### **M** 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

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.



- 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<u>ユーザマニュアル</u>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。
  - <u>Winmostar基礎講習会</u>: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<u>よくある質問</u>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。



- 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。
- <u>https://winmostar.com/jp/installation/</u>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。

<u>ビルド済みのcygwin wmをインストールする場合(推奨)</u> 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。

<u>GAMESS</u><u>NWChem</u><u>LAMMPS</u><u>NAMD</u><u>Quantum ESPRESSO</u><u>FDMNES</u> ※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。



#### 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。



| 🚾 Solvate/Build Cell    |            |            |          | -     |          | ×  |
|-------------------------|------------|------------|----------|-------|----------|----|
| Name                    | # Mol      | Position   | mol/L    | ~ Com | position |    |
|                         |            |            |          |       |          |    |
|                         |            |            |          |       |          |    |
| Add Displayed Molecule. | Add        | .mol2 File | Add W    | /ater | Dele     | te |
|                         |            |            |          | 43    |          |    |
| Simulation Cell Option  |            |            |          |       |          |    |
| Set Density [g/cm^3]    | ]          | 0.6        |          |       |          |    |
| O Set Distance from So  | lute [nm]  |            |          |       |          |    |
| O Set Lattice Constants | s [nm]     |            |          |       |          |    |
| Ang                     | gles [deg] | 90.0 90    | ).0      | 90.0  |          |    |
|                         |            | Same as    | main wir | ndow  |          |    |
| Box Type                |            | cubic      |          | ~     |          |    |
| Total Number of Atoms:  | :          |            |          |       |          |    |
| Reset                   |            | C          | Bu       | ild   | Cano     | el |

#### I. 系の作成

- 1. Add waterウインドウで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。

|  | Solvate/Build Cell – 🗆 🗙  |
|--|---|
| Add water X<br>Enter # of molecules 500<br>OK Cancel   | Name     # Mol     Position     mol/L     Composition       WATER     500     Random     49.955     H2O             |
| Winmostar N= 1,500 H1000O500 M= 9,007.64<br>Marked Order: 1 - 2 - 0 - 0<br>Marked Atom: X= 6.745 Y= 12.161 Z= 2.375<br>Length= 1.0011 Angle= * Dihedral= * Lper= * | Add Displayed Molecule Add .mol2 File Add Water Delete Simulation Cell Option                                       |
|  | Set Density [g/cm^3]     Set Distance from Solute [nm]     Set Lattice Constants [nm]     2.552     2.552     2.552 |
|  | Angles [deg] 90.0 90.0 90.0 Same as main window   |
|  | Box Type cubic ~<br>Total Number of Atoms: 1500   |
| Charges Available: User (Qtot=0.00)<br>rho= 0.900 g/cm^3<br>a= 25.520 b= 25.520 c= 25.520<br>alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000                              | Reset Build Cancel  |

- 1. ソルバー覧からLAMMPSを選択し、 M (キーワード設定)をクリックする。
- 2. 力場を割り当てウインドウが開いたら、右下のOKボタンを押す。黒いターミナルウイ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。



| 🔤 力場を割り当て           |             |           | _      |         | ×   |
|---------------------|-------------|-----------|--------|---------|-----|
| 力場を割り当てる方法          | まを選択してください  |           |        |         |     |
| ● 自動でパラメータを         | 書的当て        |           |        |         |     |
| (一般)                | GAFF        | ✓ Except  | ption  |         |     |
| (タンパク質/イオン)         | AMBER03     | $\sim$    |        |         |     |
| <mark>(</mark> 水分子) | SPC/E       | $\sim$    |        |         |     |
|                     |             |           |        |         |     |
|                     |             |           |        |         |     |
|                     |             |           |        |         |     |
|                     |             |           | Du     | Imp Now |     |
|                     |             |           |        |         |     |
| ○ パラメータファイルを        | €使用(無機物系、R  | leaxFF、散递 | ;粒子動力学 | 法向け〉    |     |
| <br>○ メインウィンドウのフ    | ファイルに書かれたパき | ラメータを使用   |        |         |     |
|                     |             |           |        |         |     |
|                     |             |           |        |         |     |
|                     |             |           |        |         |     |
|                     | < Back      | ОК        |        | Can     | cel |

- 1. LAMMPS Setupウインドウ左下の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. ウインドウ右下の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。

| Time step [fs]             | 2.0             | Pdamp [fs] | 100.           |  |
|----------------------------|-----------------|------------|----------------|--|
| # of time steps            | 5000            | ]          |                |  |
| Total time [fs]: N/A       |                 |            |                |  |
| Ensemble                   | minimize $\lor$ | ]          |                |  |
| Velocity Generation        |                 |            |                |  |
| 🗹 Generate initial velocit | tγ              |            |                |  |
| Random seed                | 12345           | ]          |                |  |
| Reset Load                 | Save Save as [  | Default OK | Cancel RUN Run |  |

- 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。

|                 |                   |   | _   |  | ×   |
|-----------------|-------------------|---|---|--|---|
|                 | MPI               | 1   | proc  | esses  |   |
| 5~~             |                   |   |   |  |   |
| Mar             | nual entry        |   | Opti  | ons  |   |
| Output Int      | eraction          | Non-equilibri   | ium (1)   | Restraint  |   |
|                 | Temperat          | ure Coupling  | J   |  |   |
| ~               | Temperatur        | e [K]   | 300.0   |  |   |
| ~               | Tdamp [fs]        |   | 100.  |  |   |
| t/coul/long 🗸 🗸 | Pressure          | Coupling  |   |  |   |
| = v             | Pressure co       | ntrol   | iso   |  | ~   |
|                 | Pressure [a       | tm]   | 1.0 1.  | 0 1.0  |   |
|                 | Mar<br>Output Int | MPI<br>Manual entry<br>Output Interaction<br>Temperatur<br>Temperatur<br>Tdamp [fs]<br>t/coul/long Pressure (o<br>Pressure (o<br>Pressure (a) | MPI 1<br>MPI 1<br>Manual entry<br>Output Interaction Non-equilibrit<br>Temperature Coupling<br>Temperature [K]<br>Tdamp [fs]<br>t/coul/long Pressure Coupling<br>Pressure control<br>Pressure [atm] | MPI 1 proc<br>MI 1 proc<br>Manual entry Option<br>Output Interaction Non-equilibrium (1)<br>Temperature Coupling<br>Temperature [K] 300.0<br>Tdamp [fs] 100.<br>Pressure Coupling<br>Pressure control iso<br>Pressure [atm] 1.0 1. | MPI     1     processes       Manual entry     Options       Output     Interaction     Non-equilibrium (1)       Restrature Coupling       Temperature [K]     300.0       Tdamp [fs]     100.       Tdamp [fs]     100.       Pressure Coupling       Pressure control     iso       Pressure [atm]     1.0     1.0 |

- 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。

| 🚾 LAMMPS Setup      | 0            |                    |            |           | _           |        | ×    |
|---------------------|--------------|--------------------|------------|-----------|-------------|--------|------|
| Extending Simu      | lation       |                    | MPI        | 1         | pro         | cesses |      |
| Preset NPT (fa      | ast)         | $\triangleright$ ~ |            |           |             |        |      |
| Automa              | tic          | Ma                 | nual entry |           | Opt         | ions   |      |
| Basic Ad            | vance O      | utput In           | teraction  | Non-equi  | librium (1) | Restra | aint |
| Unit/Format/Po      | otential     |                    | Tempera    | ture Coup | ling        |        |      |
| Units               | real         | ~                  | Temperati  | ure [K]   | 300.0       |        |      |
| Atom style          | full         | ~                  | Tdamp [fs] | ]         | 100.        |        |      |
| Pair style          | lj/cut/      | coul/long ~        | Pressure   | Coupling  |             |        |      |
| Force field/Potenti | al file GAFF | ~                  | Pressure o | ontrol    | iso         |        | ~    |
| Run Control         |              |                    | Pressure [ | atm]      | 1.0 1       | .0 1.0 |      |

- 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。



- 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。

|          | PS Setup            |                |               | _                   |           |
|----------|---------------------|----------------|---------------|---------------------|-----------|
| ✓ Extend | ling Simulation     |                |               | 18                  | processes |
| Preset   | Minimize (fast)     | $\searrow$     | ·             |                     |           |
| Basic    | Advance             | Output         | Interaction   | Non-equilibrium (1) | Restraint |
|          | Automatic           |                | Manual entry  | (                   | Options   |
| Rescale  | e velocities to 300 |                | [K] after run |                     |           |
| Rescale  | e box size to avera | ge value after | run           |                     |           |
|          |                     |                |               |                     |           |

- 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。

| 🚾 lammp   | 'S Setup         |                 |               |                 | - 0       | ×      |
|-----------|------------------|-----------------|---------------|-----------------|-----------|--------|
| 🗹 Extendi | ng Simulation    |                 | MPI           | 18              | processes |        |
| Preset    | NVT (fast)       | ß               | 1             |                 |           |        |
| Basic     | Advance          | Output          | Interaction   | Non-equilibrium | (1) Res   | traint |
|           | Automatic        |                 | Manual entry  |                 | Options   |        |
| Rescale   | velocities to 30 | 0               | [K] after run |                 |           |        |
| Rescale   | box size to aver | age value after | run           |                 |           |        |

- 1. **(キーワード設定**)をクリックする。
- 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。

| M LAMMPS Setup                   |                 | _                   |           |
|----------------------------------|-----------------|---------------------|-----------|
| Extending Simulation             |                 | 18 pro              | cesses    |
| Preset NVE (fast)                | ~               |                     |           |
| Basic Advance Out                | put Interaction | Non-equilibrium (1) | Restraint |
| Automatic                        | Manual entry    | Opt                 | ions      |
| Rescale velocities to 300        | [K] after run   |                     |           |
| Rescale box size to average valu | ie after run    |                     |           |

## 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20000に

| M LAMMPS Setup             |                  |        |            |           |           | _      |        | ×      |
|----------------------------|------------------|--------|------------|-----------|-----------|--------|--------|--------|
| Extending Simulation       |                  |        |            |           | 18        | pro    | cesses |        |
| Preset NVE (fast)          | `                | ]      |            |           |           |        |        |        |
| Automatic                  |                  | Mar    | nual entry |           |           | Opti   | ons    |        |
| Basic Advance              | Output           | Int    | eraction   | Non-e     | quilibriu | ım (1) | Restra | aint   |
| Unit/Format/Potentia       | I                |        | Tempera    | ature Co  | upling    |        |        |        |
| Units                      | real             | $\sim$ | Temperat   | ure [K]   |           | 300.0  |        |        |
| Atom style                 | full             | $\sim$ | Tdamp [fs  | ]         |           | 100.   |        |        |
| Pair style                 | lj/cut/coul/long | $\sim$ | Pressure   | e Couplin | g         |        |        |        |
| Force field/Potential file | GAFF             | $\sim$ | Pressure o | control   |           | iso    |        | $\sim$ |
| Run Control                |                  |        | Pressure ( | [atm]     |           | 1.0 1. | 0 1.0  |        |
| Time step [fs]             | 1                |        | Pdamp [fs  | ]         |           | 100.   |        |        |
| # 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

| M LAMMPS Setup       |        |              |                   | _         |        | ×    |
|----------------------|--------|--------------|-------------------|-----------|--------|------|
| Extending Simulation |        |              | 18                | pro       | cesses |      |
| Preset NVE (fast)    | ~      |              |                   |           |        |      |
| Automatic            |        | Manual entry |                   | Opt       | ions   |      |
| Basic Advance        | Output | Interaction  | Non-equilibri     | um (1)    | Restra | aint |
| Output Control       | 45     | Physical     | Properties        |           |        |      |
| Dump interval (dump) | 100    | Calcula      | te fluctuation pr | roperties |        |      |
| Dump interval (xtc)  | 100    |              | te thermal cond   | uctivity  |        |      |
| Dump interval (xyz)  | 0      | Calc in      | terval            | 10        |        |      |
| Log interval         | 2000   | ACF le       | ngth              | 200       |        |      |
| Sort dump file by id |        |              | te viscosity      |           |        |      |
|                      |        | Calc in      | terval            | 1         |        |      |
|                      |        | ACF le       | ngth              | 2000      |        |      |

## 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。

| M LAMMP   | PS Setup            |                      |                             | _                   |           |
|-----------|---------------------|----------------------|-----------------------------|---------------------|-----------|
| 🗹 Extendi | ing Simulation      |                      |                             | 18 pro              | cesses    |
| Preset    | NVE (fast)          | ~                    | ]                           |                     |           |
| Basic     | Advance             | Output               | Interaction                 | Non-equilibrium (1) | Restraint |
|           | Automatic           |                      | Manual entry                | Opt                 | ions      |
| Rescale   | e velocities to 300 | )<br>age value after | K] after run<br>r <b>un</b> |                     |           |

#### IV. 熱伝導率の取得

- 1. **〇 (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. M (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. **〇 (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. M (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。





• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>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<u>Winmostar基礎講習会</u> へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては<u>個別講習会</u>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<u>よくある質問</u>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、<u>お問合せフォーム</u>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