

 winmostar チュートリアル

# LAMMPS

## 基礎編

V10.4.3

2021年4月1日

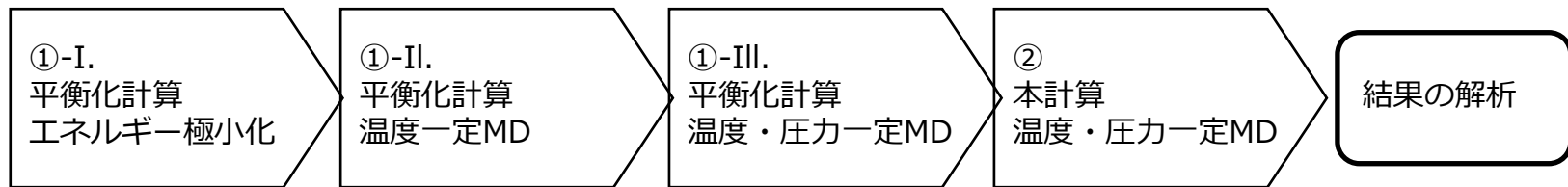
株式会社クロスアビリティ

# 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

- 常温常圧のテトラヒドロフラン（THF）の液体について、系の作成と平衡化計算と本計算を実行し、各種エネルギーとトラジェクトリの確認、動径分布関数、自己拡散係数、比熱、圧縮率の算出を行います。



## 注意点：

- 本チュートリアルでは、実施時間を短縮するため平衡化計算のステップ数を短めに設定しています。
- 同様の理由で計算精度は落とし、ソルバ間で完全に計算条件を一致させることは難しいため、他のソルバで計算した結果と異なることがあります。
- 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。
- 平衡化計算、本計算のステップ数が大きいほど、再現性が良く、信頼性の高い結果を取得することができます。
- 相互作用計算方法や力場の種類も、計算結果に大きく影響します。

# 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 \(ベータ版\)](#)

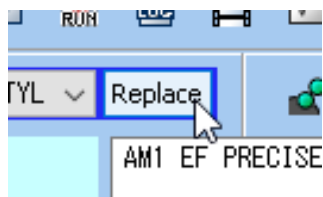
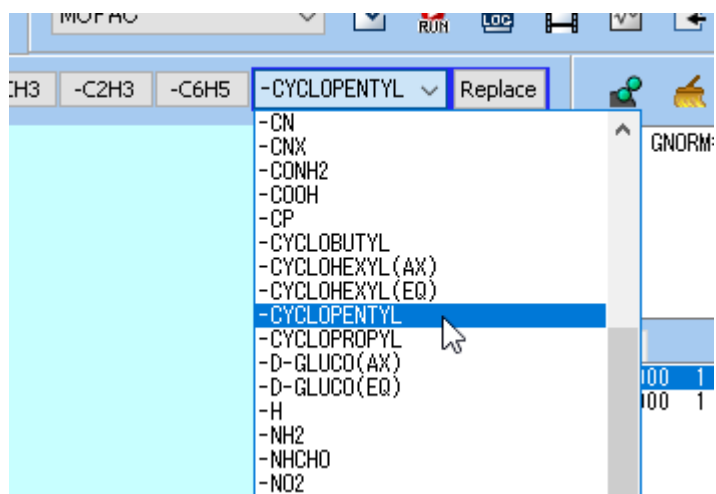
(7) WinmostarをインストールしたWindows PC (ローカルマシン) 上で使用するソルバを、以下のリンク先の手順でインストールします。

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

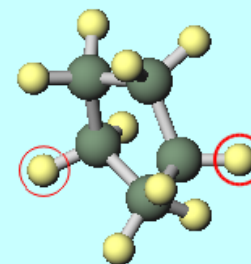
※ Gromacs, Amber, MODYLAS, OpenMXは前の手順でインストールするcygwin\_wmに含まれます。

# I. 分子を作成

1. ファイルメニュー | 新規をクリックする。
2. ツールバーの**フラグメント**を選択プルダウンメニューで**-CYCLOPENTYL**を選択する。
3. **Replace**ボタンをクリックするとシクロペンタンが作成される。

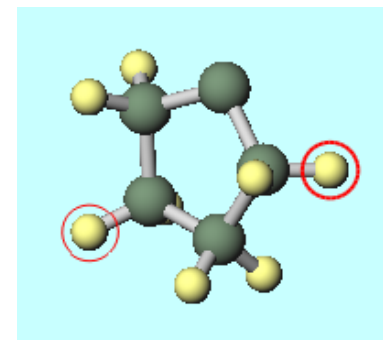
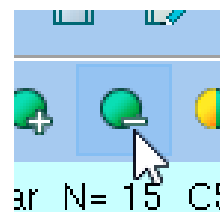
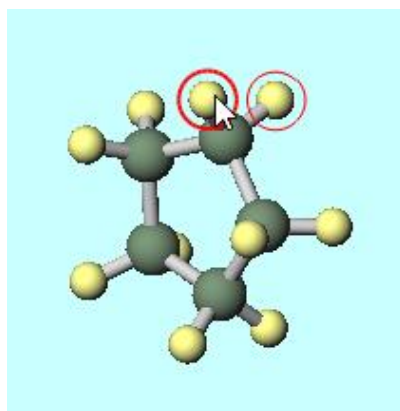


Winmostar N= 15 C5H10 M= 70.13  
Marked Order: 2 - 15 - 1 - 0  
Marked Atom: X= 1.1 Y= 0 Z= 0  
Length= 4.1707 Angle= 10.069 Dihedral= \* Lper= \*





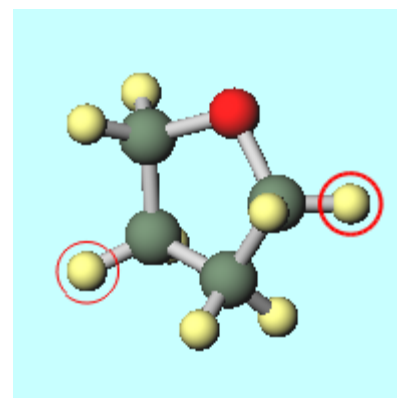
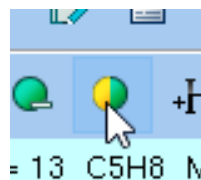
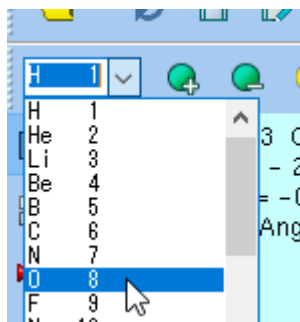
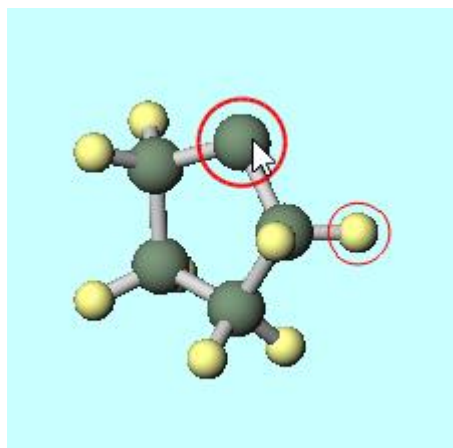
# I. 分子を作成

1. ある炭素（緑）に接続した2つの水素（黄色）を続けてクリックする。
2. 原子を削除ボタンを2回押す。



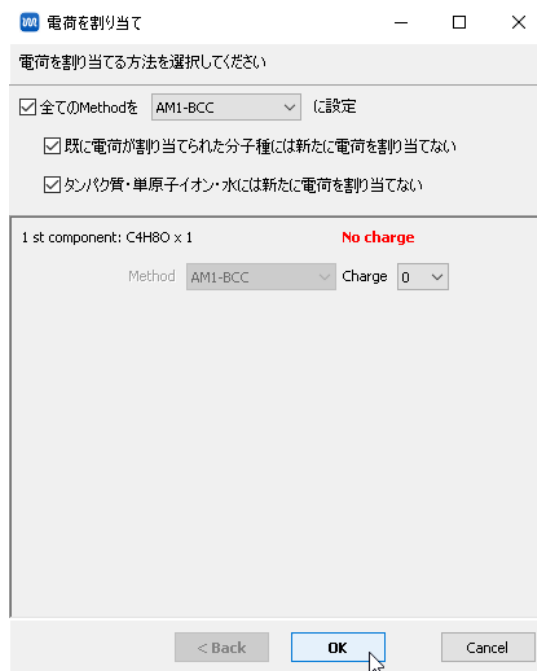
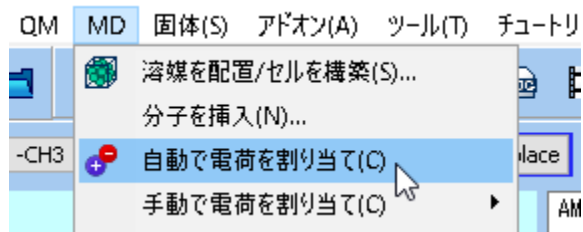
# I. 分子を作成

1. 水素を削除した炭素をクリックする。
2. 編集操作向けの元素を選択プルダウンメニューから「O 8」（酸素）を選択する。
3.  元素を変更ボタンをクリックするとTHF分子となる。
4.  簡易構造最適化ボタンを押し原子配置を自動調整する。



## II. 電荷を割り当て

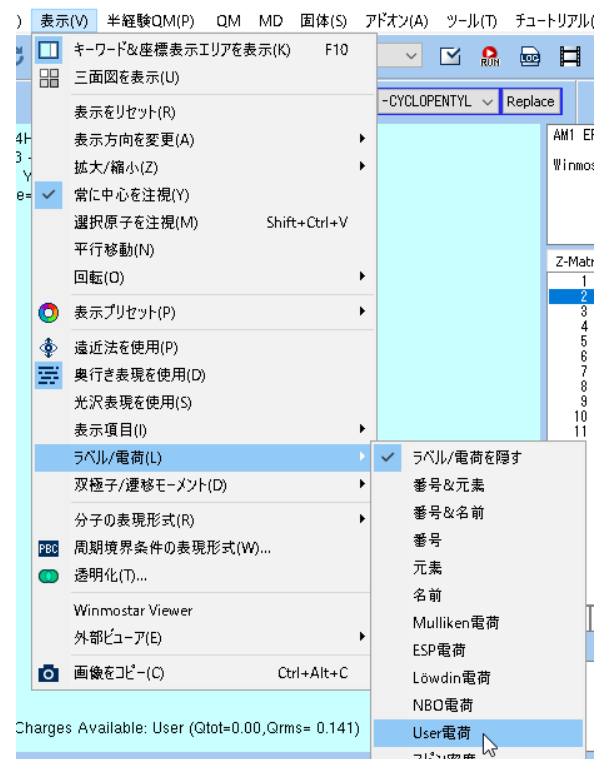
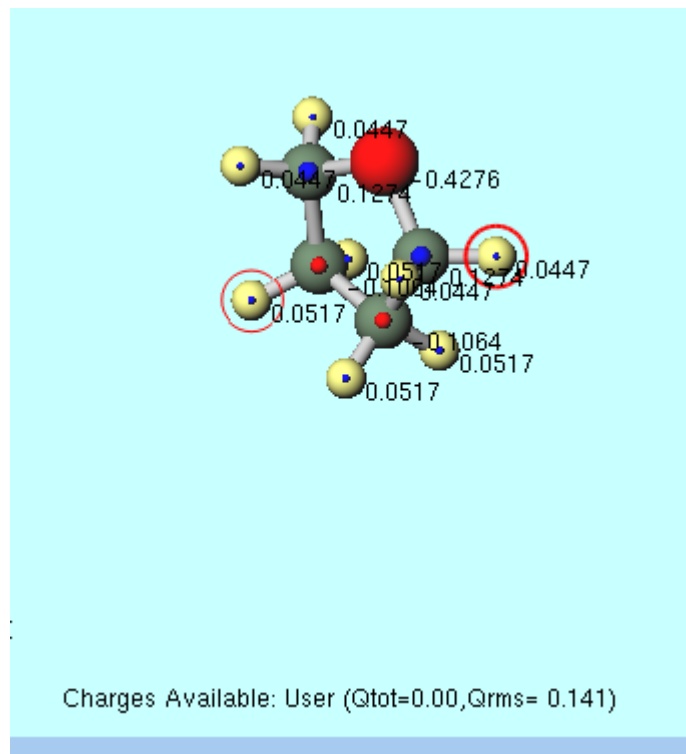
1. MDメニュー | 自動で電荷を割り当てをクリックする。
2. 電荷を割り当てウィンドウでOKボタンを押す。
3. 黒いウィンドウが何度か出現した後、「正常に電荷が設定されました」と表示されたらOKボタンを押す。






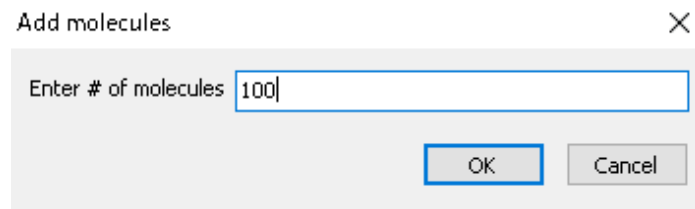
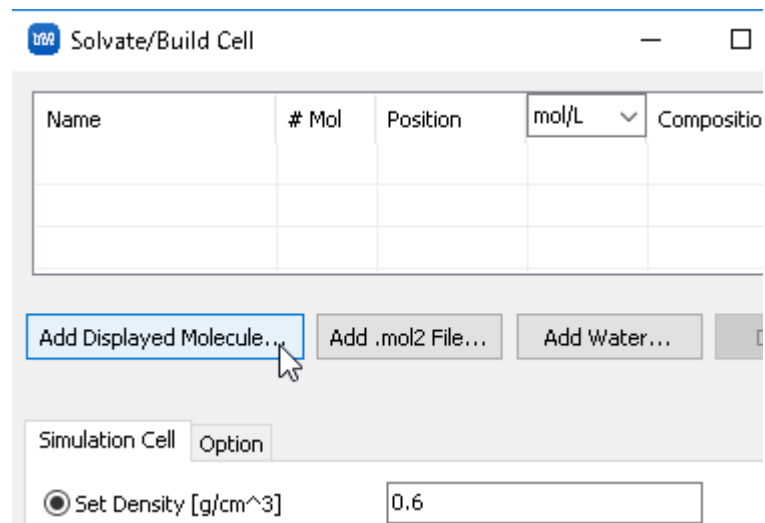
## II. 電荷を割り当て

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する。
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**をクリックする。
3. 電荷のグラフィカル表示を解除したい場合は**表示 | ラベル/電荷 | ラベル/電荷を隠す**をクリックする。



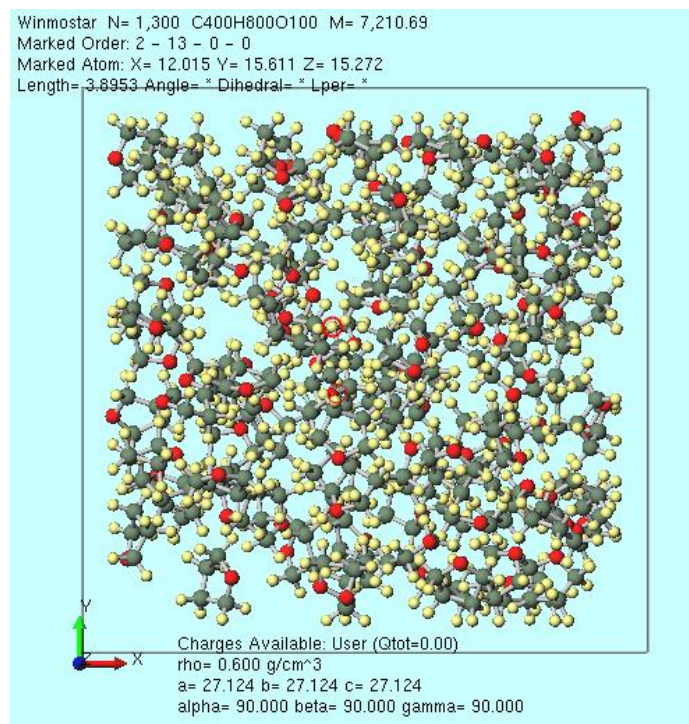
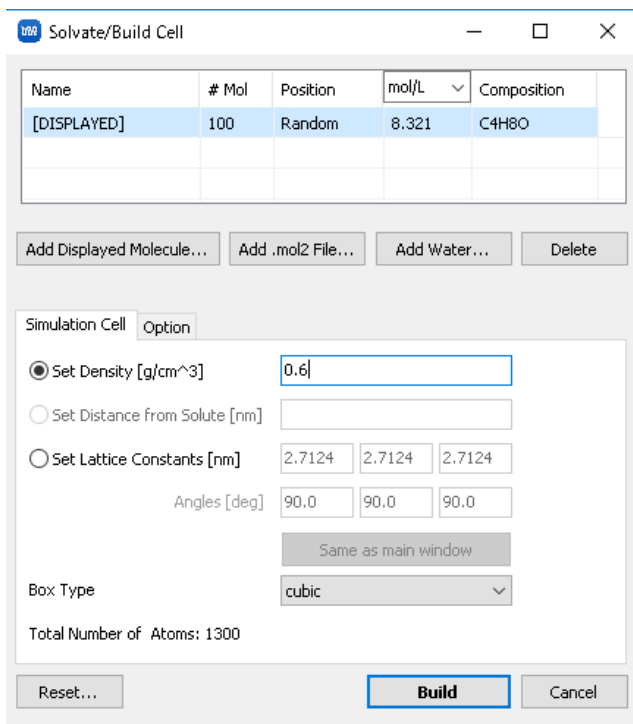
# III.液相を作成

1.  溶媒を配置/セルを構築ボタンをクリックする。
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**ボタンを押す。



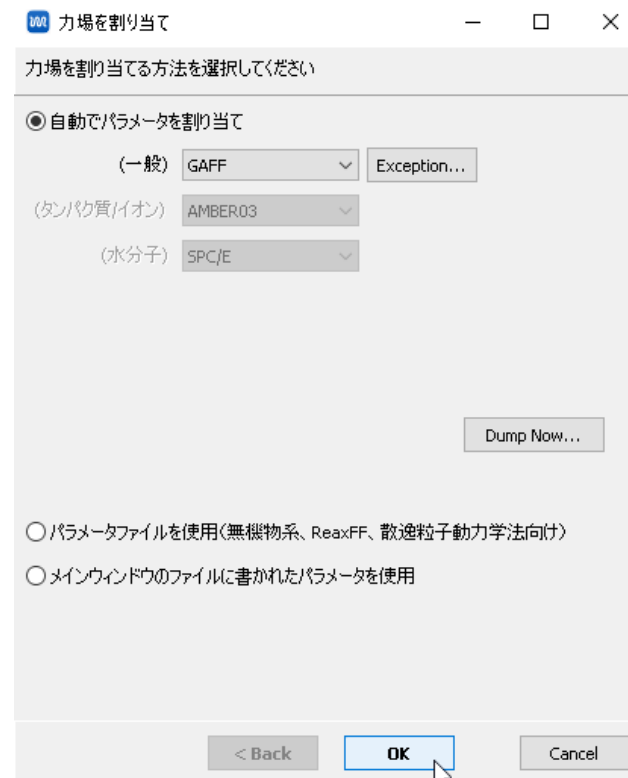
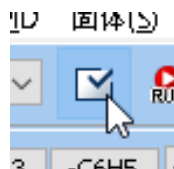
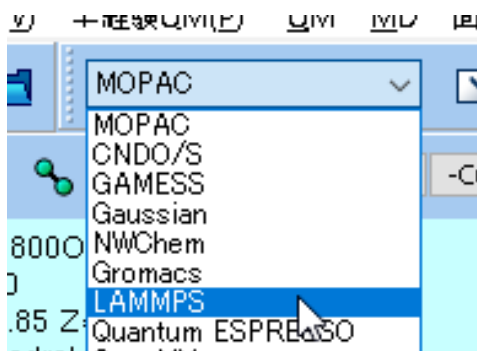
# III.液相を作成

1. **Lattice Constants [nm]**に作成される系のサイズが表示されるので、使用予定のカットオフ半径（今回は1.0 nm）の倍より大きいことを確認する。
2. **Build**ボタンを押すと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「**正常に処理が終了しました**」と表示される。THF分子が0.6 g/cm<sup>3</sup>で100個並んだ系が出現する。系のサイズ、密度は分子表示エリア下部に表示される。



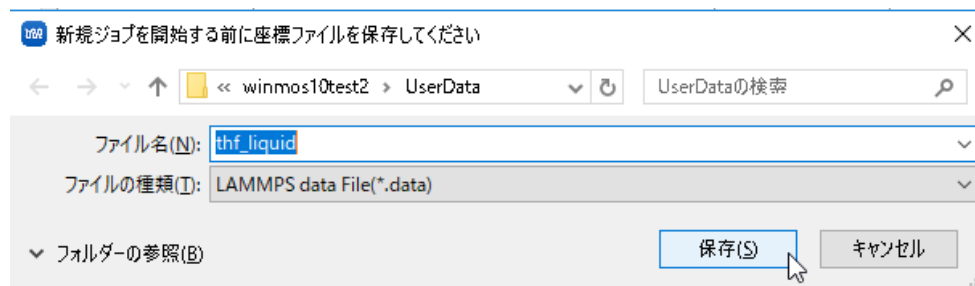
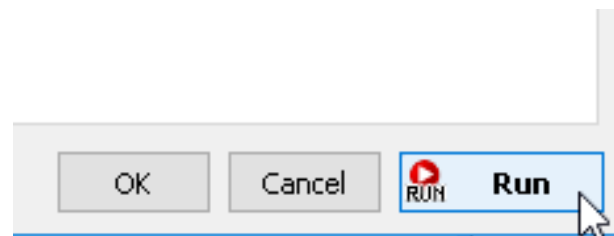
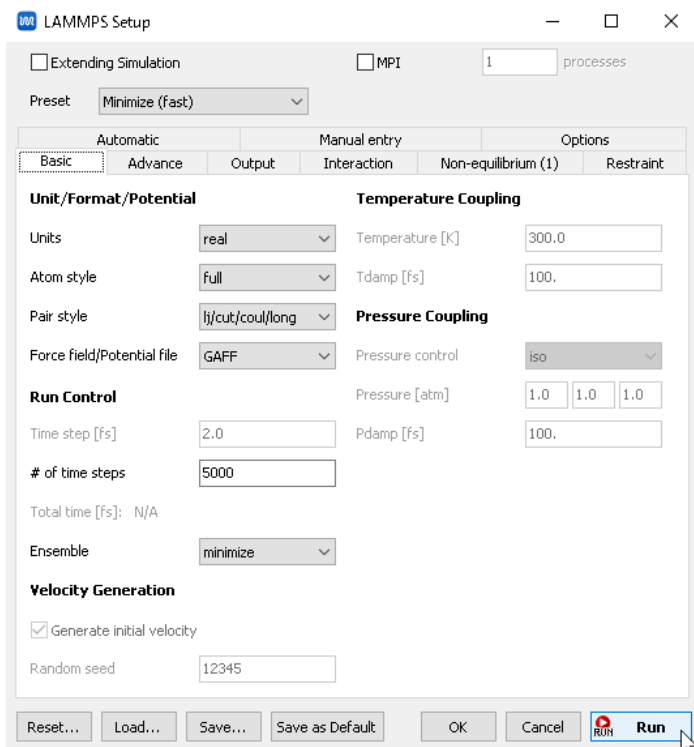
# IV. 平衡化（エネルギー極小化）

1. ソルバを選択プルダウンメニューでLAMMPSを選択する。
2. キーワード設定ボタンを押す。
3. 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。



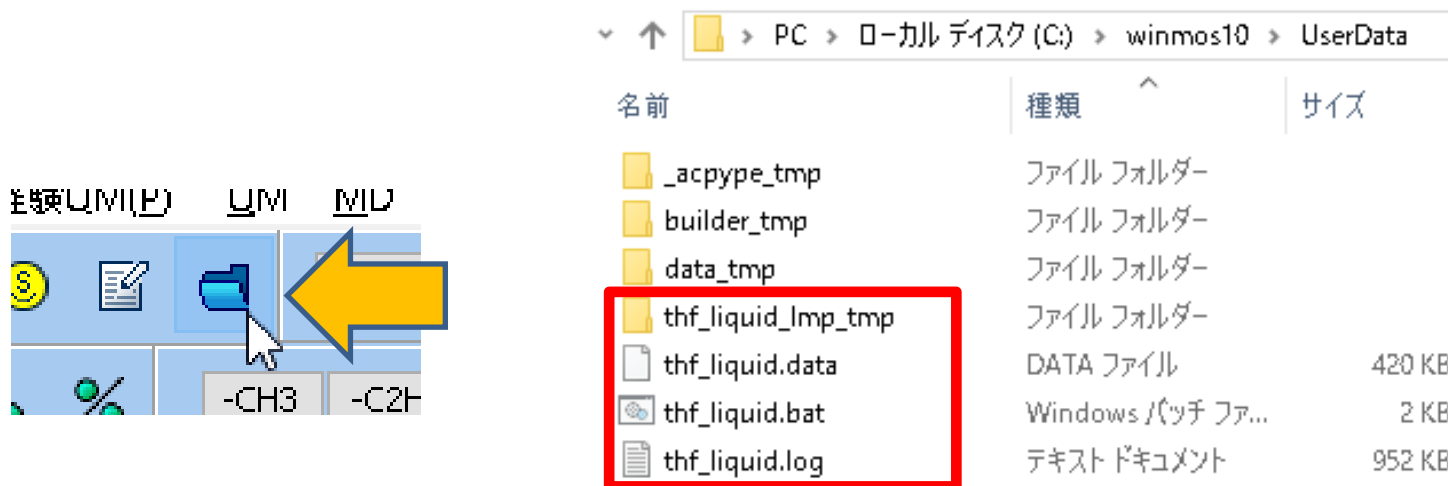
# IV. 平衡化（エネルギー極小化）

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**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、座標ファイルの名前を「thf\_liquid」として入力し保存ボタンを押す。
3. ジョブマネージャが起動し、順次LAMMPSが開始される。



# 補足 LAMMPS計算のファイル

1. ファイルを確認するため、ターミナルウィンドウが消えた後、**エクスプローラで表示ボタン**を押す。メインウィンドウで開かれているthf\_liquid.dataが置かれたフォルダが開く。
2. 各ファイル・フォルダの説明を以下に示す。
  - thf\_liquid.data : 先ほど保存した座標ファイル（メインウィンドウで開かれている）
  - thf\_liquid\_imp\_tmp : トラジェクトリファイル・リスタート用ファイルなどを含む作業フォルダ（working directory）
  - thf\_liquid.log : 計算のログ
  - thf\_liquid.bat : ジョブ実行に必要なその他ファイル



# 補足 LAMMPS計算のworking directory

作業フォルダ（working directory）内の主要なファイルの説明を以下に示す。

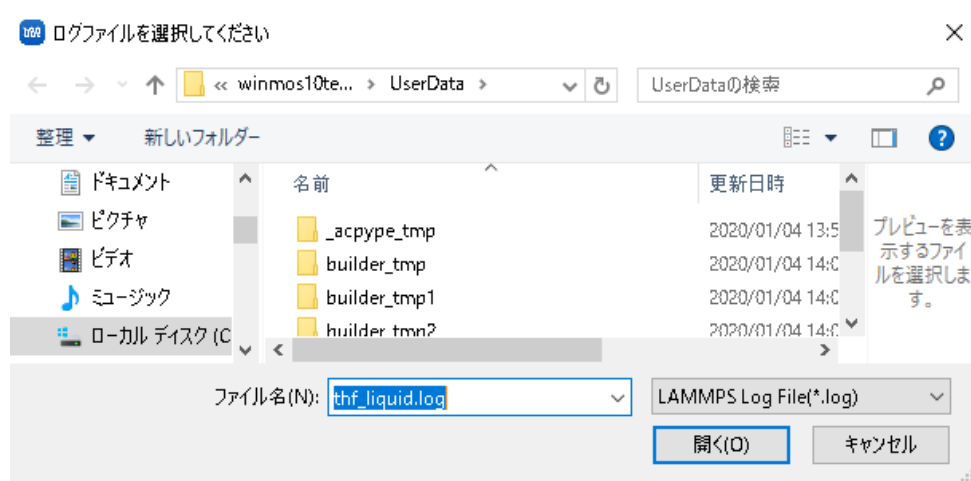
- Imp\_tmp.data : 始状態の座標ファイル（thf\_liquid.dataのコピー）
- Imp\_tmp.dump : アニメーションに使うトラジェクトリファイル
- Imp\_tmp.xtc : 結果解析に使うトラジェクトリファイル
- Imp\_tmp\_final.data : 最終状態の座標ファイル（継続する場合はこれが入力となる）



名前	種類	サイズ
Imp_tmp.data	DATA ファイル	420 KB
Imp_tmp.dump	DUMP ファイル	834 KB
Imp_tmp.gro	GRO ファイル	59 KB
Imp_tmp.in	IN ファイル	1 KB
Imp_tmp.log	テキスト ドキュメント	60 KB
Imp_tmp.mdp	MDP ファイル	2 KB
Imp_tmp.ndx	NDX ファイル	20 KB
Imp_tmp.restart	RESTART ファイル	434 KB
Imp_tmp.top	TOP ファイル	4 KB
Imp_tmp.xtc	XTC ファイル	80 KB
Imp_tmp_final.data	DATA ファイル	414 KB
Imp_tmp_final.data bak	BACK ファイル	403 KB

# IV. 平衡化 (エネルギー極小化)

1. ターミナルウィンドウが消えた後、**ログを表示ボタン**を押す。
2. 出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。
3. 先ほどの計算のログがテキストエディタで表示されるので、そこでエラーの表示がないことを確認し、テキストエディタを終了する。(分子作成手順の細かな違いにより、収束回数などに多少違いが出ることはあるが、統計平均を取るため最終的な結果解析には影響はない。)



thf\_liquid.log - メモ帳

ファイル(F)	編集(E)	書式(O)	表示(V)	ヘルプ(H)
1350	1350	0	222.07378	0 222.07378 52.617904 -5:
1360	1360	0	221.48566	0 221.48566 48.425138 -5:
1370	1370	0	220.96713	0 220.96713 49.070979 -5:
1380	1380	0	220.50645	0 220.50645 48.849791 -5:
1390	1390	0	220.05371	0 220.05371 52.27939 -57
1400	1400	0	219.61207	0 219.61207 53.319035 -5
1410	1410	0	219.20139	0 219.20139 58.369435 -5:
1420	1420	0	218.8054	0 218.8054 59.302529 -54:
1430	1430	0	218.42806	0 218.42806 63.273736 -5:
1440	1440	0	218.10215	0 218.10215 64.424562 -5:
1450	1450	0	217.77501	0 217.77501 64.062057 -5:
1459	1459	0	217.51277	0 217.51277 64.343913 -5:

Loop time of 43.733 on 1 procs for 1459 steps with 1300 atoms

99.9% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

Minimization stats:

Stopping criterion = energy tolerance  
Energy initial, next-to-last, final =  
1694.76603324 217.530710001 217.51277463  
Force two-norm initial, final = 963.397 5.03192  
Force max component initial, final = 153.213 0.814968  
Final line search alpha, max atom move = 0.0166439 0.0135643  
Iterations, force evaluations = 1459 2916

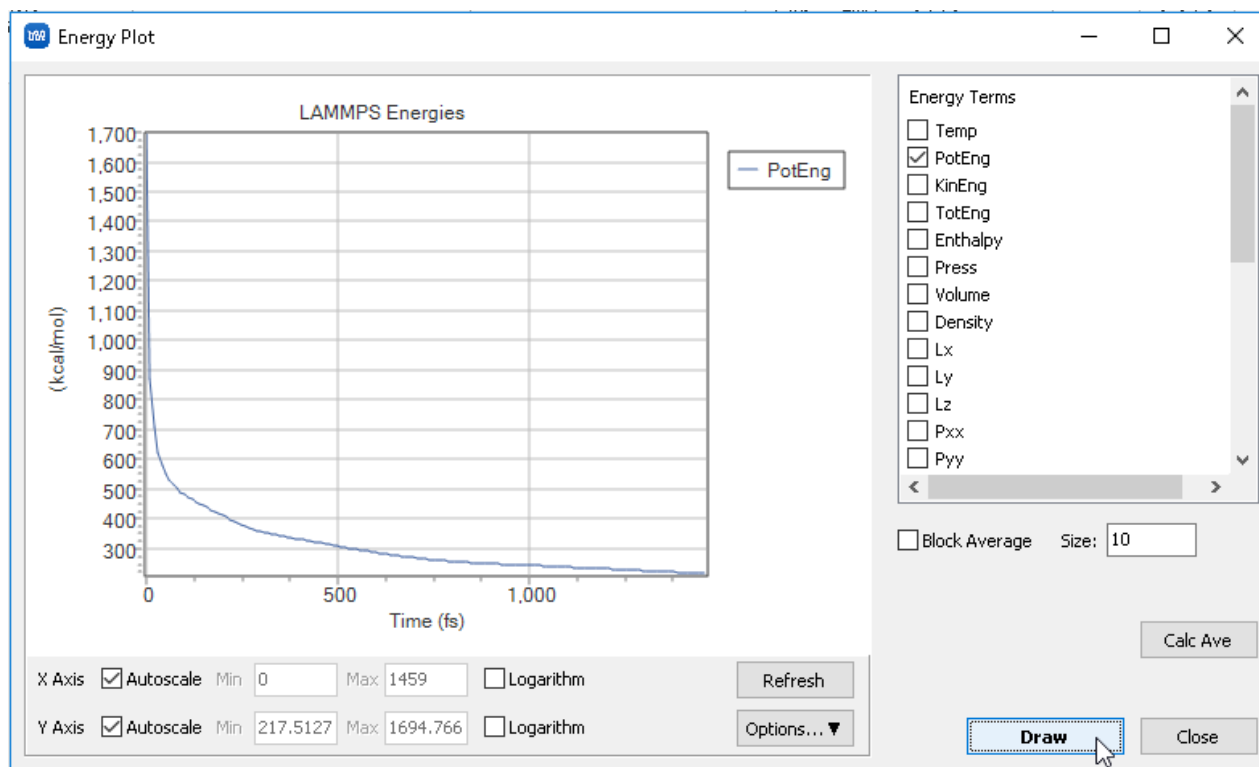
MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
---------	----------	----------	----------	---------	--------



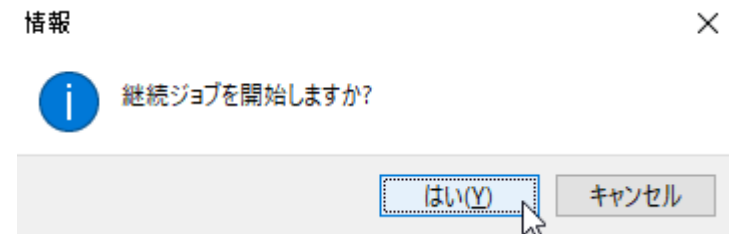
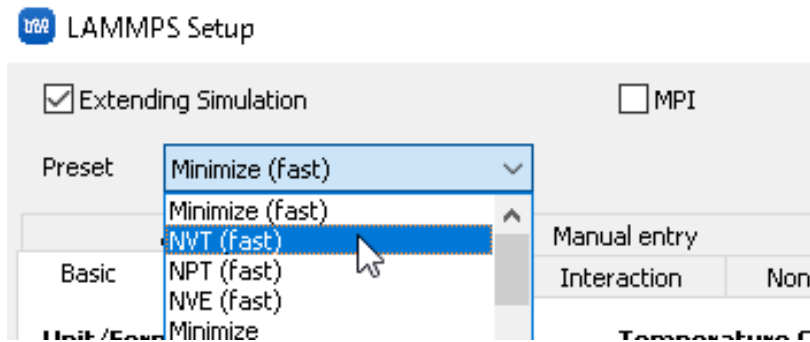
## IV. 平衡化（エネルギー極小化）

1. ポテンシャルエネルギーが低下した様子を確認するため**エネルギー変化**ボタンを押す。
2. 出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。
3. **Energy Terms**で**PotEng**にチェックを入れ**Draw**ボタンを押す。
4. グラフを確認した後右下の**Close**ボタンを押す。



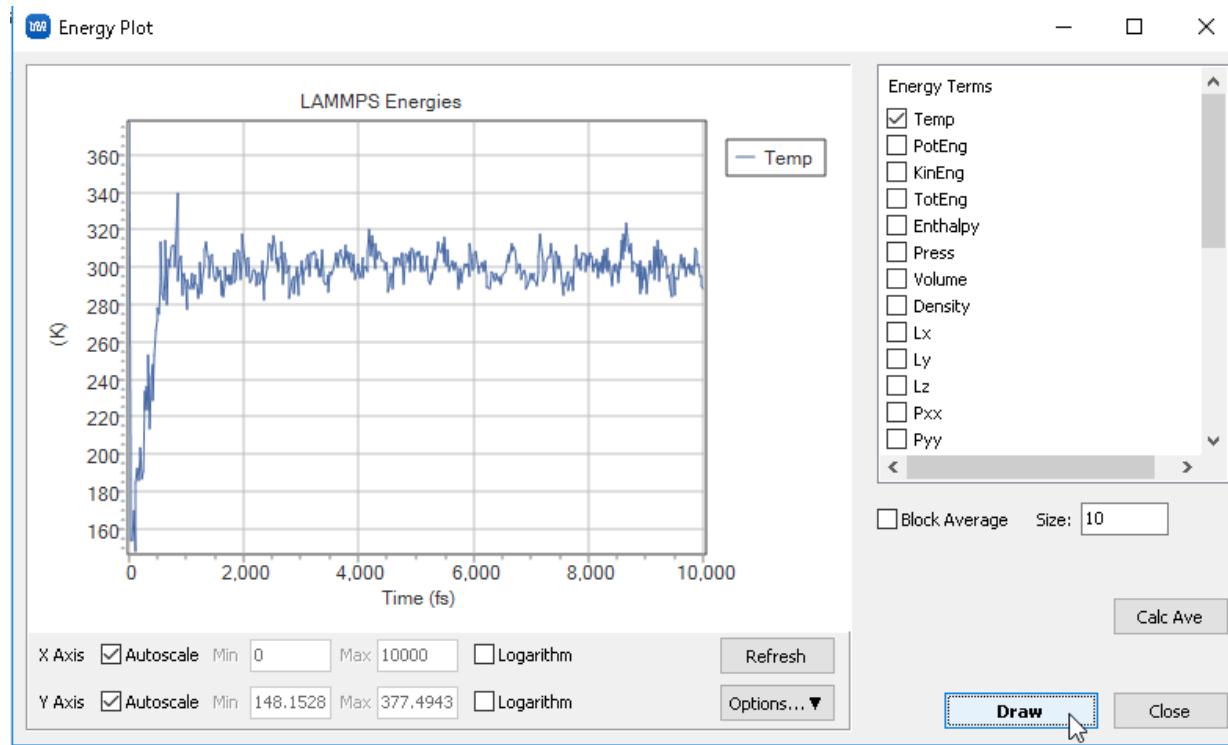
## IV. 平衡化（温度一定）

1. 再び**キーワード設定**ボタンをクリックする。
2. 以下のように変更し、**Run**ボタンを押す。
  - **Extending Simulation**をチェック
  - **Preset**は**NVT (fast)**
3. 出現したダイアログで**はい**ボタンを押すと計算が実行される。
4. 計算終了後、エネルギー極小化の際と同様にログを確認する（以降も同じ）。



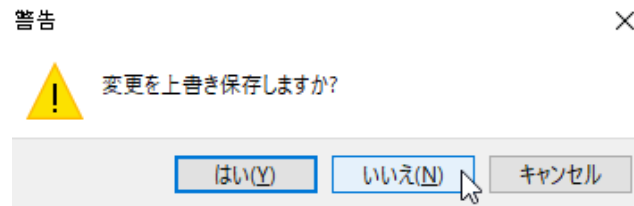
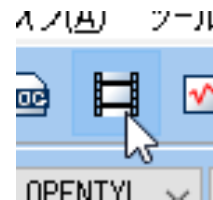
## IV. 平衡化（温度一定）

1. 温度が設定値（300 K）に到達したか確認するために**エネルギー変化**ボタンを押す。
2. 出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。
3. **Energy Terms**で**Temp**にチェックを入れ**Draw**ボタンを押す。
4. グラフを確認した後右下の**Close**ボタンを押す。



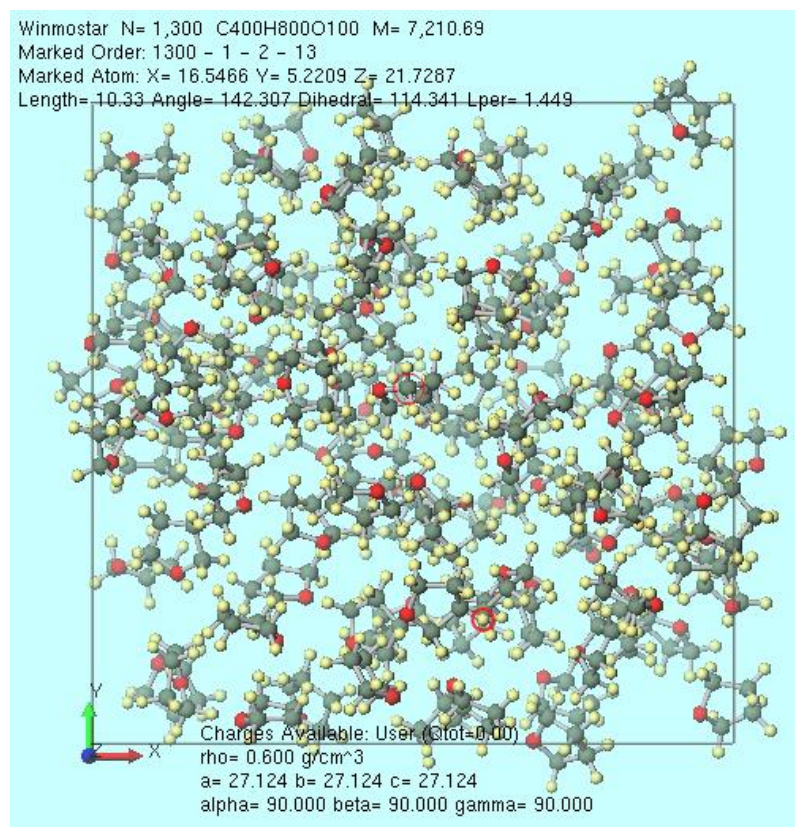
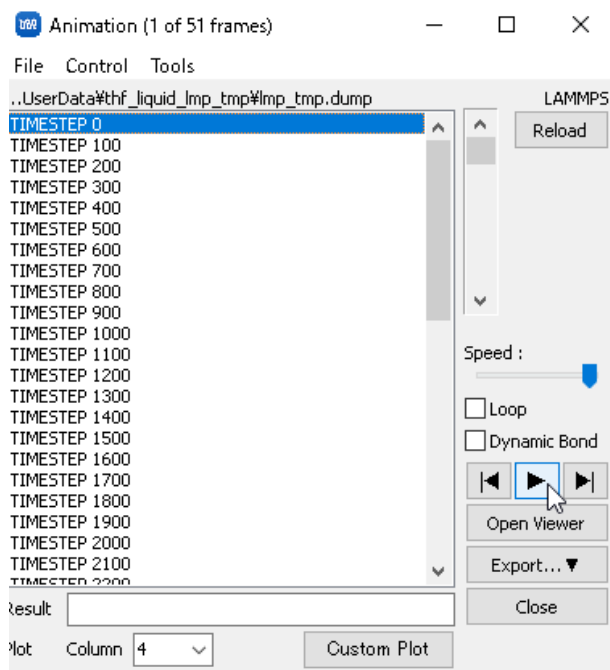
## IV. 平衡化（温度一定）

1. アニメーションボタンを押す。
2. **変更を保存しますか？**と聞かれた場合は**いいえ**ボタンを押す。
3. 出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。座標ファイルとトラジェクトリファイルそれぞれについてダイアログが開く。
4. **Animation**ウィンドウが開く。**Animation**ウィンドウが背面に隠れた場合は**ウィンドウメニュー | Animation**を選択する。



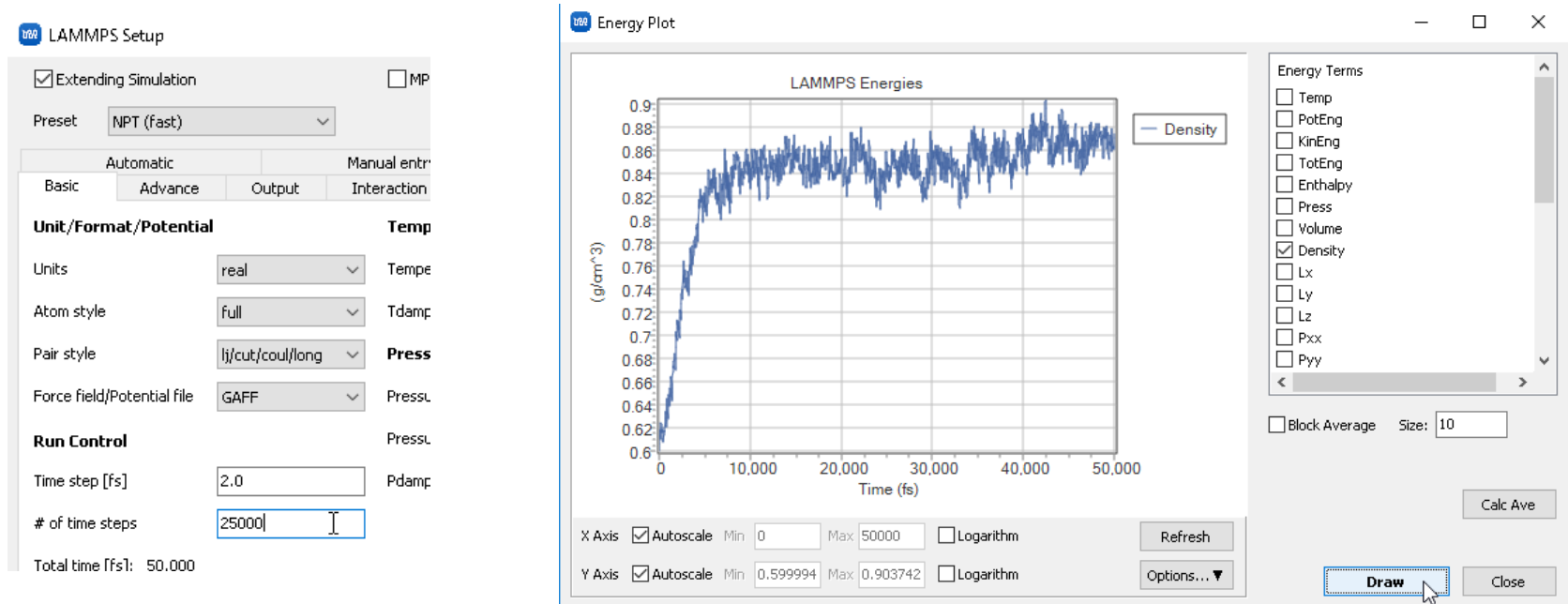
# IV. 平衡化（温度一定）

1. **Animation** ウィンドウ右中段の**Play/Pause**（右向き三角）ボタンを押すとトラジェクトリ  
のアニメーションが再生される。
2. アニメーションを確認した後**Close**ボタンを押す。



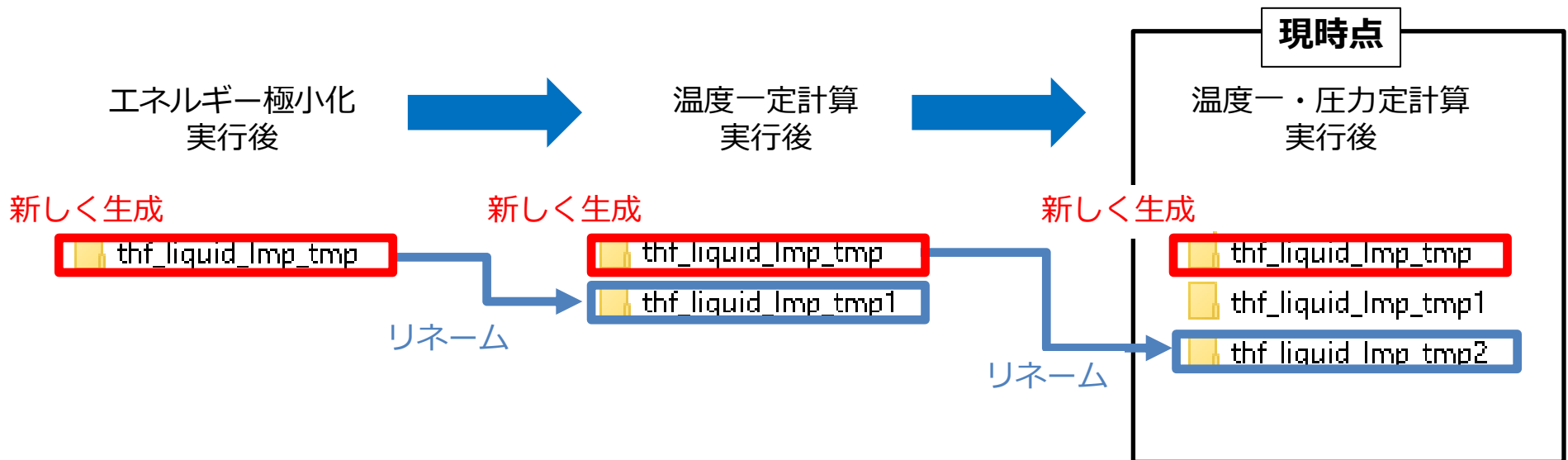
# IV. 平衡化（温度・圧力一定）

1. キーワード設定ボタンをクリックする。
2. 以下のように変更し、**Run**ボタンを押し先ほどと同様に計算を実行する。
  - **Preset**は**NPT (fast)**
  - **Basic**タブの**# of Time Steps**は**25000**
3. 計算終了後、必要に応じてアニメーションを確認する（以降も同じ）。
4. **エネルギー変化**ボタンをクリックし、**Density**のグラフを確認する。



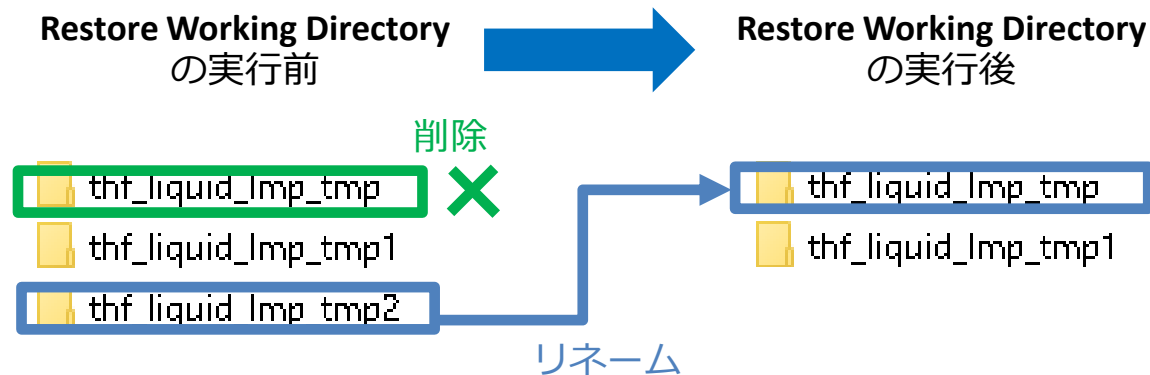
# 補足 LAMMPS計算のworking directory

1. ファイルを確認するため、**エクスプローラで表示ボタン**を押す。メインウィンドウで開かれているthf\_liquid.dataが置かれたフォルダが開く。
2. working directoryが合計3つ生成されていることを確認する。working directoryは以下のように生成されている。
  - thf\_liquid\_imp\_tmp（末尾に番号がないフォルダ）が常に直近に実行した計算のworking directoryとなっている。
  - 計算の開始時にすでにworking directoryが存在する場合は、そのworking directoryは名前の末尾に重複しない最も小さい番号を追加してリネームされる。



# 補足 LAMMPS計算の再開、やり直し

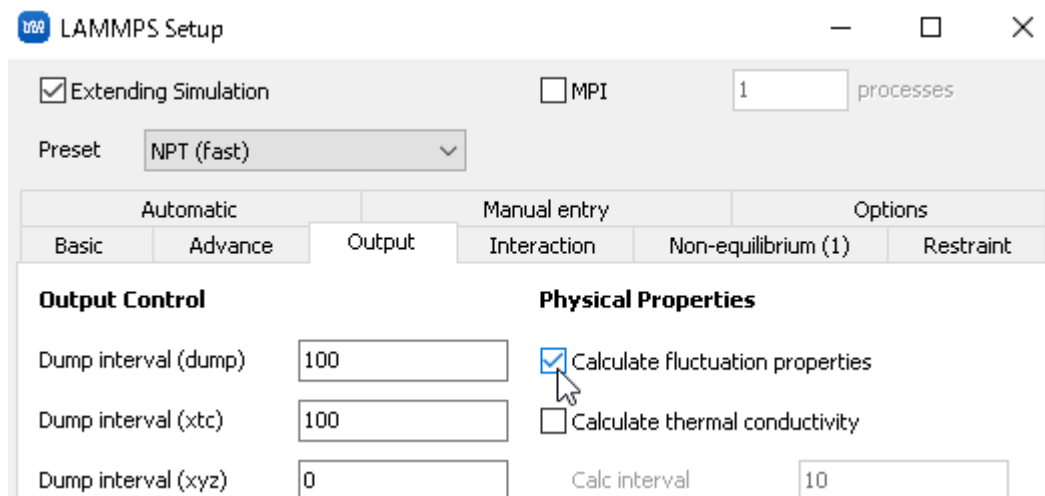
- 計算・作業途中でWinmostarを再起動した場合は、最初に保存した座標ファイル（今回は thf\_liquid.data）をメインウィンドウで開くと、続きから作業できる。
- **キーワード設定のOptionsタブのRestore Working Directory**ボタンをクリックすると、最新のworking directoryが削除され、最も大きい番号が末尾に付いたworking directoryが最新のworking directoryとしてリネームされる。これにより、直近の計算を実行する前の状態に戻る。





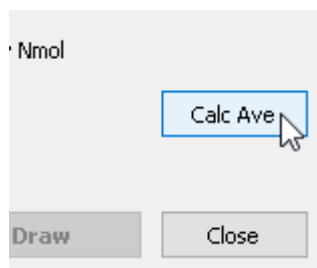
# V. 本計算 + 結果解析

1. キーワード設定ボタンをクリックする。
2. 以下のように変更し、**Run**ボタンを押し先ほどと同様に計算を実行する。
  - **Output**タブの**Calc Fluctuation Properties**をチェック  
(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)
3. 計算終了後、必要に応じてエネルギーを確認する (以降も同じ) 。



# V. 本計算 + 結果解析 (基礎物性)

1. エネルギー変化ボタンをクリックする。
2. Calc Aveボタンをクリックする。
3. テキストファイルが開き、そこには各種熱力学量の平均値が出力されている。



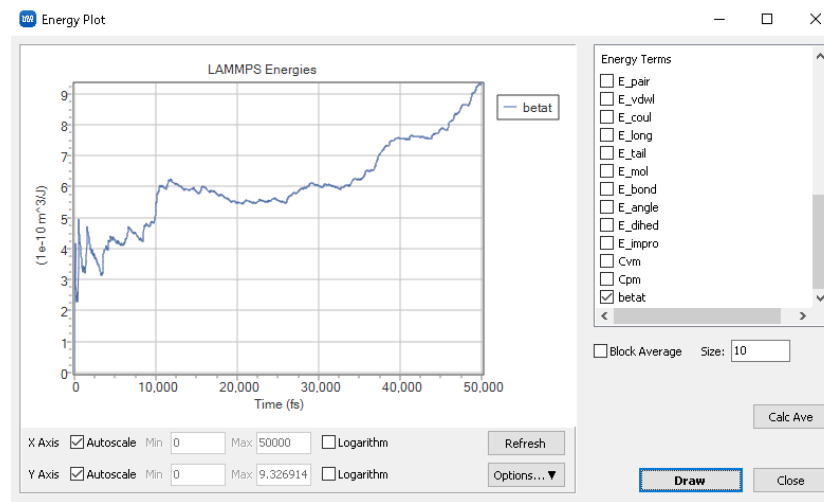
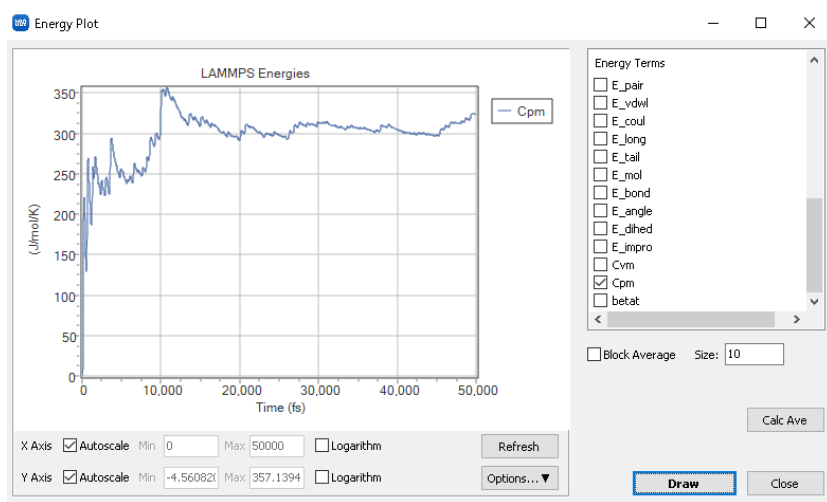
energy\_ave.log - メモ帳

ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

# data	Average	Standard error
Temp (K)	299.865648433252860	0.194272510546405
PotEng (kcal/mol)	1145.285969504396200	0.730820082122733
KinEng (kcal/mol)	922.743447406075140	0.597813350184739
TotEng (kcal/mol)	2068.029416506795200	1.111744883650592
Enthalpy (kcal/mol)	2067.476559592329900	4.504682688825743
Press (atm)	-0.000530257179848	21.335311281859693
Volume (Å <sup>3</sup> )	13942.930434852104000	7.246950979526272
Density (g/cm <sup>3</sup> )	0.858275384272582	0.000445627265906
Lx (Å)	24.061478798960829	0.009980324760829
Ly (Å)	24.061478798960829	0.009980324760829
Lz (Å)	24.061478798960829	0.009980324760829
Pxx (atm)	26.285229604887808	34.932634066462182
Pyy (atm)	-69.100305758429184	34.926458127325082
Pzz (atm)	42.813483910527507	34.650833233718477
Pxy (atm)	-12.426513831472438	23.667965226323130
Pxz (atm)	-56.276029477406061	24.950584669917373
Pyz (atm)	4.934906038705044	25.563317644939232
GamNsurf	15.640651967462022	10.086230818706859
E_pair (kcal/mol)	-703.338719676259070	0.437526159708506
E_vdwl (kcal/mol)	-637.382835051959420	0.389236912066645
E_coul (kcal/mol)	1178.964190207832600	0.479235168829766
E_ljng (kcal/mol)	-1244.920076378897100	0.498840536113786
E_tail (kcal/mol)	0.000000000000000	0.000000000000000
E_mol (kcal/mol)	1848.624688649085400	0.851047370221093
E_bond (kcal/mol)	153.498229732214050	0.201001761883627
E_angle (kcal/mol)	896.775490727419140	0.568599293793588
E_dihed (kcal/mol)	798.350968497200640	0.404859427792341
E_impro (kcal/mol)	0.000000000000000	0.000000000000000
Cvm (J/mol/K)	296.662300496881860	0.656310339593845
Cpm (J/mol/K)	296.678994410194050	0.656427840714051
betat (1e-10 m <sup>3</sup> /J)	6.045312208979608	0.027322232342770

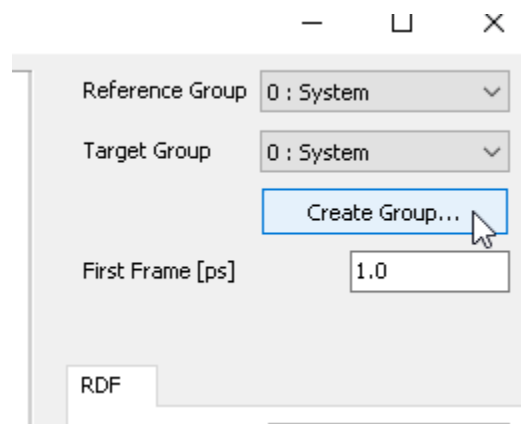
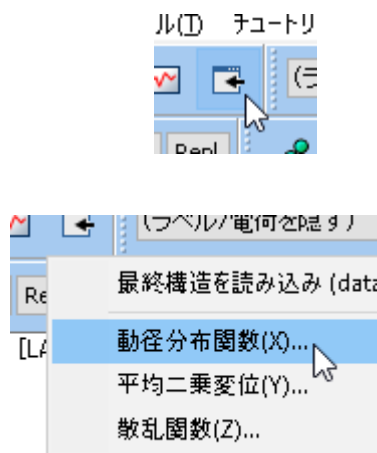
# V. 本計算 + 結果解析 (基礎物性)

1. 続けて**Energy Plot**ウィンドウで**Cpm**と**betat**にチェックを入れて**Draw**ボタンを押すと、それぞれ定圧比熱と等温圧縮率の積算平均値が得られる。(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)
  - また、ここで使われる古典MD計算の熱力学量の揺らぎから計算する方法では、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る点が知られている。(J. Chem. Theory Comput., 2012, 8, 61-74など)
  - 下図のように今回の例ではbetat (等温圧縮率) は明らかに収束しておらず、本来であればより長い計算時間が必要であることに注意すること。



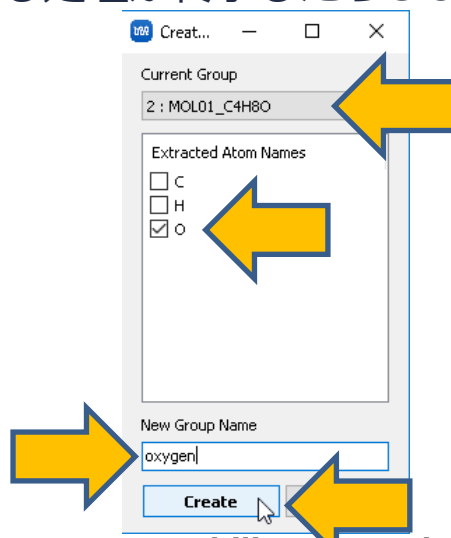
## V. 本計算 + 結果解析（動径分布関数）

1. **結果解析**ボタンから**動径分布関数**を選択し、出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。トラジェクトリファイルと座標ファイルとインデックスファイルそれぞれについてダイアログが開く。
2. **Create Group**ボタンをクリックし、出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。



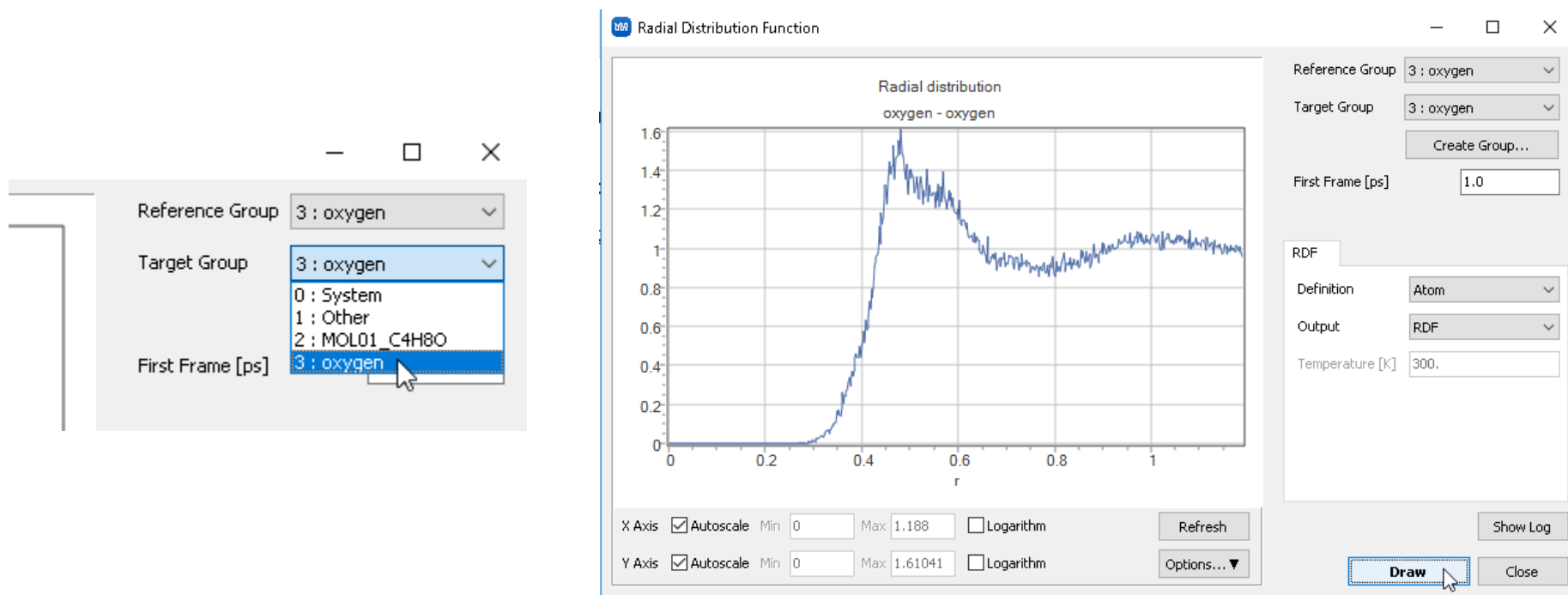
## V. 本計算 + 結果解析（動径分布関数）

- 開いた**Create Group**ウィンドウにおいて、**Current Group**に**MOL01\_C4H8O**（今回はTHFを意味する）、**Extracted Atom Names**に**O**を選択し、**New Group Name**に**oxygen**と入力して**Create**ボタンをクリックする。
  - なお事前に、メインウィンドウでworking directory内のgmp\_tmp.groを開いたうえで**表示 | ラベル/電荷 | 名前**をクリックしておくこと、分子表示エリアで各原子のAtom Nameを確認することができる。
  - また、予め作成したndxファイルを動径分布関数算出機能立ち上げ時に選べば、複雑なグループを解析に使うことができる。ndxファイルはメインウィンドウの**選択**メニュー以下の操作で作成できる。（詳細はユーザマニュアルを参照）
- ターミナルウィンドウが出現し処理が終了したら**Close**ボタンを押す。



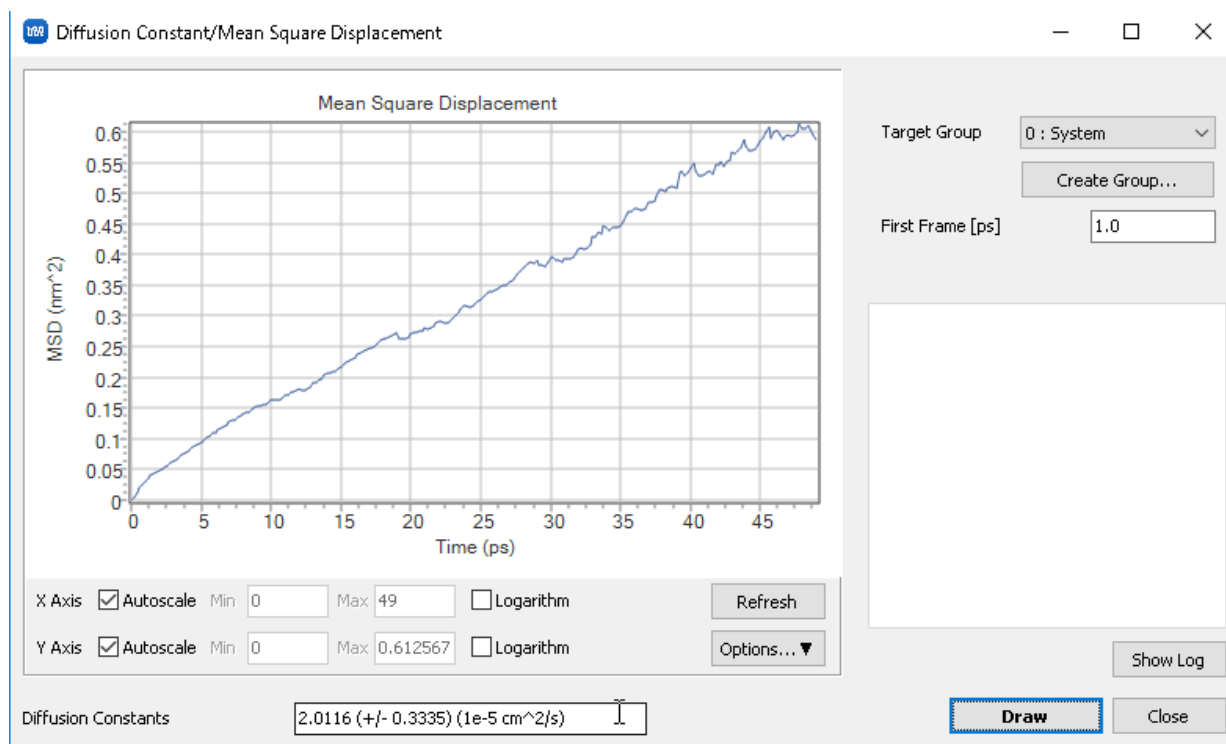
# V. 本計算 + 結果解析 (動径分布関数)

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る。
2. グラフを確認後**Close**ボタンを押す。



## V. 本計算 + 結果解析（自己拡散係数）

1. **結果解析**ボタンから**自己拡散係数/平均二乗変位**を選択し、出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。トラジェクトリファイルと座標ファイルとインデックスファイルそれぞれについてダイアログが開く。
2. **Draw**ボタンをクリックすると平均二乗変位のグラフが表示される。このグラフから計算される自己拡散係数（**Diffusion Constants**）がウィンドウ下に表示される。



## 補足 高精度での計算結果

本チュートリアルの手順から以下のように変更して高精度に計算した際の結果を示す。

- Cutoff(vdw) =15, Cutoff(Coulomb) =15
- 平衡化（エネルギー極小化）
  - Preset=Minimize
- 平衡化（温度一定）
  - Preset=NVT, nsteps=40000
- 平衡化（温度圧力一定）、本計算
  - Preset=NPT, nsteps=200000

Density [kg/m <sup>3</sup> ]	878.7 +- 0.2
Diffusion constant [1e-5 cm <sup>2</sup> /s]	1.7 +- 0.3



# 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