

 winmostar チュートリアル

LAMMPS

熱伝導率・粘度計算

V10.0.0

2020年3月2日

株式会社クロスアビリティ

本書について

- 本書はWinmostar V10の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方は[ビギナーズガイド](#)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、常温常圧の水の熱伝導率・粘度をGreen-Kubo式で計算する方法を紹介いたします。ここでは目標の温度・圧力でNVEアンサンブルの計算を実行するための平衡化手順（以下）を適用します。
 1. エネルギー最小化 : 座標重なり除去
 2. NVT一定 : 粒子速度の平衡化
 3. NPT一定 : 密度の平衡化
 4. NPT一定 : 平均密度算出→系を平均密度にスケーリング
 5. エネルギー最小化 : 座標重なり除去
 6. NVT一定 : 粒子速度の平衡化
 7. NVE一定 : 平均温度算出→系を平均温度にスケーリング
 8. NVE一定 : 本計算
- ターゲットとなる物質の種類、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。
- 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。相関関数計算のパラメータも調整の余地があります。

動作環境設定

- 本機能を用いるためには、LAMMPSとCygwinのセットアップが必要です。
- <https://winmostar.com/jp/installation/> インストール方法のWindows用のLAMMPSとCygwinの設定手順に従います。

(6) 以下のいずれかのリンク先の手順でWinmostar用のCygwin環境 (cygwin_wmと呼びます) を構築します。

[ビルド済みのcygwin_wmをインストールする場合 \(推奨\)](#)

[cygwin_wmをビルドする場合 \(非推奨、上級者向け\)](#)

[Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合 \(ベータ版\)](#)

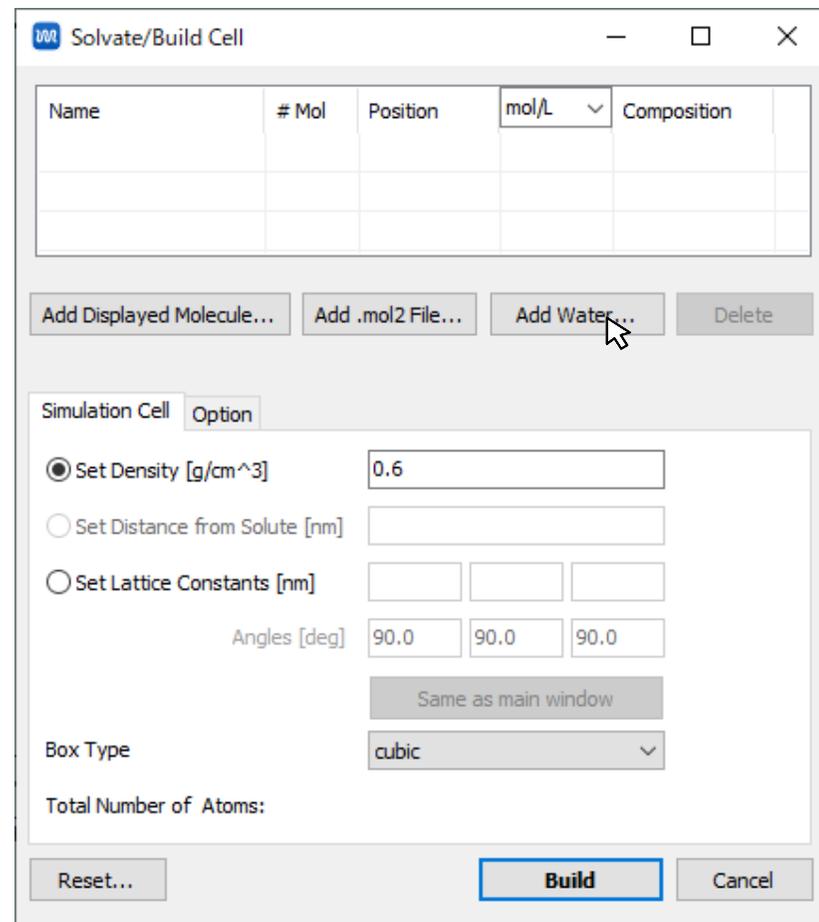
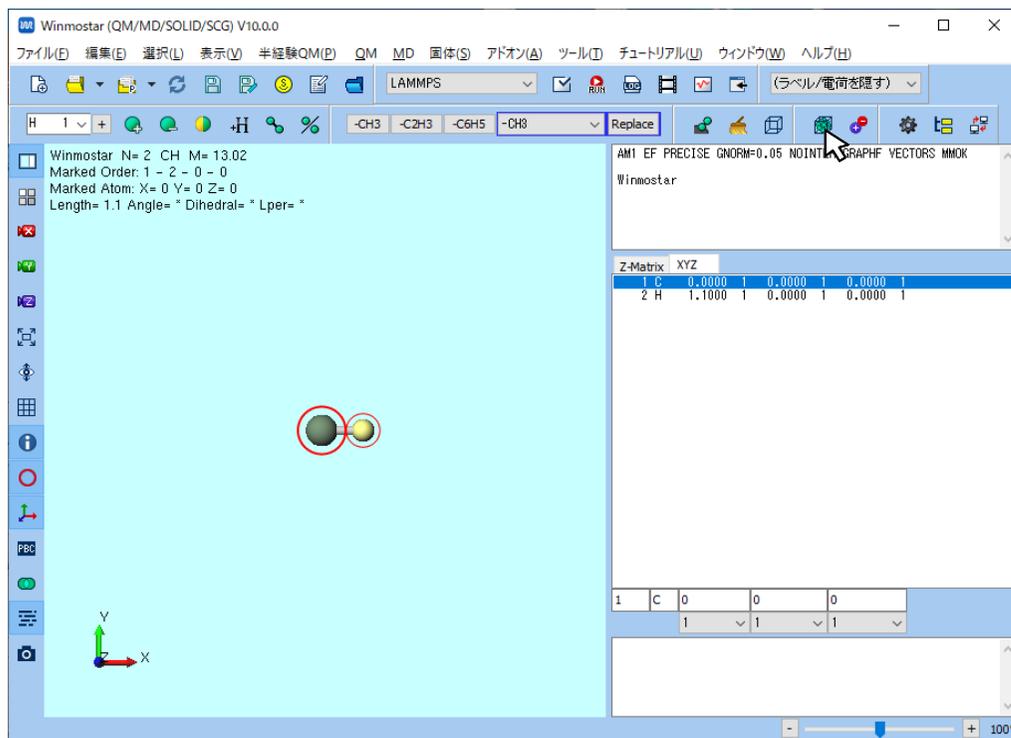
(7) WinmostarをインストールしたWindows PC (ローカルマシン) 上で使用するソルバを、以下のリンク先の手順でインストールします。

[GAMESS](#) [NWChem](#) [LAMMPS](#) [NAMD](#) [Quantum ESPRESSO](#) [FDMNES](#)

※ Gromacs, Amber, MODYLAS, OpenMXは前の手順でインストールするcygwin_wmに含まれます。

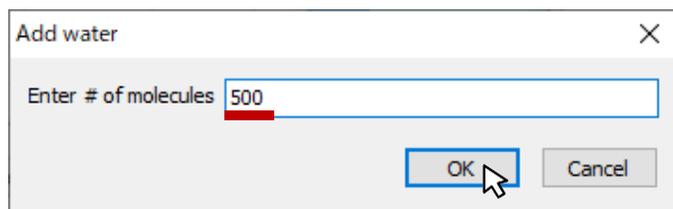
I. 系の作成

1.  (溶媒を配置/セルを構築)をクリックする。
2. **Add Water**をクリックする。

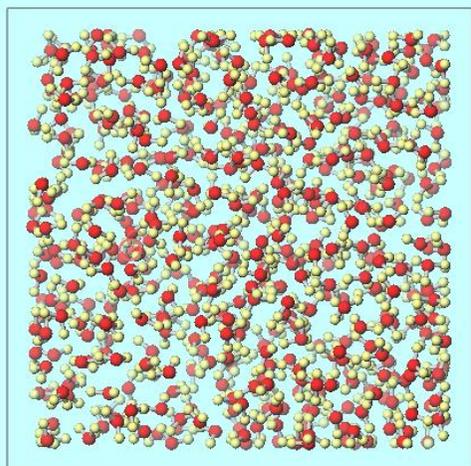


I. 系の作成

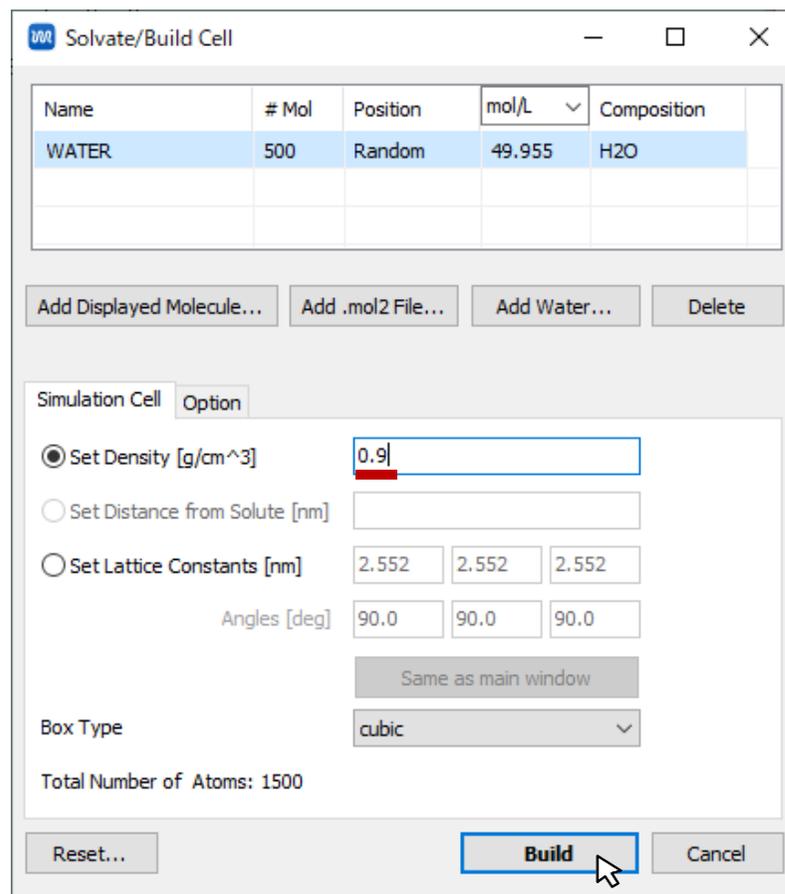
1. **Add water**ウィンドウで**500**と入力し**OK**をクリックする。
2. **Set Density**に**0.9**と入力し、**Build**ボタンをクリックする。



Winmostar N= 1,500 H1000O500 M= 9,007.64
Marked Order: 1 - 2 - 0 - 0
Marked Atom: X= 6.745 Y= 12.181 Z= 2.375
Length= 1.0011 Angle= ° Dihedral= ° Lper= °

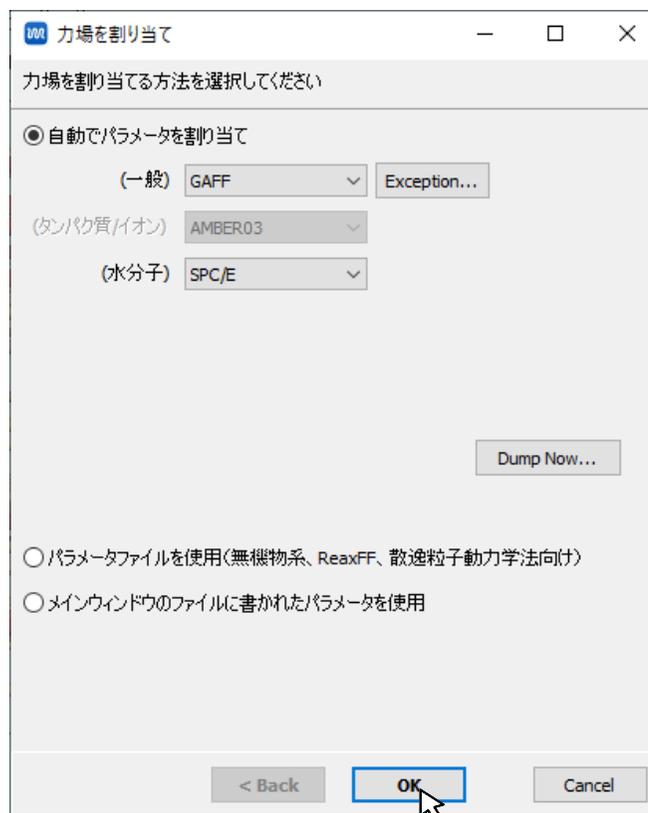
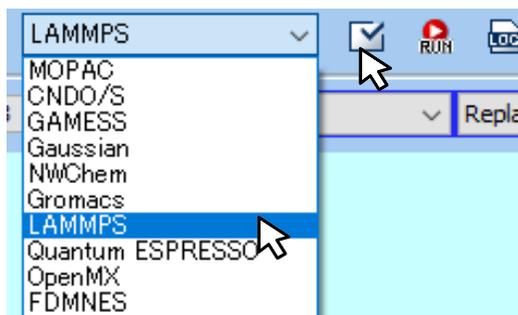


Charges Available: User (Gtot=0.00)
rho= 0.900 g/cm³
a= 25.520 b= 25.520 c= 25.520
alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000



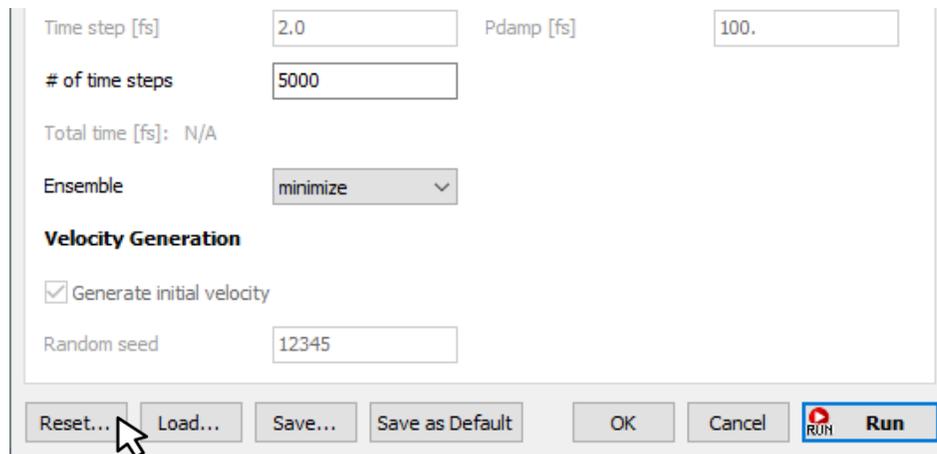
II. 系の平衡化

1. ソルバー一覧から**LAMMPS**を選択し、 (キーワード設定)をクリックする。
2. 力場を割り当てウィンドウが開いたら、右下の**OK**ボタンを押す。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「**正常に力場が設定されました**」と表示される。



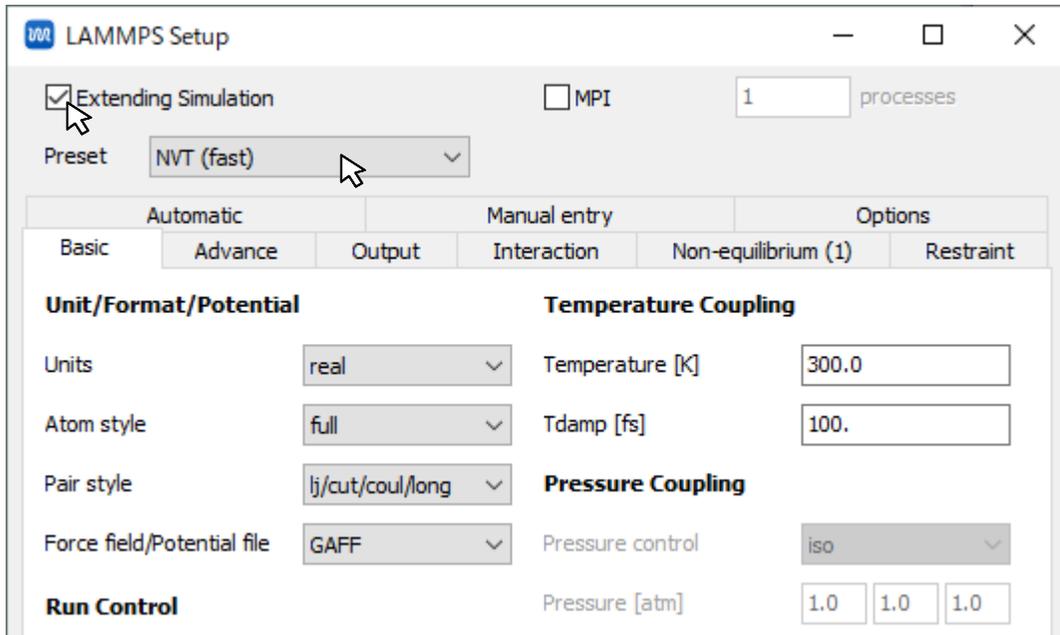
II. 系の平衡化

1. **LAMMPS Setup** ウィンドウ左下の**Reset**ボタンを押し、警告ダイアログで**はい**ボタンをクリックする。
2. ウィンドウ右下の**Run**ボタンをクリックし、座標ファイル名を「kappa」として保存する。



II. 系の平衡化

1. (キーワード設定)をクリックする。
2. **Extending Simulation**にチェックを入れ、**Preset**に**NVT (fast)**を選択する。
3. **Run**をクリックする。



The screenshot shows the LAMMPS Setup window with the following settings:

- Extending Simulation
- MPI
- 1 processes
- Preset: NVT (fast)

The window is divided into sections:

- Automatic**: Basic, Advance, Output
- Manual entry**: Interaction, Non-equilibrium (1)
- Options**: Restraint

Unit/Format/Potential

- Units: real
- Atom style: full
- Pair style: lj/cut/coul/long
- Force field/Potential file: GAFF

Temperature Coupling

- Temperature [K]: 300.0
- Tdamp [fs]: 100.

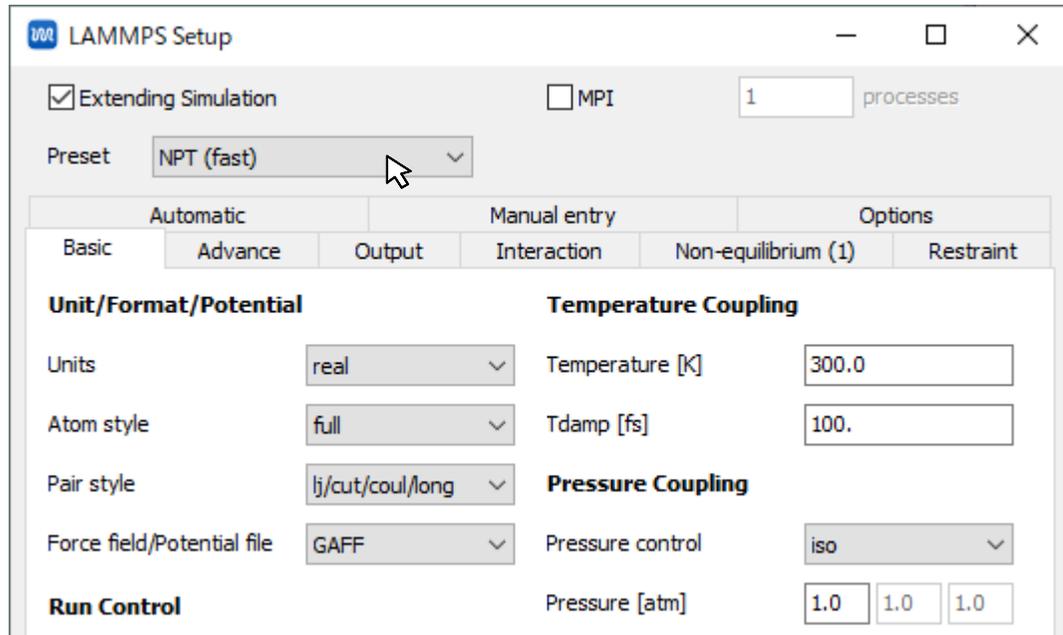
Pressure Coupling

- Pressure control: iso
- Pressure [atm]: 1.0 1.0 1.0

Run Control

II. 系の平衡化

1. (キーワード設定)をクリックする。
2. **Extending Simulation**にチェックを入れ、**Preset**に**NPT (fast)**を選択する。
3. **Run**をクリックする。

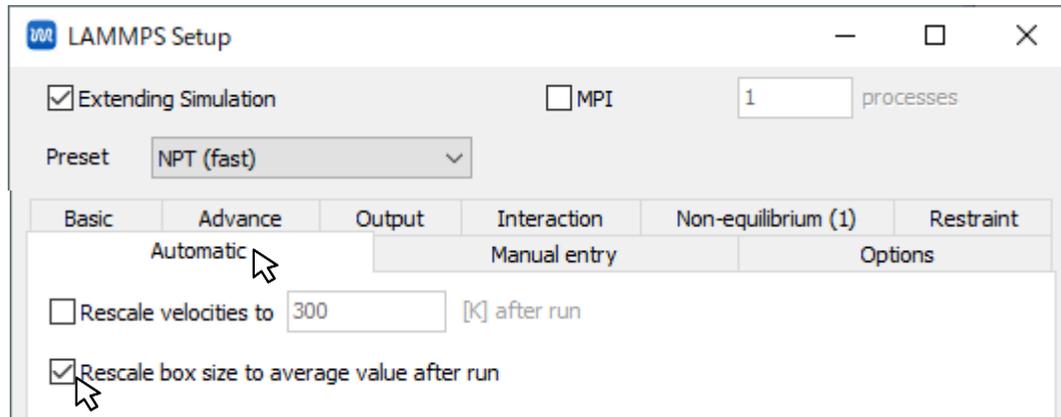


The screenshot shows the LAMMPS Setup window with the following configuration:

- Extending Simulation
- MPI
- 1 processes
- Preset: NPT (fast)
- Automatic: Basic, Advance, Output
- Manual entry: Interaction, Non-equilibrium (1)
- Options: Restraint
- Unit/Format/Potential**
 - Units: real
 - Atom style: full
 - Pair style: lj/cut/coul/long
 - Force field/Potential file: GAFF
- Temperature Coupling**
 - Temperature [K]: 300.0
 - Tdamp [fs]: 100.
- Pressure Coupling**
 - Pressure control: iso
 - Pressure [atm]: 1.0, 1.0, 1.0
- Run Control**

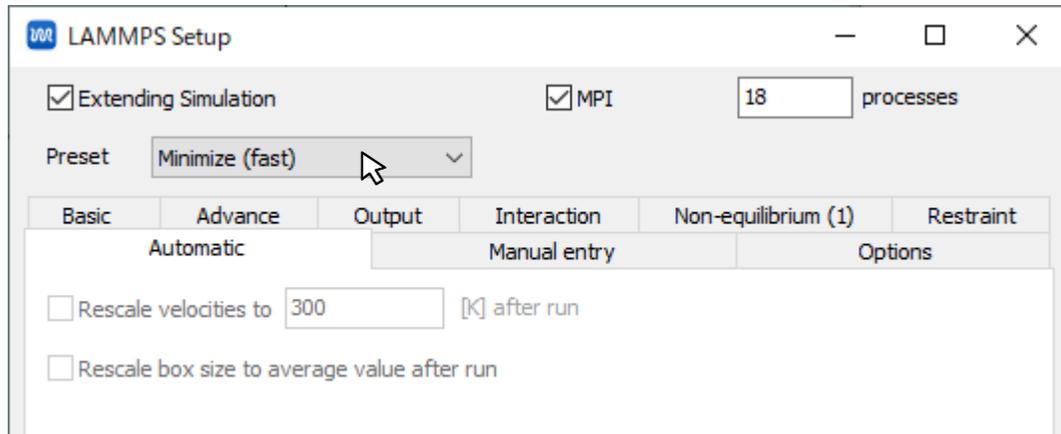
II. 系の平衡化

1. (キーワード設定)をクリックする。
2. **Automatic**タブを開き、
Rescale box size to average value after runにチェックを入れる。
3. **Run**をクリックする。



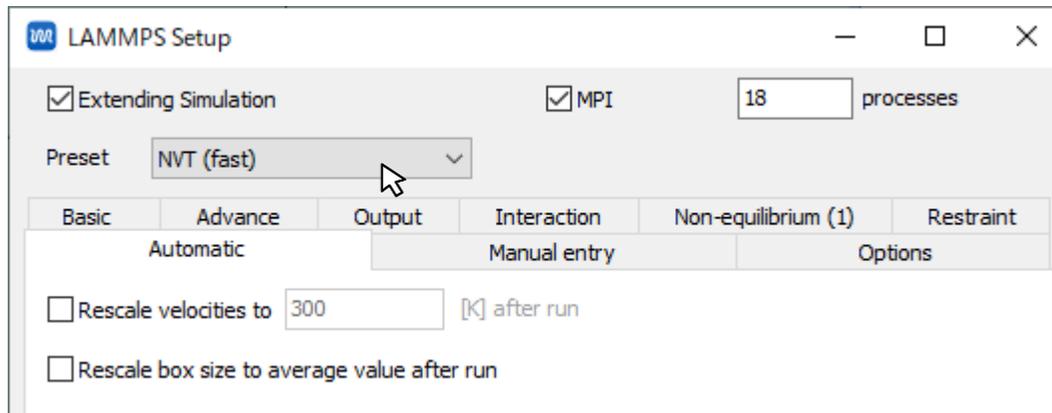
II. 系の平衡化

1. (キーワード設定)をクリックする。
2. **Preset**に**Minimize (fast)**を選択する。
3. **Run**をクリックする。



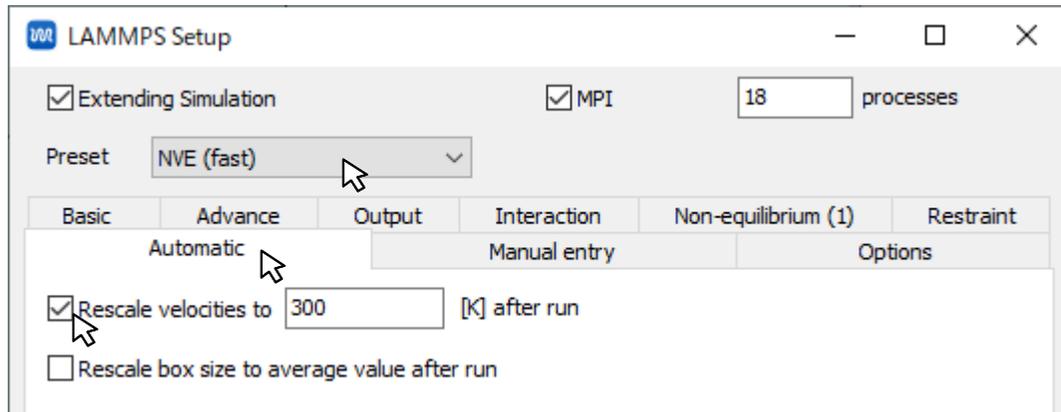
II. 系の平衡化

1. (キーワード設定)をクリックする。
2. **Preset**に**NVT (fast)**を選択する。
3. **Run**をクリックする。



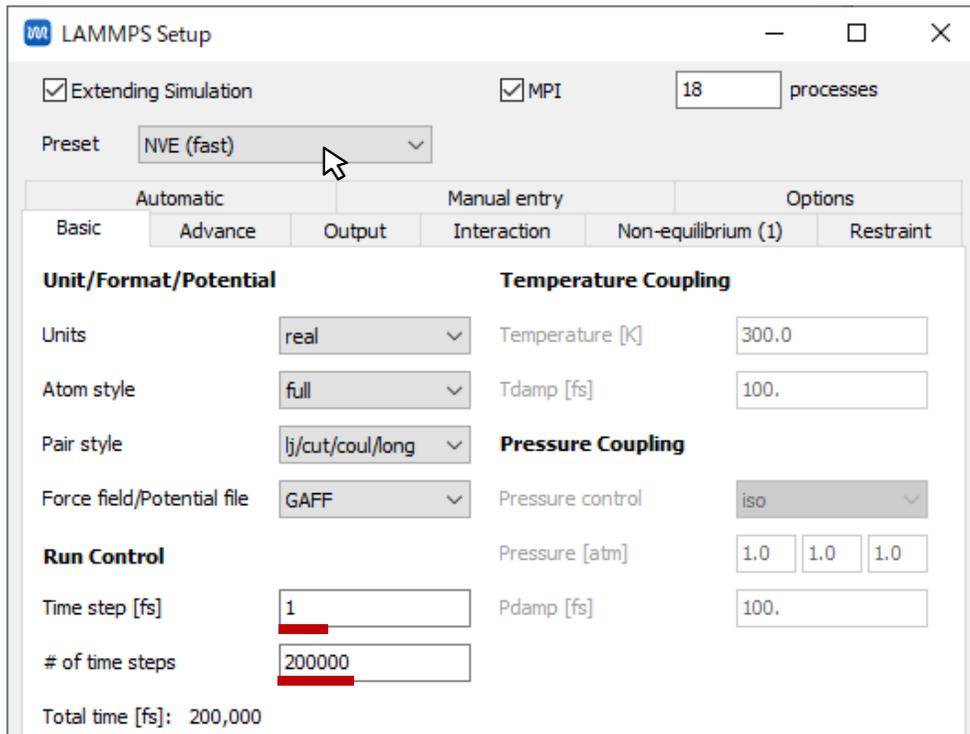
II. 系の平衡化

1. (キーワード設定)をクリックする。
2. **Preset**に**NVE (fast)**を選択し、
Automaticタブの**Rescale velocities to...**にチェックを入れる。
3. **Run**をクリックする。



III. プロダクトラン

1. (キーワード設定)をクリックする。
2. **Basic**タブを開き以下のように変更する。
 - **Time Step**を**1**に
 - **# of TimeSteps**を**200000**に

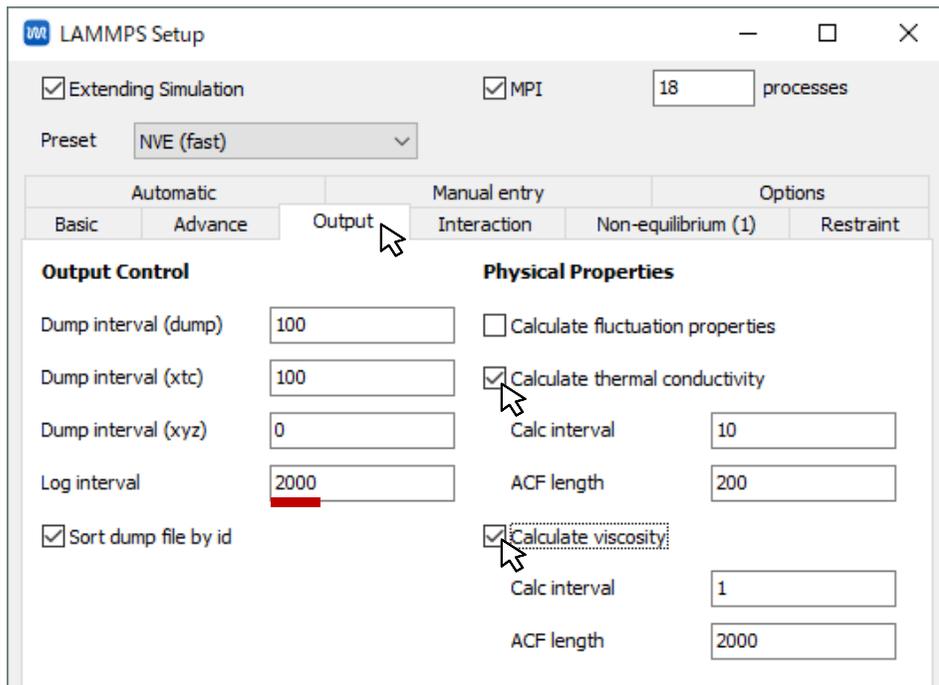


The screenshot shows the LAMMPS Setup window with the following settings:

- Extending Simulation
- MPI
- 18 processes
- Preset: NVE (fast)
- Automatic tab selected
- Basic sub-tab selected
- Unit/Format/Potential: Units (real), Atom style (full), Pair style (lj/cut/coul/long), Force field/Potential file (GAFF)
- Temperature Coupling: Temperature [K] (300.0), Tdamp [fs] (100.)
- Pressure Coupling: Pressure control (iso), Pressure [atm] (1.0, 1.0, 1.0), Pdamp [fs] (100.)
- Run Control: Time step [fs] (1), # of time steps (200000)
- Total time [fs]: 200,000

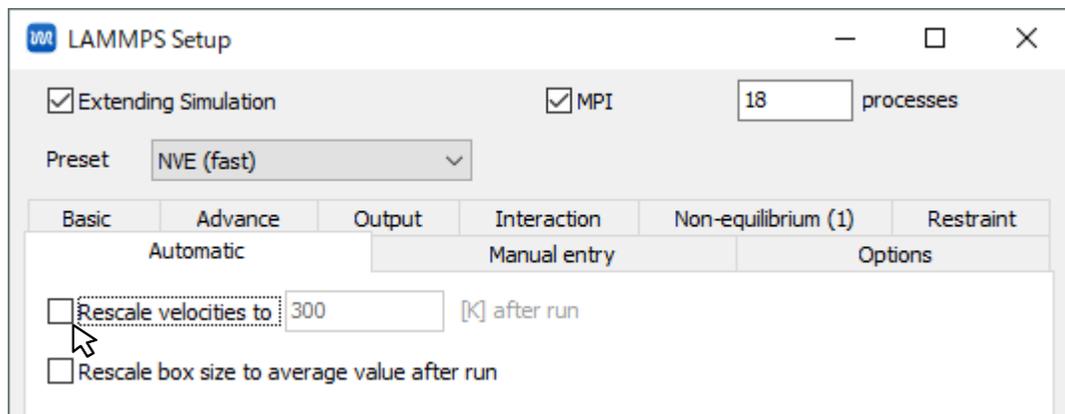
III. プロダクトラン

1. **Outputタブ**を以下のように変更する。
 - **Log Interval**を**2000**に
 - **Calculate thermal conductivity**をチェック
 - **Calculate viscosity**をチェック



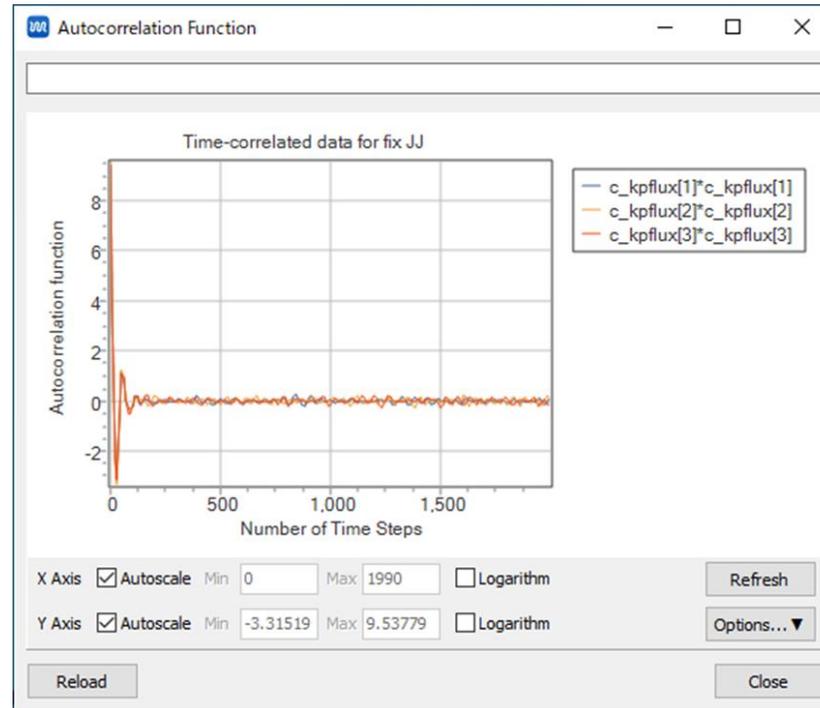
III. プロダクトラン

1. **Automatic**タブの**Rescale velocities to...**のチェックを外す。
2. **Run**をクリックする。



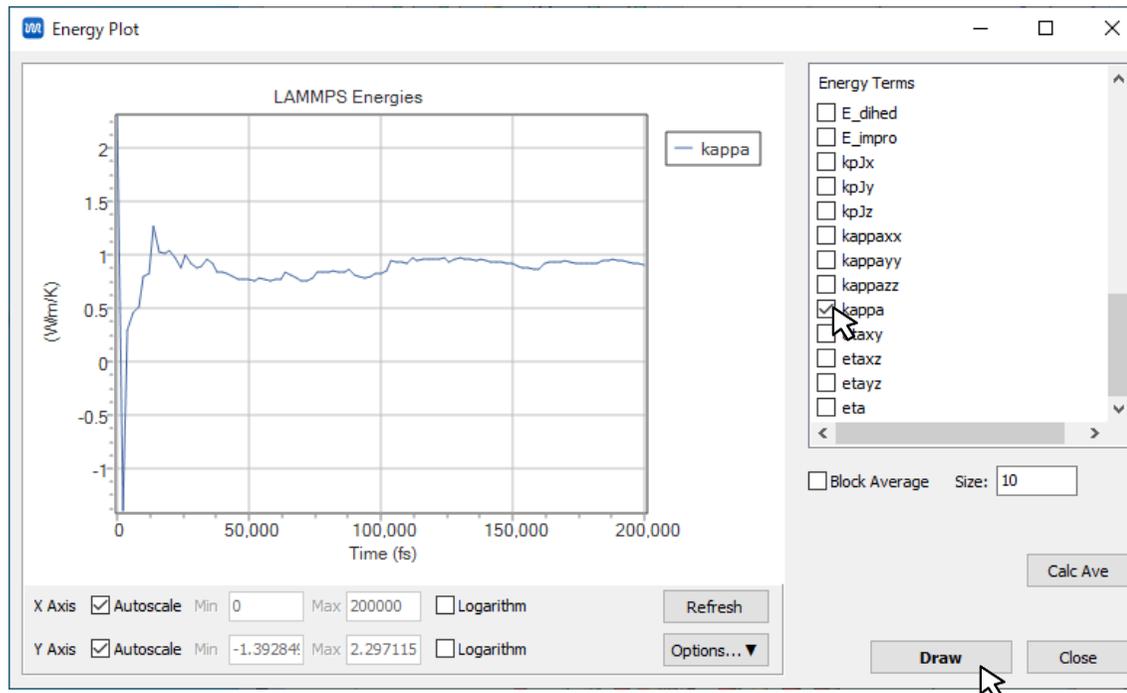
IV. 熱伝導率の取得

1.  (結果解析)をクリックし、各種自己相関関数をクリックし、autocorr_heatflux.dを開く。
2. 熱伝導率の計算に係る自己相関関数が表示されるので、ここではその自己相関関数が十分0に収束する形になっているかを確認する。場合によっては**Logarithm**にチェックを入れ対数プロットで形を確認する。
3. チェック後**Close**ボタンを押す。



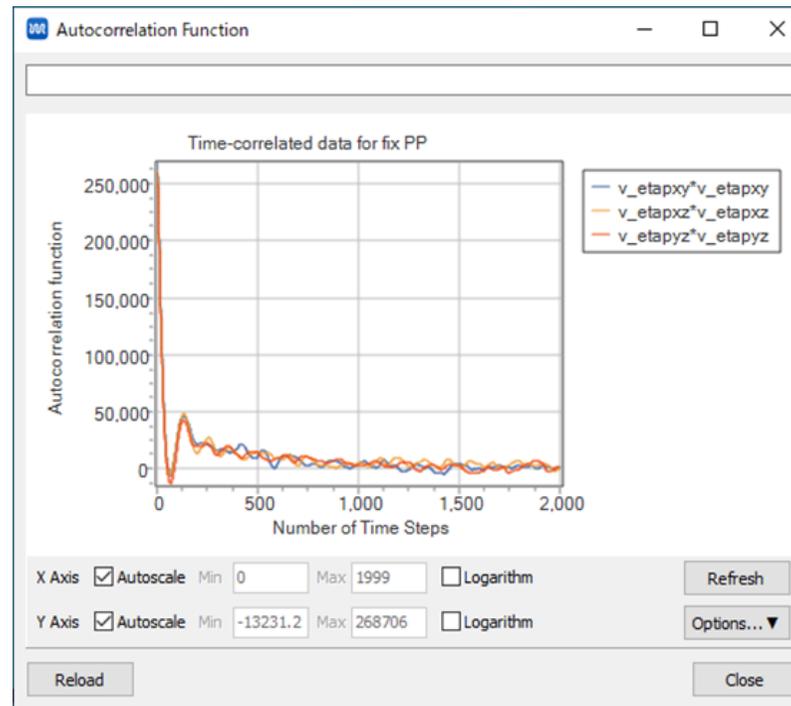
IV. 熱伝導率の取得

1.  (エネルギー変化)をクリックし、デフォルトで選ばれるファイルを開く。
2. **Energy Terms**の**kappa**にチェックを入れ**Draw**ボタンを押すとグラフが得られる。
このグラフは、Green-Kubo式に基づいて計算された熱伝導率の積算平均値の時間変化を示している。



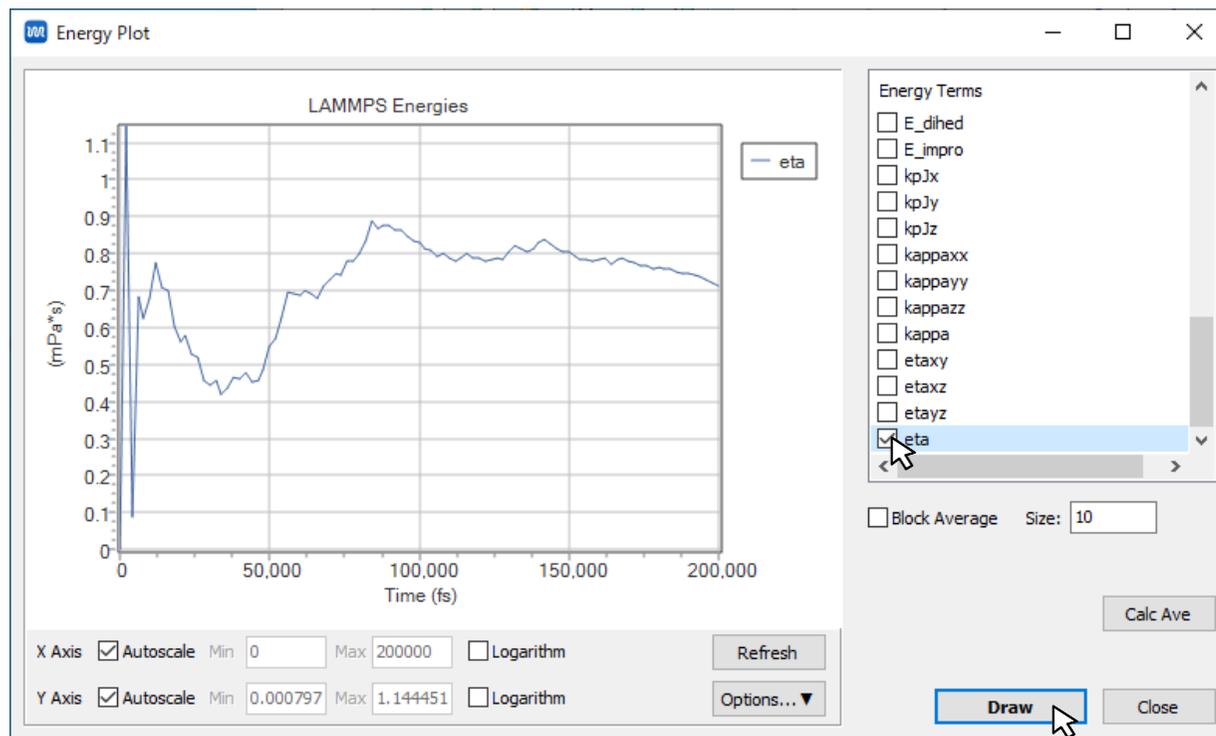
IV. 粘度の取得

1.  (結果解析)をクリックし、**各種自己相関関数**をクリックし、autocorr_pressure.dを開く。
2. 粘度の計算に係る自己相関関数が表示されるので、ここではその自己相関関数が十分0に収束する形になっているかを確認する。場合によっては**Logarithm**にチェックを入れ対数プロットで形を確認する。
3. チェック後**Close**ボタンを押す。



IV. 粘度の取得

1.  (エネルギー変化)をクリックし、デフォルトで選ばれるファイルを開く。
2. **Energy Terms**の**eta**にチェックを入れ**Draw**ボタンを押すとグラフが得られる。
このグラフは、Green-Kubo式に基づいて計算された粘度の積算平均値の時間変化を示している。



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、基礎編チュートリアルについては[Winmostar基礎講習会](#)へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては[個別講習会](#)のご依頼をご検討ください。
- 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