

 winmostar チュートリアル

LAMMPS

伸長計算（ポリマー）

V11.1.1

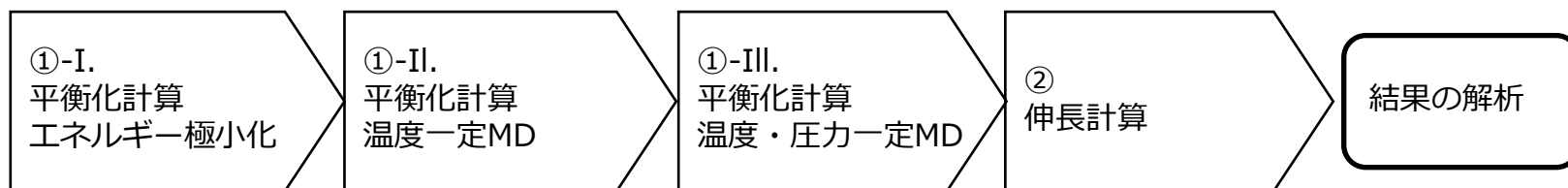
2022年4月28日 株式会社クロスアビリティ

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

- ポリエチレン溶融体の伸長過程を計算し、ひずみ-応力の取得を行います。処理のフローを以下に示します。



注意点：

- 分子の種類、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。
- 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。
- 重合度（鎖長）、分子数、伸長速度、圧力制御（ポアソン比）も結果に影響を与えます。
- チュートリアルという性質上、ここではポリマー系の平衡化に十分なステップ数の計算を実施しません。

動作環境設定

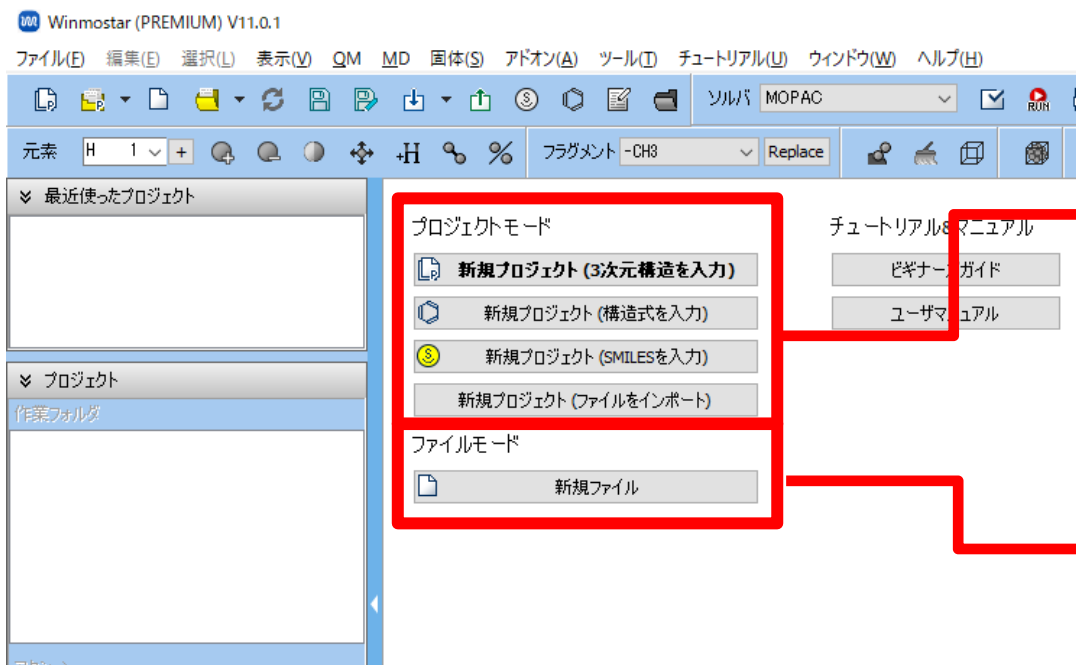
- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、[CygwinWM 2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定](#)してください。
 - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版LAMMPSが同梱されています。
- 上記に該当しない場合、または[推奨バージョン](#)以外のLAMMPSを利用したい方は、別途[Windows版LAMMPSのインストールと環境設定](#)が必要です。

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。

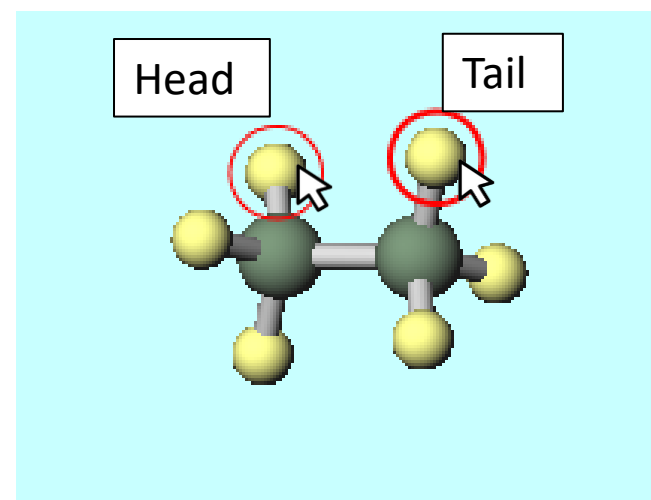
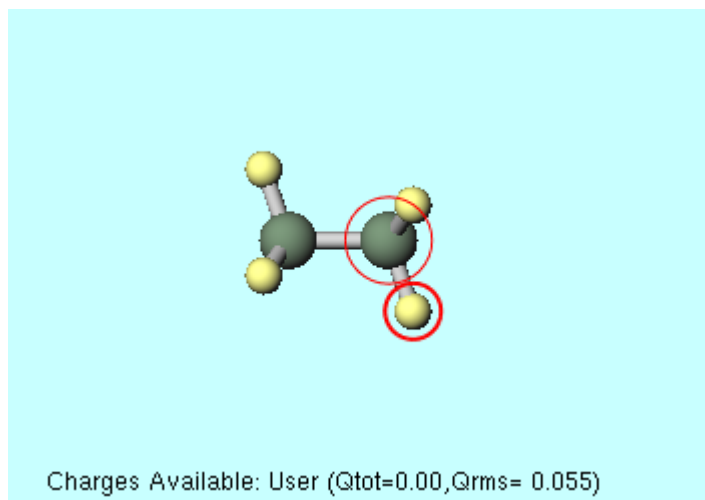
ファイルモード

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「pe_elong」と入力して**保存**をクリックします。
2. ポリエチレンの繰り返し単位（エタン、 C_2H_6 ）を作成します。
3.  **自動で電荷を割り当て**をクリックし**OK**をクリックします。
4. 「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。
5. 重合した際に隣の繰り返し単位と結合する2箇所（HeadとTail）を続けてクリックします。



I. 系のモデリング

1. **MD | ポリマー | 繰り返し単位登録**をクリックし**OK**をクリックします。
2. **Enter name**で「pe」と入力し**OK**をクリックします。
3. 「…pe.wmo saved successfully.」と表示されたら**OK**をクリックする。
4. **MD | ポリマー | ホモポリマービルダ**をクリックし以下のように設定します。
 - **Degree of Polymerization**を「50」に変更
 - **Repeat Unit**に「pe」を選択
5. **Build**をクリックし**Enter polymer name**で「pe50」と入力し**OK**をクリックします。
6. 「…pe50.wpo saved successfully.」と表示されたら**OK**をクリックします。
7. **Close**をクリックし**Homo Polymer Builder**ウィンドウを閉じます。

Homo Polymer Builder

Degree of Polymerization: 50

Repeat Unit: pe

Display Delete

Tacticity

☒ Isotactic
☐ Syndiotactic
☐ Atactic Racemo Ratio: 0

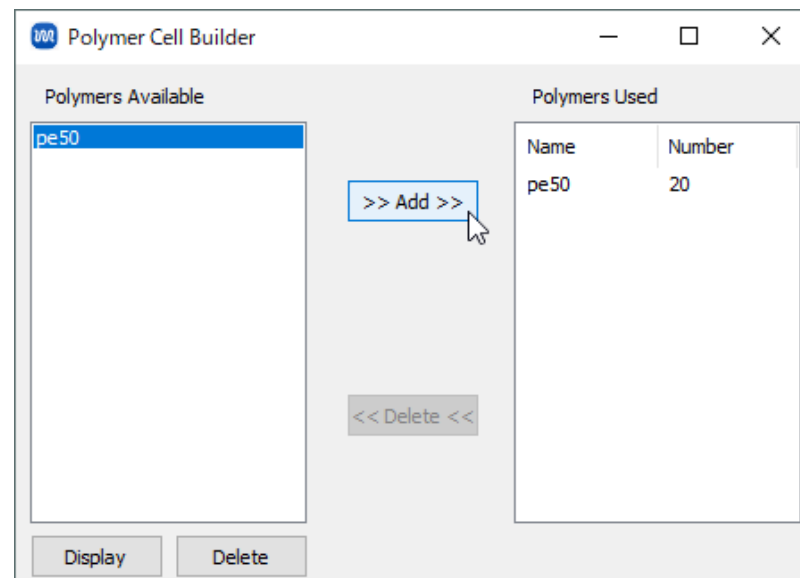
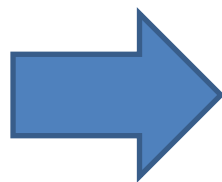
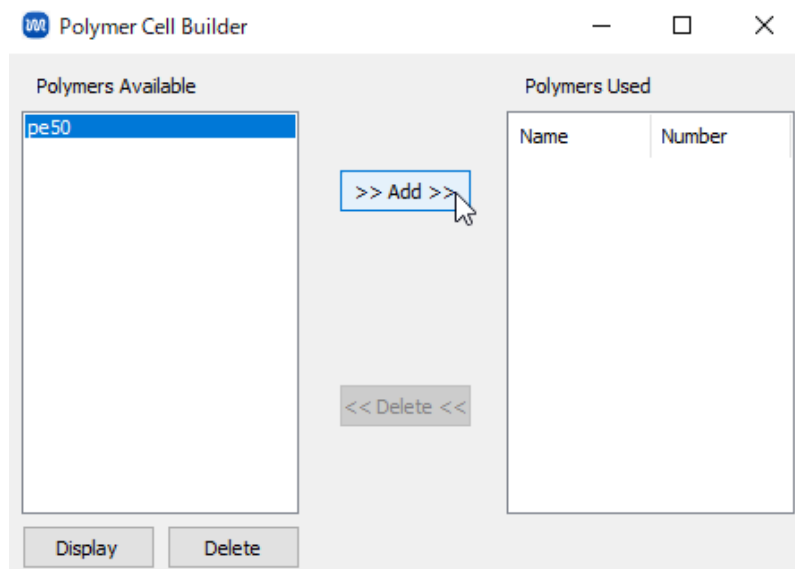
Head/Tail Configuration

☒ Head to Tail ☐ Head to Head

Build Close

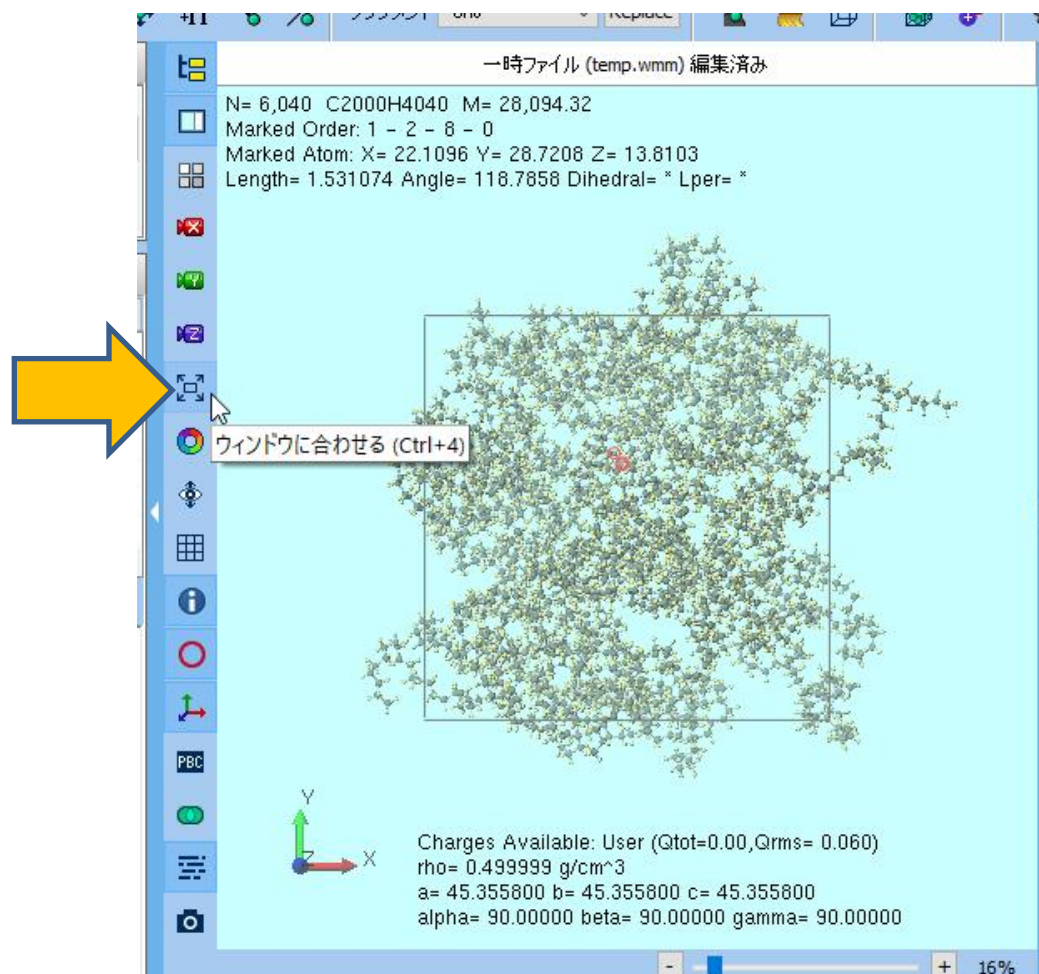
I. 系のモデリング

1. MD | ポリマー | ポリマーセルビルダをクリックします。
2. **Polymers Available**から**pe50**を選択し、**Add**をクリックします。
3. **Enter Value**で「20」と入力し**OK**をクリックします。
3. **Polymers Used**に「pe50 20」と表示されたのを確認し、**Build**をクリックします。
4. 黒いウィンドウが出現し数十秒程度ポリマーの構築処理が流れた後、「Successfully generated polymer system.」と表示されたら**OK**をクリックします。
5. **Close**をクリックし**Polymer Cell Builder**ウィンドウを閉じます。



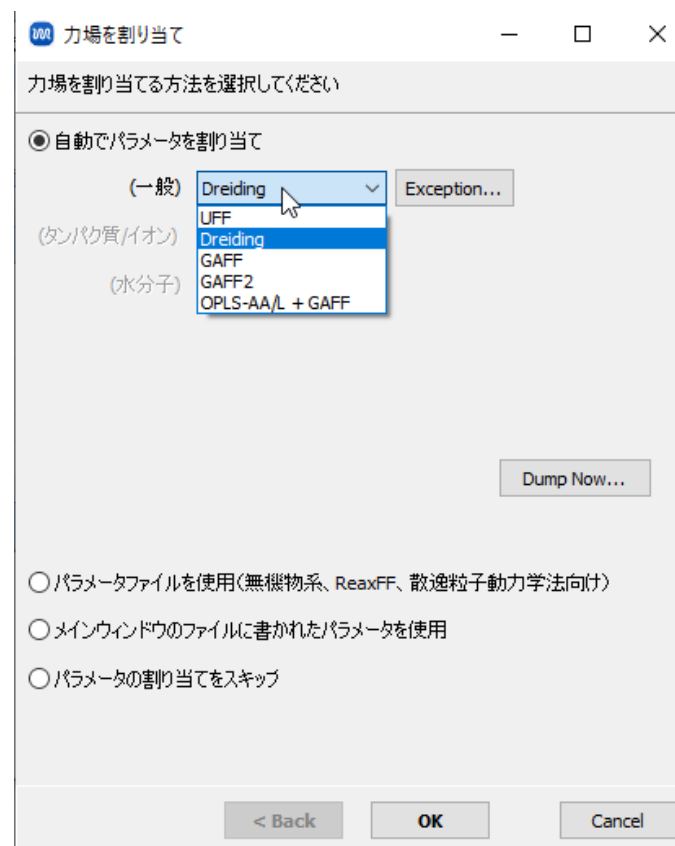
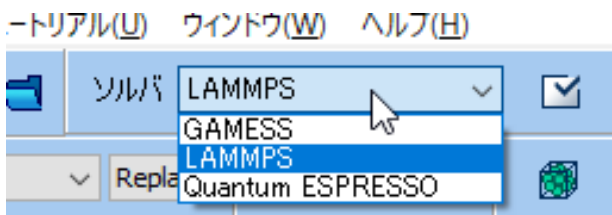
I. 系のモデリング

1.  ウィンドウに合わせるをクリックし、系の全体を確認します。



II. 計算の実行

1. ソルバで「LAMMPS」を選択し、☒ (ワークフロー設定) をクリックします。
2. 自動でパラメータを割り当ての(一般)をDreidingに変更し、右下のOKをクリックします。
3. 数秒処理が流れた後「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。



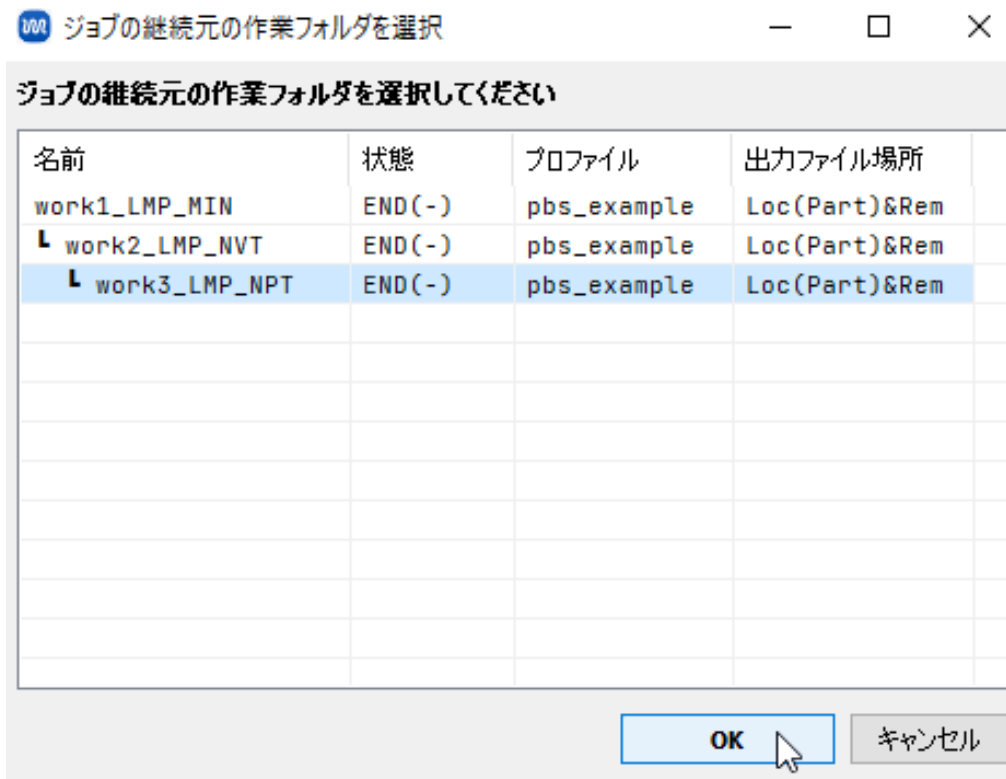
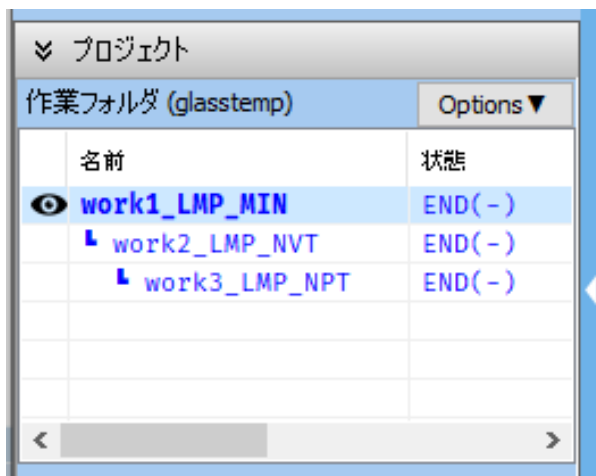
II. 計算の実行

1. LAMMPS Workflow Setupウィンドウで以下のように設定を変更します。
 1. 2nd jobのTemperatureを「500」に変更
 2. 3rd jobのTemperatureを「250」に変更
2. 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。
3. 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。

The screenshot shows the 'LAMMPS Workflow Setup' window. At the top, the 'Preset' is 'Fluid/Amorphous NPT Equilibration' (modified) and the '# of Jobs' is 3. Below this are three job configuration sections. The 1st job has Ensemble 'Minimize', Temperature 300, Pressure 1, Simulation time 10, # of snapshots 50, and Precision 'Medium'. The 2nd job has Ensemble 'NVT', Temperature 500, Pressure 1, Simulation time 10, # of snapshots 50, and Precision 'Medium'. The 3rd job has Ensemble 'NPT', Temperature 250, Pressure 1, Simulation time 50, # of snapshots 50, and Precision 'Medium'. At the bottom, there are buttons for 'Reset...', 'Import...', 'Export...', 'OK', and 'Cancel'. A mouse cursor is pointing at the 'OK' button.

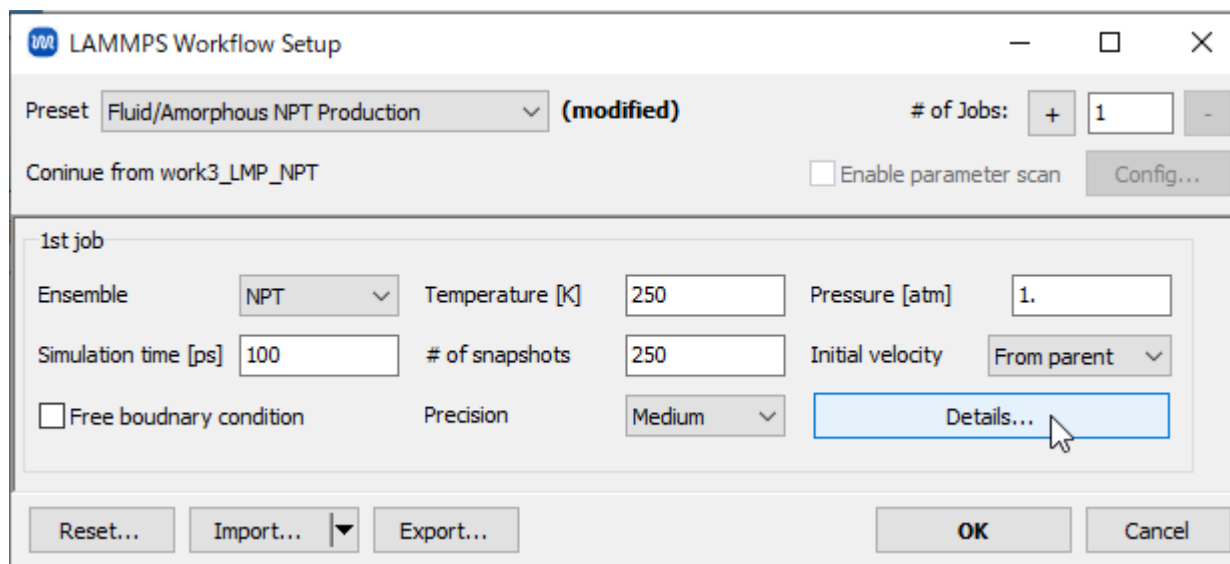
II. 計算の実行

1. work1_LMP_MINからwork3_LMP_NPTまでの3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. work3_LMP_NPTを選択し**OK**をクリックします。



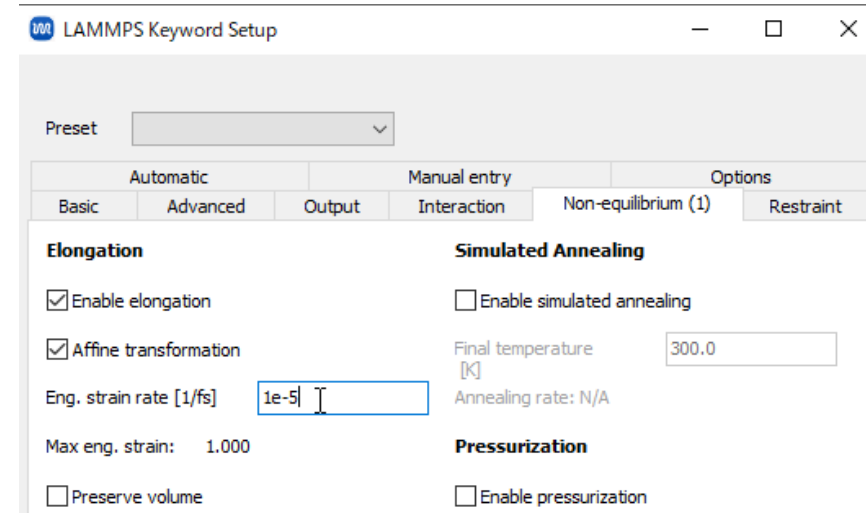
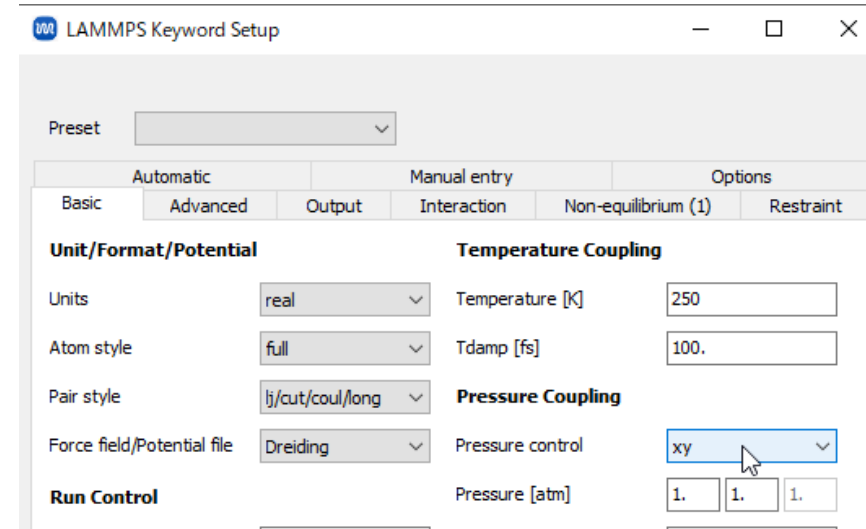
II. 計算の実行

1. **Preset**を「Fluid/Amorphous NPT Production」に変更します。
2. 以下のように設定を変更します。
 1. **1st job**の**Temperature**を「250」に変更
 2. **1st job**の**Simulation time**を「100」に変更
3. 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**の**Precision**を「Low」に変更します。
4. **Details...**をクリックします。



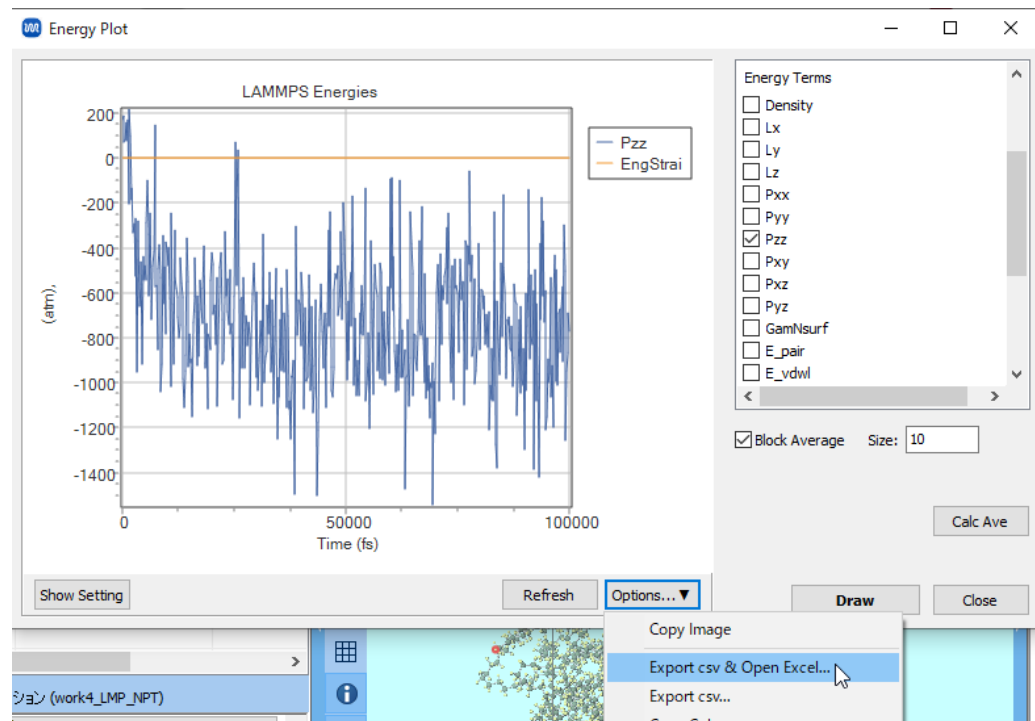
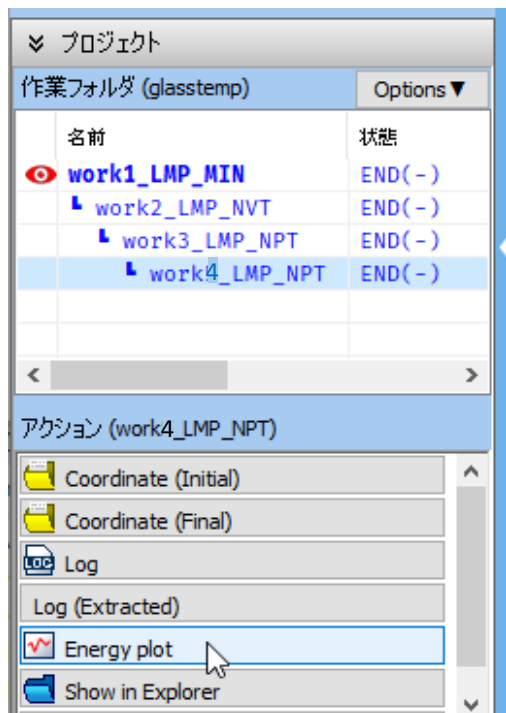
II. 計算の実行

1. LAMMPS Keyword SetupウィンドウでBasicタブのPressure controlを「xy」に変更します。
2. Non-equilibrium(1)タブに移動し以下のように設定を変更します。
 1. Enable elongationをチェック
 2. Eng. Strain Rateを「1e-5」に変更
3. OKをクリックしてLAMMPS Keyword Setupウィンドウを閉じます。
4. LAMMPS Workflow SetupウィンドウでOKをクリックします。
5. 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

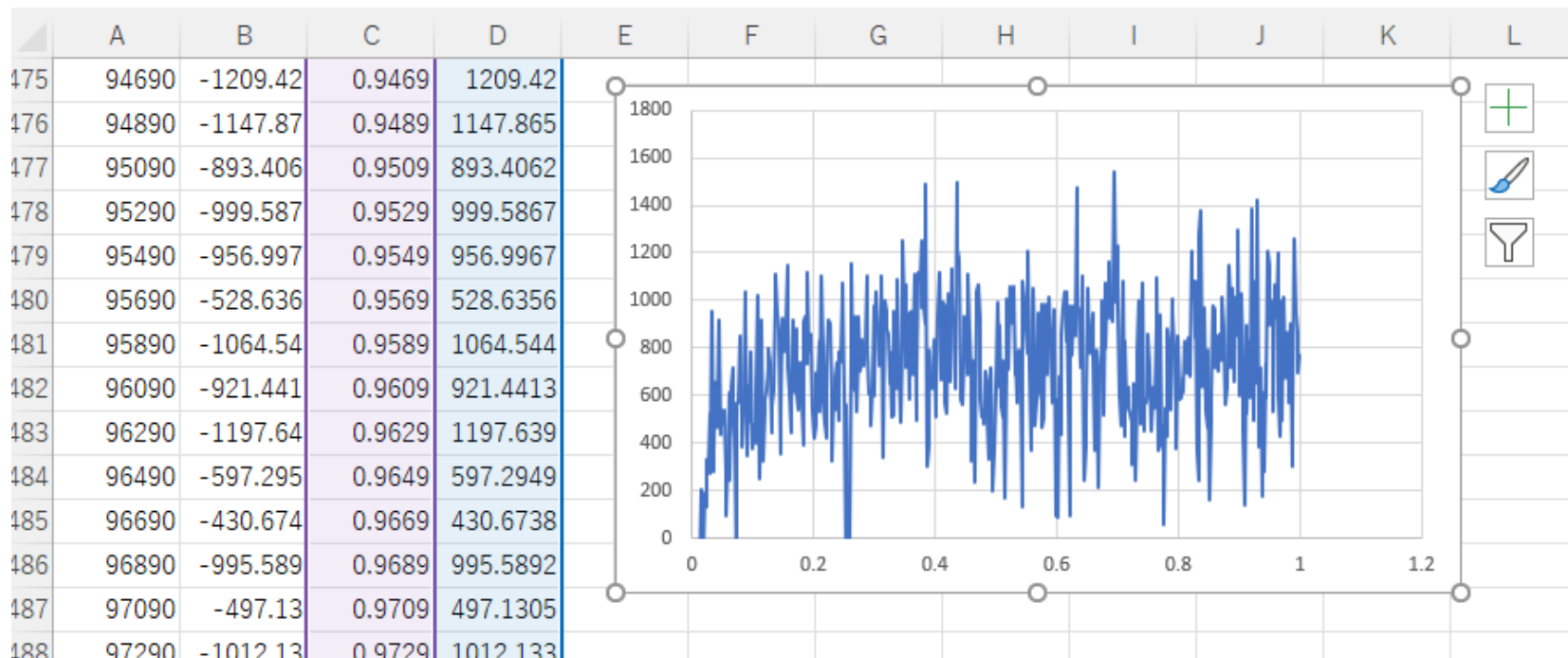
1. work4_LMP_NPTの作業フォルダの状態が**END**または**END(-)**に変化したら、「work4_LMP_NPT」をクリックし、**アクション**で  **Energy plot**をクリックします。
2. **Energy Terms**にて**Pzz**と**v_EngStrei**にチェックを入れます。また**Block Average**にチェックを入れ**Size**を**10**に変更します。
3. **Draw**をクリックし、**Options | Export csv & Open Excel**をクリックします。
4. 名前を付けて保存で保存をクリックします。



III.結果解析

1. 3列目と, 2列目に-1を掛けた列 (ここではD列) をプロットします。これはひずみ-応力曲線 (S-S曲線) に相当します。

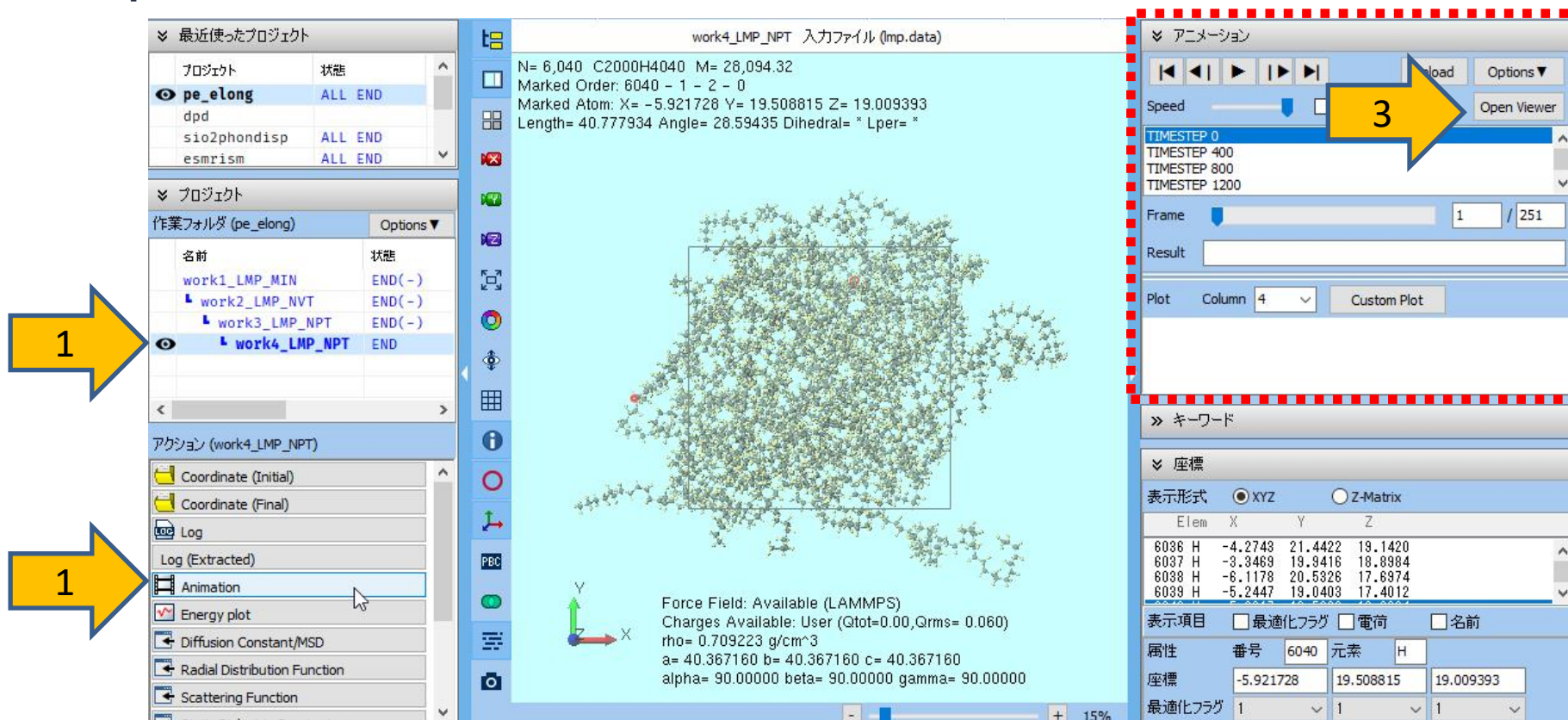
(ここでは縦軸の下限は0としてプロットしました)



参考文献: Hossain, D., Tschopp, M.A., Ward, D.K., Bouvard, J.L., Wang, P., Horstemeyer, M.F., Polymer, 51 (2010) 6071-6083.

III.結果解析

1. Winmostarに戻り、**Energy Plot**ウィンドウは**Close**をクリックして閉じます。
2. **作業フォルダ**の「work4_LMP_NPT」をクリックし、**アクション**で  **Animation**をクリックします。数秒程度処理が流れた後、アニメーションを操作するエリアが出現します。
3. **Open Viewer**をクリックします。



The screenshot displays the Winmostar interface with the following components:

- 最近使ったプロジェクト (Recently Used Projects):** Lists 'pe_elong' with status 'ALL END'.
- プロジェクト (Project):** Shows the '作業フォルダ (pe_elong)' with a list of projects: 'work1_LMP_MIN', 'work2_LMP_NVT', 'work3_LMP_NPT', and 'work4_LMP_NPT' (selected).
- アクション (work4_LMP_NPT) (Actions):** A list of actions including 'Coordinate (Initial)', 'Coordinate (Final)', 'Log', 'Log (Extracted)', 'Animation' (highlighted), 'Energy plot', 'Diffusion Constant/MSD', 'Radial Distribution Function', and 'Scattering Function'.
- アニメーション (Animation) Panel:** Contains playback controls (play, stop, etc.), a 'Speed' slider, a 'Frame' selector (1 / 251), and a 'Result' field. A red dashed box highlights this panel.
- キーワード (Keywords) Panel:** Shows '座標' (Coordinates) with '表示形式' (Display Format) set to 'XYZ'. It includes a table of coordinates for atoms 6036, 6037, 6038, and 6039.

The main window displays a 3D visualization of a molecular system with the following parameters:

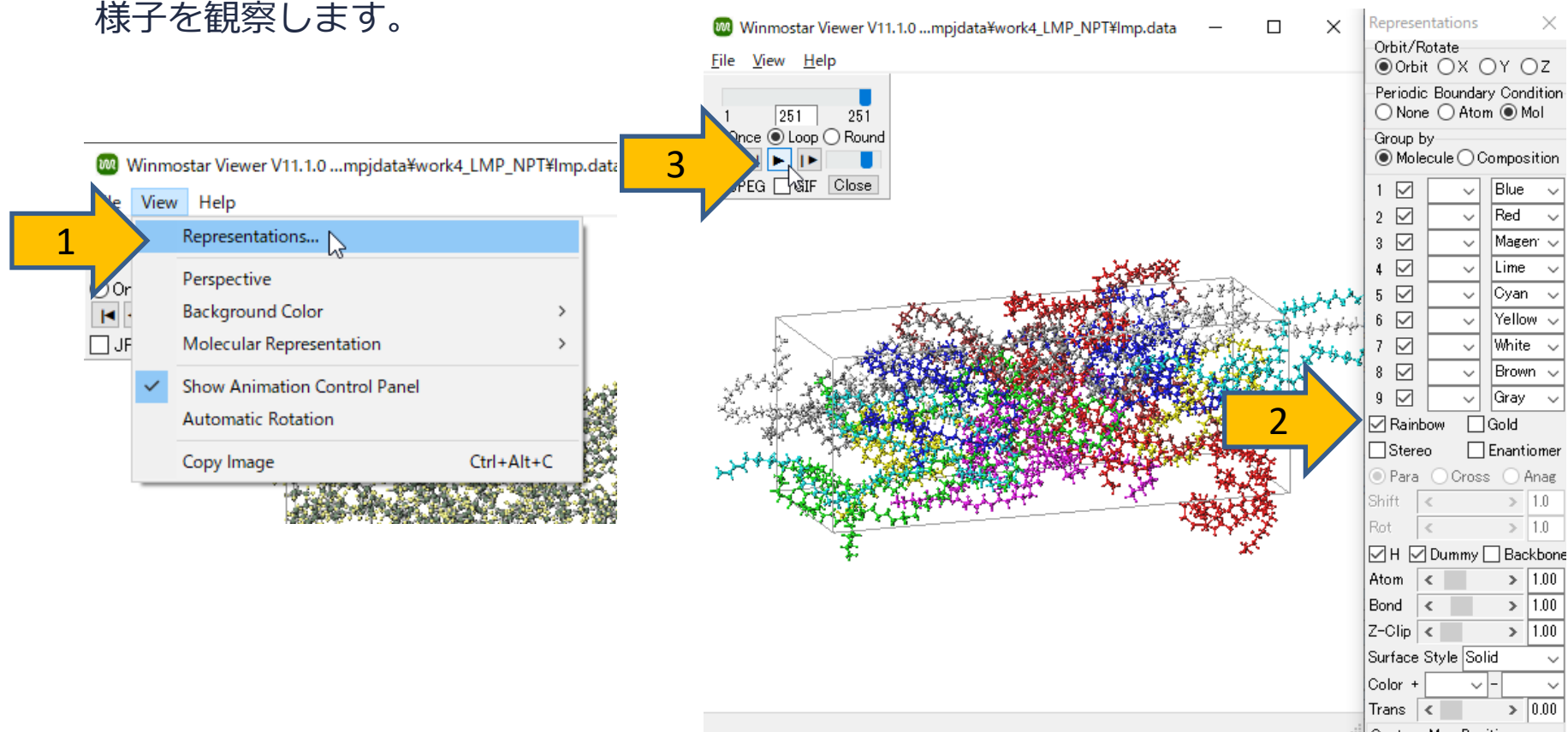
- N= 6,040 C2000H4040 M= 28,094.32
- Marked Order: 6040 - 1 - 2 - 0
- Marked Atom: X= -5.921728 Y= 19.508815 Z= 19.009393
- Length= 40.777934 Angle= 28.59435 Dihedral= * Lper= *

At the bottom, the 'Force Field' and 'Charges' are listed:

- Force Field: Available (LAMMPS)
- Charges Available: User (Qtot=0.00, Qrms= 0.060)
- rho= 0.709223 g/cm³
- a= 40.367160 b= 40.367160 c= 40.367160
- alpha= 90.000000 beta= 90.000000 gamma= 90.000000

III.結果解析

1. 起動した**Winmostar Viewer**の**View | Representations**をクリックする。
2. **Representations**ウィンドウにて**Rainbow**をチェックします。
3. **Winmostar Viewer**ウィンドウ左上の  ボタンをクリックし、ポリマーが引き伸ばされる様子を観察します。



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