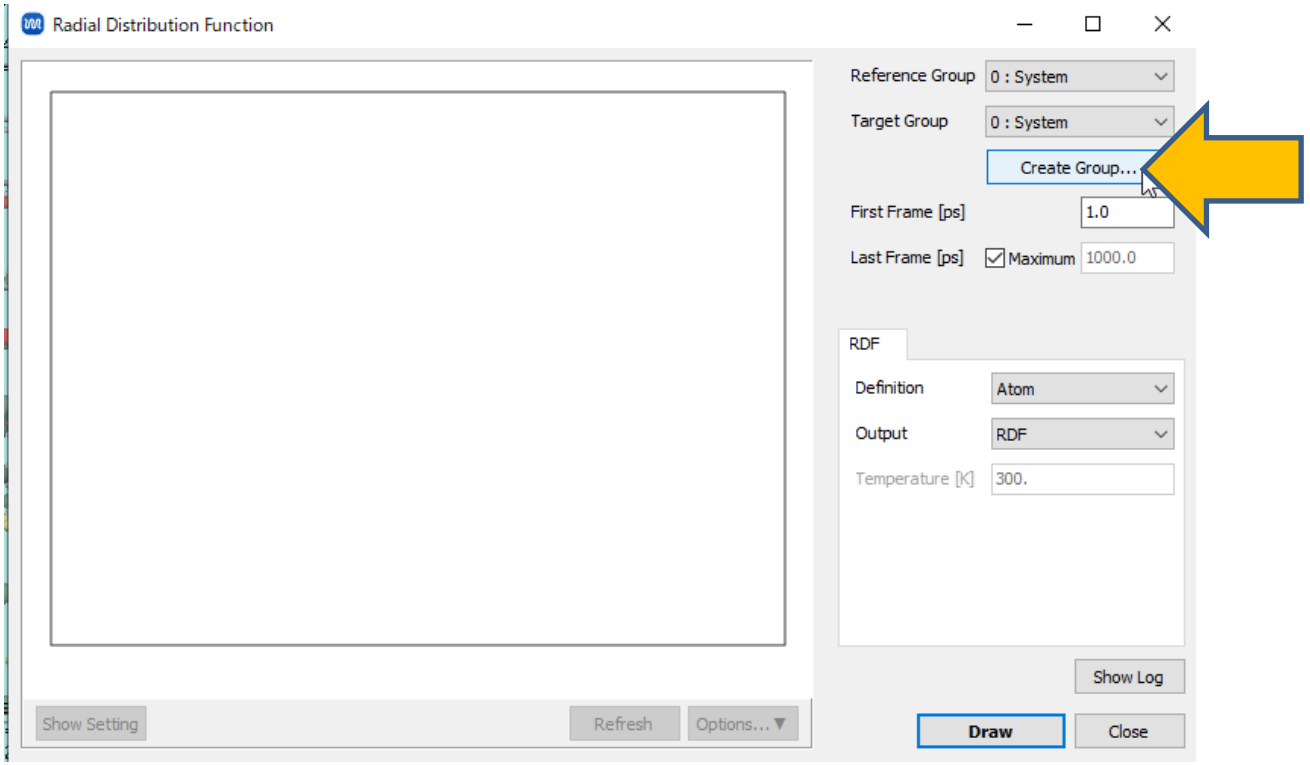
```
# data                    Average                    Standard error
Temp (K)                  0.000000000000000          0.000000000000000
PotEng (kcal/mol)         348.391234500000190        25.170539185458522
KinEng (kcal/mol)         0.000000000000000          0.000000000000000
TotEng (kcal/mol)         348.391234500000190        25.170539185458522
Enthalpy (kcal/mol)       200.348655016666660        75.040080094477274
Press (atm)               -508.685721616666620       177.661581027747230
Volume (A^3)              19955.435000000032000      3.75728835565913E-012
Density (g/cm^3)          0.599994420000001          1.00330423315483E-016
Lx (A)                    27.124000000000019         2.75192018236753E-015
Ly (A)                    27.124000000000019         2.75192018236753E-015
Lz (A)                    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)         -767.631870333333250       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)          1116.023103333333300       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
```


Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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。



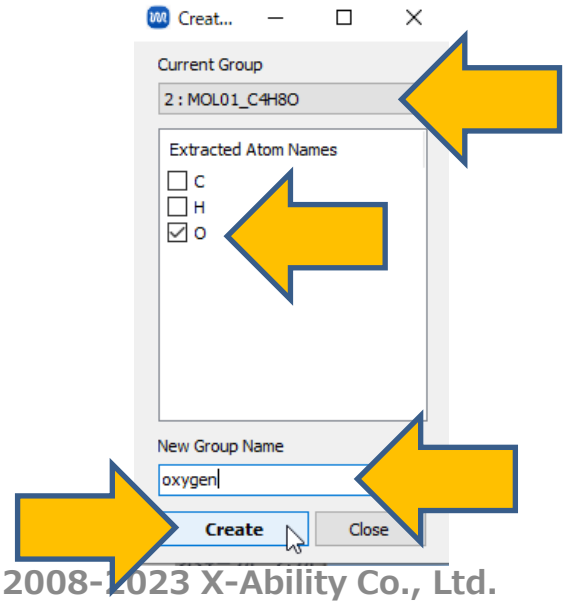





Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# III.結果解析　動径分布関数

1. **Create Group**ウインドウにおいて、**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. ターミナルウインドウが出現し処理が終了したら**Close**をクリックします。

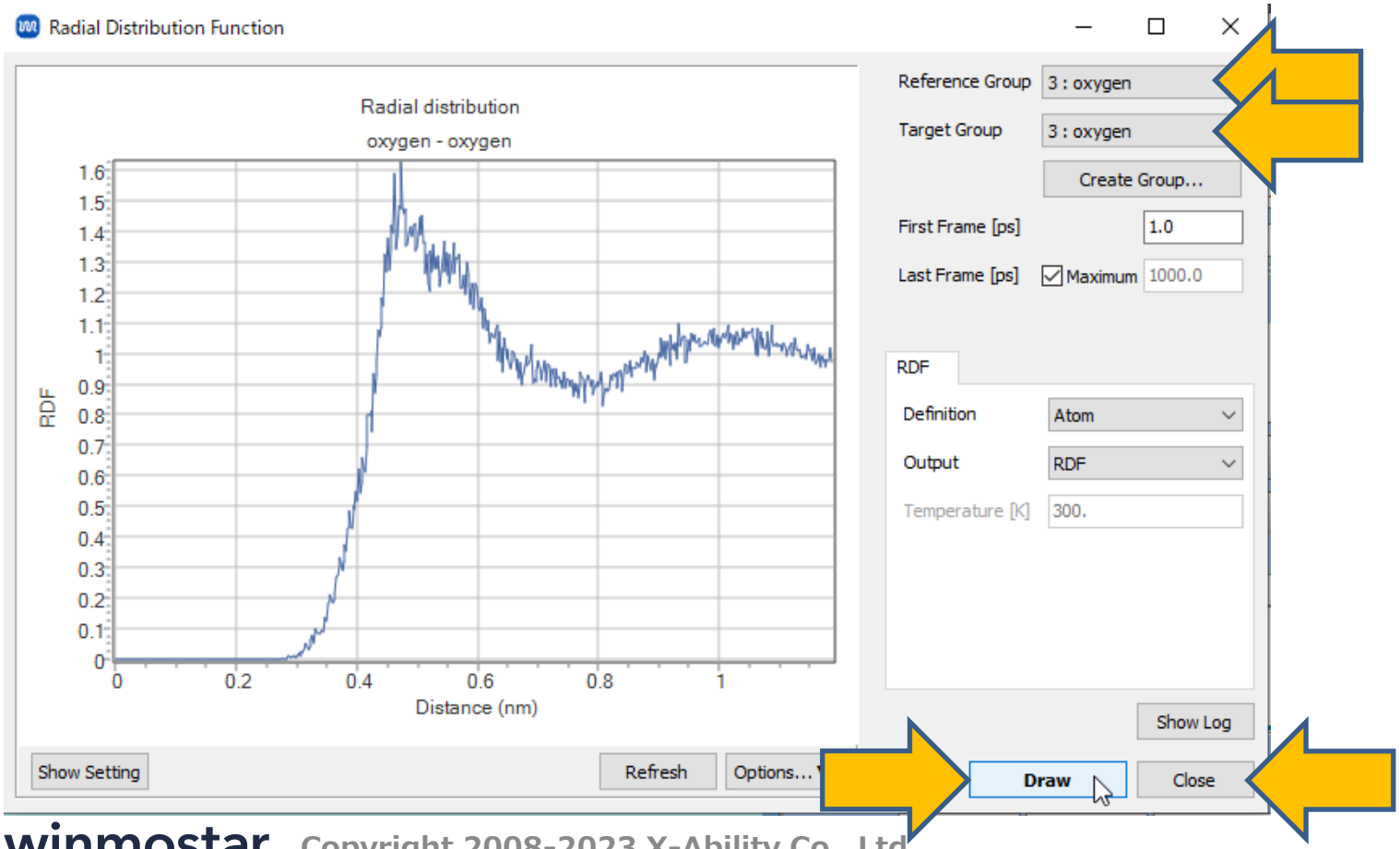




Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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。





Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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）

Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.

# 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


Copyright 2008-2023 X-Ability Co., Ltd.