# **M** 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

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。



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。
- <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。

#### 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。



#### 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「08」(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. 電荷を割り当てウインドウでOKボタンを押す。
- 3. 黒いウィンドウが何度が出現した後、「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。

			🚾 電荷を割り当て	– 🗆 X			
			電荷を割り当てる方法を選択してください				
			☑全てのMethodを AM1-BCC ∨ に設定				
			☑ 既に電荷が割り当てられた分子種には新たに電荷を	割り当てない	Winnestar	~	
ом	MD	国体(5) アドオン(か) ツール(1) チュートル	▽タンパク質・単原子イオン・水には新たに電荷を割り当	自てない	White lost at	^	
QIVI			1 st component: C4H8O x 1 No ch	arge	正常に電荷が設定されました		
		溶媒を配直/ゼルを構築(S) 20	Method AM1-BCC V Charg	e 0 ~	_		
		分子を挿入(N)				OK	
-CH3	ď	自動で電荷を割り当て(C)					
		手動で電荷を割り当て(C) <sup>レS</sup> ト AM					
			< Back OK	Cancel			

# 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. **彦 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。

	🚾 Solvate/Build Cell				- 0		
	Name	# Mol	Position	mol/L ~	Compositio		
(フハル/电回2						Add molecules	×
NORM=0.05 NOINTER GR	Add Displayed Molecule.	Add	.mol2 File	Add Wate	er	Enter # of molecules 100	OK Cancel
	Simulation Cell Option	]	0.6				

# 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イ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/cm3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。

Solvate/Build Cell				-		×
Name	# Mol	Position	mol/L	~ Com	position	
[DISPLAYED]	100	Random	8.321	C4H	80	
dd Displayed Molecule	. Add	.mol2 File	. Add V	Water	Dele	te
imulation Cell Ontion						
-		la el			1	
Set Density [g/cm^3]		0.6			]	
🔵 Set Distance from Solu	ute [nm]					
○ Set Lattice Constants	ſnm]	2.7124	2.7124	2.7124	]	
			1		1	
Angl	les [deg]	90.0	90.0	90.0		
Angi	les [deg]	90.0 Same	90.0 e as main wi	90.0 indow	]	
Angi Box Type	les [deg]	90.0 Same	90.0 e as main wi	90.0 indow	]   ]	
Angi Box Type Total Number of Atoms:	les [deg] 1300	90.0 Same	90.0 e as main wi	90.0 indow		
Angi Box Type Total Number of Atoms:	les [deg] 1300	90.0 Same	90.0 e as main wi	indow	] ]	

# 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。

		- ロ ×
		力場を割り当てる方法を選択してください
		● 自動でパラメータを割り当て
M + TESRUM(P) UM MD	LEL	(→般) GAFF ~ Exception
		(タンパク質/イオン) AMBER03 ~
MOPAG	「」(ノ 道144(三)	(水分子) <b>SPC/E</b> ~
CNDO/S GAMESS Gaussian 8000 NWChem Gromacs .85 Z Quantum ESPREaSO	-Сі	Dump Now
		○パラメータファイルを使用(無機物系、ReaxFF、散逸粒子動力学法向け)
		○メインウィンドウのファイルに書かれたパラメータを使用
		< Back OK Cancel

# IV.平衡化(エネルギー極小化)

- 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。

🚾 LAMMPS Setup			- 🗆	$\times$		
Extending Simulation		MPI 1	processes			
Preset Minimize (fast)	~					
Automatic	Man	nual entry	Options			
Basic Advance	Output Inte	eraction Non-equili	ibrium (1) Restra	aint		
Unit/Format/Potential	I	Temperature Coupli	ng			
Units	real $\checkmark$	Temperature [K]	300.0		OK Cancel 妃 Run	
Atom style	full 🗸 🗸	Tdamp [fs]	100.			
Pair style	lj/cut/coul/long $\sim$	Pressure Coupling				
Force field/Potential file	GAFF $\sim$	Pressure control	iso	~		
Run Control		Pressure [atm]	1.0 1.0 1.0		🔤 新規ジョブを開始する前に座標ファイルを保存してください	×
Time step [fs]	2.0	Pdamp [fs]	100.		ム	0
# of time steps	5000					~
Total time [fs]: N/A					ファイル名( <u>N</u> ): thf_liquid	~
Ensemble	minimize $\checkmark$				ファイルの種類( <u>T</u> ): LAMMPS data File(*.data)	~
Velocity Generation						
Generate initial velocity	/				✓ フォルダーの参照(B) 保存(S) キャンセル	· .
Random seed	12345					
Reset Load	Save Save as De	əfault OK	Cancel	un		

# 補足 LAMMPS計算のファイル

- 1. ファイルを確認するため、ターミナルウインドウが消えた後、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\_lmp\_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)

👻 🛧 📙 « ローカル ディスク (C:) » winmos10 »	UserData > thf_liqu	id_Imp_tmp
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
📄 loon toon final data hak	RAK DV/II.	403 KB

### IV. 平衡化(エネルギー極小化)

- 1. ターミナルウインドウが消えた後、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。)

2 F & Z(A)		
🎯 ログファイルを選択してください		×
$\leftarrow$ $\rightarrow$ $\checkmark$ $\bigstar$ winmos10te $\Rightarrow$ UserData $\Rightarrow$ $\checkmark$ $\eth$	UserDataの検索	<i>م</i>
整理 ▼ 新しいフォルダー		
<ul> <li>※ドキュメント</li> <li>※名前</li> <li>※ピクチャ</li> <li>…acpype_tmp</li> <li>…builder_tmp</li> <li>…sュージック</li> <li>…builder_tmp1</li> <li>…builder_tmp2</li> <li>…builder_tmp2</li> </ul>	更新日時 ^ 2020/01/04 13:5 2020/01/04 14:C 2020/01/04 14:C 2020/01/04 14:C >	プレビューを表 示するファイ ルを選択しま す。
ファイル名(N): <mark>thf_liquid.log</mark> ~	LAMMPS Log File(*.log) 開く(O) キャ	ンセル :

ファイル(F)	編集(E) 君式(O)	表示(V)	ヘルプ(H)				
1350	1350	0	222.07378	0	222.07378	52.617904	-58
1360	1360	0	221.48566	0	221.48566	48.425138	-59
1370	1370	0	220.96713	0	220.96713	49.070979	-59
1380	1380	0	220.50645	0	220.50645	48.849791	-58
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	-5ť
1420	1420	0	218.8054	0	218.8054	59.302529	-54
1430	1430	0	218.42806	0	218.42806	63.273736	-50
1440	1440	0	218.10215	0	218.10215	64.424562	-57
1450	1450	0	217.77501	0	217.77501	64.062057	-57
1459	1459	0	217.51277	0	217.51277	64.343913	-54

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。

ノールロリ





- 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(*t*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)。

#### 🚾 LAMMPS Setup

🗹 Extend	ding Simulation	MPI			
Preset	Minimize (fast)		$\sim$		
	Minimize (fast) NVT (fast)		^	Manual entry	
Basic	NPT (fast) NVE (fast)	6		Interaction	Non
Linit /Eas	Minimize			Tompor	stune C



- 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。



- 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ウインドウが開く。Animationウインドウが背面に隠れた場合は**ウインドウメ** ニュー | Animationを選択する。



- **1. Animation**ウインドウ右中段の**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(*INPT* (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。

🚾 LAMMPS Setup	100 Energy Plot	- 🗆 X
Extending Simulation Imp   Preset NPT (fast)   Automatic Manual entr   Basic Advance   Output Interaction   Unit/Format/Potential real   Interaction Tempe   Atom style full   Pair style [j/cut/coul/long   Porce field/Potential file GAFF   Pressu Pressu   Time step [fs] 2.0	LAMMPS Energies 0.9 0.88 0.84 0.74 0.72 0.76 0.74 0.72 0.72 0.76 0.74 0.72 0.70 0.74 0.72 0.70 0.74 0.72 0.70 0.74 0.72 0.70 0.74 0.72 0.72 0.74 0.72 0.72 0.74 0.72 0.	Energy Terms Temp PotEng KinEng TotEng Enthalpy Press Volume Density Lx Ly Ly Lz Pxx Pyy C Calc Ave
# of time steps 25000 1 Total time [fs1: 50.000	X Axis       ✓ Autoscale       Min       0       Max       50000       □ Logarithm       Refresh         Y Axis       ✓ Autoscale       Min       0.599994       Max       0.903742       □ Logarithm       Options▼	Draw

# 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\_lmp\_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)。

🚾 LAMMPS Setup			_	
🗹 Extending Simulati	on	MPI	1 p	processes
Preset NPT (fast	) \	/		
Automatic		Manual entry	0	ptions
Basic Advar	nce Output	Interaction	Non-equilibrium (1)	Restraint
Output Control		Physical	Properties	
Dump interval (dump)	100		te fluctuation propertie:	s
Dump interval (xtc)	100		te thermal conductivity	
Dump interval (xyz)	0	Calc int	terval 10	

#### 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 Avera	ge Standard er	ror	
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 (keal/mol)	2067.476559592329900	4.504682688825743	
Press (atm)	-0.000530257179848	21.335311281859693	
Volume (A^3)	13942.930434852104000	7.246950979526272	
Density (g/cm^3)	0.858275384272582	0.000445627265906	
Lx (A)	24.061478798960829	0.009980324760829	
Ly (A)	24.061478798960829	0.009980324760829	
Lz (A)	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 (keal/mol)	-703.338719676259070	0.437526159708506	
E_vdwl (kcal/mol)	-637.382835051959420	0.389236912066645	
E_coul (kcal/mol)	1178.964190207832600	0.479235168829766	
E_long (kcal/mol)	-1244.920076378897100	0.498840536113786	
E_tail (kcal/mol)	0.0000000000000000	0.0000000000000000	
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)	0.0000000000000000	0.0000000000000000	
Cvm (J/mol/K)	296.662300496881860	0.656310339593845	
Cpm (J/mol/K)	296.678994410194050	0.656427840714051	
betat (1e-10 m^3/J)	6.045312208979608	0.027322232342770	

#### V. 本計算+結果解析(基礎物性)

- 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)

- 1. 開いた**Create Group**ウインドウにおいて、**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)
- 2. ターミナルウイ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)がウイ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^3]	878.7 +- 0.2
Diffusion constant [1e-5 cm <sup>2</sup> /s]	1.7 +- 0.3



• 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、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>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