

水統合シミュレータ操作説明書



東京理科大学
ウォーターフロンティア研究センター
(Water Frontier Research Center: WaTUS)

1. 水統合シミュレータの利用前の準備

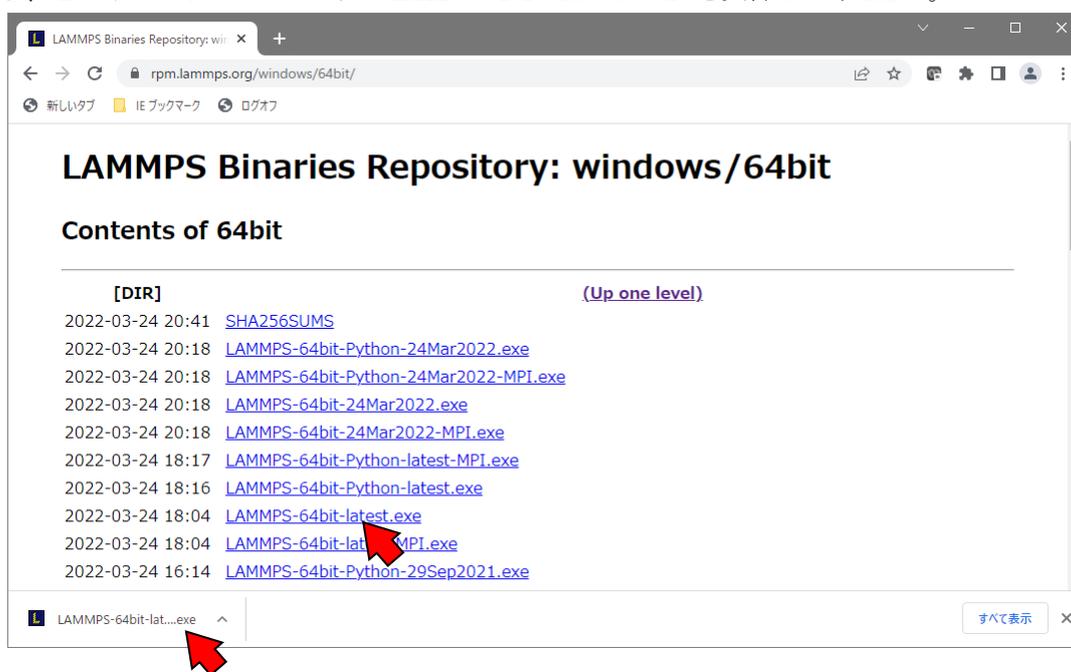
水統合シミュレータは材料界面での水分子の運動と構造を研究する東京理科大学の理論研究者が用いる数値シミュレーション解析プログラム群を一般の利用者が Windows パソコンから容易に利用できるようにするものです。小規模な分子動力学計算ならば Windows パソコンでも計算できますし、大規模な分子動力学計算ならば遠隔の Linux ワークステーションで計算させ、その計算内容の設定と結果の確認は Windows パソコンで行えます。

この水統合シミュレータを利用できるようにするため、以下の手順で Windows パソコンと Linux ワークステーションを準備します。なお、Linux ワークステーションを利用できなくても Windows パソコンのみで本水統合シミュレータを利用できます。

1.1 Windows パソコンでの LAMMPS 環境の準備

分子動力学計算を常に Linux ワークステーションで行い、Windows パソコンでは行わない場合は本節での準備は不要です。次節の Linux ワークステーションでの LAMMPS 環境の準備に進んでください。

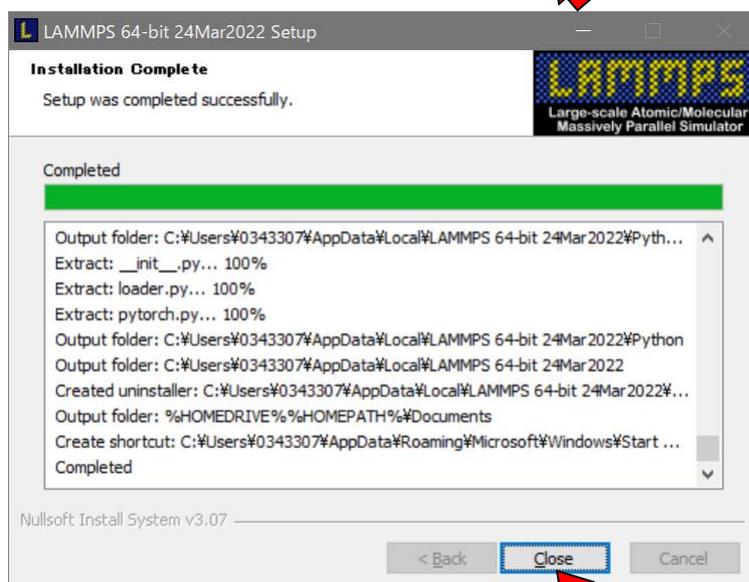
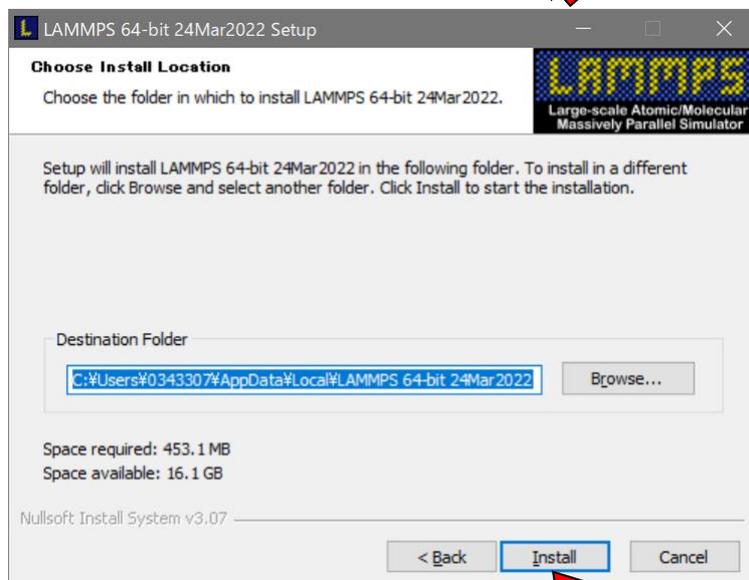
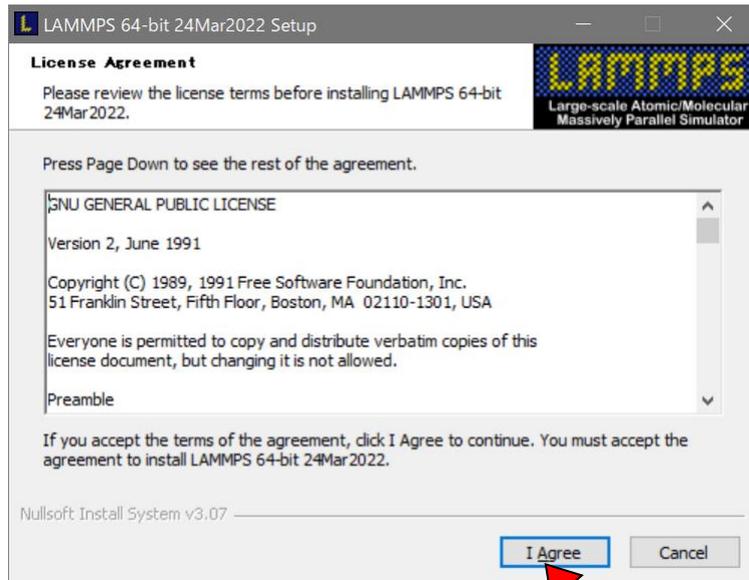
64bit Windows 版の LAMMPS のダウンロードサイト (<https://rpm.lammps.org/windows/64bit/>) から LAMMPS の最新版のインストールプログラム LAMMPS-64bit-latest.exe をダウンロードしてください。そして、ダウンロードを終えたら、このインストールプログラム LAMMPS-64bit-latest.exe を実行してください。



実行の際に Windows Defender による保護の画面が開く場合は詳細情報を表示の上で実行ボタンを押してください。



インストール画面で以下のようにボタンを押してインストールを完了してください。

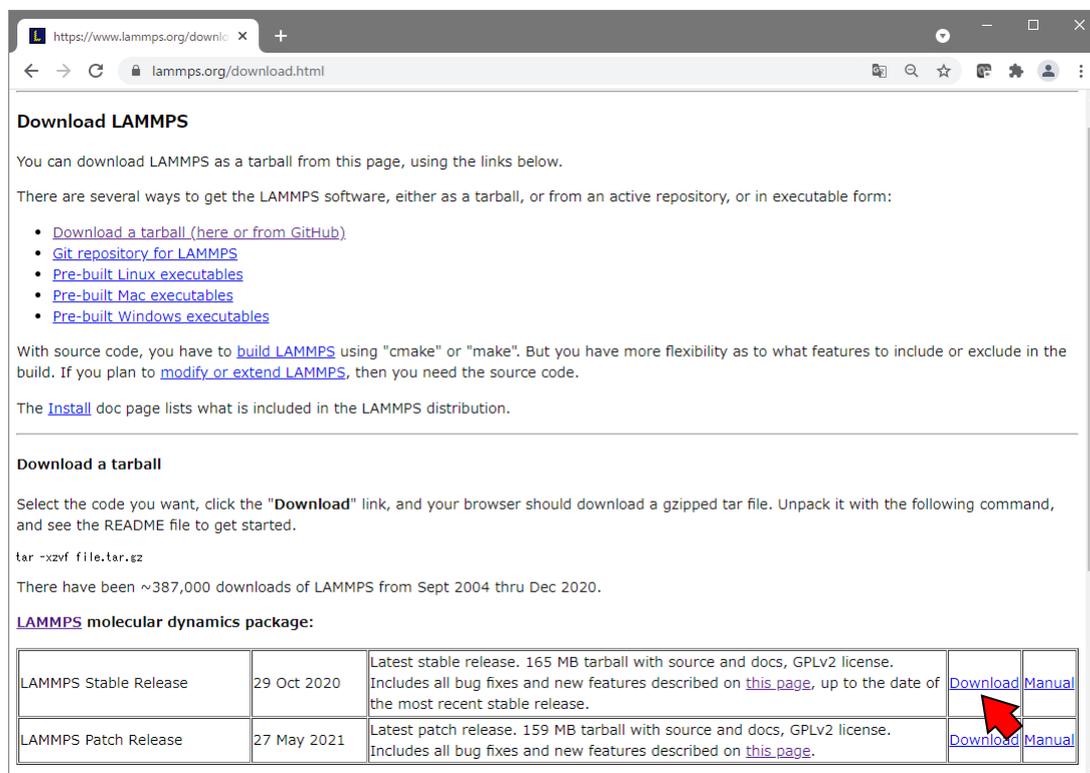


以上で Windows での LAMMPS 環境の準備は完了です。

1.2 Linux ワークステーションでの LAMMPS 環境の準備

分子動力学計算を常に Windows パソコンで行い、Linux ワークステーションでは行わない場合は本節での準備は不要です。次々節の本シミュレータの実行ファイルの準備に進んでください。

LAMMPS のダウンロードサイト (<https://www.lammps.org/download.html>) からソースファイルのアーカイブ lammps-stable.tar.gz をダウンロードしてください。



Linux ワークステーションで以下の手順でコンパイルしてください。

```
$ tar zxvf lammps-stable.tar.gz
$ cd lammps-stable_29Oct2020          ※この日付は version ごとに異なります。
[lammps-stable_29Oct2020]$ mkdir build
[lammps-stable_29Oct2020/build]$ cd build
[lammps-stable_29Oct2020/build]$ cmake ../cmake
[lammps-stable_29Oct2020/build]$ make -j 8
[lammps-stable_29Oct2020/build]$ ln -s lmp lmp_mpi
[lammps-stable_29Oct2020/build]$ ls
CMakeCache.txt  cmake_install.cmake  install_manifest.txt  lmp_mpi
CMakeFiles      etc                  liblammps.a           styles
Makefile        includes            lmp
```

LAMMPS 実行ファイル lmp や lmp_mpi を任意のディレクトリから起動できるように環境設定ファイル .bashrc などにて以下のように環境変数を設定してください。

```
export PATH="$PATH:$HOME/lammps-stable_29Oct2020/build"
export LAMMPS_POTENTIALS="$HOME/lammps-stable_29Oct2020/potentials"
```

続いて、弊社作成の LAMMPS 関連スクリプトの `lammpsctl.sh` と `persistentdiagram.py` を Linux ワークステーションにアップロードのうえ、Linux ワークステーションで以下のとおり両ファイルを実行可能なファイルとして、先の LAMMPS をコンパイルしたディレクトリに移動してください。

```
$ chmod u+x lammpsctl.sh persistentdiagram.py
$ mv lammpsctl.sh persistentdiagram.py lammps-stable_29Oct2020/build
```

続いて、パーシステント・ホモロジー解析に必要なライブラリを以下の手順でインストールしてください。

```
$ yum install gmp-devel mpfr-devel libboost-dev

$ curl -LO ¥
    https://github.com/CGAL/cgal/releases/download/releases%2FCGAL-5.0.2/CGAL-5.0.2-library.tar.xz

$ tar xf CGAL-5.0.2-library.tar.xz

$ CGAL_DIR=$PWD/CGAL-5.0.2/ pip install --verbose diode

$ pip install dionysus
```

以上で LAMMPS 環境の準備は完了です。

続いて、次節の Linux ワークステーションへのパスワード無しのログインの準備の作業に進んでください。

1.3 Linux ワークステーションへのパスワード無しのログインの準備

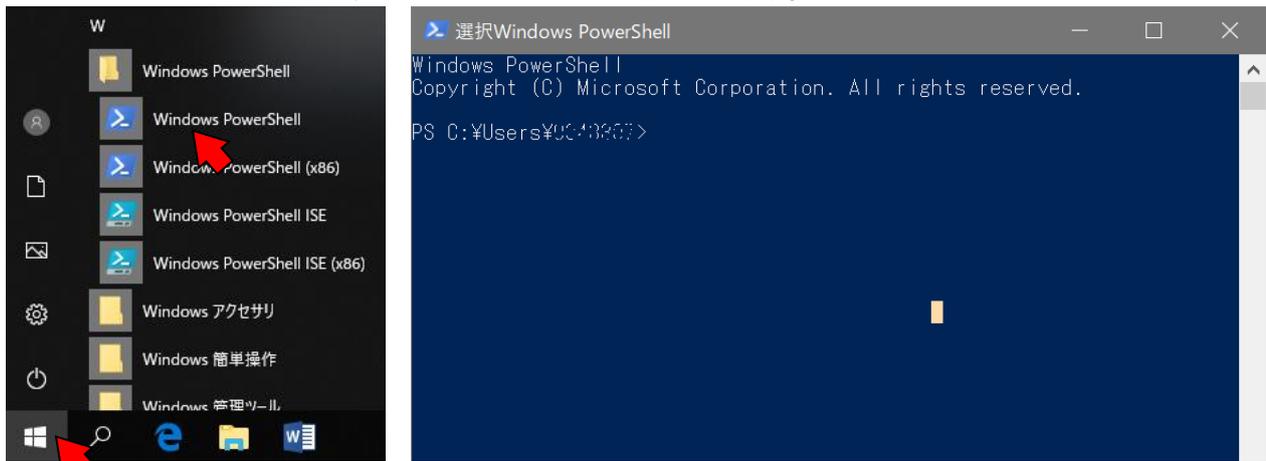
分子動力学計算を常に Windows パソコンで行い、Linux ワークステーションでは行わない場合は本節での準備は不要です。次節の本シミュレータの Windows パソコンへのインストールに進んでください。

既にパソコンからなんらかの ssh ソフト (PuTTY, TeraTerm, Cygwin, PowerShell など) で Linux ワークステーションにパスワード無しでログインできる場合も本節の準備は不要です。次節に進んでください。

Windows10 では標準で ssh コマンドを利用できる PowerShell を利用できます。これを用いて Linux ワークステーションにパスワード無しでログインできるようにするために以下の手順で準備してください。

Windows10 の画面左下のスタートボタンから Windows PowerShell を選択してください。

Windows PowerShell が起動し、コマンドプロンプト画面が開きます。



図：Windows PowerShell の起動とそのコマンドプロンプト画面

Linux ワークステーションのホスト名とユーザー名とパスワードを用いて、コマンドプロンプト画面で以下のようにタイプして Linux ワークステーションへログインしてください。

ログインできることを確認したら、.ssh ディレクトリを作成して一旦 exit してログアウトしてください。

```
PS C:\Users\%username> ssh username@hostname
username@hostname's password:
$ mkdir .ssh
$ chmod go= .ssh
$ exit
```

[注意] ssh の前にドット(.)を忘れずに

次に ssh-keygen コマンドを実行して、質問にすべてエンターキーのみを押して答えてください。

```
PS C:\Users\%username> ssh-keygen
Generating public/private rsa key pair.
Enter file in which to save the key (C:\Users\%username/.ssh/id_rsa):
Enter passphrase (empty for no passphrase):
Enter same passphrase again:
Your identification has been saved in C:\Users\%username/.ssh/id_rsa.
Your public key has been saved in C:\Users\%username/.ssh/id_rsa.pub.
```

公開鍵と秘密鍵がそれぞれ id_rsa.pub と id_rsa のファイルに生成されています。

この保存フォルダ名 C:\Users\%username/.ssh を後で使用しますので覚えておいてください。

公開鍵のファイルのみを Linux ワークステーションに送信してください。
先のログインで指定しましたユーザー名とホスト名に:(コロン)を忘れずに付けて送信してください。

```
PS C:\Users\¥username> scp .ssh/id_rsa.pub username@hostname: [注意]末尾に:(コロン)を忘れずに  
username@hostname' s password:
```

再度、Linux ワークステーションにログインしてください。上矢印キーで以前のコマンドを選べます。
ログインして、以下のコマンドでこの公開鍵のファイルを認証鍵リストに追記してください。
送信したファイルは削除して、また exit してログアウトしてください。

```
PS C:\Users\¥username> ssh username@hostname  
username@hostname' s password:  
  
$ cat id_rsa.pub >> .ssh/authorized_keys [注意]つづりを間違えないように  
$ chmod go= .ssh/authorized_keys  
$ rm id_rsa.pub  
$ exit
```

再度、Linux ワークステーションにログインしてください。今回はパスワード無しでログインできます。
ログインできることを確認できましたら exit してログアウトしてください。

```
PS C:\Users\¥username> ssh username@hostname  
  
$ exit
```

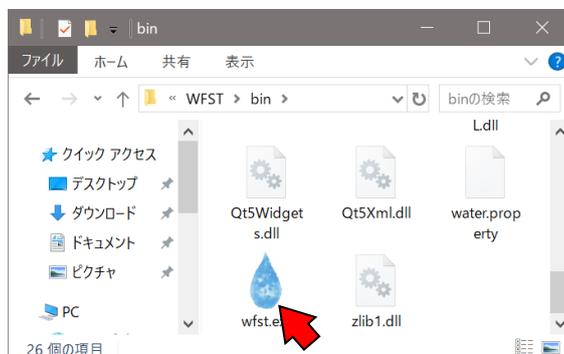
最後に exit して PowerShell を終了してください。

```
PS C:\Users\¥username> exit
```

以上で Linux ワークステーションへのログインの準備は完了です。

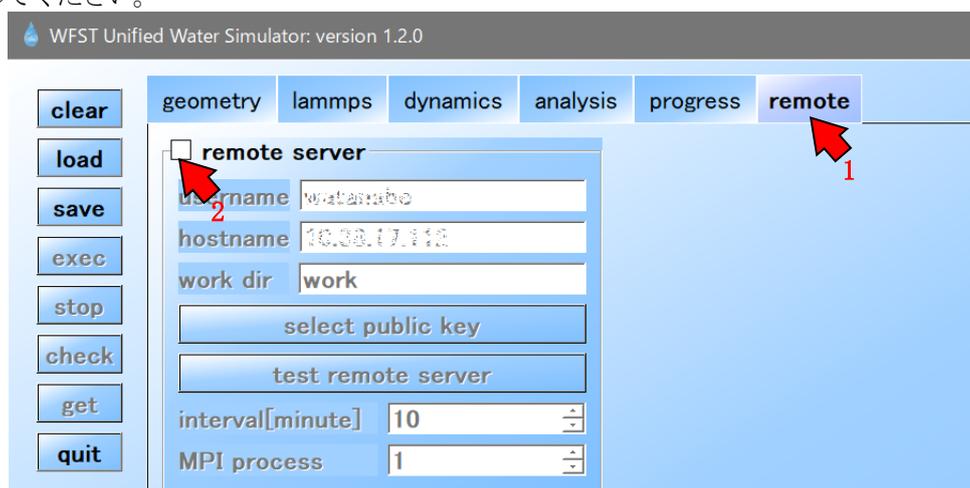
1.4 本シミュレータのWindows パソコンへのインストール

本シミュレータのアーカイブファイル wfst.zip をWindows パソコンの適当なところ(例えばデスクトップ上)にコピーし、これを開いて展開してください。開いたフォルダには以下のようにファイルが展開されています。このbin フォルダの中の wfst.exe をダブルクリックしてください。本シミュレータが起動します。



図：展開された本シミュレータの実行ファイルの起動

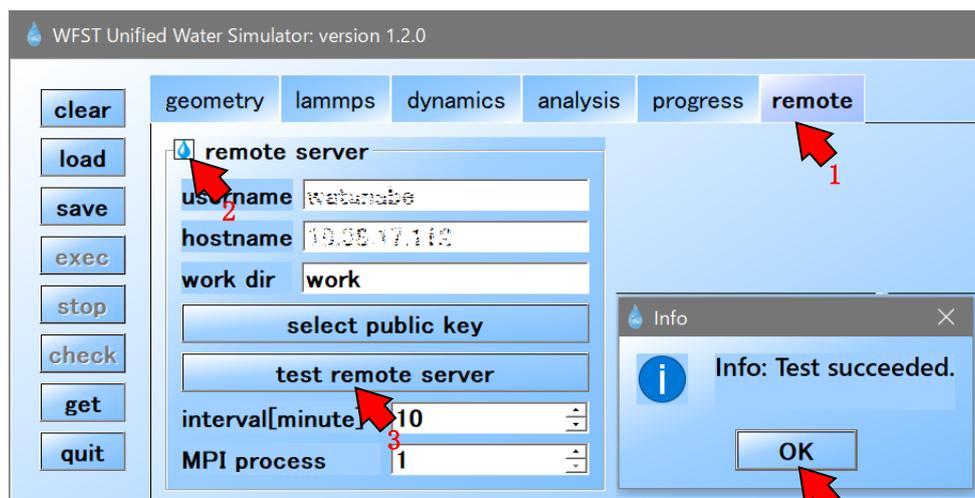
分子動力学計算をWindows パソコンで実行する場合は下図の**矢印1**が示す本シミュレータの画面の[remote]タブをクリックしてください。



矢印2が示す[remote server]のチェックボックスが**チェックされていない**ことを確認してください。

分子動力学計算をWindows パソコンで実行する場合のインストール作業は以上で完了です。

分子動力学計算を Linux ワークステーションで実行する場合は下図の**矢印 1** が示す本シミュレータの画面の [remote] タブをクリックしてください。



図： [remote] タブ画面のリモートサーバーの設定欄 **4**

矢印 2 が示す [remote server] のチェックボックスに**チェック**を入れてください。
Linux ワークステーションにログインするための情報の入力欄に入力できるようになります。

[username] の欄にユーザー名を指定してください。

[hostname] の欄にホスト名もしくは IP アドレスを指定してください。

[work dir] の欄に LAMMPS の入出力ファイルを保存するディレクトリ名を指定してください。

既定値の work のままでも構いません。

[select public key] のボタンを押して、公開鍵のファイルを指定してください。

PowerShell で公開鍵を作成した場合は公開鍵は C:\Users\¥username\.ssh/id_rsa.pub にあります。

矢印 3 が示す [test remote server] のボタンを押し数秒待ち、ワークステーションへの**接続を確認**してください。
テストの成功の旨が表示されたら本シミュレータのインストールは完了です。

矢印 4 の [OK] ボタンを押して、画面左下の [quit] ボタンを押してシミュレータを終了してください。

分子動力学計算を Linux ワークステーションで実行する場合のインストール作業は以上で完了です。

1.5 本シミュレータのコンパイル

本シミュレータはWindows パソコンでも Mac パソコンでもソースファイルから利用者がコンパイルして実行ファイルを作成することもできます。コンパイル済みの実行ファイルを利用する場合はこの説での作業は不要です。次章に進んでください。各 OS での本シミュレータのソースファイルからのコンパイル手順は以下のとおりです。

1.5.1 Windows パソコンでのコンパイル手順

開発環境の準備

本シミュレータはWindows パソコンのCygwin 環境で開発されましたが、MinGW 対応のコンパイラ・ライブラリのみを用いてコンパイルしますのでMinGW 環境でも開発できます。

Cygwin 開発環境でコンパイルする場合はまずCygwin のサイト <https://www.cygwin.com> からセットアップツール `setup-x86_64.exe` をダウンロードしてください。セットアップツールでのインストールパッケージの選択画面において、以下のパッケージのインストールを選択してください。

```
cmake, make, mingw64-i686-freeglut, mingw64-i686-gcc-fortran, mingw64-i686-gcc-g++,  
mingw64-i686-qt5-base, その他適当なファイル編集ソフト
```

SSH ライブラリのインストール

本シミュレータはSSH ライブラリのLIBSSH を用いてワークステーション上でLAMMPS を実行します。LIBSSH のサイト <https://www.libssh.org/> からアーカイブファイル `libssh-0.7.5.tar.xz` をダウンロードしてください。Cygwin の terminal 上で以下の手順でLIBSSH を展開してください。

```
$ tar axvf libssh-0.7.5.tar.xz  
$ cd libssh-0.7.5  
$ mkdir build  
$ cd build  
$ cmake -DCMAKE_C_COMPILER=i686-w64-mingw32-gcc -DCMAKE_CXX_COMPILER=i686-w64-mingw32-g++ ¥  
  -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=/usr/i686-w64-mingw32/sys-root/mingw ¥  
  -DCMAKE_LEGACY_CYGWIN_WIN32=1 ..
```

次に `config.h` の以下の箇所をコメントアウトしてください。

```
/* #undef LOCALEDIR */  
// #define DATADIR "/usr/i686-w64-mingw32/sys-root/mingw/share/libssh"
```

そしてLIBSSH をコンパイルして、インストールしてください。

```
$ make  
$ make install
```

本シミュレータのコンパイル

本シミュレータのソースディレクトリにて以下のようにファイルをコピーの上、コンパイルしてください。

```
[src]$ cp Makefile.inc.windows Makefile.inc  
[src]$ make
```

実行ファイル `wfst.exe` を他のフォルダにコピーする場合は設定ファイル `defaults.qml` を同じディレクトリにコピーしてください。また、実行時に必要となるDLL ファイルが `/usr/i686-w64-mingw32/sys-root/mingw/bin` にあり、PATH を通しておく必要があります。

1.5.2 Mac パソコンでのコンパイル手順

開発環境の準備

本シミュレータは GUI ライブラリの Qt5 と SSH ライブラリの LIBSSH を用いた C++プログラムであるため、必要なアプリケーションを Mac の terminal 上で以下の手順でインストールしてください。

```
$ brew install gcc  
$ brew install qt5  
$ brew install libssh
```

本シミュレータのコンパイル

本シミュレータのソースディレクトリにて以下のようにファイルをコピーの上、コンパイルしてください。

```
[src]$ cp Makefile.inc.mac Makefile.inc  
[src]$ make
```

実行ファイル wfst を他のフォルダにコピーする場合は設定ファイル defaults.qml を同じディレクトリにコピーしてください。

2. 水統合シミュレータの操作手順

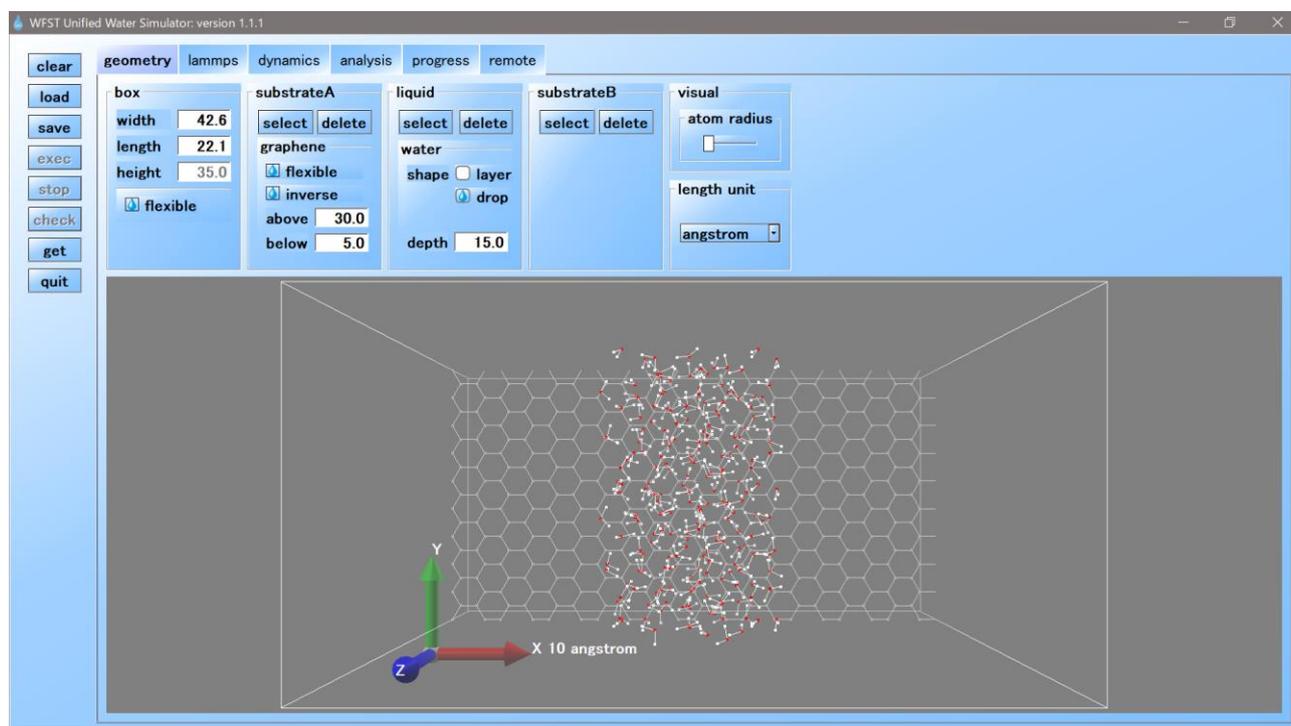
水統合シミュレータは材料界面での水分子の運動と構造を研究する東京理科大学の理論研究者が用いる数値シミュレーション解析プログラム群を一般の利用者が Windows パソコンから容易に利用できるようにするものです。

小規模な分子動力学計算ならば Windows パソコンでも計算できますし、大規模な分子動力学計算ならば遠隔の Linux ワークステーションで計算させ、その計算内容の設定と結果の確認は Windows パソコンで行えます。

この水統合シミュレータを以下の手順で操作することで、水分子の運動と構造を解析できます。

2.1 シミュレータの概要

本シミュレータの外観は下図のとおり、基板結晶の表面での水分子の配置などを示す可視化画面と計算内容を設定する設定画面と、計算の実行を制御するボタン群で構成されます。



図：本シミュレータの概観図。グラファイト基板上に水分子の初期配置を設定する様子。

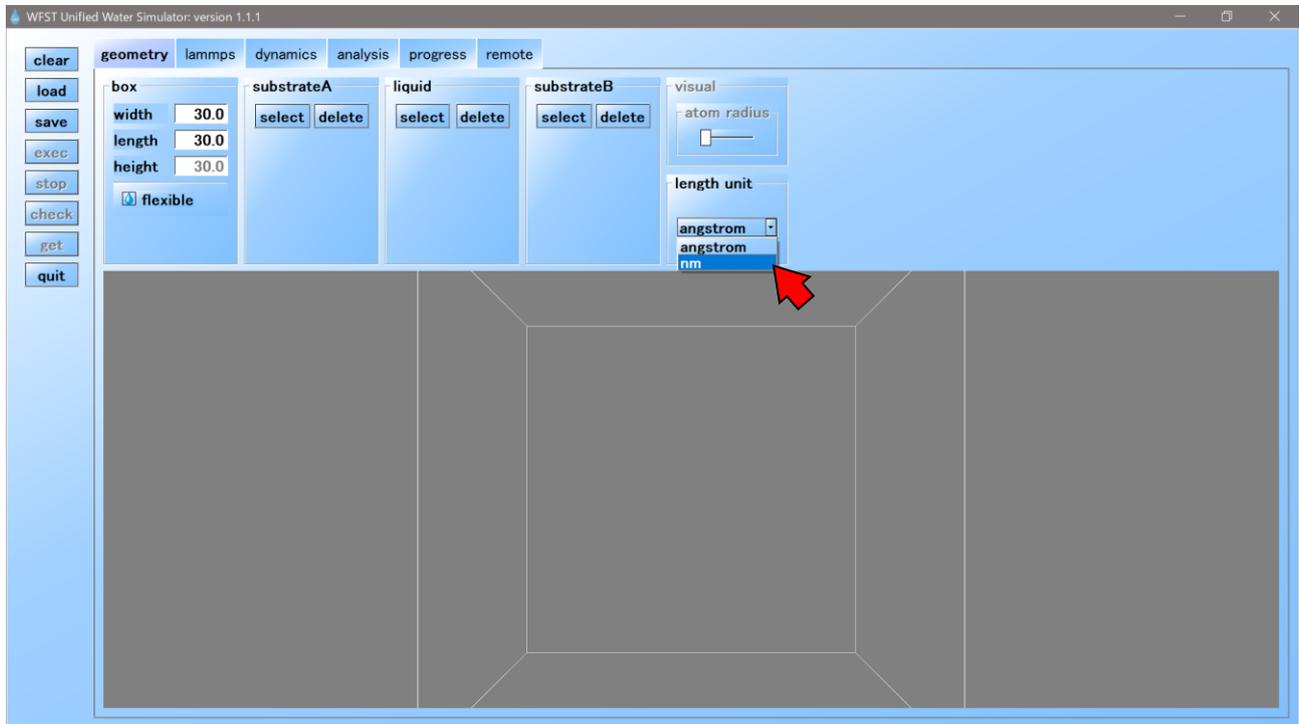
画面の左側に縦に並ぶボタンは LAMMPS の実行を制御します。

画面の上側に横に並ぶメニュータブは画面に表示する内容を切り替えます。

メニュータブのうち最初に表示される geometry タブは計算系の基板と水の配置を設定する画面を表示します。

2.2 計算系の設定

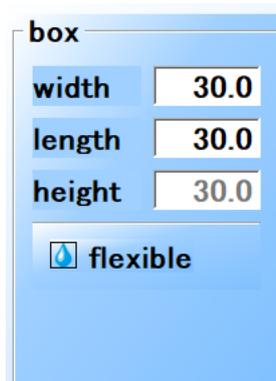
本シミュレータの実行ファイル wfst.exe もしくはショートカットをダブルクリックして本シミュレータを起動してください。始めに 30 Å 立方の計算系の枠線が画面に表示されます。



図：起動直後の本シミュレータの画面

計算系などの長さの値は始めにはÅ単位で表示されます。nm 単位での表示に替えたい場合は[geometry]タブの[unit]の欄で[nm]を選択してください。

続いて、[geometry]タブの[box]の欄で計算系の水平方向の長さを調整します。



図：計算系の調整欄

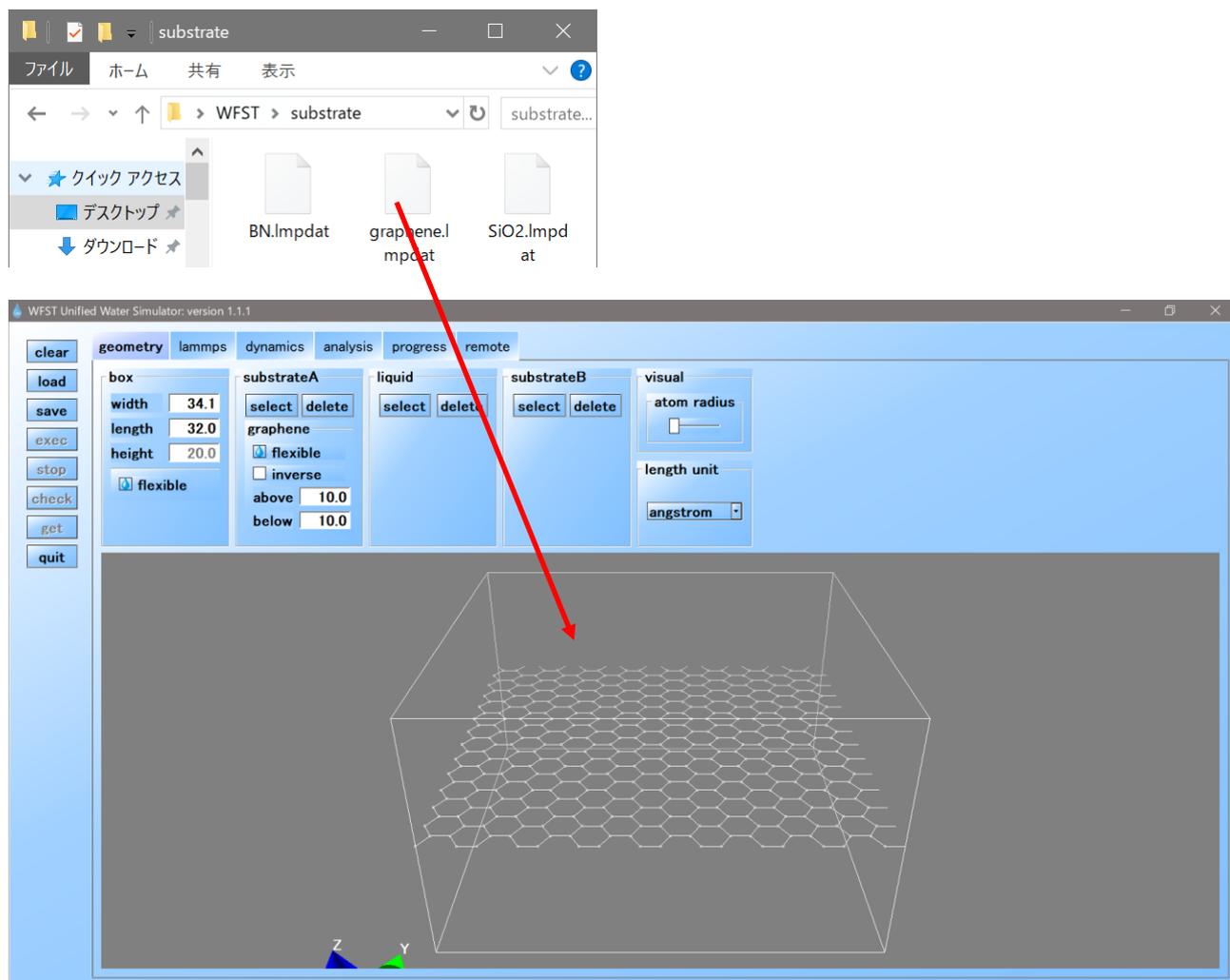
[width]の欄に計算系の水平横方向(x軸)の長さを指定してください。
[length]の欄に計算系の水平奥方向(y軸)の長さを指定してください。
この水平面内に基板の単位構造が周期的に並びます。

[flexibility]の欄に水滴模様のチェックを入れてください。

基板の単位構造をこの計算系の中に隙間なく周期的に並べるには計算系の長さが基板の単位長さの整数倍とするか、逆に基板の単位長さが計算系の整数分の一とすることで整合させる必要があります。ここでのチェックは計算系の長さを伸び縮みさせて基板と整合させることを指示するものです。

2.3 基板 A の設定

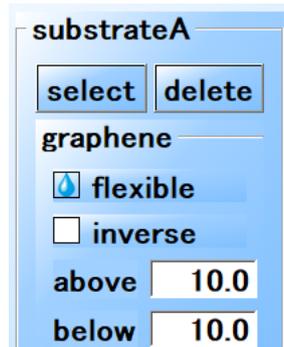
本シミュレータでは基板を基板 A と基板 B の 2 種類まで設定できます。
substrate フォルダにはいくつかの種類の子板の構造ファイルが用意されています。
例として graphene.lmpdat のファイルのアイコンをシミュレータの画面にまでドラッグ・ドロップしてください。
すると、計算系にグラフェンが周期的に並べられ、基板 A として画面に表示されます。



図：基板 A としてグラフェン基板が設定された様子

先の[box]欄で選んだ[flexibility]に従い基板または計算系の長さが少し伸長されています。

続いて、[geometry]タブの[substrateA]の欄で基板 A の垂直方向の長さを調整します。



図：基板 A の調整欄

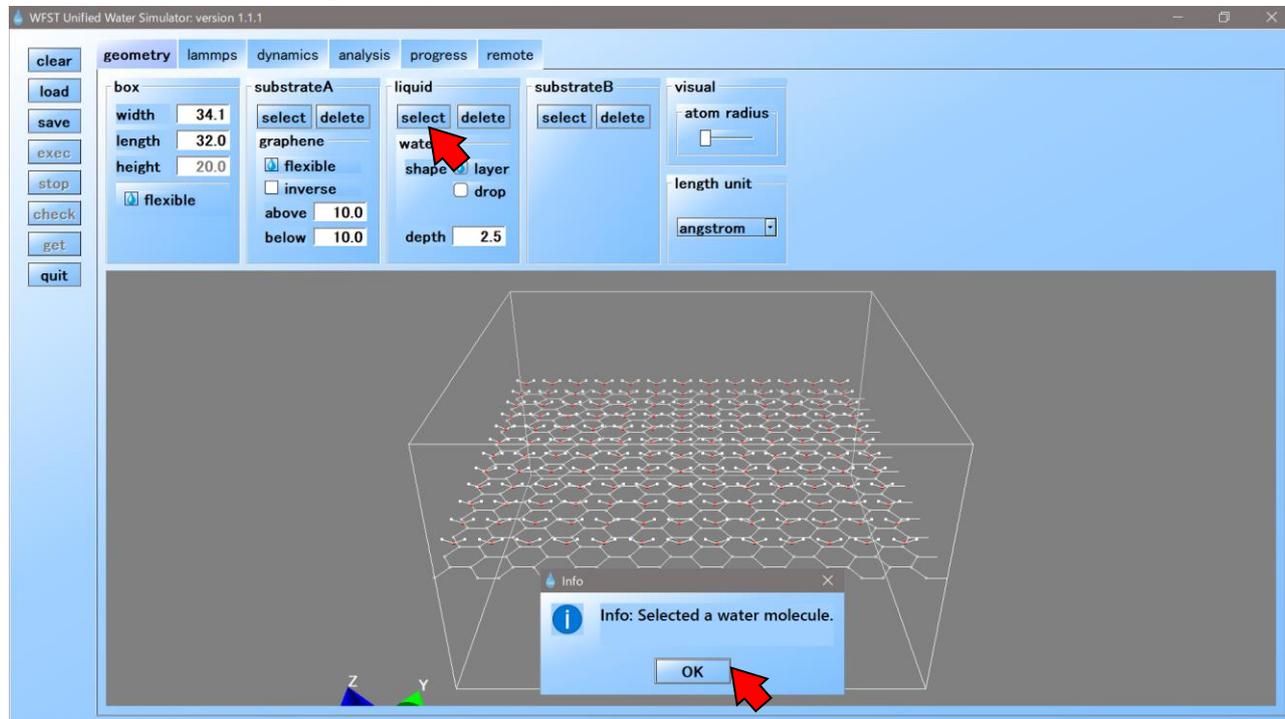
基板 A を変更する際に[select]ボタンで基板ファイルを選んでください。
基板 A を使用しない場合は[delete]ボタンで基板 A を削除してください。

基板 A の単位長さを計算系や基板 B と整合させるため伸び縮みしても良い場合は
[flexible]の欄にチェックしてください。

基板 A の表裏を反転する場合は[inverse]の欄にチェックしてください。
[above]の欄に基板 A 表面の上側(z 軸)の空間の長さを指定してください。
[below]の欄に基板 A 表面の下側(z 軸)の空間の長さを指定してください。

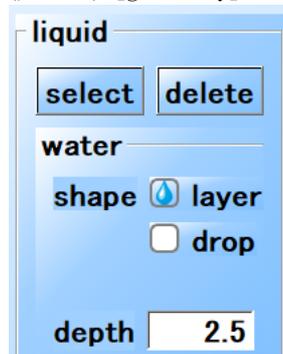
2.4 液体の設定

本シミュレータでは液体として水を設定できます。
基板Aが設定されていればその上側に、基板Bが設定されていればその下側に、水が設定されます。
[geometry]タブの[liquid]の欄の[select]ボタンで水が選択されます。
すると、計算系に水分子が層状に配置されます。



図：基板Aのグラフェン基板の上側に水分子が層状に設定された様子

続いて、[geometry]タブの[liquid]の欄で液体の形状を調整します。



図：液体の調整欄

液体を使用する際に[select]ボタンを押してください。現状では水のみを設定でき、他の選択枝はありません。

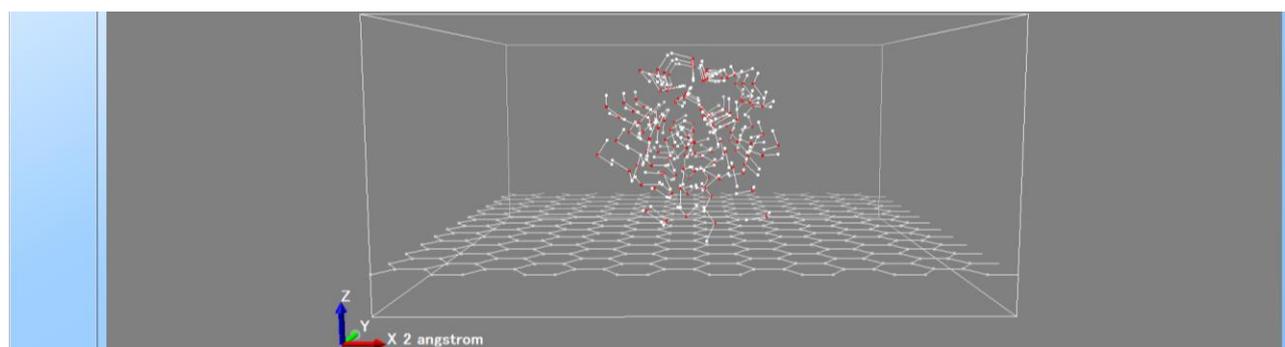
液体を使用しない場合は[delete]ボタンで液体を削除してください。

[shape]の欄の[layer]か[drop]のどちらかを選択してください。

[depth]の欄に液体の厚さを指定してください。

[layer]の場合は[depth]の厚さの層状に水分子が配置されます。

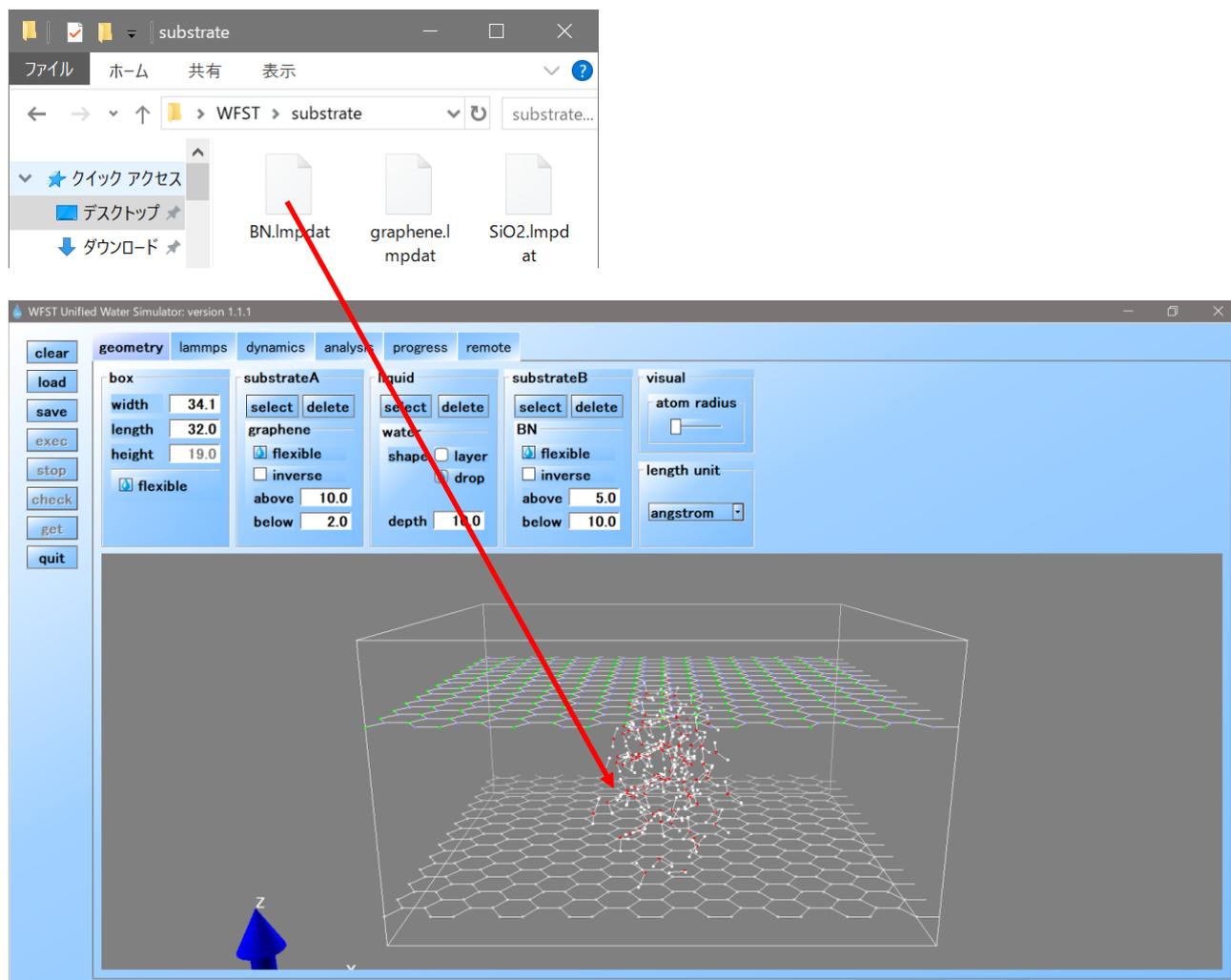
[drop]の場合は[depth]の直径の円柱状に水分子が配置されます。



図：基板Aのグラフェン基板の上側に水分子が円柱状に設定された様子

2.5 基板Bの設定

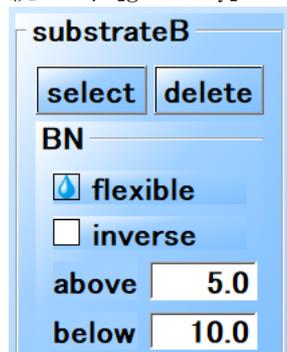
基板Aが設定された状態で例としてBN.lmpdatのファイルのアイコンをシミュレータの画面にまでドラッグ・ドロップしてください。すると、計算系のグラフェン基板や水の上側に六方晶の窒化ホウ素基板が周期的に並べられ、基板Bとして画面に表示されます。



図：基板Aのグラフェンと基板Bの窒化ホウ素の間に水分子が設定された様子

先の[box]欄で選んだ[fit]の方式に従い基板または計算系の長さが少し伸び縮みされています。

続いて、[geometry]タブの[substrateB]の欄で基板Bの垂直方向の長さを調整します。



図：基板Bの調整欄

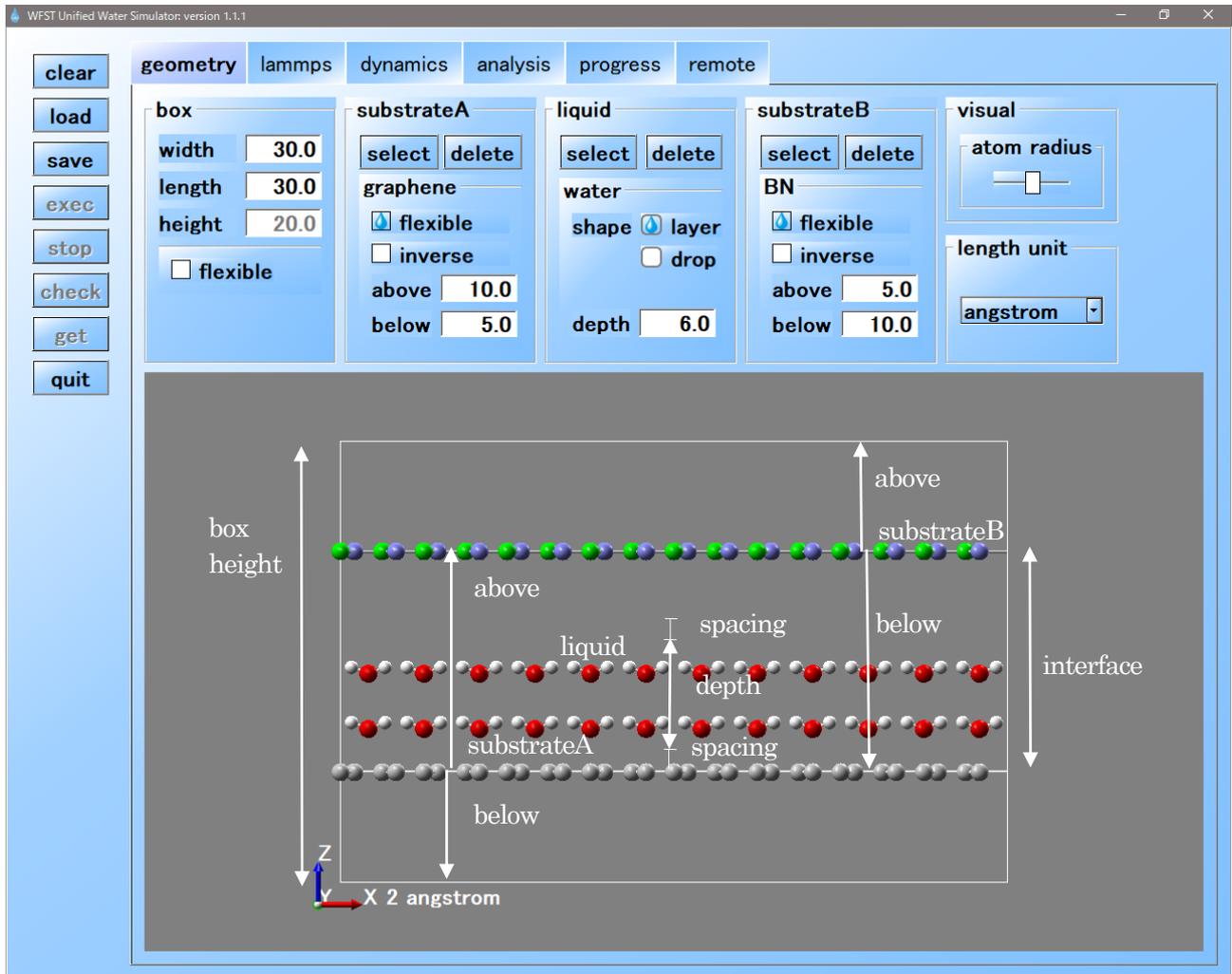
基板Bを変更する際に[select]ボタンで基板ファイルを選んでください。基板Bを使用しない場合は[delete]ボタンで基板Bを削除してください。

基板Bの単位長さを計算系や基板Aと整合させるため伸び縮みしても良い場合は[flexible]の欄にチェックしてください。

基板Bの表裏を反転する場合は[inverse]の欄にチェックしてください。[above]の欄に基板B表面の上側(z軸)の空間の長さを指定してください。[below]の欄に基板B表面の下側(z軸)の空間の長さを指定してください。

2.6 基板と液体の配置

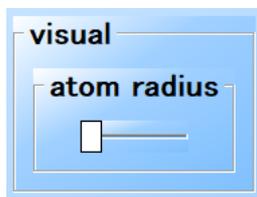
基板 A、液体、基板 B は各パラメタから下図のとおり配置されます。基板 A の above、液体の $\text{depth} + \text{spacing} * 2$ 、基板 B の below の三者のうち、存在するものの最大値を基板 AB 間の空壁 interface とします。



図：基板 A、液体、基板 B の鉛直方向の配置

2.7 計算系の可視化の変更

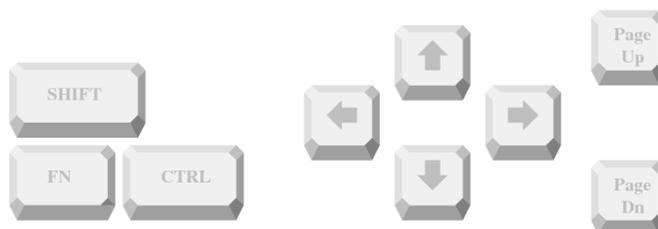
本シミュレータでは原子は始めには小さな球で表示されていますが、[geometry]タブの[visual]欄の[radius]のスライダーを右に移動すると、より大きな球で表示されます。



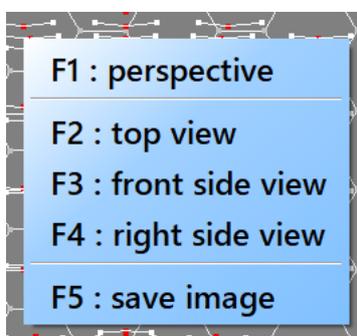
図：原子球の調整欄

[geometry]タブの表示画面上でのマウスやキーボードによる以下の操作で眺めを回転・拡大縮小できます。

操作	内容	操作	内容
マウス左ドラッグ	回転		
マウスホイール	前後移動		
上矢印キー	上移動	CTRL+上矢印キー	上向 15 度回転
下矢印キー	下移動	CTRL+下矢印キー	下向 15 度回転
左矢印キー	左移動	CTRL+左矢印キー	左向 15 度回転
右矢印キー	右移動	CTRL+右矢印キー	右向 15 度回転
PgUp キー	後移動	CTRL+PgUp キー	左回 15 度回転
PgDn キー	前移動	CTRL+PgDn キー	右回 15 度回転



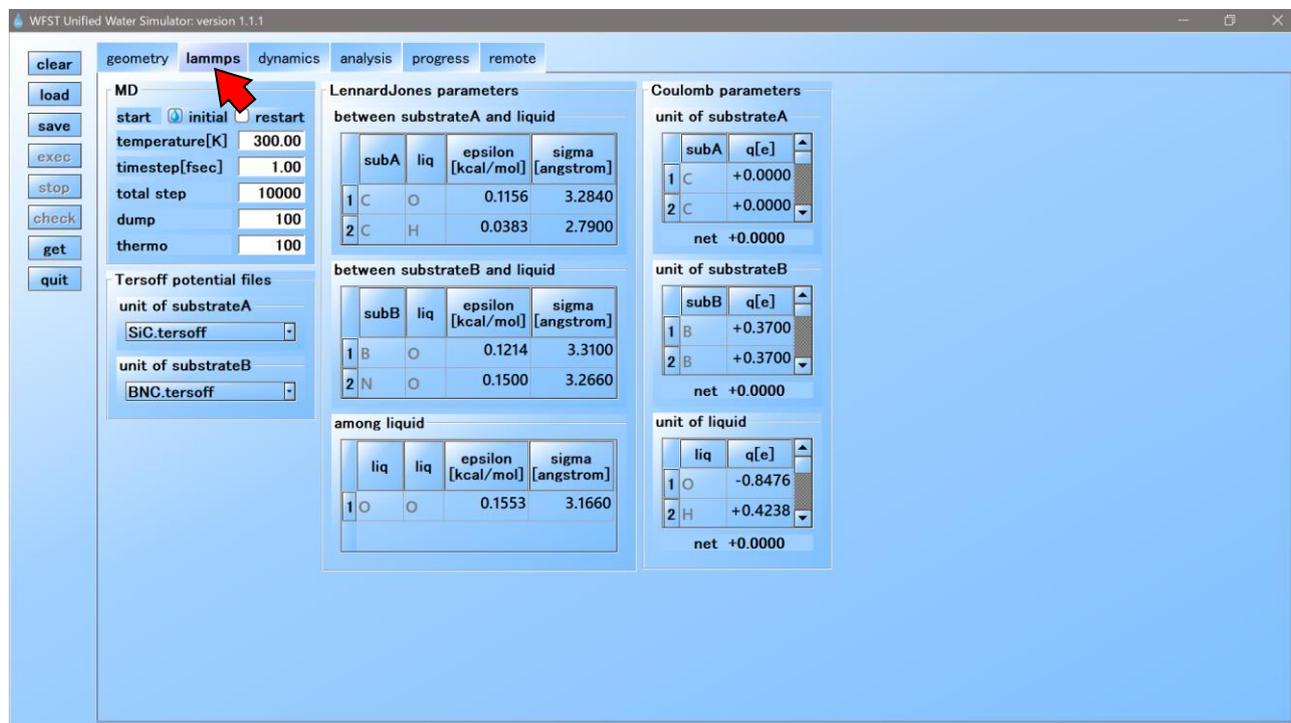
画面で右クリックして開く小画面のメニューからも投影方法を変更できます。この小画面から表示画面を BMP 画像ファイルとして保存することもできます。



図：マウス右クリックで開く小画面

2.8 分子動力学パラメタの設定

[geometry]タブの右隣の[lammps]タブをクリックしてください。
LAMMPS の分子動力学に関する主要パラメタの調整画面が表示されます。



図： [lammps] タブの画面の LAMMPS 分子動力学パラメタの調整欄

[MD]欄では分子動力学に関する以下の計算内容についてそれぞれ指定します。

- [start]の[initial] (新規計算)か[restart] (前回からの継続計算)のどちらかを選択してください。
- [temperature]に水分子の温度をケルビン単位で指定してください。
- [timestep]に分子動力学計算の時間刻みをフェムト秒単位で指定してください。
- [total step]に分子動力学計算の総ステップ数を指定してください。
- [dump]に分子動力学計算の途中で分子構造を記録するステップ間隔を指定してください。
- [thermo]に分子動力学計算の途中で熱力学的な情報を記録するステップ間隔を指定してください。

[Tersoff potential files]の欄には各基板に適応する Tersoff ポテンシャルの係数が記録されたファイル名を選択します。基板の構成元素に対応したファイルを選択してください。

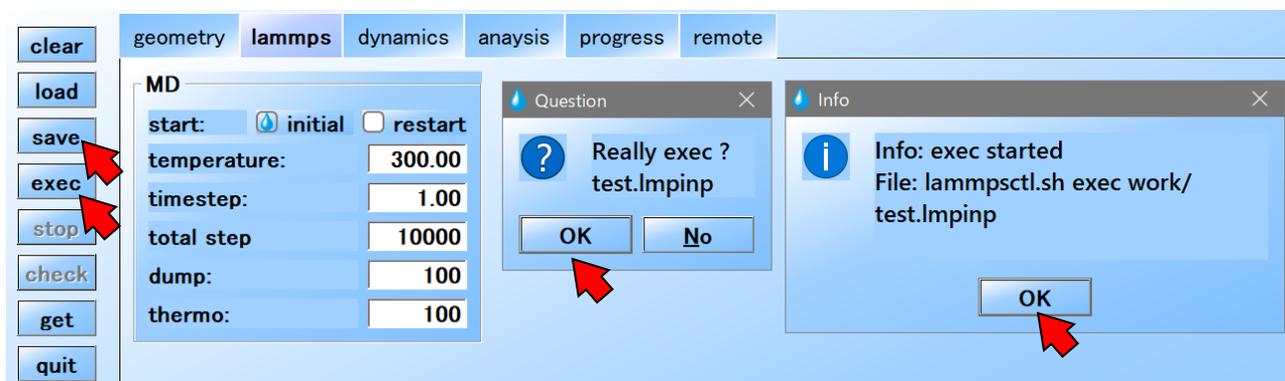
Tersoff ポテンシャルのファイルのデータのエネルギーが metal 単位系 (eV) で記録されている場合は、本シミュレータのスクリプト内で自動的に real 単位系 (kcal/mol) に変換されます。

[LennardJones parameter]欄には分子間の van der Waals ポテンシャルのパラメタの最小エネルギー ϵ [kcal/mol] と衝突半径 σ [Å] の値が元素の組別に表示され、必要がある場合にはこれらの値を調整してください。

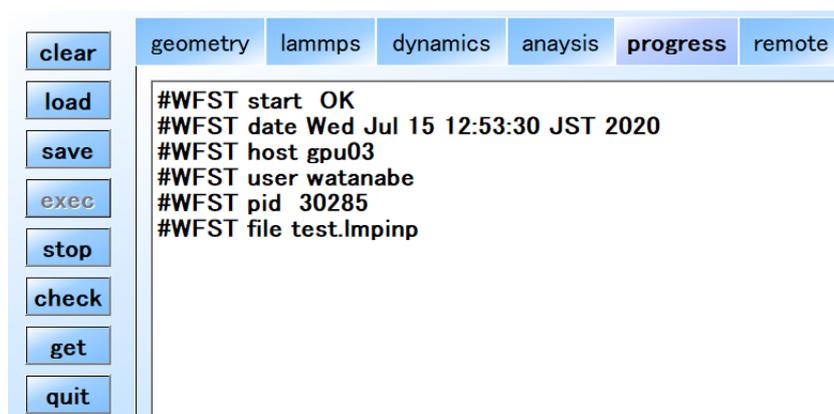
[Coulomb parameter]欄には原子間の Coulomb ポテンシャルの形状を定める電荷 q [e] の値が単位構造の原子別に表示され、必要がある場合にはこれらの値を調整してください。単位構造の電荷の総和は0になるように各原子の電荷の値を設定してください。

2.9 分子動力学計算の実行

画面左側の[save]ボタンを押してこの計算内容を適当なフォルダに適当なファイル名で保存してください。計算内容をファイルに保存すると画面左側の[exec]ボタンを押せるようになります。[exec]を押し、[OK]を押し数秒待ち、計算開始の旨が別の画面に表示されますので、[OK]を押してください。計算開始直後のLAMMPSの標準出力の内容が[progress]タブの画面に表示されます。

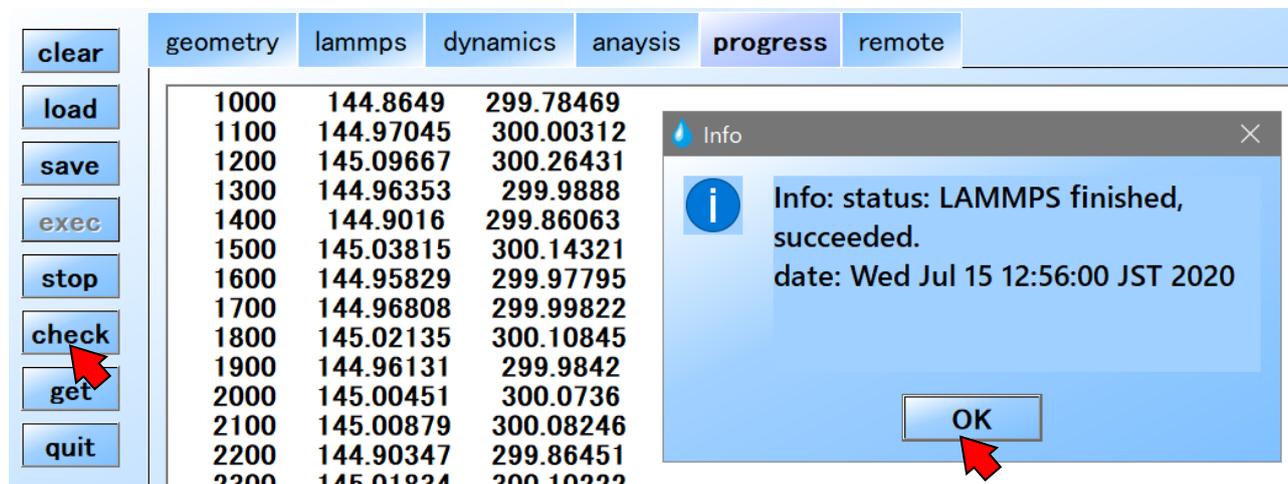


図：遠隔の計算機でのLAMMPS分子動力学計算の実行



図：[progress]タブ画面の計算開始状況報告欄

10分間おきにLAMMPSの標準出力の内容が[progress]タブの画面に更新されます。最新の内容を直ちに調べるには画面左側の[check]ボタンを押してください。計算が終了した場合はその旨が別の画面に表示されます。



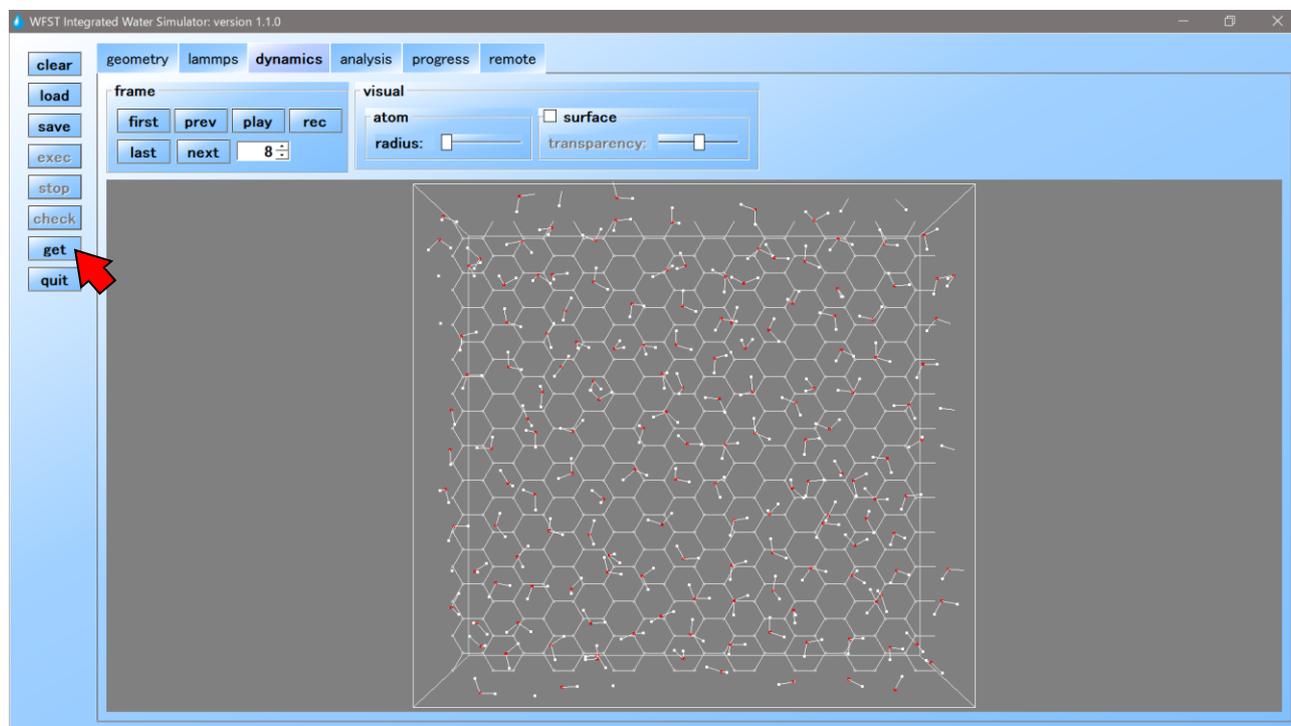
図：[check]ボタンによる計算の進行状況の確認

2.10 計算結果の取得

分子動力学計算が途中で分子の運動の様子を可視化できます。

[get]ボタンを押してください。LAMMPS の計算結果の出力ファイルがダウンロードされます。

ダウンロードが終わると画面上側の[dynamics]タブの画面に分子動力学での分子の運動の様子が表示されます。

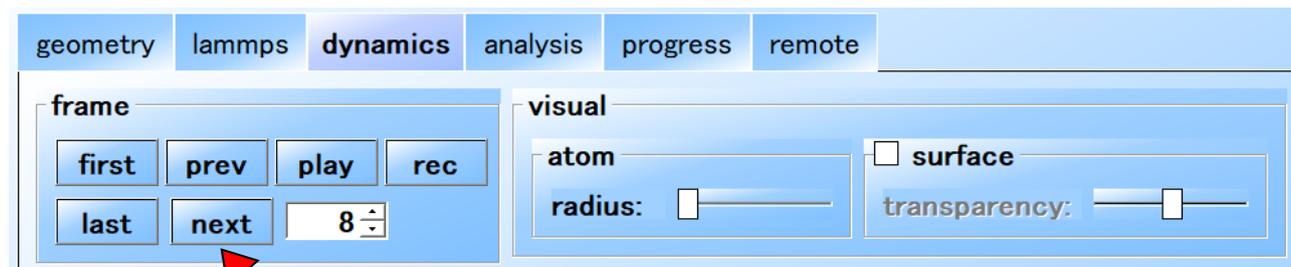


図：[dynamics]タブ画面の分子動力学での分子の運動の様子

分子動力学の[dump]で指定した一定ステップごとのフレームで分子の座標がファイルに記録されています。

[dynamics]タブの[frame]の欄で表示するフレーム番号を調整します。

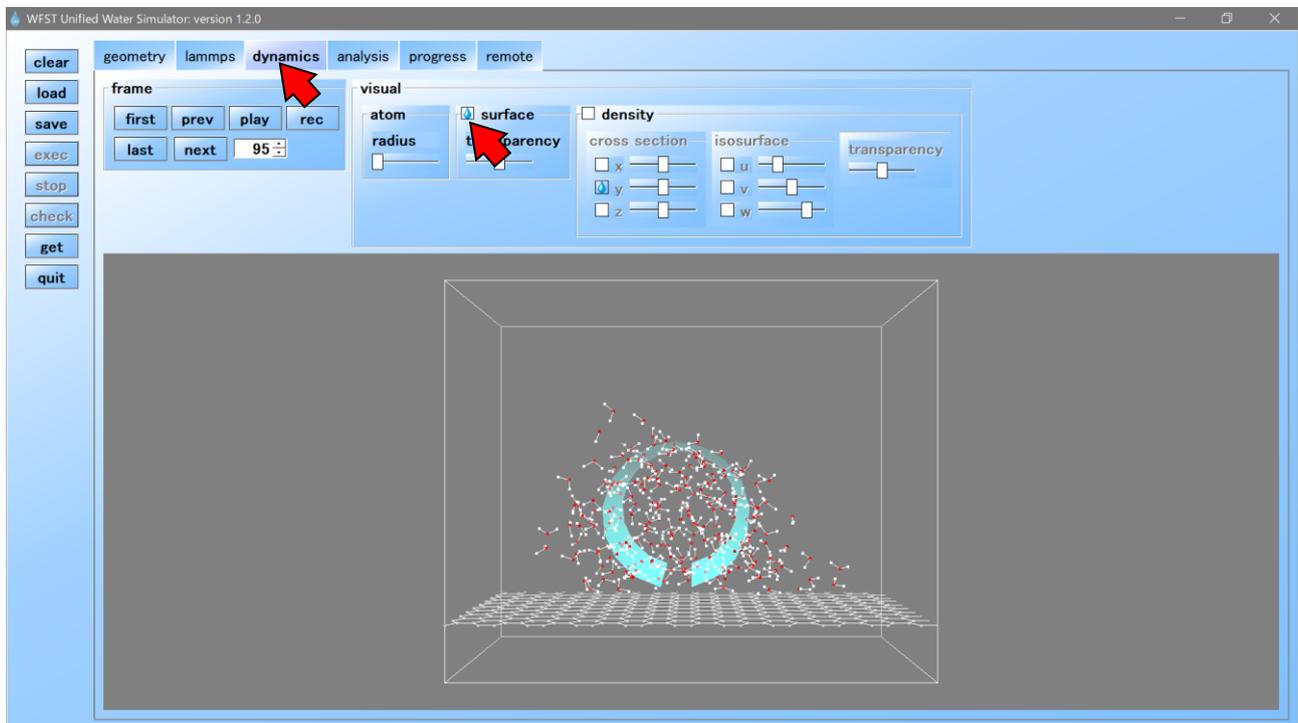
- [first] 最初のフレームを表示します。
- [last] 最後のフレームを表示します。
- [prev] ひとつ前のフレームを表示します。
- [next] ひとつ後のフレームを表示します。
- [play] 初めから最後まで順番にフレームを表示します。再度押すと止まります。
- [rec] 表示されたフレームの画像をファイルに保存します。



図：[dynamics]タブの表示フレームの調整欄

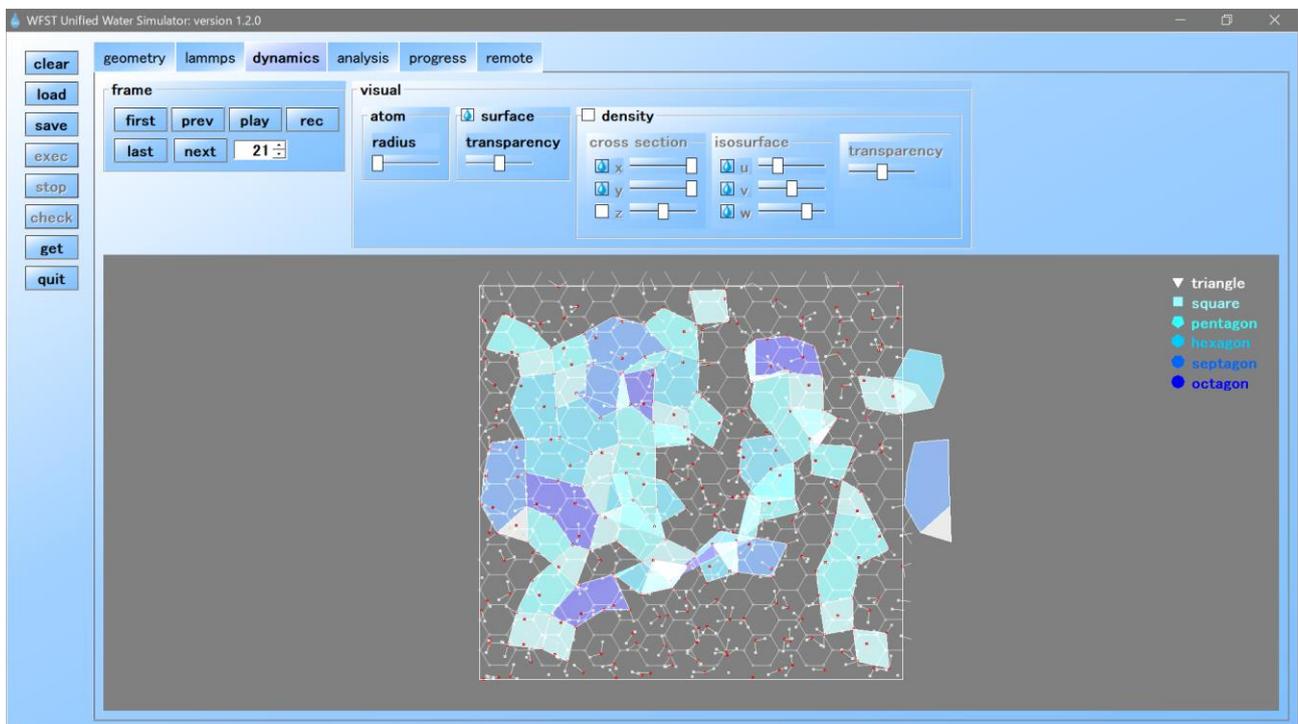
2.11 計算結果の分析

[dynamics]タブの[surface]欄をチェックすると水分子の基板表面上の構造の解析結果が表示されます。液滴状の水を計算した場合は解析された円筒の形状が重ねて表示されます。



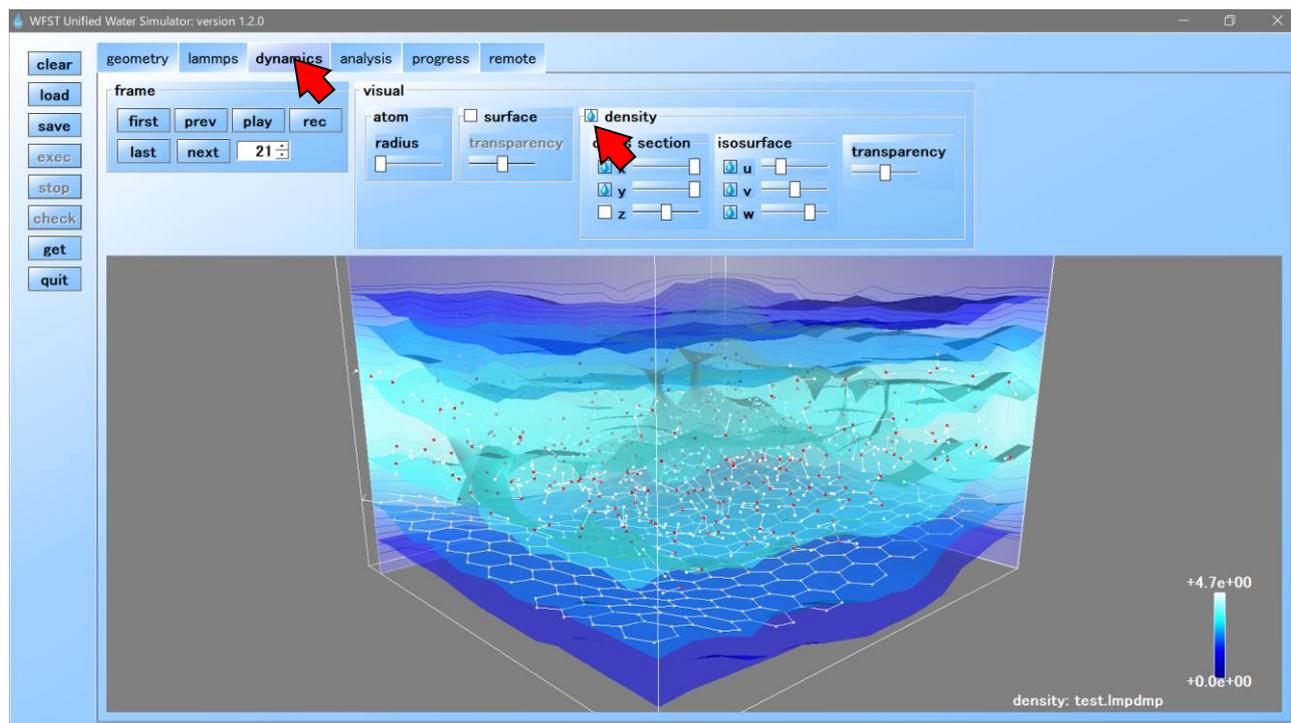
図：水分子の円柱状液滴の形状の様子

層状の水を計算した場合は水分子の水素結合ネットワークの多面体構造が重ねて表示されます。



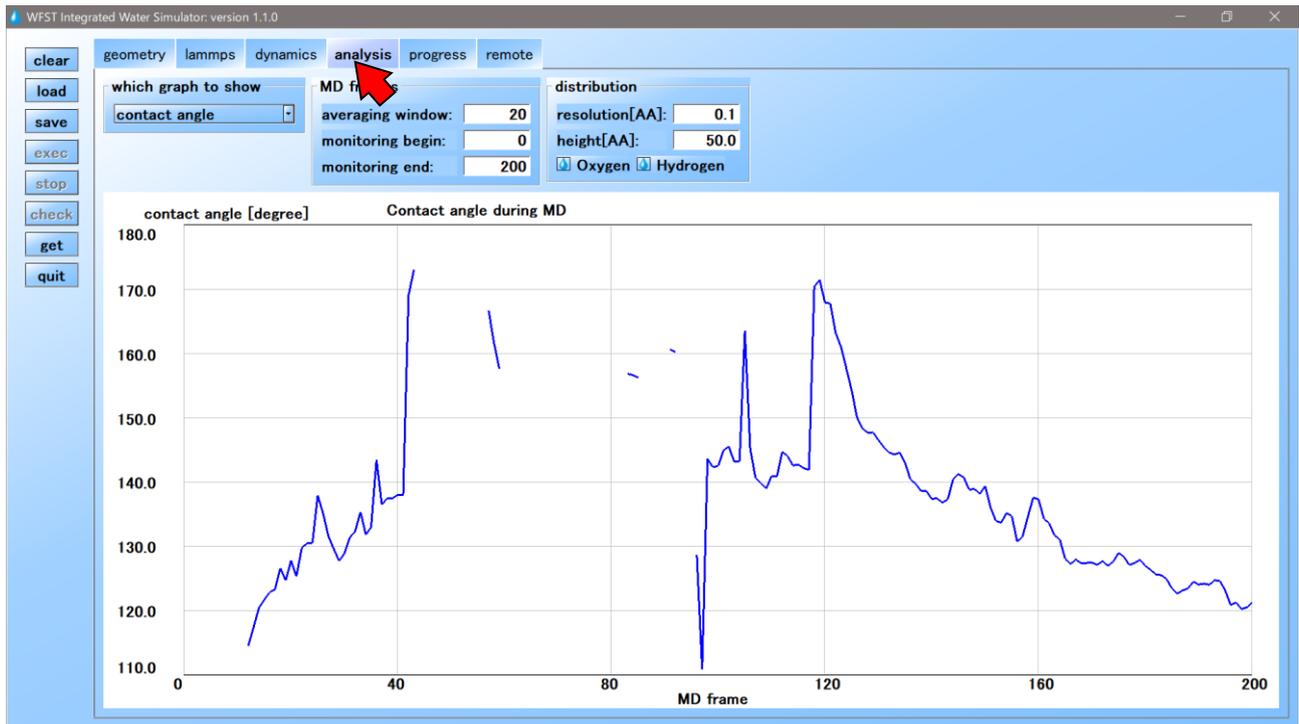
図：水分子の水素結合ネットワークの多面体構造の様子

[dynamics] タブの [density] 欄をチェックすると水分子の配置から水分子の密度分布が計算され表示されます。密度分布の断面図と等数値面図を選択・調整して表示させることができます。



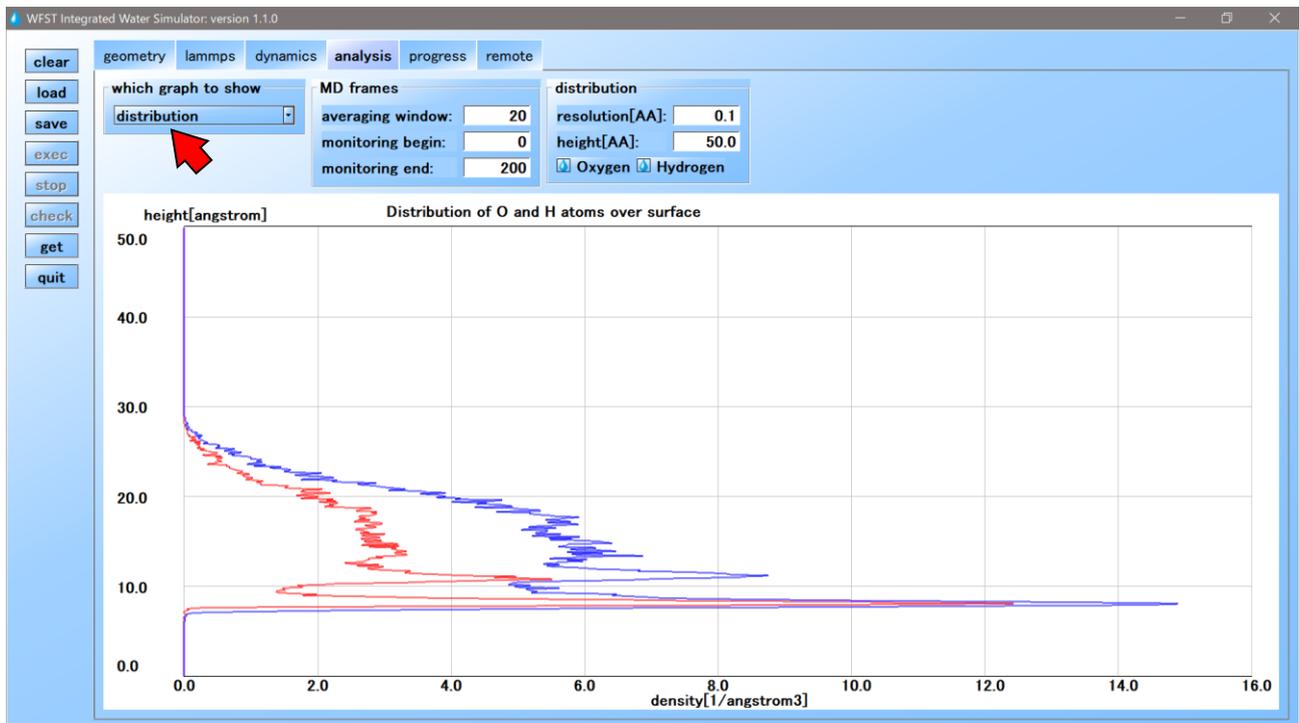
図：水分子の密度分布の断面図表示と等数値面表示の様子

[analysis]タブをクリックすると水滴の基板表面との接触角度の時間変化がグラフとして表示されます。ただし、水分子の分布により接触角度を判定できない場合があります、その場合はグラフの線は不連続に飛びます。



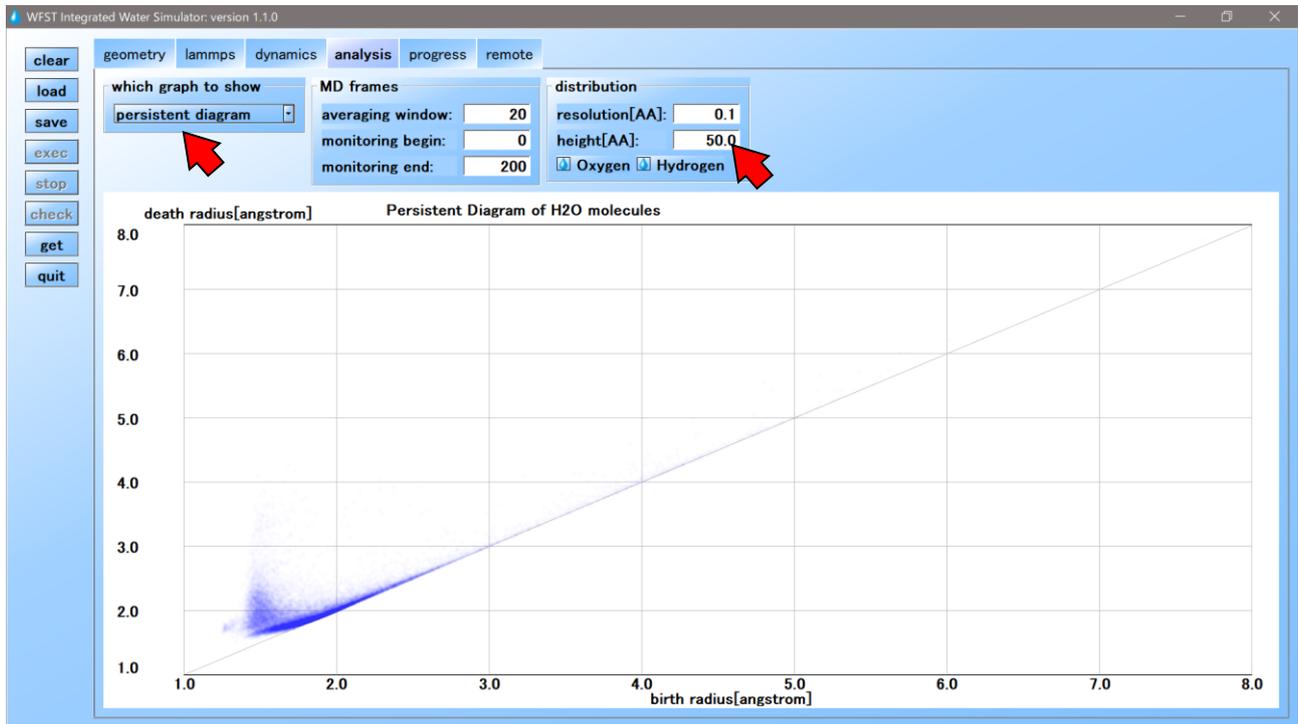
図：水滴の基板表面との接触角度の時間変化

[analysis]タブの[which graph to show]欄の[distribution]を選択すると水分子の酸素原子と水素原子の基板表面上方での密度分布の時間平均値がグラフとして表示されます。



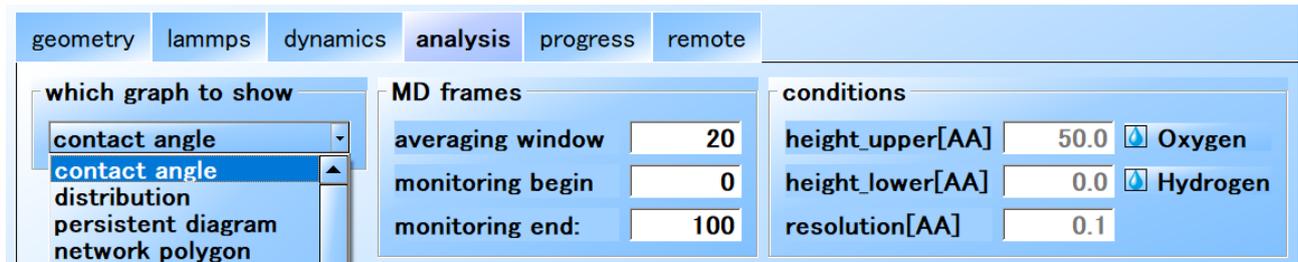
図：水分子の酸素原子と水素原子の基板表面上方での密度分布の時間平均

[analysis]タブの[which graph to show]欄の[persistent diagram]を選択すると分子動力学の各フレームでの水分子の配置からパーシステントダイアグラムが計算され、全フレームでの集積されたダイアグラムが表示されます。なお、このダイアグラムの計算は再び遠隔の計算機で計算されるため表示までに少し時間を要します。



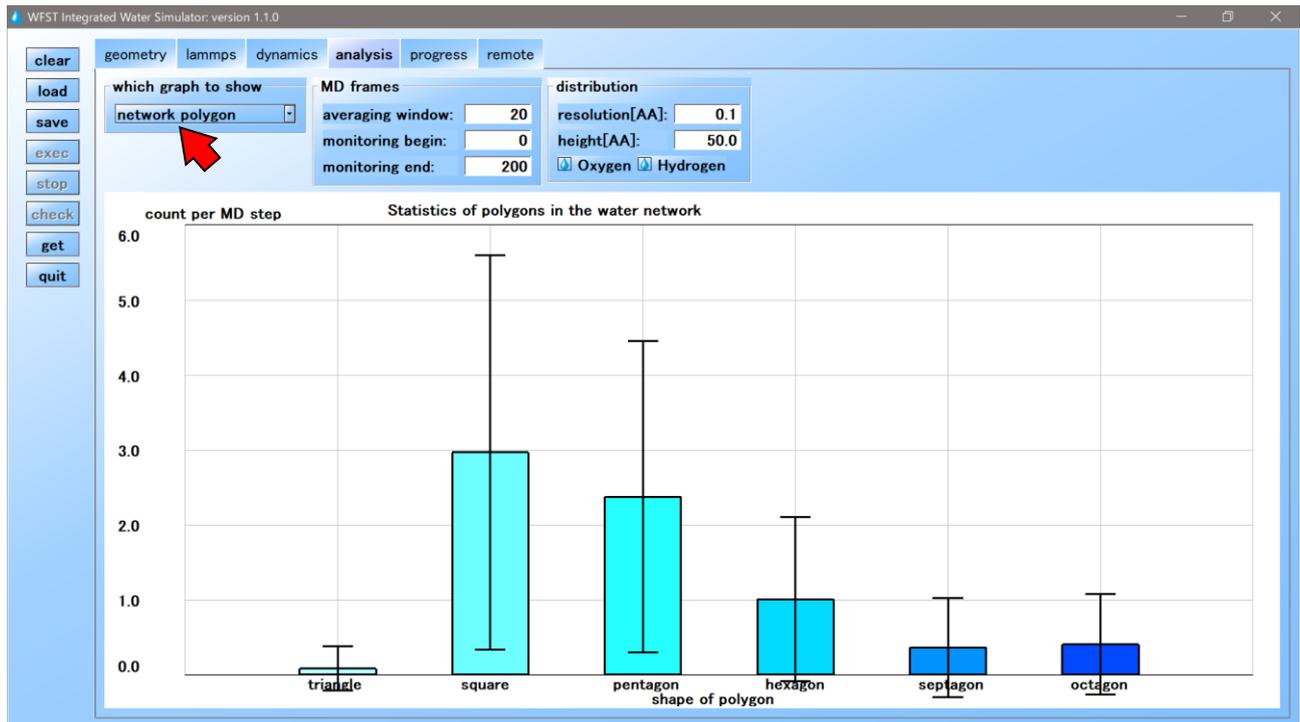
図：分子動力学の全工程での集積された水分子のパーシステントダイアグラム

解析条件を[analysis]タブの以下の欄で変更することもできます。



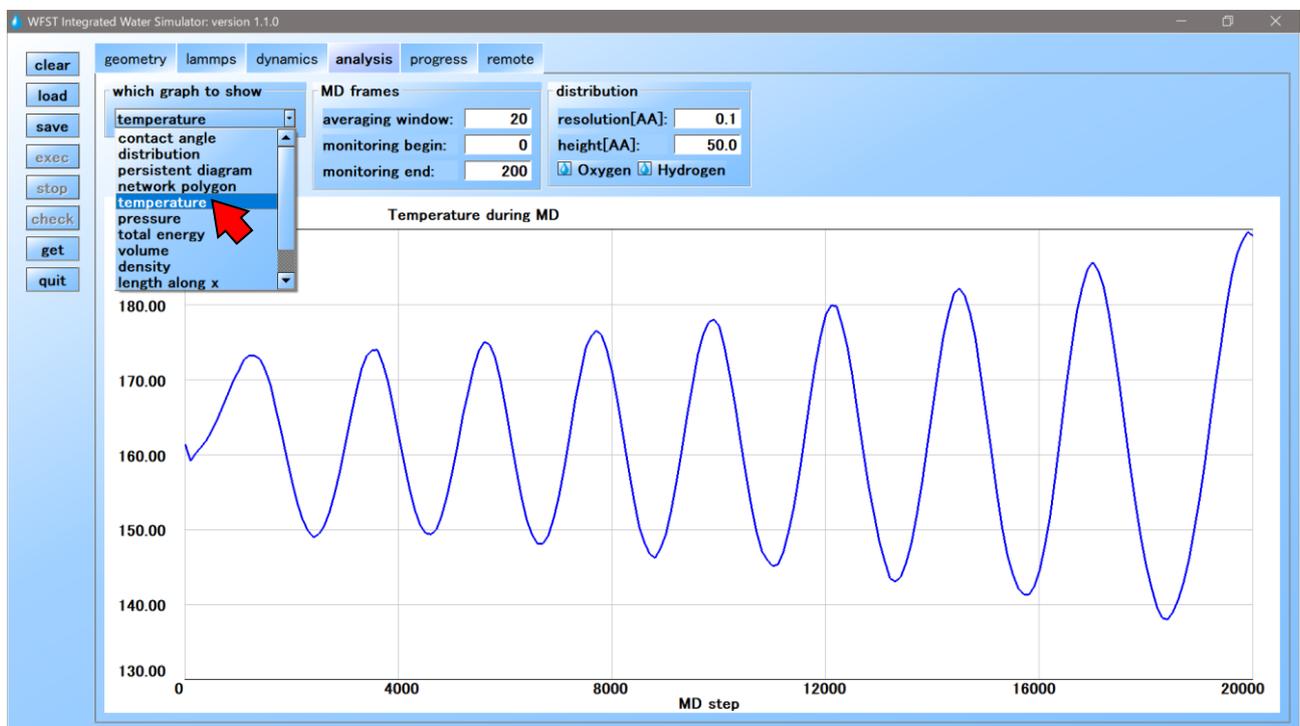
[averaging window]欄は接触角度の計算での水分子の存在密度分布の平均化処理で用いられるフレーム数です。
 [monitoring begin]欄と[monitoring end]欄は解析対象のフレーム番号の範囲です。
 [resolution]欄は高さ方向の水分子の密度分布の計算での高さのヒストグラムの間隔です。
 [height_upper]欄と[height_lower]は密度分布とパーシステントダイアグラム解析での水分子の基板からの高さの解析範囲です。
 [Oxygen]と[Hydrogen]のチェックボックスは水分子の酸素原子と水素原子の密度分布の表示を切り替えます。

[analysis]タブの[which graph to show]欄の[network polygon]を選択すると分子動力学の各フレームでの水素結合ネットワークを構成するポリゴンの多角形の形状別の統計情報がグラフに表示されます。



図：水素結合ネットワークを構成するポリゴンの多角形の形状別の統計情報

[analysis]タブの[which graph to show]欄のその他の項目を選択すると分子動力学の全ステップに渡る物性値の時間変化のグラフが表示されます。



図：MDの全ステップでの各種の物性値の時間変化のグラフ

以上のグラフの数値データはそれぞれ以下のとおりファイルに記録されています。

接触角度の時間変化 angle.dat

# frame	xcenter[AA]	ycenter[AA]	radius[AA]	angle[deg]
12	21.074466	21.300441	4.186181	114.529477
13	21.058692	21.527123	4.263410	117.439400
14	21.040019	21.603732	4.025229	120.471492
15	21.024494	21.779368	4.218388	121.703591
...				

基板表面上方での水分子の密度分布の時間平均 distrib.dat

# height[AA],	dens0[1/AA ³],	densH[1/AA ³]
0.000000	0.000000e+00	0.000000e+00
0.100000	0.000000e+00	0.000000e+00
0.200000	0.000000e+00	0.000000e+00
0.300000	0.000000e+00	0.000000e+00
...		

水分子のパーシステントダイアグラム diagram.dat

birth and death radius
1.248950 1.726338
1.250733 1.662780
1.252119 1.653314
...

水素結合ネットワークを構成するポリゴンの統計情報 polygon.dat

count of each polygon per MD steps.
shape, mean, deviation
3 0.084577 0.295591
4 2.970149 2.633331
5 2.378109 2.079590
6 1.009950 1.092671
7 0.363184 0.663503
8 0.402985 0.670480
...

各種物性値の時間変化 md.dat

# step	temp	press	etotal	vol	density	lx	ly	lz
0	128.335630	6.627208e+05	3.439679e+04	16344.920000	0.793128	34.080000	31.973630	15.000000
100	127.716060	4.305784e+04	3.004552e+02	16344.920000	0.793128	34.080000	31.973630	15.000000
200	128.313370	1.054159e+04	-1.469677e+03	16344.920000	0.793128	34.080000	31.973630	15.000000
300	128.300170	2.440718e+03	-1.607411e+03	16344.920000	0.793128	34.080000	31.973630	15.000000
400	128.353600	-1.246430e+02	-1.575036e+03	16344.920000	0.793128	34.080000	31.973630	15.000000
...								

2.12 OpenFOAM 用の水の物性値の定義ファイルの出力

分析後に、OpenFOAM 用の水分子の物性値の定義ファイルが以下の内容で自動的に生成されます。ただし、ここで接触角度以外は固定値が記録され、接触角度は先の接触角度のグラフの最終値が記録されます。接触角度の最終値が判定できていない場合は0が記録されます。

water.property

```
FoamFile
{
  version 2.0;
  format  ascii;
  class   dictionary;
  location "location";
  object  transportProperties;
}
Pphases (water air);

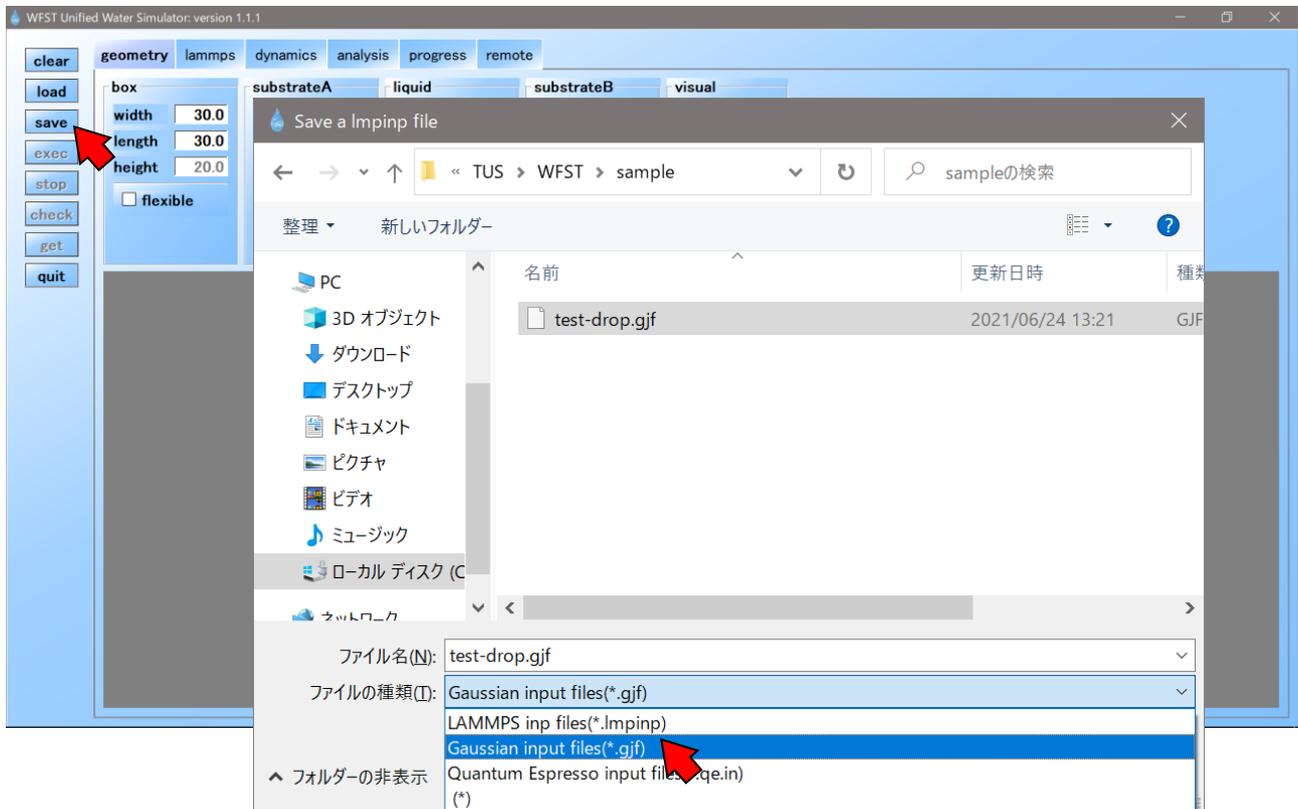
water
{
  transportModel Newtonian;
  rho  rho  [ 1 -3  0 0 0 0 0 ] 1e+03; // [kg/m3]
  nu   nu   [ 0  2 -1 0 0 0 0 ] 1e-06; // [m2/s] kinematic viscosity
  mu   mu   [ 1 -1 -1 0 0 0 0 ] 1e-03; // [sPa] viscosity
}

sigma sigma [ 1  0 -2 0 0 0 0 ] 0.07225; // [N/m] surface tension

side-wall
{
  type constantAlphaContactAngle;
  theta0 121.30; // [deg] Equilibrium contact angle
  limit gradient;
  value uniform 0;
}
```

2.13 量子力学計算のための入力ファイルの作成

[save]ボタンをクリックして開く保存ファイルを選ぶ画面において、「ファイルの種類」の欄でLAMMPSの入力ファイル(lmpinp ファイル)の他にも Gaussian の入力ファイルと (gjf ファイル)と Quantum Espresso の入力ファイル(qe.in ファイル)を選択できます。



ここで選んだファイルの種類によって、それぞれ次ページのファイルが保存されます。

LAMMPS 入力ファイル(lmpinp ファイル)

```

#WFST_box 42.600000 22.135590 35.000000 1
#WFST_substrateA ../substrate/graphene.lmpdat 30.000000 5.000000 0 1
#WFST_liquid water drop 15.000000

# Intialization
units          real
dimension      3
boundary       p p p
atom_style     full

# Atom Definition
#read_restart  test-drop.lmprst
read_data      test-drop.lmpdat
replicate      1 1 1
group substrateA type 1
group liquid   type 2 3

#The potential
kspace_style   pppm 1.0e-5
kspace_modify  gewald 0.29
pair_style     lj/cut/coul/long 9.8 9.8
pair_coeff * * 0.000000 0.000000
pair_coeff 1 2 0.115600 3.284000 # subA C liq 0
pair_coeff 1 3 0.038330 2.790000 # subA C liq H
pair_coeff 2 2 0.155350 3.166000 # liq 0 liq 0
bond_style     harmonic
angle_style    harmonic
dihedral_style none
improper_style none
bond_coeff     1 100.00 1.000
angle_coeff    1 100.00 109.47
special_bonds  lj/coul 0.0 0.0 0.5
fix            RigidOHBonds all shake 0.0001 20 0 b 1 a 1

# Settings
velocity       liquid create 300.000000 4928459 rot yes mom yes dist gaussian
velocity       substrateA zero linear
fix            fix_liquid liquid nvt temp 300.00 300.00 1 tchain 1
fix            fix_substrateA substrateA momentum 1 linear 1 1 1 angular
timestep       1.000000

# Output
dump           1 all custom 100 test-drop.lmpdump id type x y z
dump_modify    1 sort id
thermo_style   custom step temp press etotal vol density lx ly lz
thermo         100
log            test-drop.lmplog
restart        100 test-drop.lmprst test-drop.lmprst
# Run the simulation
run            10000

```

LAMMPS 入力ファイル(lmpdat ファイル)

LAMMPS Description

990 atoms
 420 bonds
 210 angles

3 atom types
 1 bond types
 1 angle types

0.0000000 42.600000 xlo xhi
 0.0000000 22.135590 ylo yhi
 0.0000000 35.000000 zlo zhi

Masses

1 12.010780 # subA C
 2 15.999430 # liq O
 3 1.007947 # liq H

Atoms

1	1	1	+0.000000	2.840000	0.000000	5.000000	# subA C
2	1	1	+0.000000	0.710000	1.229755	5.000000	# subA C
3	1	1	+0.000000	0.000000	0.000000	5.000000	# subA C
...							
988	211	2	-0.847600	25.975100	21.814040	17.143290	# liq O
989	211	3	+0.423800	25.474140	21.471390	17.938040	# liq H
990	211	3	+0.423800	25.578130	21.431780	16.308853	# liq H

Bonds

1	1	361	362
2	1	361	363
3	1	364	365
...			
418	1	985	987
419	1	988	989
420	1	988	990

Angles

1	1	362	361	363
2	1	365	364	366
3	1	368	367	369
...				
208	1	983	982	984
209	1	986	985	987
210	1	989	988	990

Gaussian 入力ファイル(gjf ファイル)

```
%NProcShared=2
%Chk=C:/cygwin64/home/0343307/TUS/WFST/sample/test-drop.chk
# B3LYP/6-31G(d) Opt Freq
```

Title

0 1

```
  C  2.84000000  0.00000000  5.00000000
  C  0.71000000  1.22975500  5.00000000
  C  0.00000000  0.00000000  5.00000000
  C  2.13000000  1.22975500  5.00000000
  C  2.84000000  2.45951000  5.00000000
  C  0.71000000  3.68926500  5.00000000
  C  0.00000000  2.45951000  5.00000000
  C  2.13000000  3.68926500  5.00000000
...
  H 21.96585000 19.32839000 19.85446000
  H 21.45908000 19.55349000 18.31851000
  O 23.70269000 20.44458800 17.49096000
  H 23.55346000 21.35413000 17.10305000
  H 22.99771000 20.25377100 18.17403000
  O 25.97510000 21.81404000 17.14329000
  H 25.47414000 21.47139000 17.93804000
  H 25.57813000 21.43178000 16.30885300
```

Quantum Espresso 入力ファイル(qe.in ファイル)

```

&control
  calculation='relax', prefix='test-drop', restart_mode='restart',
  pseudo_dir='./', outdir='./', tprnfor=.true.,
/
&system
 ibrav=0, ecutwfc=30.0,
nat=990, ntyp=3
/
&electrons
  mixing_beta=0.7, conv_thr=1.0d-8,
/
ATOMIC_SPECIES
C 12.010780 C.PBE.US.RRKJ3
O 15.999430 O.PBE.US.RRKJ3
H 1.007947 H.PBE.US.RRKJ3
CELL_PARAMETERS angstrom
 42.600000 0.000000 0.000000
 0.000000 22.135590 0.000000
 0.000000 0.000000 35.000000
ATOMIC_POSITIONS angstrom
C 2.840000 0.000000 5.000000
C 0.710000 1.229755 5.000000
C 0.000000 0.000000 5.000000
C 2.130000 1.229755 5.000000
C 2.840000 2.459510 5.000000
C 0.710000 3.689265 5.000000
...
O 21.744590 20.012743 19.159690
H 21.965850 19.328390 19.854460
H 21.459080 19.553490 18.318510
O 23.702690 20.444588 17.490960
H 23.553460 21.354130 17.103050
H 22.997710 20.253771 18.174030
O 25.975100 21.814040 17.143290
H 25.474140 21.471390 17.938040
H 25.578130 21.431780 16.308853
K_POINTS automatic
1 1 1 0 0 0

&inputph
  outdir='./',
  prefix='test-drop',
  amass(1)= 12.010780,
  amass(2)= 15.999430,
  amass(3)= 1.007947,
  fildyn='test-drop.dynG',
  trans=.true.,
/
0.0 0.0 0.0

```

以上