

Winmostar™ チュートリアル
DCDFTBMD
分子動力学計算
V9.3.0

株式会社クロスアビリティ

2019年6月7日

概要

本チュートリアルでは、水中をOH-イオンがホッピング拡散する様子を計算する。初期状態は、31個のH₂O分子と1個のOH-イオンが存在する状態とする。LAMMPSを用いて平衡化するため、MDオプションが必要となる。計算手順は以下の通りである。



補足:

- 本チュートリアルは、短いステップ数の手軽な計算において、各種操作手順を一通り習得するという目的で作られている。
- 最後の計算をNVE一定にしている理由は、エネルギーの保存を確認するためである。例えば、動径分布関数や自己拡散係数をNVT一定計算から算出しても多くの場合は問題ない。
- Grotthuss機構による拡散の寄与は、本チュートリアルの手順とは別に算出されるべきものである。

ソルバの入手方法

本チュートリアルを実施するには別途DCDFTBMDのソルバ本体を入手する必要があります。

・アカデミック版は早稲田大学中井研究室より、無償で登録できます。

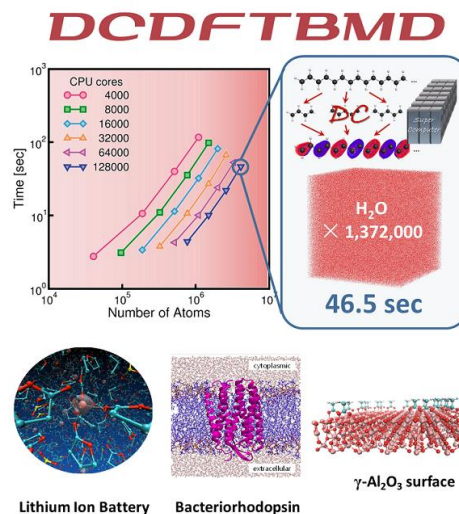
DCDFTBMD登録サイト

<http://www.chem.waseda.ac.jp/dcdftbmd/>

・商用版は以下のURLより購入可能です。

Winmostarウェブサイト

<https://winmostar.com/>



Winmostarのライセンスについて

商用版ではソルバ本体及びWinmostarのDCDFTBMDライセンスを入手できます。本ライセンスでは、Winmostarを用いてDCDFTBMDのインプットの入出力、リモートサーバへのジョブ投入によるソルバの実行および計算結果の読込が可能です。

またWinmostarの学生版ライセンスでは、DCDFTBMDのインプットの入出力および計算結果の読込が可能です(ジョブ投入機能は使用できません)。ソルバ本体に関しては上記登録サイトより申請して下さい。

パラメータの入手方法

<http://www.dftb.org/parameters/download/mio/mio-1-1-cc/> のDownloadに置かれている [mio-1-1.tar.xz](#) を保存し、適当なフォルダにて解凍してください。解凍には、例えば、7-zipとLhaplusなどを使用します。この場合は、7-zipでxzを解凍した後、続けてLhaplusでtarを解凍します。

Download

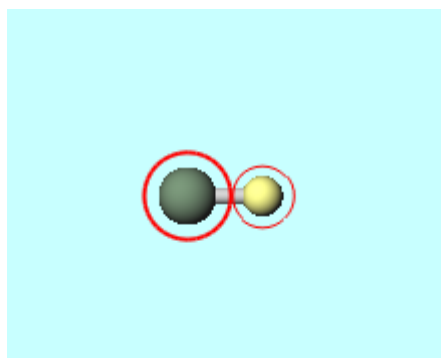
Slater-Koster files	mio-1-1.tar.xz
Spin coupling constants	mio-1-1.spinw.txt
STO coefficients	wfc.mio-1-1.hsd

その後、生成されたmio-1-1フォルダの中にskfファイルが含まれていることを確認してください。

名前	更新日時	種類	サイズ
C-C.skf	2007/07/27 23:04	SKF ファイル	101 KB
C-H.skf	2007/07/27 23:04	SKF ファイル	53 KB
C-N.skf	2007/07/27 23:04	SKF ファイル	99 KB
C-O.skf	2007/07/27 23:04	SKF ファイル	99 KB
C-D.skf	2011/07/11 23:05	SKF ファイル	108 KB

I. 系の作成

新規作成の状態で、編集操作で適用される元素を選択からO 8を選択し、元素を変更ボタンをクリックすると、OHが作成される。



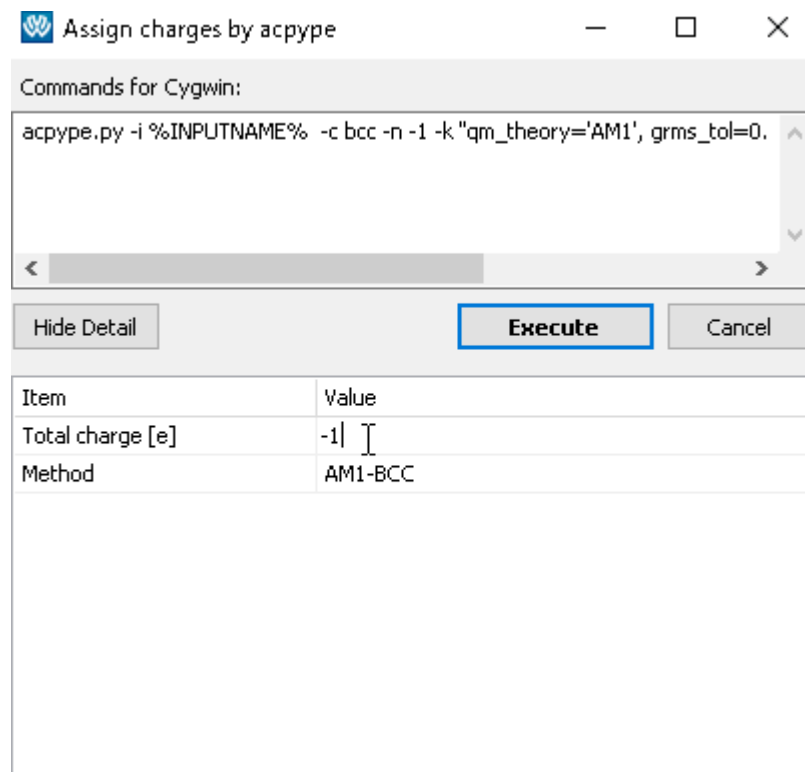
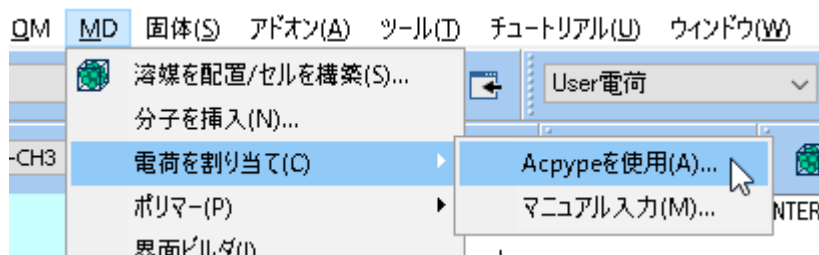
O	8
F	9
Ne	10
Na	11
Mg	12
Al	13
Si	14
P	15

N= 2 CH M= 13.02
rder: 1 - 2 - 0 - 0



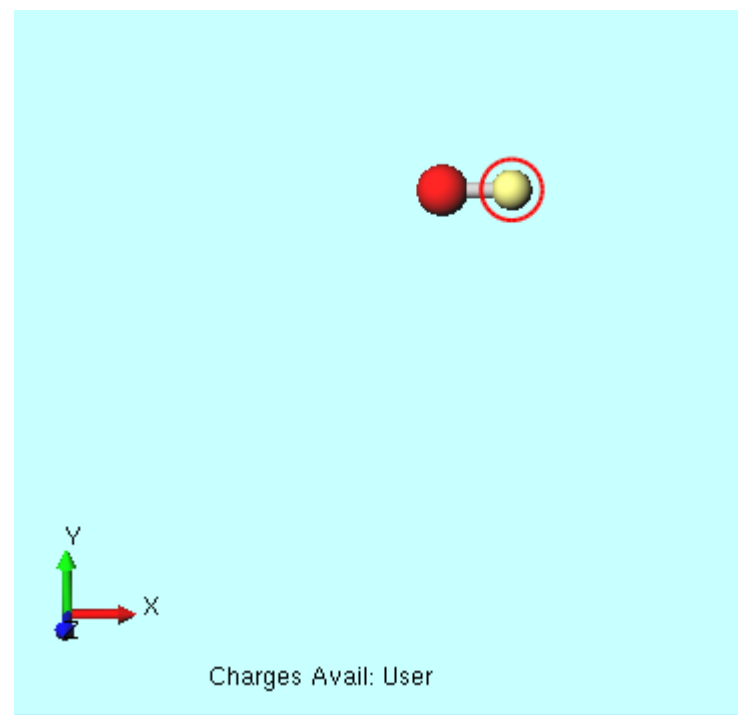
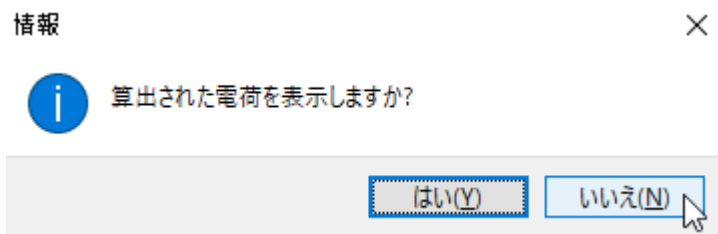
I. 系の作成

MD | 電荷を割り当て | Acptypeを使用をクリックし、Assign charges by acptypeウィンドウ下のTotal chargeの値を「-1」に変更し、Executeボタンを押す。




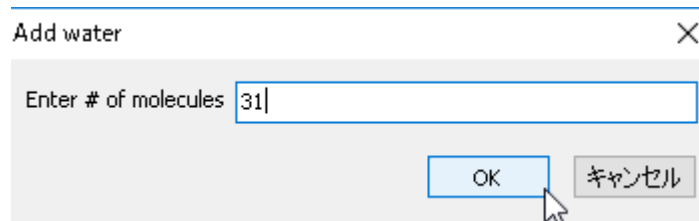
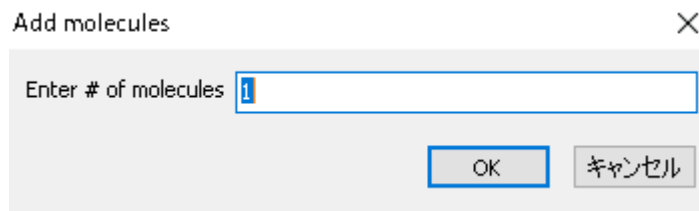
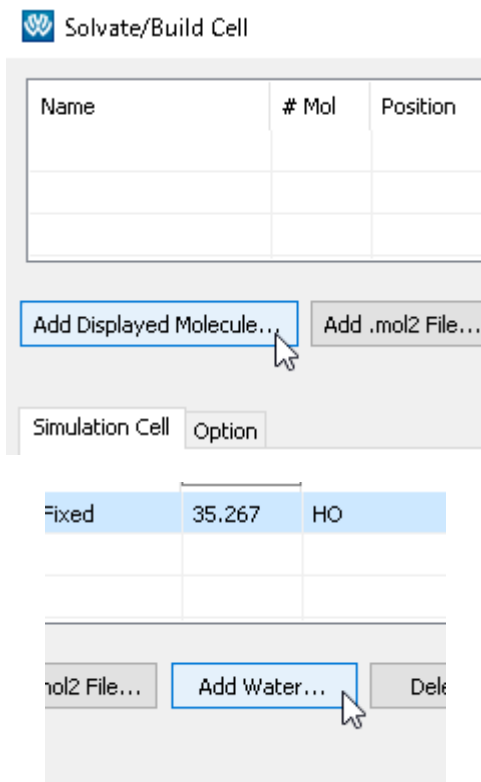
I. 系の作成

「算出された電荷を...」と聞かれたら「いいえ」をクリックする。分子表示エリア下に「Charges Avail: User」となっていることを確認する。



I. 系の作成

 (溶媒を配置/系を作成) ボタンをクリックする。**Add Displayed Molecule** ボタンを押し、**Add molecules** ダイアログで **OK** ボタンを押し。次に、**Add Water** ボタンを押し、**Add molecules** ダイアログで **Enter # of molecules** の値を「31」に変更し **OK** ボタンを押し。



I. 系の作成

Set Densityの値を「1.0」に変更し、**Build**ボタンをおす。「系の作成に成功しました」と表示され、**OK**ボタンを押すと、作成された系が分子表示エリアに表示される。

Simulation Cell Option

Set Density [g/cm³]

Set Distance from Solute [nm]

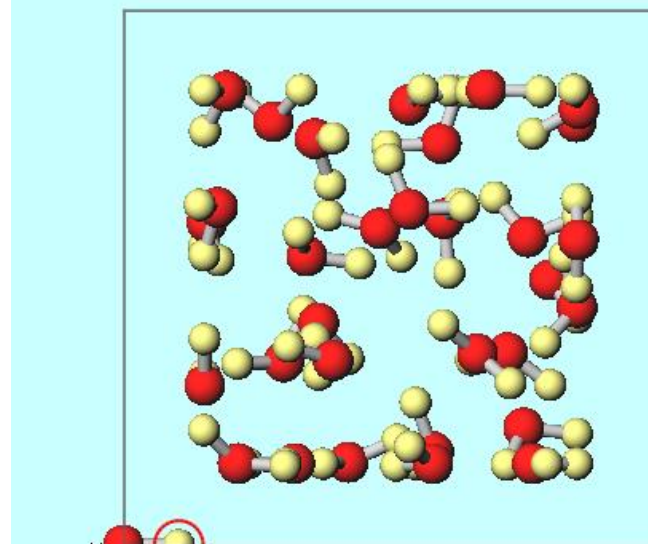
Set Lattice Constants [nm]

Angles [deg]

Box Type

Total Number of Atoms: 95

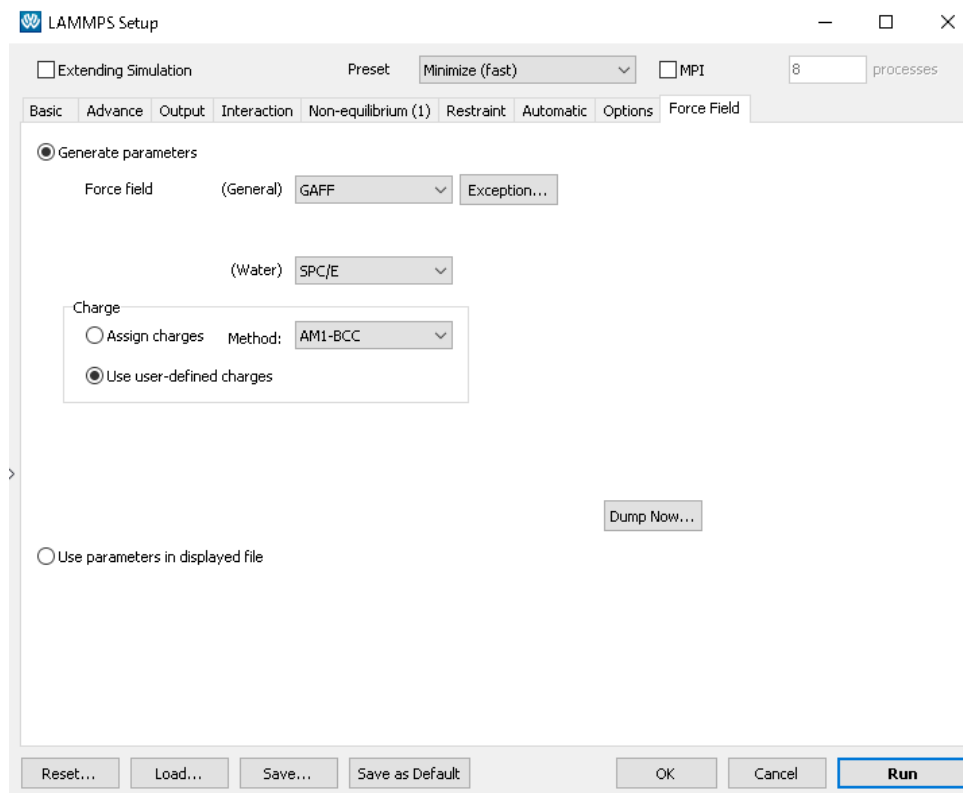
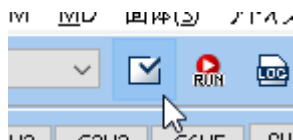
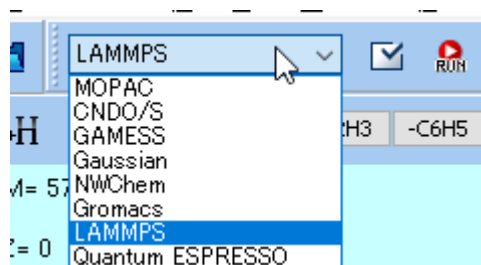
Winmostar N= 95 H63O32 M= 575.48
Marked Order: 2 - 0 - 0 - 0
Marked Atom: X= 1.02 Y= 0 Z= 0
Length= * Angle= * Dihedral= * Lper= *



Charges Avail: User
rho= 1.000 g/cm³
a= 9.850 b= 9.850 c= 9.850
alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000

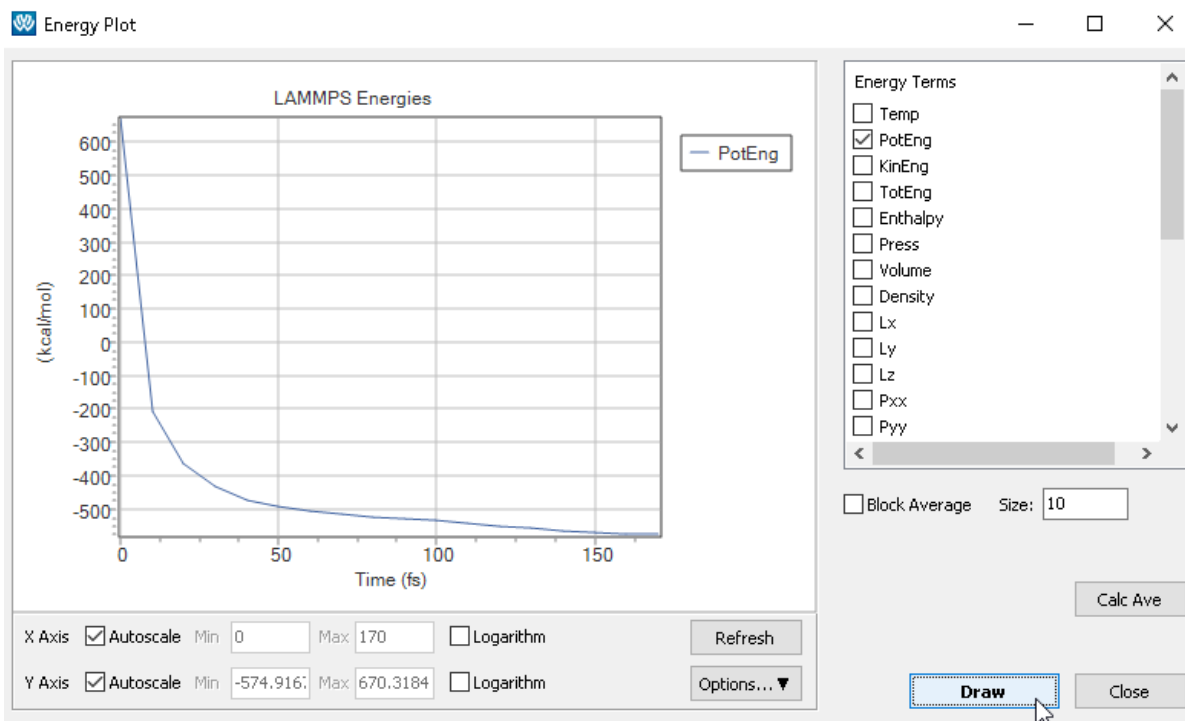
II. 古典MD計算(エネルギー極小化)

ソルバを選択メニューから**LAMMPS**を選択し、キーワード設定ボタンをクリックする。まず**LAMMPS Setup**ウィンドウ左下の**Reset**ボタンをクリックし、はいをクリックする。次に、**Force Field**タブの**User user-defined charges**にチェックを入れ、**Run**ボタンをクリックする。



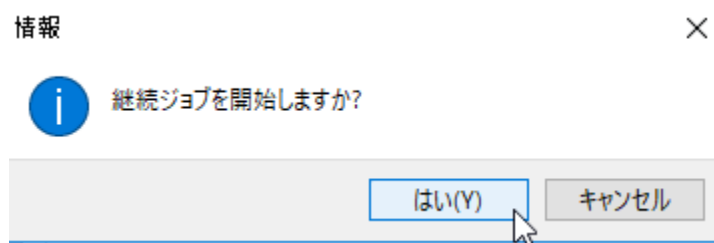
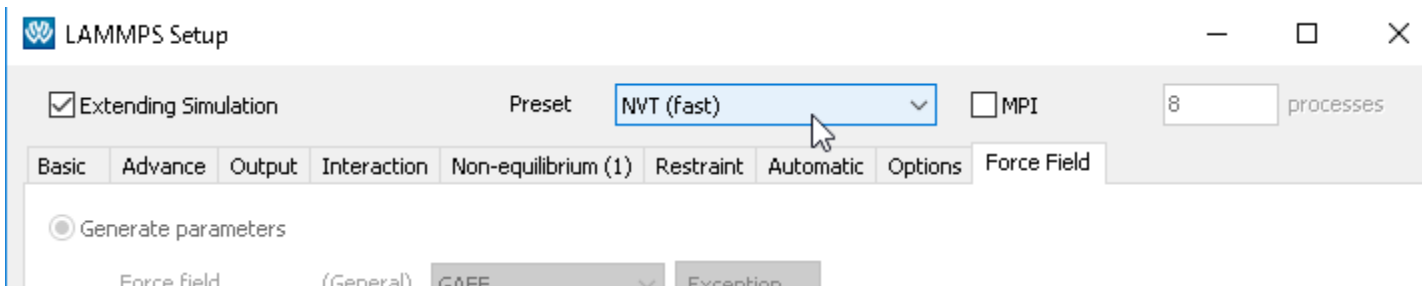
II. 古典MD計算(エネルギー極小化)

ファイル名を「h2o_oh_32.data」として保存すると、計算が開始される。計算が終了しコンソールウィンドウが閉じた後、**エネルギー変化ボタン**をクリックする。デフォルトで選ばれるファイルを開くと、**Energy Plot**ウィンドウが開く。**Energy Terms**の**PotEng**にチェックを入れ、**Draw**ボタンを押すとポテンシャルエネルギーの変化が表示される。ポテンシャルエネルギーが低下する様子を確認したあと、**Close**ボタンを押す。



III. 古典MD計算 (NVT一定計算)

再びキーワード設定ボタンをクリックする。**Extending Simulation**にチェックを入れ、**Preset**に**NVT (fast)**を選択し、**Run**ボタンを押す。表示されたダイアログでは**はい**をクリックすると再び計算が開始される。



III. 古典MD計算(NVT一定計算)

計算終了後、アニメーションボタンをクリックする。デフォルトで選ばれるファイルを2回開くとAnimationウィンドウが出現する。▶ (Go to last frame) ボタンをクリックすると、最終フレームが分子表示エリアに出現する。念のため、この状態でファイル | 別名を付けて保存メニューをクリックし、「h2o_oh_32.mol2」として保存する。

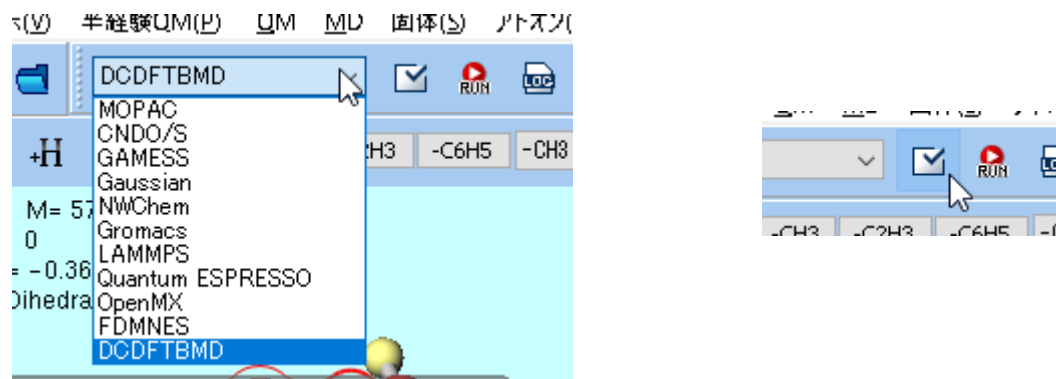
The screenshot displays the X-Ability software interface. On the left, a molecular simulation window shows a 3D ball-and-stick model of water molecules (red and white spheres) in a light blue box. The window title is "Winmostar N= 95 H63O32 M= 575.46". Below the model, a coordinate system (X, Y, Z) is shown, and simulation parameters are listed: "Charges Avail: User", "rho= 1.000 g/cm³", "a= 9.850 b= 9.850 c= 9.850", and "alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000".

On the right, the "Animation" window is open, showing a list of timesteps from 2900 to 5000. The "Go to last frame" button (▶) is highlighted with a red box. The "Result" field is empty, and the "Plot" section shows "Column 4" selected. The "Speed" slider is set to a low value, and the "Loop" and "Dynamic Bond" checkboxes are unchecked.

In the bottom-left corner, a small inset shows a toolbar with a button that looks like a film strip, which is the animation button mentioned in the text.

IV. DCDFTBMD計算 (NVT一定計算)

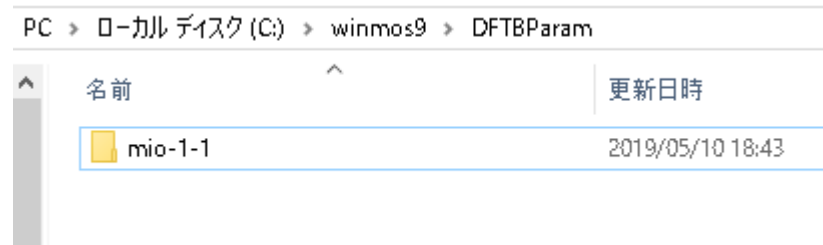
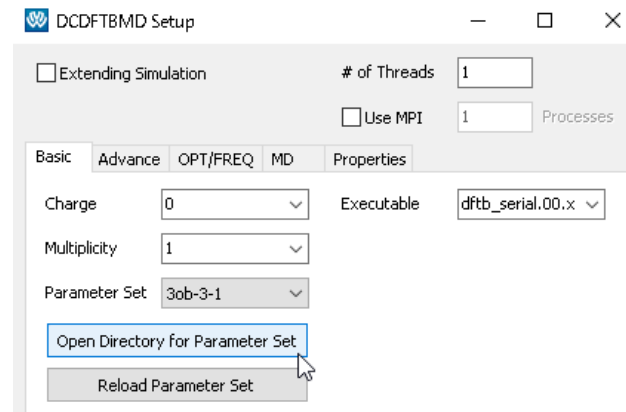
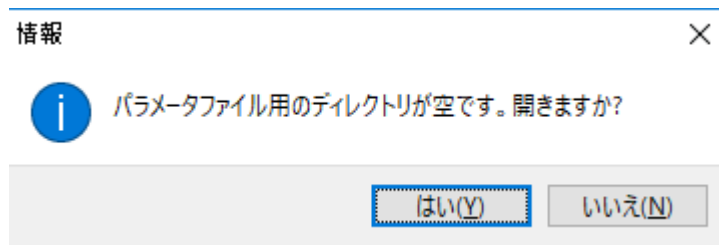
ソルバを選択メニューからDCDFTBMDを選択する。次に、キーワード設定ボタンをクリックする。



IV. DCDFTBMD計算 (NVT一定計算)

(このページの操作は2回目以降不要である)

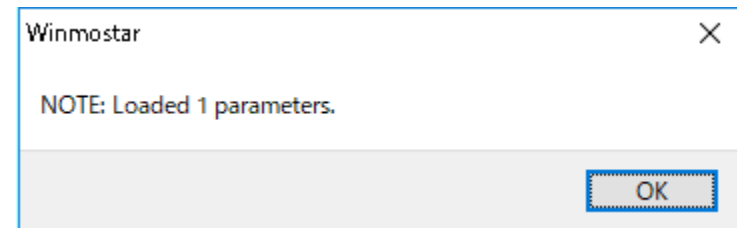
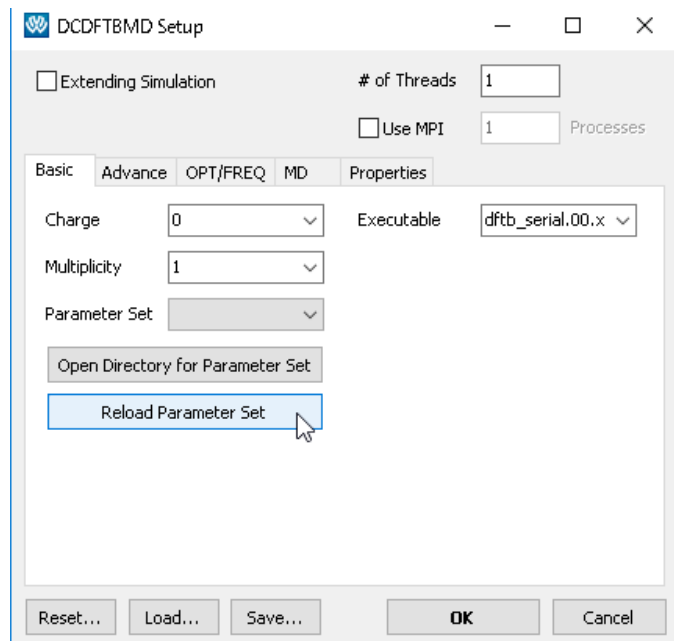
1. 「パラメータファイル用のディレクトリが空です...」と聞かれたらはいをクリックする。
聞かれなかった場合は**Open Directory for Parameter Set**ボタンを押す。
2. Winmostarのインストールフォルダ以下に**DFTBParam**フォルダが生成され、エクスプローラで開かれるので、そこに冒頭で解凍した**mio-1-1**フォルダをコピーする。



IV. DCDFTBMD計算 (NVT一定計算)

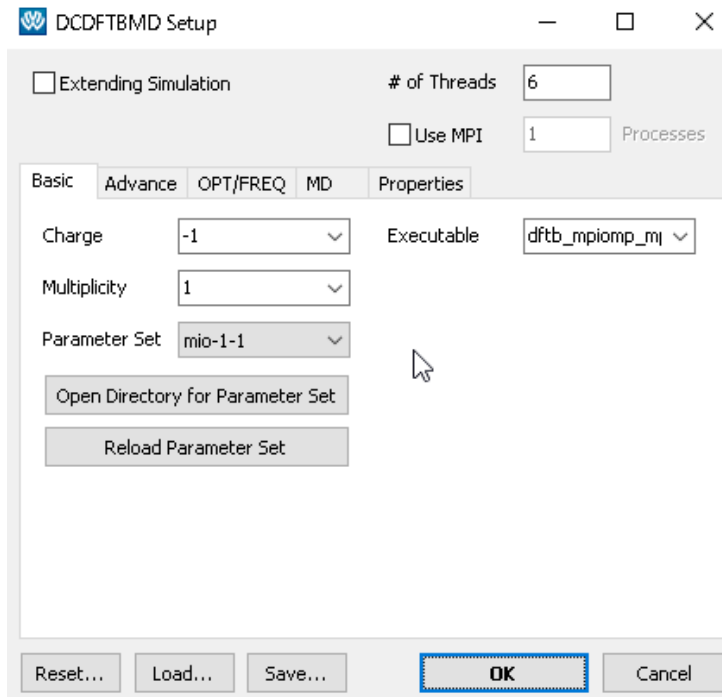
(このページの操作は2回目以降不要である)

1. Winmostarの**DCDFTBMD Setup**ウィンドウで**Reload Parameter Set**ボタンを押す。
2. 「NOTE: Loaded ** parameters.」と表示されたら**OK**ボタンを押す。



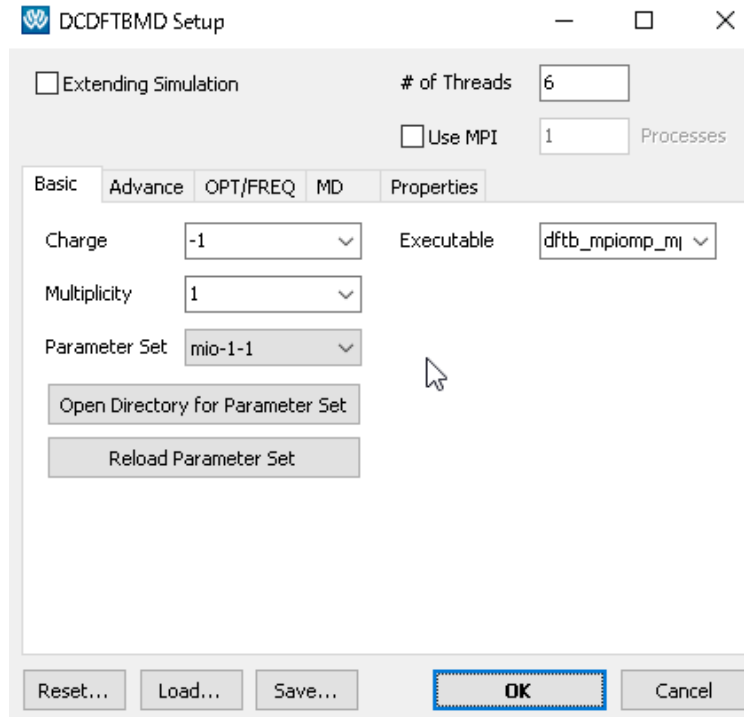
IV. DCDFTBMD計算 (NVT一定計算)

1. DCDFTBMD SetupウィンドウのBasicタブにてParameter Setにmio-1-1を、Chargeに「-1」を指定する。
2. Executableには使用するバイナリの種類を選択する。2019年5月時点の最新バイナリでは、シリアル実行の場合はdftb_serial.00.x、並列実行の場合はdftb_mpiomp_mpich.00.xなどを選択する。



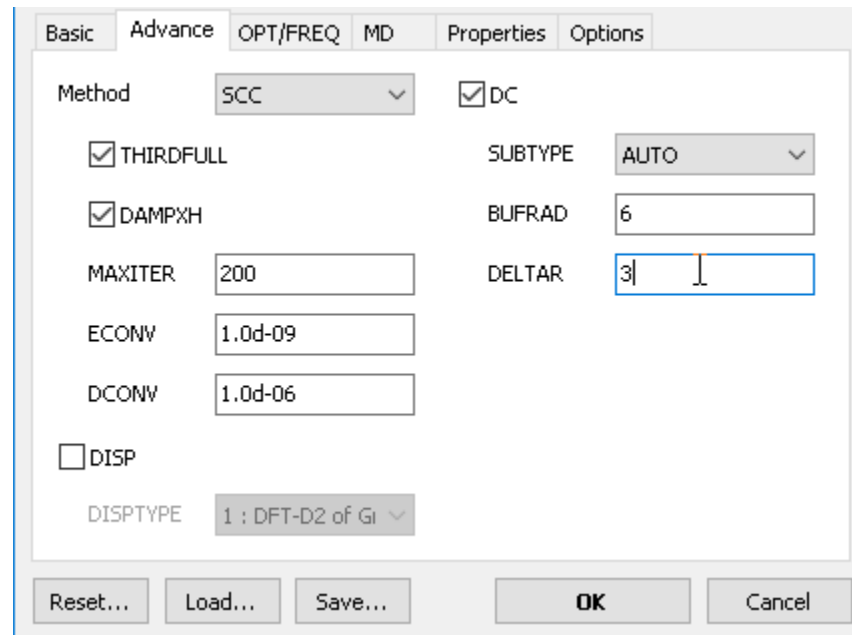
IV. DCDFTBMD計算 (NVT一定計算)

並列実行の際、OpenMPのスレッド並列数は# of Threadsに入力する。MPIを使う場合は**Use MPI**にチェックを入れ、その横にMPIのプロセス数を入力する。ただし、DC法を使わない場合は、MPIを使用できないため、OpenMPによるスレッド並列を推奨する。



IV. DCDFTBMD計算 (NVT一定計算)

- 次に、**Advance**タブにて**THIRDFULL**と**DAMPXH**にチェックを入れる。この設定によりDFTB3レベルで計算される。
- もし系が十分大きい場合は、**DC**にチェックを入れ、例えば**BUFRAD**に「6」、**DELTAR**に「3」と入力すると、バッファを6 Åにし、3x3x3 Åのグリッドに系を分割したDC法が適用される。



IV. DCDFTBMD計算 (NVT一定計算)


1. 次に、**MD**タブにて**MD**にチェックを入れる。
2. **NSTEP**を「1000」に、**DELTAT**を「0.5d-15」に、**Ensemble**を「NVT」に、**NVTTYPE**を「1: Velocity scaling」に、**PRINT**を「10」に変更する。
3. **CALCPRESSURE**にチェックを入れる。
4. **OK**ボタンを押す。

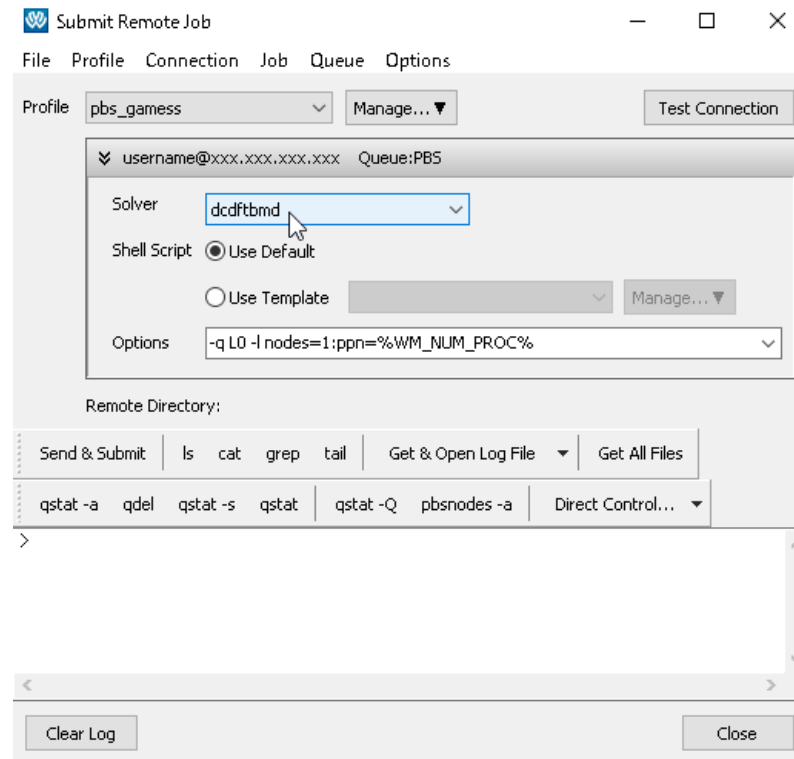
The image shows a software dialog box for configuring Molecular Dynamics (MD) simulation parameters. The 'MD' tab is selected, and the 'MD' checkbox is checked. The following parameters are set:

Parameter	Value
NSTEP	1000
DELTAT	0.5d-15
BATHTEMP	298.15
Ensemble	NVT
NVTTYPE	1: Velocity scalar
INITTEMP	298.15
PRINT	10

Additional settings include the 'CALCPRESSURE' checkbox checked. At the bottom, there are buttons for 'Reset...', 'Load...', 'Save...', 'OK', and 'Cancel'.

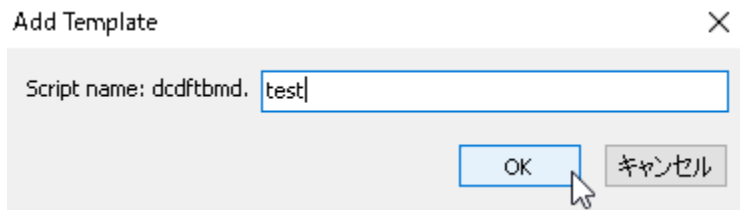
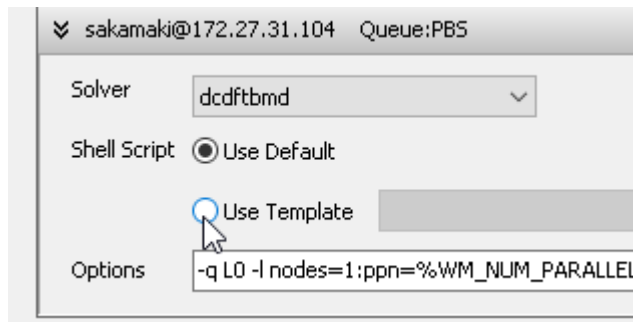
IV. DCDFTBMD計算 (NVT一定計算)

1. ツールボタンの  または ツール | リモートジョブ投入 をクリックする。
2. [ユーザガイド](#) の内容に従い プロファイルの設定を行い、**Solver**には **dcdfbtmd** を選択する。



IV. DCDFTBMD計算 (NVT一定計算)

1. 実行時のMPI等の設定をカスタマイズする場合は、**Use Template**をクリックする。
2. **Add Template**ダイアログが開いたらテンプレート名を入力し**OK**を押す。
3. テンプレートスクリプトが開かれたら、そこでMPICOMMの編集やmoduleコマンドの追加、パスの追加等を行う。詳細は[ユーザガイド](#)を参照のこと。
4. 編集後、スクリプトを保存し閉じる。



```

dcdftbmd.test.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
cd $PBS_O_WORKDIR
fi

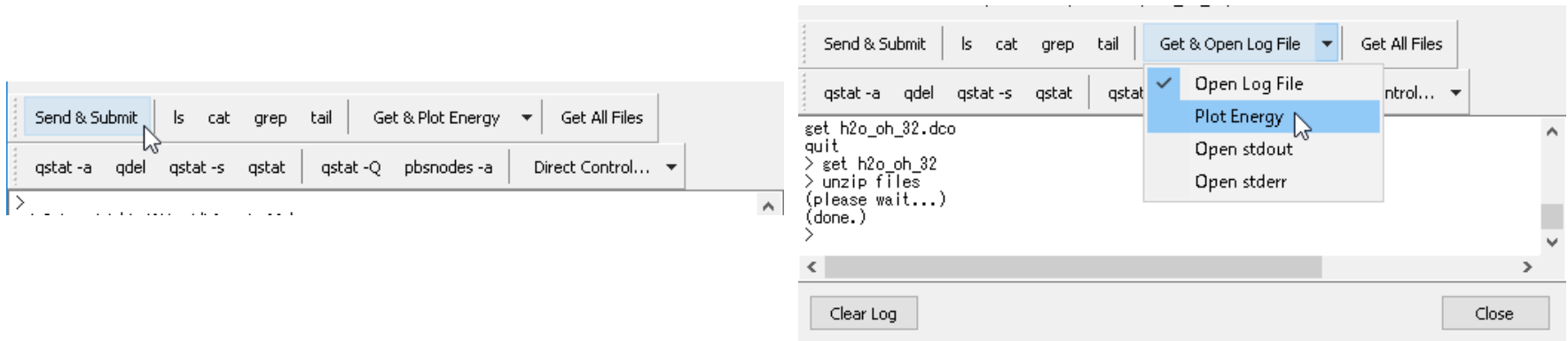
export LANG=C
pwd

set -v
set +v
echo "*****"
echo "****          Define variables          ****"
echo "*****"
set -v
set +v
if [ ! -f %WM_PREFIX%.conf.sh ]; then
  echo "Error : config file was not found."
  sleep 5
  exit 1
fi
set -v
source ${PWD}/${WM_PREFIX%.conf.sh} || exit 1
MPICOMM="mpirun --hostfile $PBS_NODEFILE -n %WM_NUM_PROC%"
FILEIN=%WM_INPUT%
WORKDIR=%WM_WORKDIR%
set +v
echo "*****"

```

IV. DCDFTBMD計算 (NVT一定計算)

1. **Send & Submit**ボタンを押してジョブを開始する。ファイル名は**h2o_oh_32.dci**とする。
2. **tail**ボタンを押し、リモートサーバ上の実行中のログファイルの末尾を表示することで、計算が異常終了していないことを確認する。
3. **Get & Open Log File**の横の▼をクリックし、**Plot Energy**をクリックすると、計算途中でも各種エネルギーの時間発展をグラフ化することができる(後述)。



IV. DCDFTBMD計算 (NVT一定計算)

1. **tail**ボタンを押し、「Execution of DCDFTBMD terminated normally ...」と表示されていたら、DCDFTBMDが正常に終了したと判断できる
2. その後、**qstat -a**ボタン等で、キューも終了したことを確認したら、**Get All Files**ボタンを押す。

```

Send & Submit | ls | cat | grep | tail | Get & Open Log File | Get All Files
qstat -a | qdel | qstat -s | qstat | qstat -Q | pbsnodes -a | Direct Control...
TEMPERATURE = 298.15000000 K
KINETIC ENERGY = 0.13313002 Eh
TOTAL MD ENERGY = -130.75543057 Eh
*** Restart information dumped to "restart_chk" ***
Execution of DCDFTBMD terminated normally Fri May 10 19:26:50 2019

```

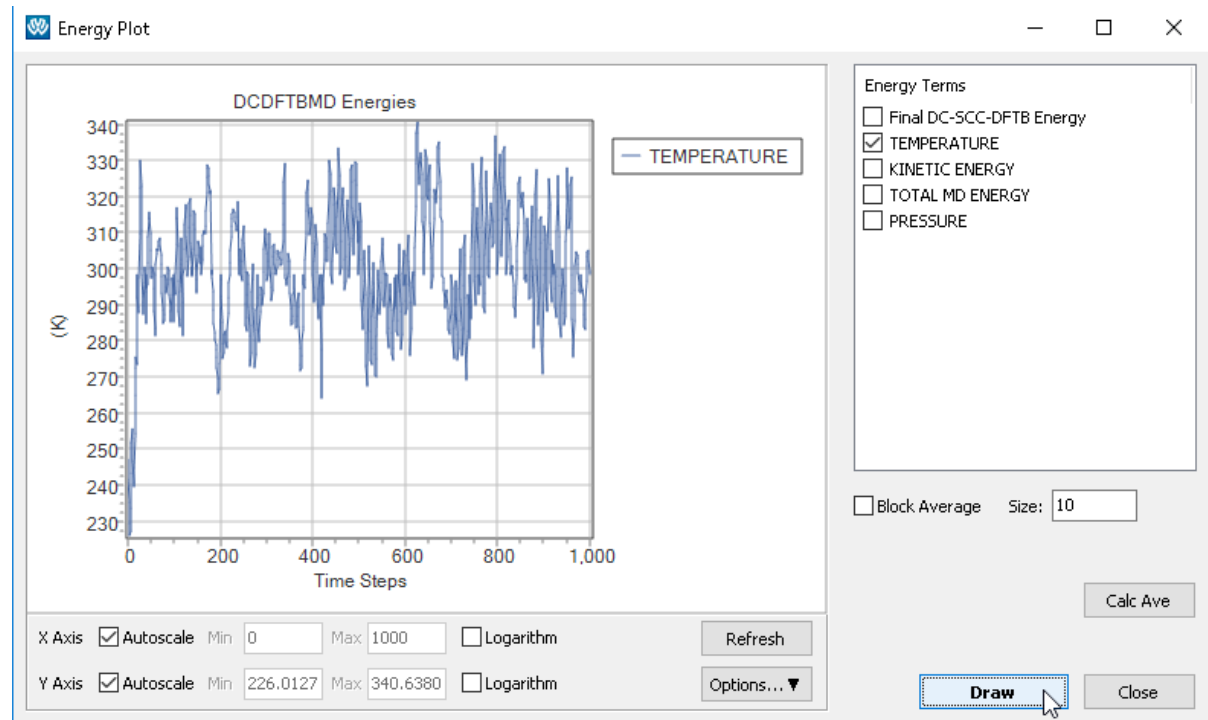
```

Send & Submit | ls | cat | grep | tail | Get & Open Log File | Get All Files
qstat -a | qdel | qstat -s | qstat | qstat -Q | pbsnodes -a | Direct Control...
get sty_opt.dco
quit
> get sty_opt
> unzip files
(please wait...)
(done.)

```


IV. DCDFTBMD計算 (NVT一定計算)

Submit Remote Job ウィンドウを閉じずにメインウィンドウに戻り、**エネルギー変化** ボタンをクリックする。デフォルトで選ばれるファイルを開くと**Energy Plot** ウィンドウが開く。**Energy Terms**にて**TEMPERATURE**にチェックを入れ、**Draw**ボタンをクリックすると、温度の時間発展がグラフ化される。温度が298K前後で揺らいでいることを確認したら**Close**ボタンを押す。



IV. DCDFTBMD計算 (NVT一定計算)

続けて、メインウィンドウのアニメーションボタンをクリックする。デフォルトで選ばれるファイルを2回開くとAnimationウィンドウが開く。▶ (Play/pause)ボタンを押し分子が動く様子を確認する。確認後Closeボタンを押しAnimationウィンドウを閉じる。

The screenshot displays the software's main window and an 'Animation' sub-window. The main window shows a 3D ball-and-stick model of a molecular simulation box with a light blue background. The atoms are colored red (oxygen) and yellow (hydrogen). A coordinate system with X, Y, and Z axes is visible in the bottom left. Below the model, the following simulation parameters are listed:

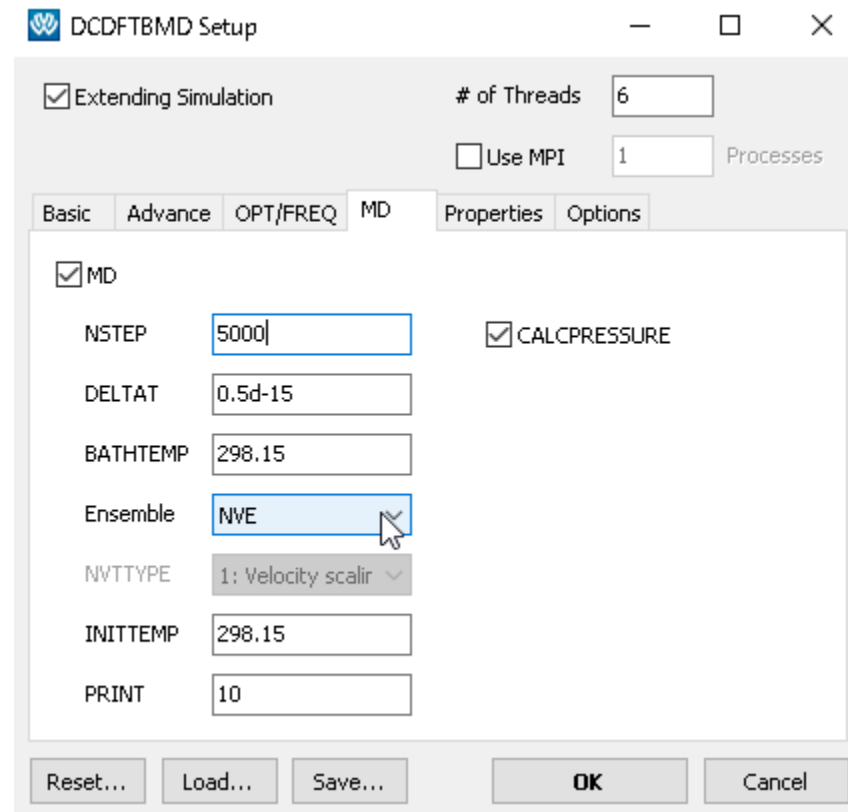
```

rho= 1.000 g/cm^3
a= 9.850 b= 9.850 c= 9.850
alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000
  
```

The 'Animation' window is open on the right side. It has a menu bar with 'File', 'Control', and 'Tools'. The main area contains a list of frames from 80 to 101, with 'Frame: 101' selected. To the right of the frame list are controls for 'Speed' (a slider), a 'Loop' checkbox, and navigation buttons (back, play/pause, forward). The play/pause button is highlighted with a mouse cursor. Below these are buttons for 'Open Viewer', 'Export...', and 'Close'. At the bottom of the window, there are 'Plot' and 'Column' (set to 5) options, along with 'Excel' and 'Custom Plot' buttons.

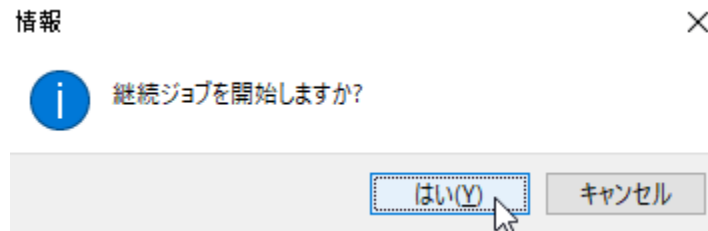
V. DCDFTBMD計算 (NVE一定計算)

再びメインウィンドウのキーワード設定ボタンをクリックする。**Extending Simulation**にチェックを入れ、**MD**タブの**NSTEP**を「5000」に、**Ensemble**を**NVE**に切り替える。その後、OKボタンを押す。



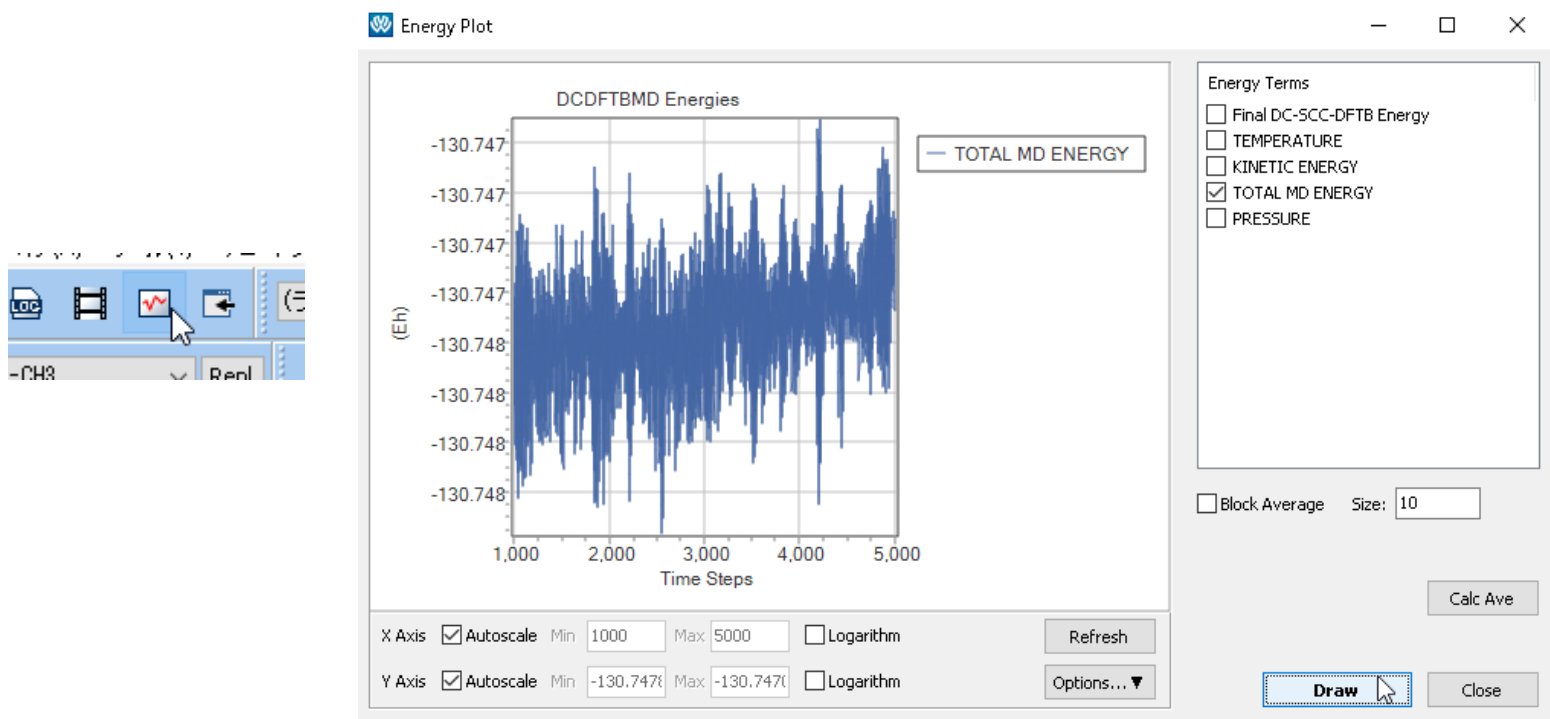
V. DCDFTBMD計算(NVE一定計算)

Submit Remote Jobウィンドウに戻り(ウィンドウが隠れた場合はウィンドウメニューから探す)、**Send & Submit**ボタンを押す。「継続ジョブを開始しますか?」と聞かれ、はいをクリックすると、ジョブが開始される。NVT一定計算の時と同様に進捗を確認し、終了後**Get All Files**ボタンをクリックする。



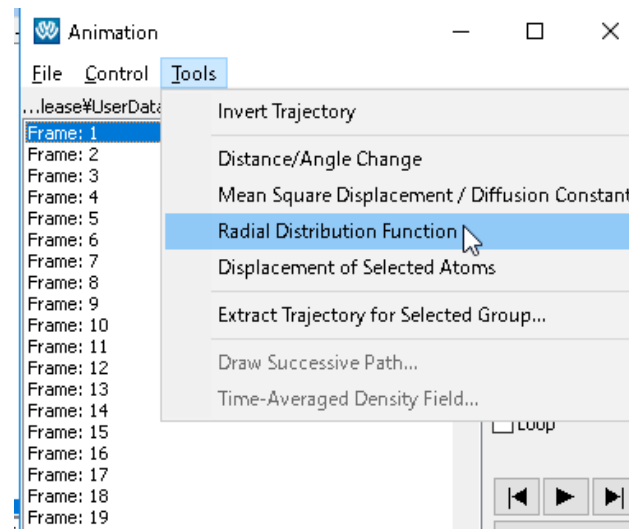
V. DCDFTBMD計算 (NVE一定計算)

メインウィンドウに戻り、エネルギー変化ボタンをクリックする。デフォルトで選ばれるファイルを開くとEnergy Plotウィンドウが開く。Energy TermsにてTOTAL MD ENERGYにチェックを入れ、Drawボタンをクリックすると、全エネルギー (Final SCC-DFTB EnergyとKINETIC ENERGYの和) の時間発展がグラフ化される。ここで全エネルギーがドリフトせず保存していることを確認し、Closeボタンを押す。



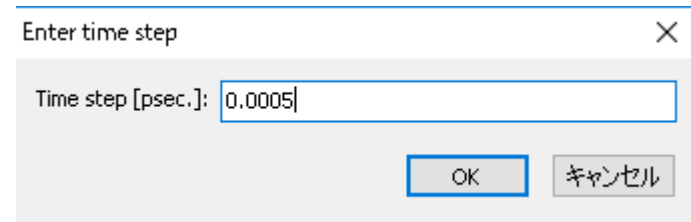
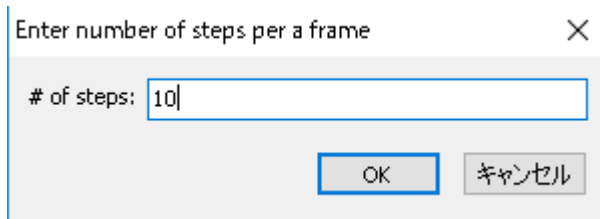
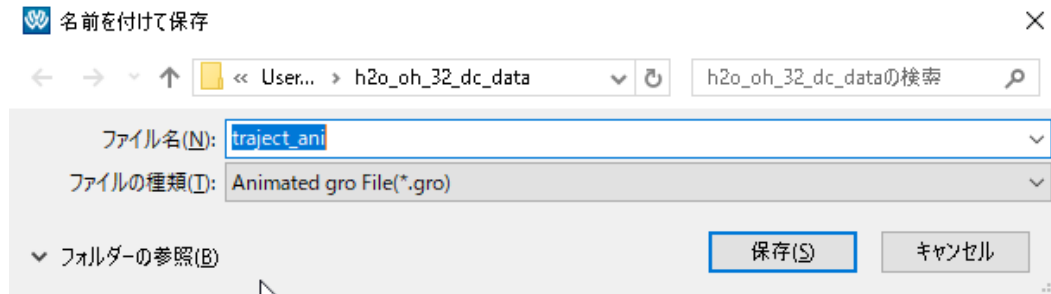
V. DCDFTBMD計算 (NVE一定計算)

続けて、メインウィンドウのアニメーションボタンをクリックする。デフォルトで選ばれるファイルを2回開くとAnimationウィンドウが開く。そして、Animationウィンドウの **Tools | Radial Distribution Function**メニューをクリックする。



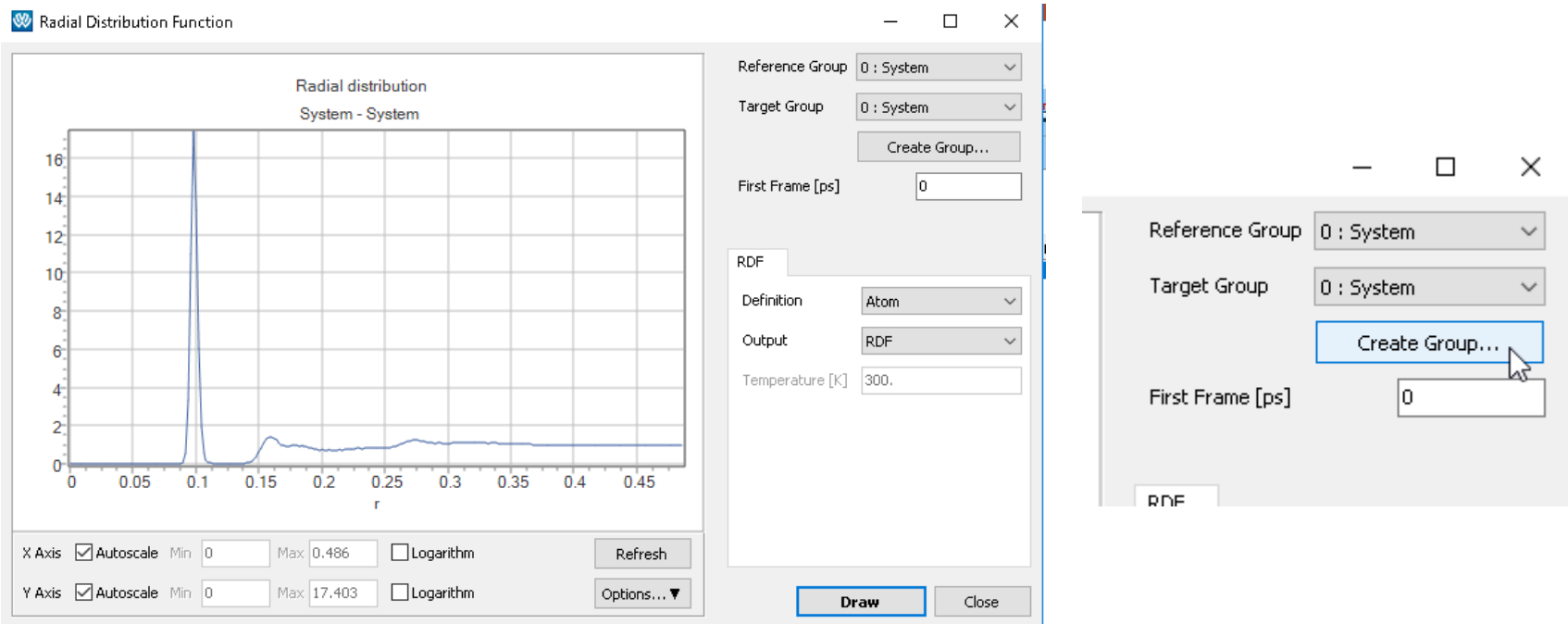
V. DCDFTBMD計算 (NVE一定計算)

生成される中間ファイル(gro形式)のファイル名を聞かれるので、デフォルトの状態
で保存をクリックする。「Enter number of steps between each frames」というダイ
アログでは、DCDFTBMDのPRINTキーワードの数を入力し(ここでは「10」)、OK
を押す。「Enter time step」というダイアログでは同様にDELTATキーワードの値(単
位は秒)をピコ秒単位に直してから入力し(ここでは「0.0005」)、OKを押す。



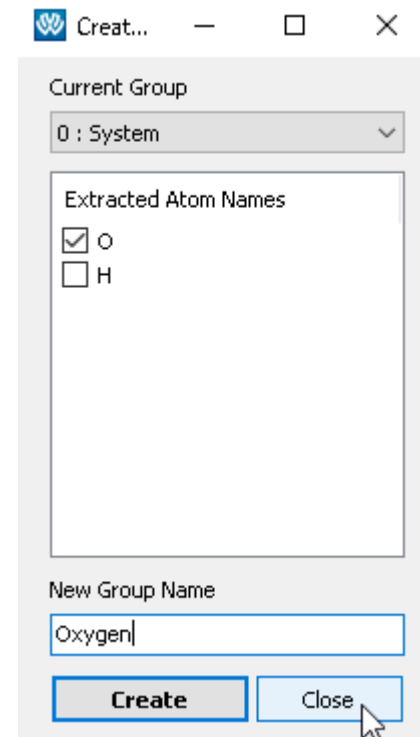
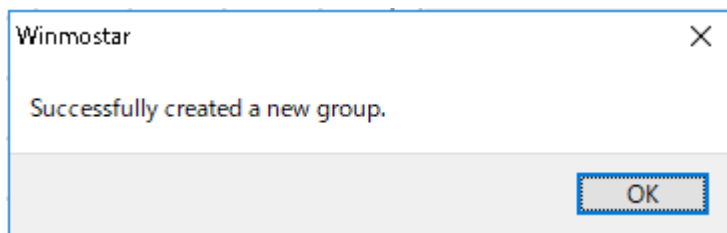
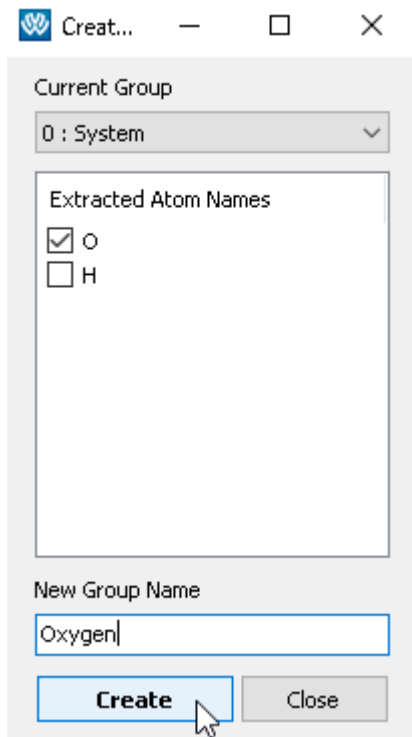
V. DCDFTBMD計算 (NVE一定計算)

Radial Distribution Functionウィンドウが開き、まずは自動で全原子間の動径分布関数が表示される。次に、酸素原子間の動径分布関数を求めるために、**Create Group**ボタンをクリックする。そして、デフォルトで選ばれるファイルを開く。



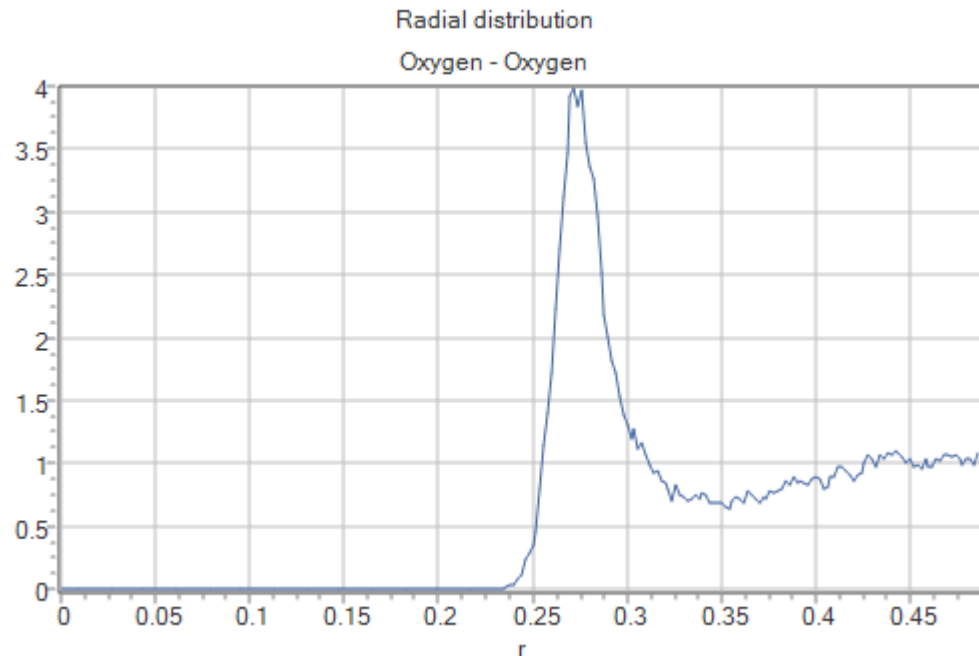
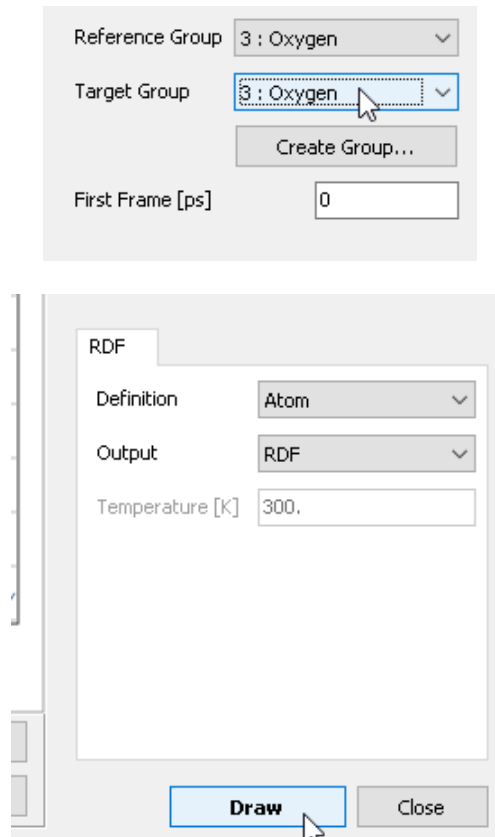
V. DCDFTBMD計算 (NVE一定計算)

Create Groupウィンドウが表示されたら、**Extracted Atom Names**にて**O**にチェックを入れ、**New Group Name**に「**Oxygen**」と入力し**Create**ボタンを押す。「**Successfully created a new group**」と表示されたら**OK**を押す。その後**Close**ボタンを押す。



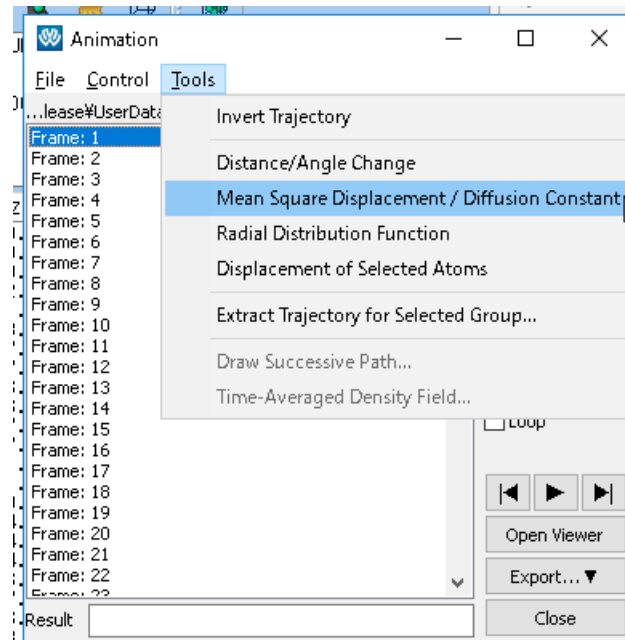
V. DCDFTBMD計算 (*NVE*一定計算)

再びRadial Distribution Functionウィンドウに戻りReference GroupとTarget Groupに3: Oxygenを選択し、ウィンドウ右下のDrawボタンを押すと、酸素-酸素原子間の動径分布関数が表示される。確認後Closeボタンを押す。



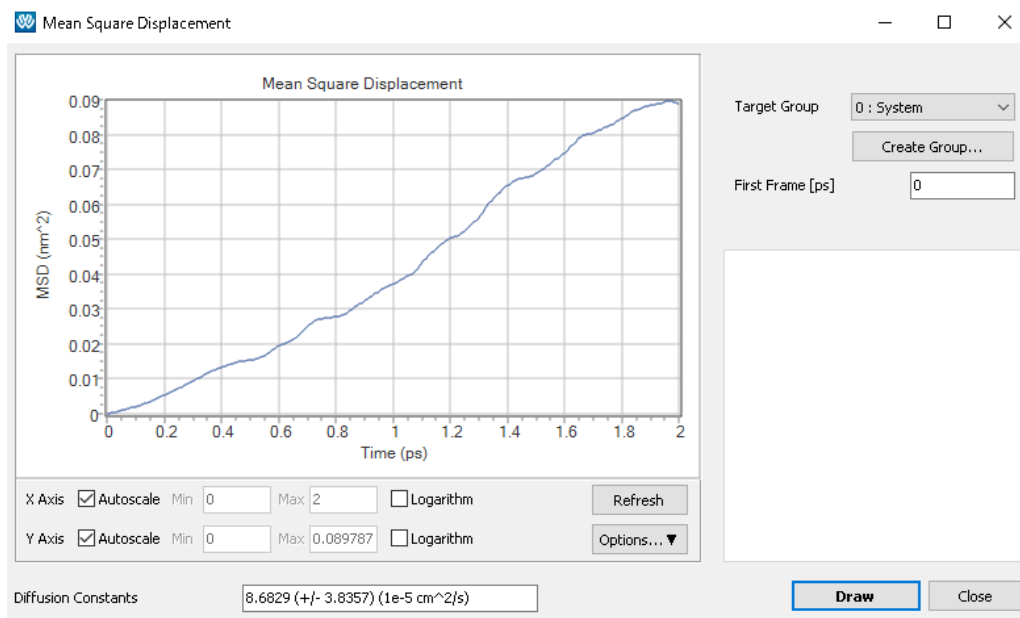
V. DCDFTBMD計算 (*NVE*一定計算)

再びAnimationウィンドウに戻りTools | Mean Square Displacement / Diffusion Constantメニューをクリックする。保存ダイアログでは先ほどと同様にデフォルト設定で保存を押す。「traject_ani.groを上書きしますか?」と聞かれたらはいを押す。



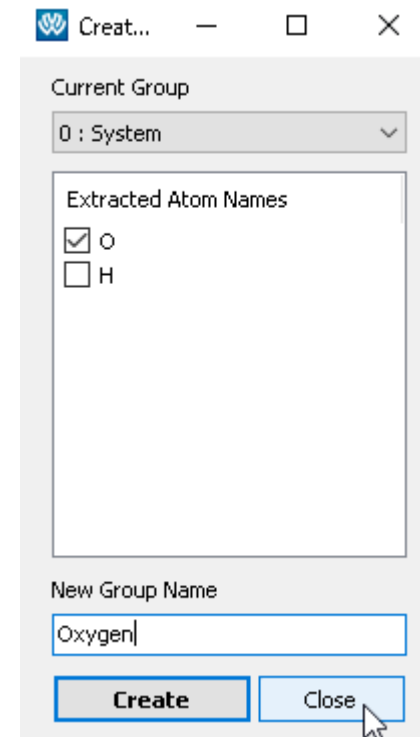
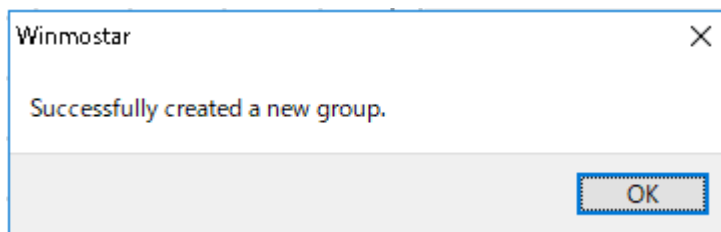
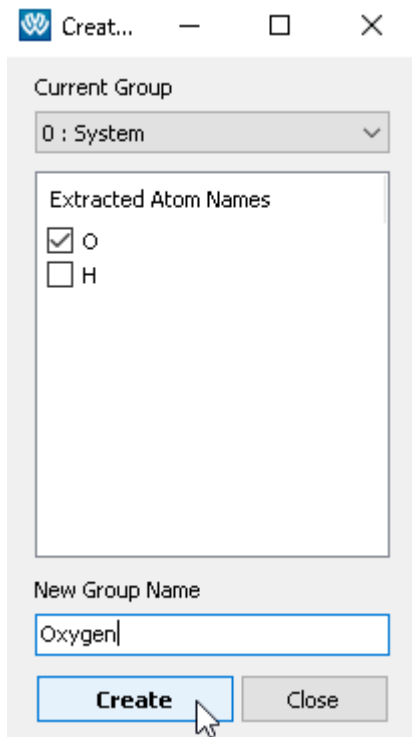
V. DCDFTBMD計算 (NVE一定計算)

Mean Square Displacementウィンドウが開き、まずは自動で全原子 (Target Group: System) の平均二乗変位のグラフと、その下に自己拡散係数が表示される。次に、酸素原子の平均二乗変位・自己拡散係数を求めるために、**Create Group**ボタンをクリックする。そして、デフォルトで選ばれるファイルを開く。



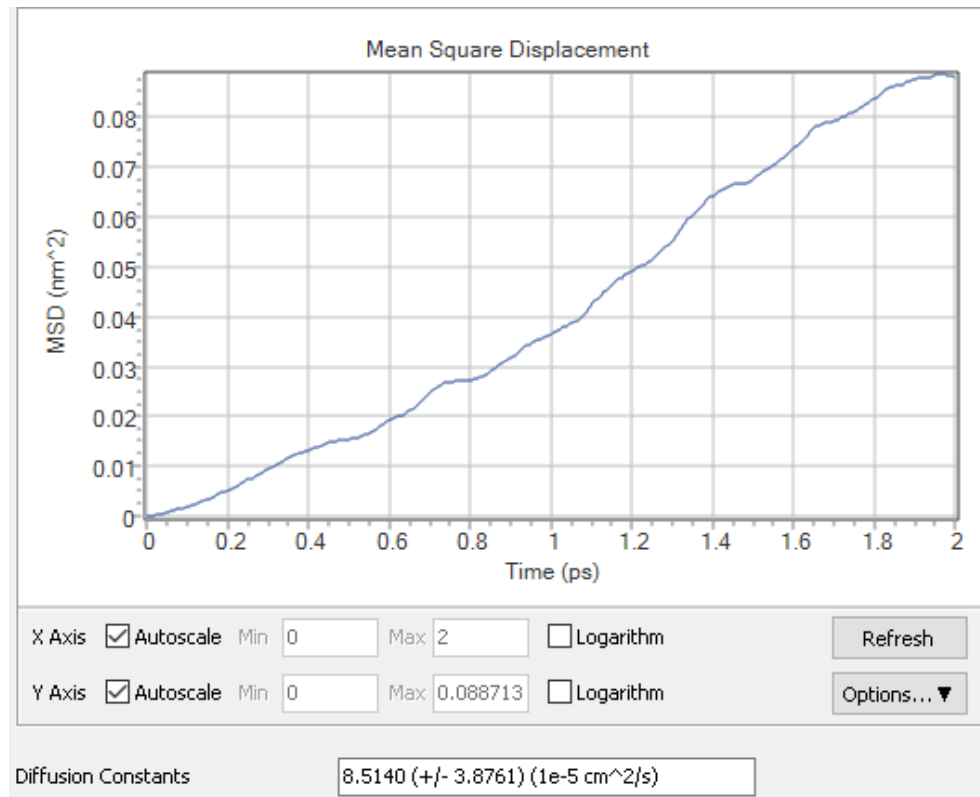
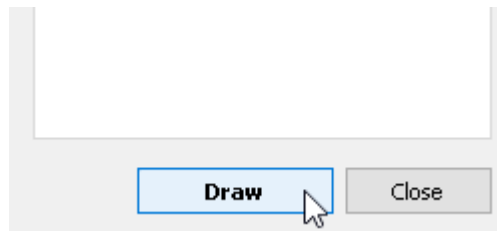
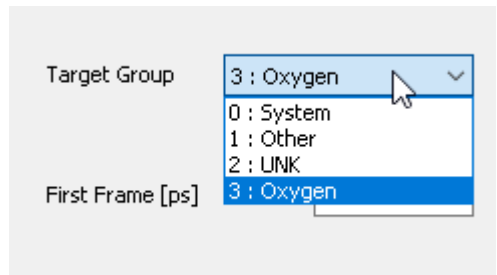
V. DCDFTBMD計算 (NVE一定計算)

Create Groupウィンドウが表示されたら、**Extracted Atom Names**にて**O**にチェックを入れ、**New Group Name**に「**Oxygen**」と入力し**Create**ボタンを押す。「**Successfully created a new group**」と表示されたら**OK**を押す。その後**Close**ボタンを押す。



V. DCDFTBMD計算 (NVE一定計算)

再び**Mean Square Displacement**ウィンドウに戻り**Target Group**に**3: Oxygen**を選択し、ウィンドウ右下の**Draw**ボタンを押すと、酸素原子の平均二乗変位・自己拡散係数が表示される。確認後**Close**ボタンを押す。



<https://www.facebook.com/X-Ability-CoLtd-168949106498088/>

facebook アカウント登録

メールアドレスまたは携帯番号 パスワード

ログインしたままにする

X-Ability Co.,Ltd.
さんはFacebookを利用しています。
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の友

アカウント登録 ログイン

X-Ability
クロスアビリティ

X-Ability Co.,Ltd.
コンピュータ・テクノロジー

タイムライン 基本データ 写真 いいね! 動画

ユーザー

いいね! 138件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ユーザー投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30 · 公開

最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。
http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_au_detailpage_o00_s00...

山口 達明

フロンティアオービタルによる新有機化学教程
フロンティアオービタルによる新有機化学教程
AMAZON.CO.JP

いいね! コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)
11月9日 21:38 · 公開

