

Winmostar™ チュートリアル  
LAMMPS  
熱伝導率・粘度計算  
V9.2.0

株式会社クロスアビリティ

2019年4月8日

# 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/download\\_jp.html](https://winmostar.com/jp/download_jp.html)の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) Windows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(7)でインストールするcygwin\_wmに含まれます。

(7) MDまたはSolidバックの計算（およびその他の一部の処理）を実行する場合は、以下のいずれかのリンク先の手順でCygwinの環境を構築します。

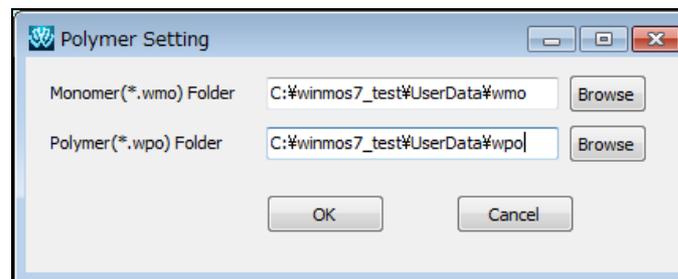
[ビルド済みのcygwin\\_wmをインストールする場合（推奨）](#)

[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）](#)

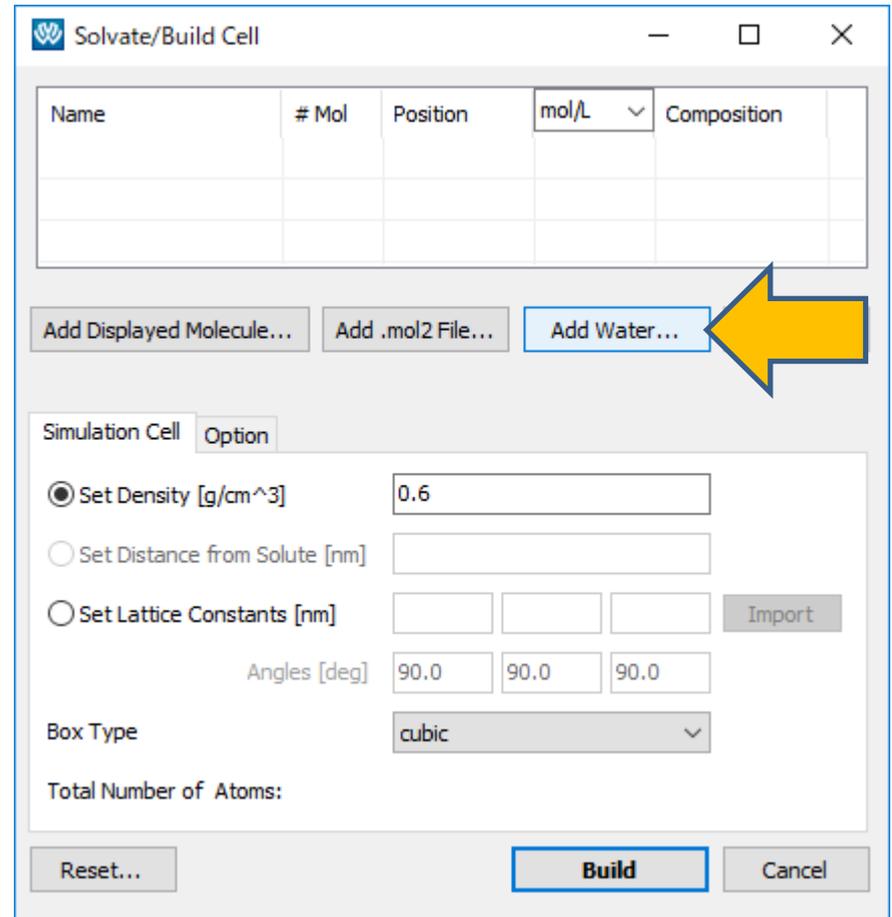
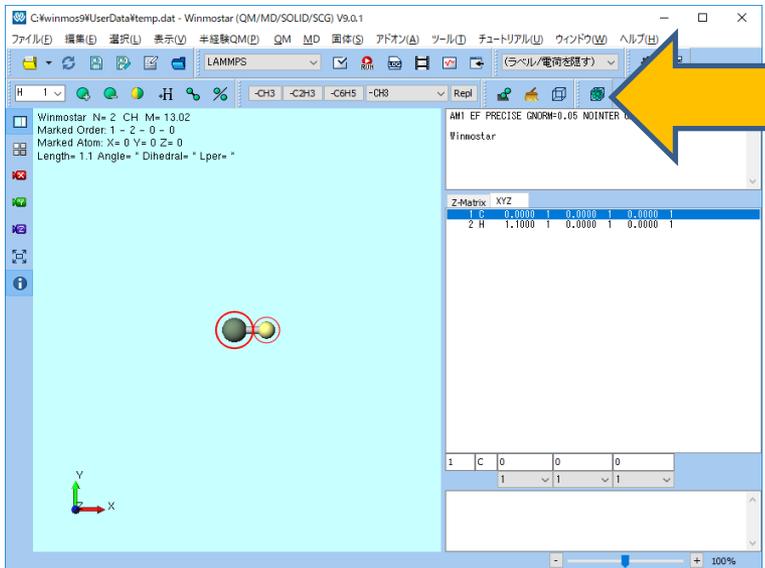
- ポリマーツールの設定

[MD]->[ポリマー]->[設定]（下図）で、必要に応じてモノマーファイル（拡張子.wmo）とポリマーファイル（拡張子.wpo）の格納フォルダを指定する。



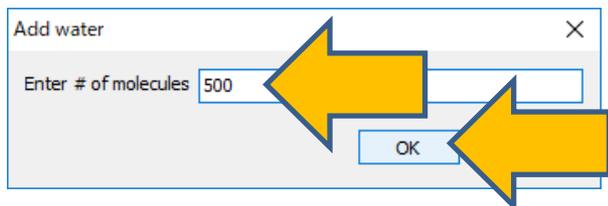
# I. 系の作成

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

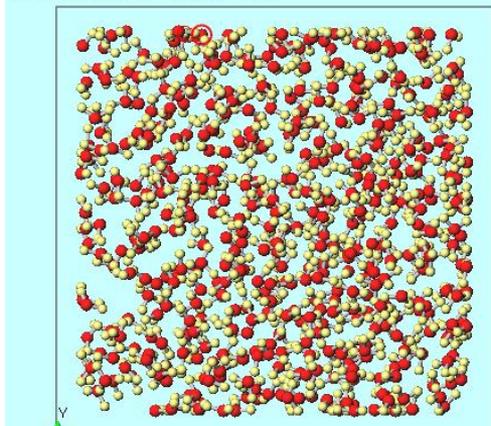


# I. 系の作成

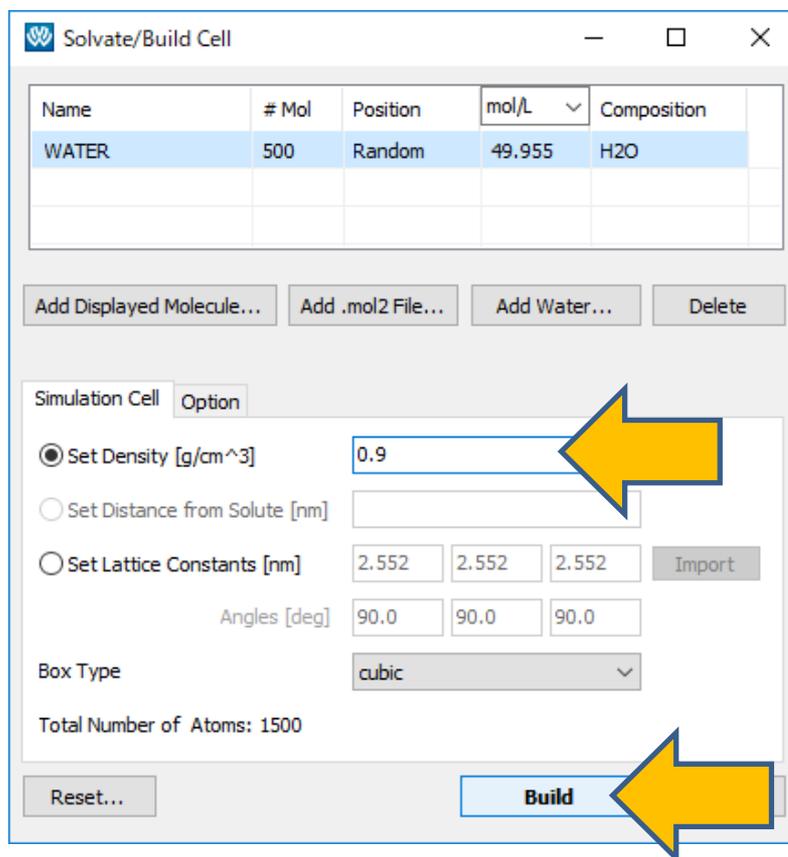
1. Add waterウインドウで500と入力しOKをクリックする。
2. Set Densityに0.9と入力し、Buildボタンをクリックする。



Winmostar N= 1,500 H1000O500 M= 9,007.64  
Marked Order: 1 - 2 - 0 - 0  
Marked Atom: X= 8.532 Y= 23.82 Z= 12.483  
Length= 1.0005 Angle= \* Dihedral= \* Lper= \*

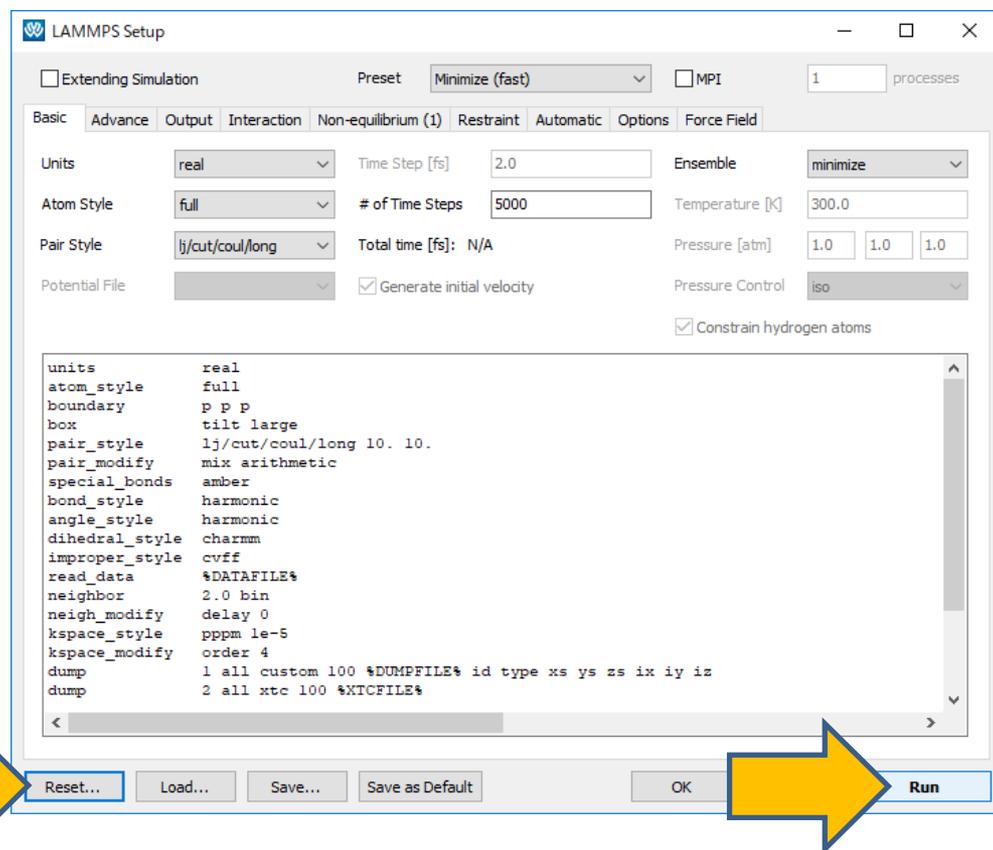
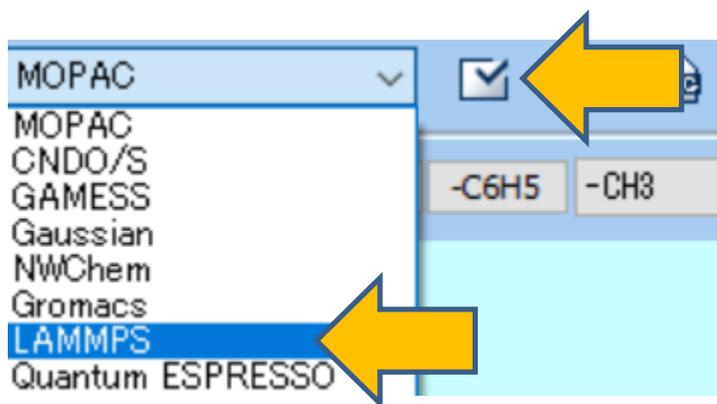


Charges Avail: User  
rho= 0.900 g/cm<sup>3</sup>  
a= 25.520 b= 25.520 c= 25.520  
alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000



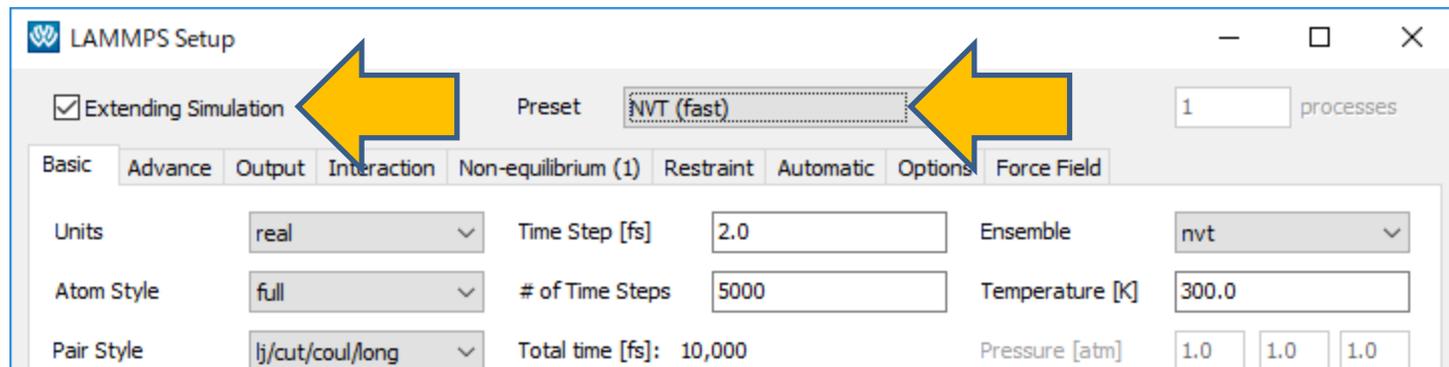
## II. 系の平衡化

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. Resetをクリック後、Runをクリックする。ファイル名をkappa.dataとして保存する。



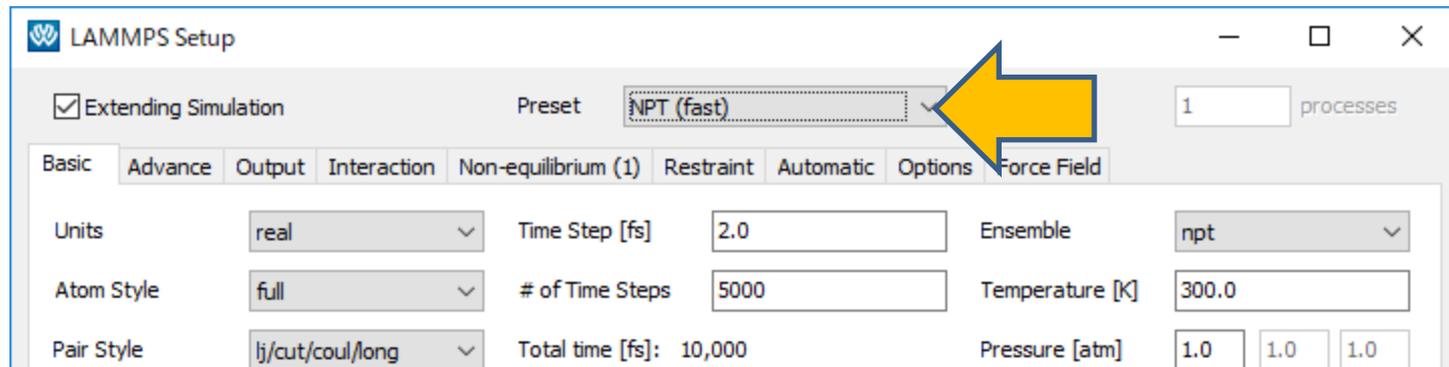
## II. 系の平衡化

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。



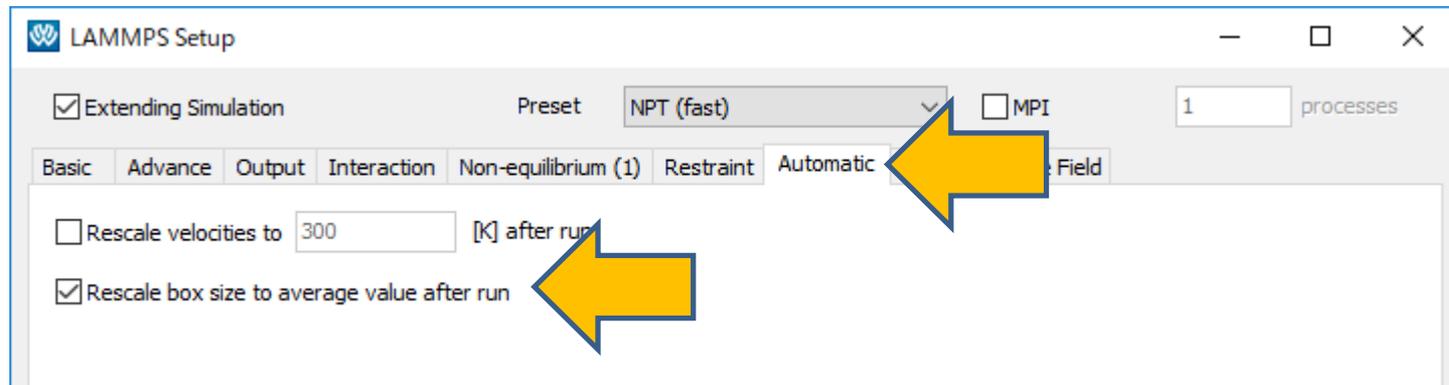
## II. 系の平衡化

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。



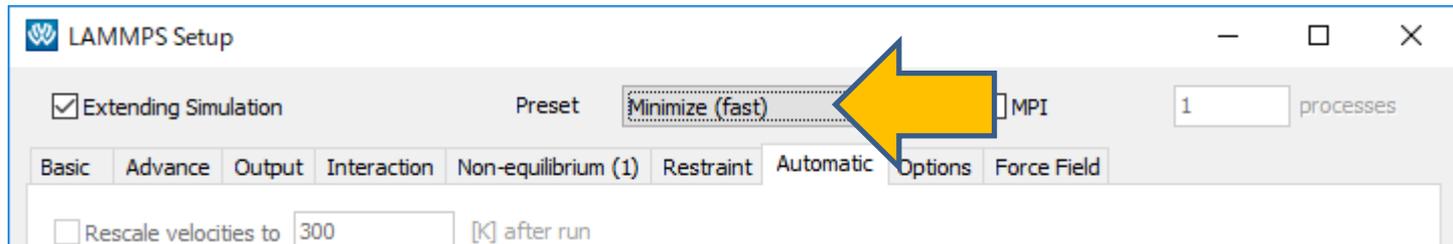
## II. 系の平衡化

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。



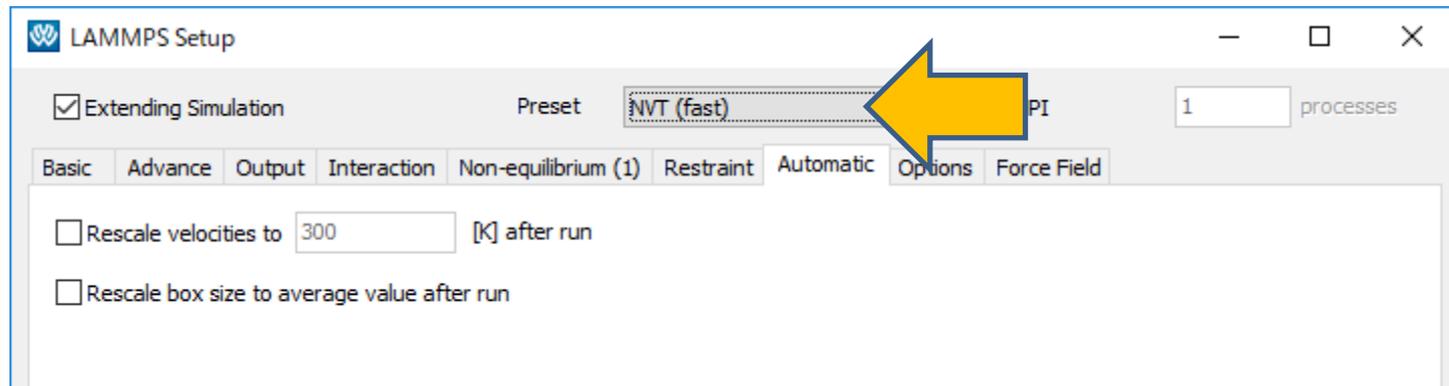
## II. 系の平衡化

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。



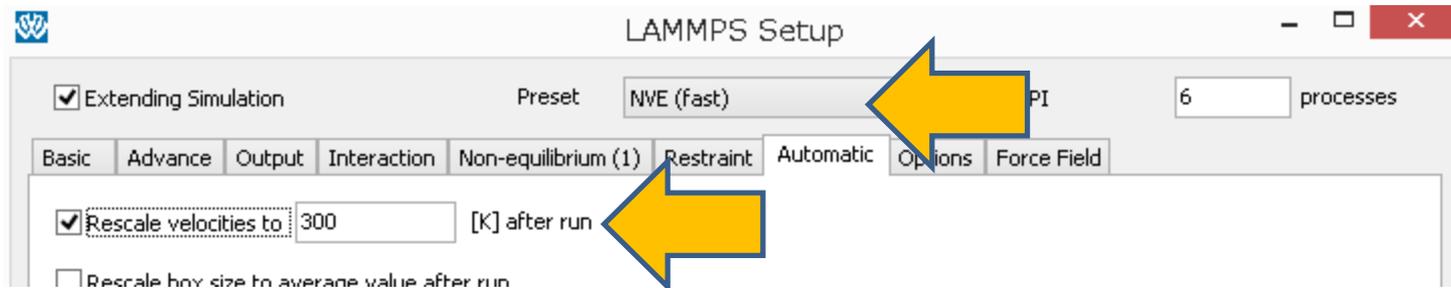
## II. 系の平衡化

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。



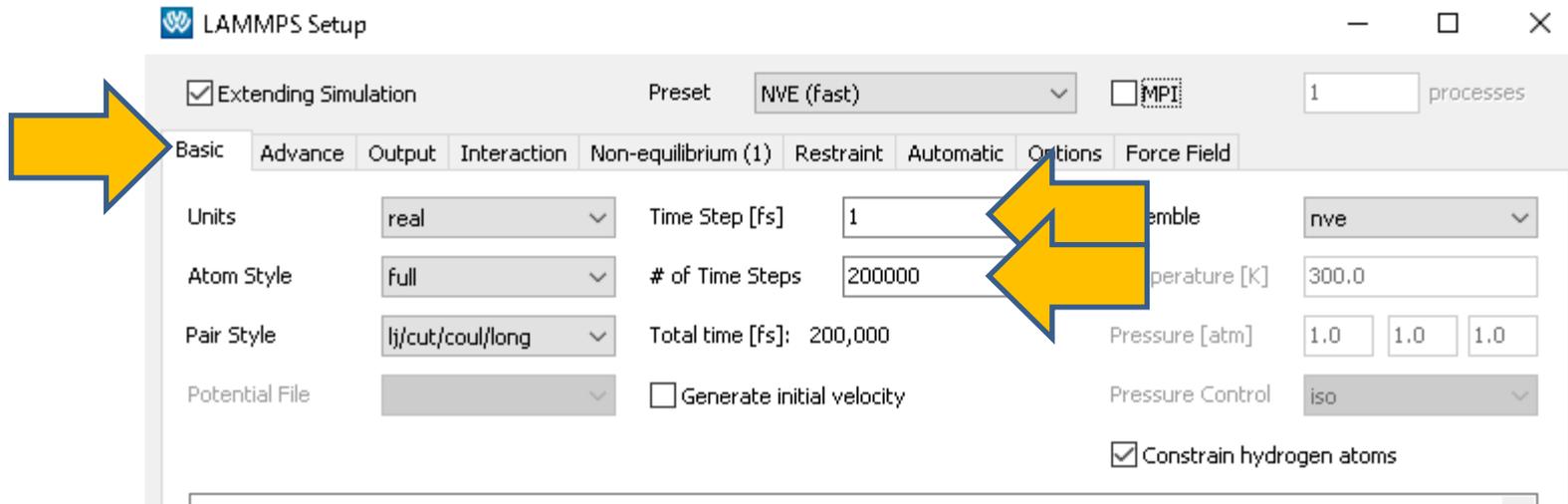
## II. 系の平衡化

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、
3. Runをクリックする。



### III. プロダクトラン

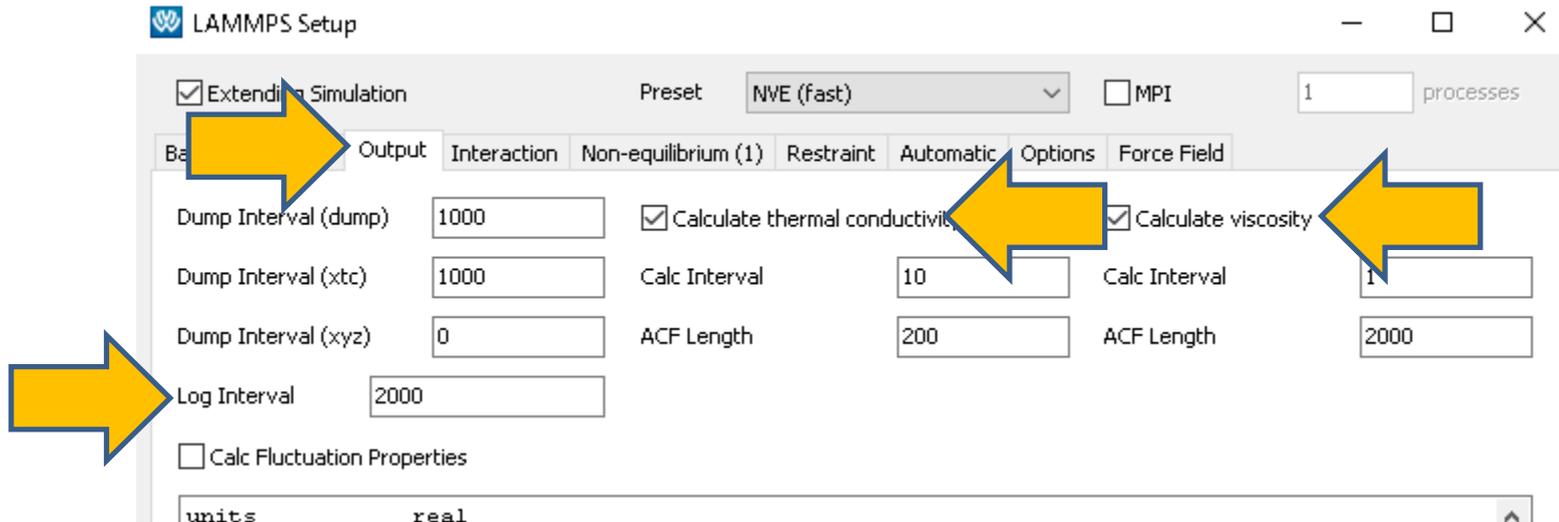
1.  (キーワード設定)をクリックする。
2. **Basic**タブにおいて以下のように変更する。
  - Time Stepを1に
  - # of TimeStepsを200000に



### III. プロダクトラン

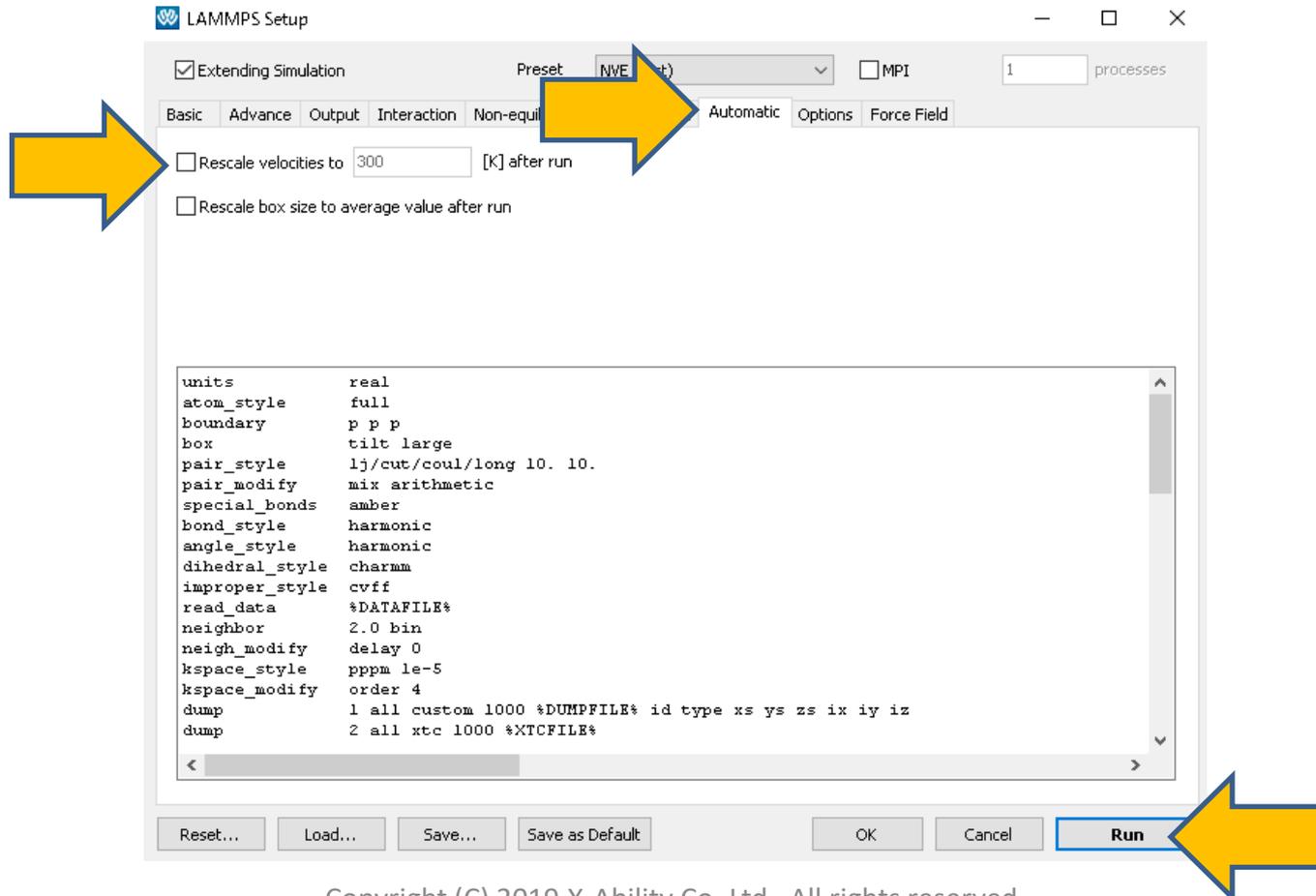
続けてOutputタブにおいて以下のように変更する。

- Log Intervalを2000に
- Calculate thermal conductivityをチェック
- Calculate viscosityをチェック



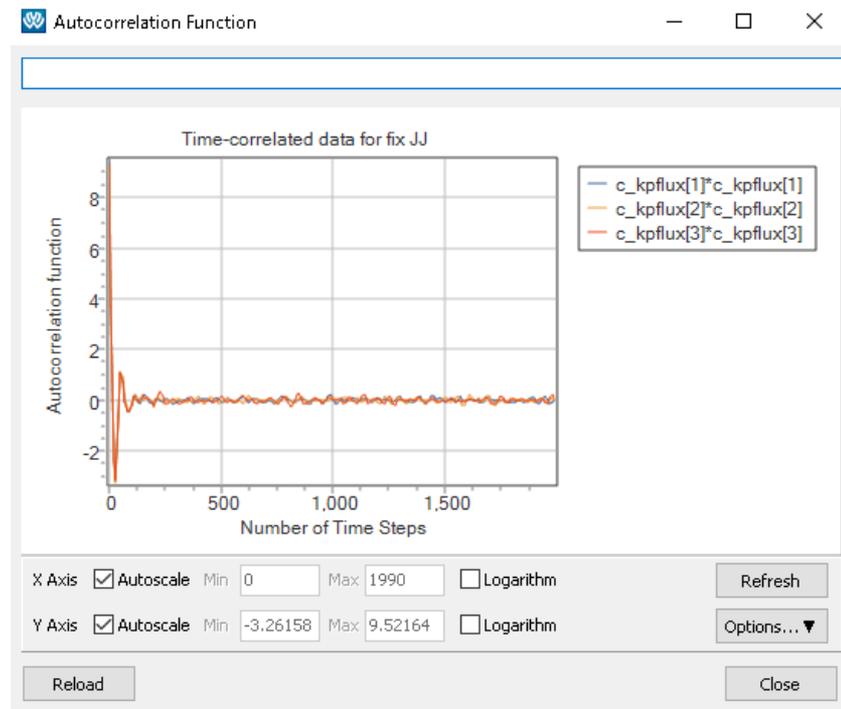
### III. プロダクトラン

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



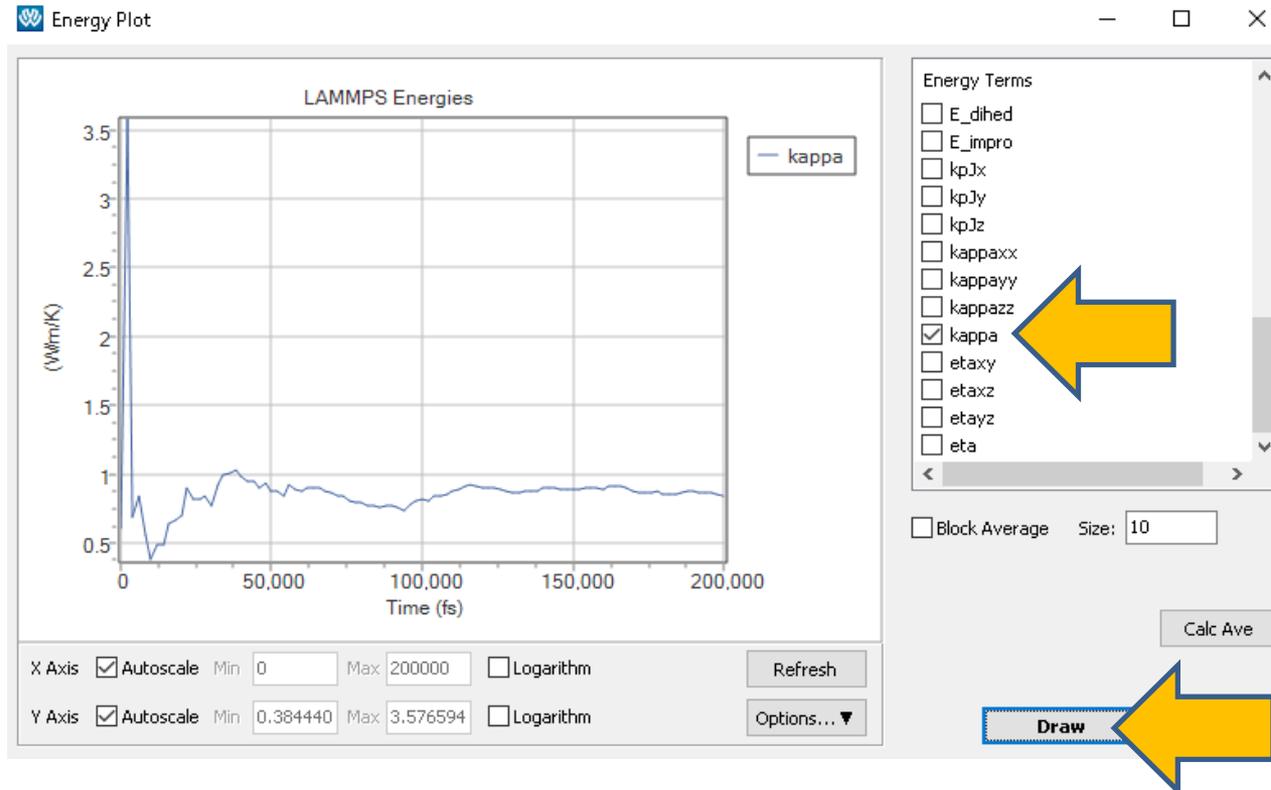
## IV. 熱伝導率の取得

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。



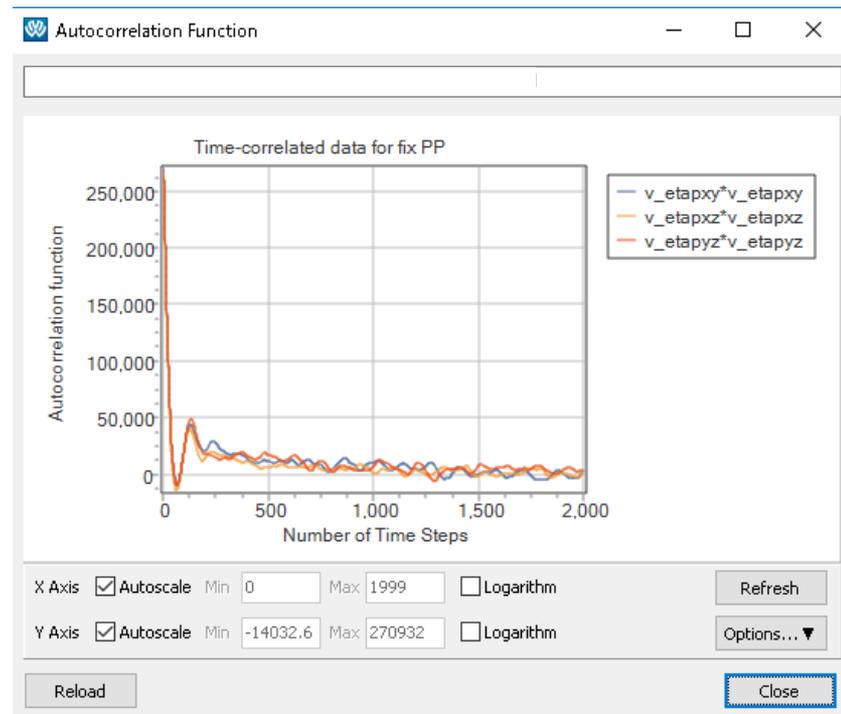
## IV. 熱伝導率の取得

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。



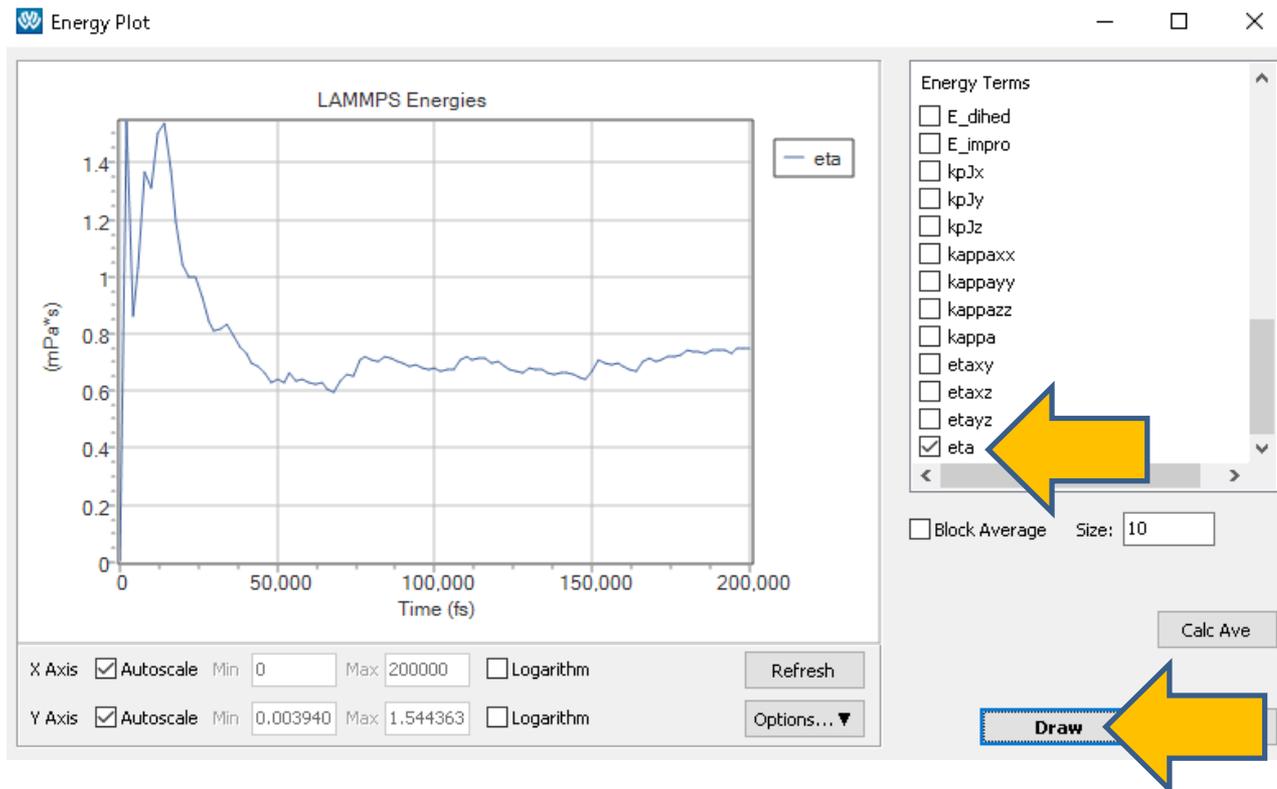
## V. 粘度の取得

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。



## V. 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。



<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

山口 達明

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...](http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_au_detailpage_o00_s00...)

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