M winmostar チュートリアル

Gromacs基礎編

V11.13.0 2025年 7月 1日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.



- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方はビギナーズマニュアル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。
 - <u>Winmostar導入講習会</u>: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)液体の各種熱力学量、動径分布関数、自己拡散係数、 比熱、圧縮率をGromacsによる分子動力学計算(GAFF、AM1-BCC電荷)から取得します。平 衡化計算としてエネルギー極小化、温度一定MD、温度・圧力一定MDを実行した後、本計算と して再度温度・圧力一定MDを実行します。

手順の概要:



注意点:

- 系の種類、計算したい物性、目標とする精度に応じてステップ数・分子数は変化します。
- 力場、電荷の種類は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、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Cygwinの設定手順に従い セットアップします。

(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> ← こちら

Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合(ベータ版)

cygwin wmをビルドする場合(非推奨、上級者向け)

デフォルトではC:¥直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」>「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。

チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)	; プログラムパス			
□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□	 5¥jmol.bat	GAMESS(1): GAMESS(2):	C:¥Users¥Public¥gamess-64¥games C:¥ff820_windows¥Firefly820.exe	
	Files¥CCDC¥Mercury 1. Files¥POV-Ray¥v3.74bi	こちら NWChem:	C:¥G16W¥g16.exe C:¥nwchem¥bin¥nwchem.exe	
255 -	Files¥OpenSCAD¥open:	Cygwin:	C:¥cygwin_wm	ĺ

Winmostar V11の動作モード

V11には**プロジェクトモード**とファイルモードの2つの動作モードが用意されています。 本書ではプロジェクトモードでの操作方法を解説します。 ファイルモードの操作方法は<u>V10のLAMMPSチュートリアル</u>を参照してください。

Winmostar (PREMIUM) V11.0.1

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(D) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)



I. 系のモデリング ①1分子の作成

- 1. Winmostarを起動し、新規プロジェクト(3次元構造を入力)をクリックします。 (すでに 起動している場合は先にファイル | 閉じるをクリックします。)
- 2. プロジェクト名に「thf_liquid」と入力し保存をクリックします。



I. 系のモデリング ①1分子の作成

初期構造の作成方法の詳細は分子モデリング有機分子編チュートリアルを参照してください。 ここでは既存の分子構造ファイルを読み込ませます。

- 1. ファイル | インポート | Samplesファイル | thf.pdbをクリックします。
 - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりにファイル ファイルをインポートを使います。
- ファイルをインポートダイアログで破棄して読み込みをクリックします。

分子表示エリアに所望の分子が出現することを確認します。 3.

C:¥winmos1101test1¥UserData¥propylene.wmpjdata¥propylene.wmpj - Winmostar (PREMIUM) V11.1.0

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(T) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)



×

I. 系のモデリング ②電荷の割り当て

- 1. 🕑 (自動で電荷を割り当て) をクリックします。
- 2. 電荷を割り当てウインドウでOKをクリックします。
- 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**を クリックします。

	🚾 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 (✓ 既に電荷が割り当てられた分子種には新た ✓ タンパク質・単原子イオン・水には新たに電 1 st component: C4H80 × 1 	こ設定 EC電荷を割り当てない 荷を割り当てない <mark>No charge</mark>	Winmostar 正常に電荷が設定されました	
自動で電荷を割	Method AM1-BCC	✓ Charge 0 ✓		C
	< Back	OK Cancel		

winmostar Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

Х

I. 系のモデリング ②電荷の割り当て

- 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します。
- 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電荷をクリックします。
- 3. 2を解除したいときは表示 | ラベル/電荷 | ラベル/電荷を隠すをクリックします。



I. 系のモデリング ③液相の作成

- 1. **一 溶媒を配置/セルを構築**ボタンをクリックします。
- 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 ボタンをクリックします。

Solvate/Build Cell					
Name	# Mol	Position	mol/L		
Add Displayed Molecu	ıle	Add File (mol2,wmm			
	Add Water				

Add molecules			×
Enter # of molecules	100		
		ОК	Cancel

I. 系のモデリング ③液相の作成

- 1. Simulation Cellの設定内容を確認します。(本書では特に変更せず先に進みます。)
- 2. Buildをクリックする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」と表示されます。THFが0.6 g/cm³で100個並んだ系が出現します。 系のサイズ、密度は分子表示エリア下部に表示されます。

Solvate/Build Cell				-			一時ファイル (temp.wmm) 編集済み
Name	# Mol	Position	mol/L	✓ Comp	osition] _	N= 1,300 C400H800O100 M= 7,210.7
[DISPLAYED]	100	Random	8.321	C4H8	0	8	Marked Order: 15 - 1 - 2 - 0 Marked Atom: X= -9.214 Y= -0.373 Z= 8.73 Length= 3.335796 Angle= 113.94926 Dihedral= * Lper= *
Add Displayed Molecu Add SMILES Simulation Cell Option	ıle /	dd File (m Add ۷	ol2,wmm,e /ater	tc.)	Delete	3	
Set Density [g/cm ²	`3]	0.6					
O Set Margin from So	olute [nm]					Ħ	
O Set Lattice Consta	nts [nm]	2.7124	2.7124	2.7124			
A	ngles [deg]	90.0	90.0	90.0		!	
		Same	e as main w	indow			
		Change	only one di	rection			
Box Type		cubic		~			
Total Number of Atom	ns: 1300				_	5	Charges Available: User (Qtot=0.00,Qrms= 0.141) rho= 0.600019 g/cm^3 a= 27.124000 b= 27.124000 c= 27.124000 alpha= 90.00000 beta= 90.00000 gamma= 90.00000
Reset			Bu	ild	Cancel		+ 47%

II. 計算の実行 ①力場の割り当て

- 1. ツールバーのソルバからGromacsを選択します。
- 2. **(ワークフロー設定)** をクリックします。
- 3. 力場を割り当てウインドウが開いたら、右下のOKをクリックします。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「力場が設定されました」と表示されるのでOKをクリックします。

	• · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·					
	力場を割り当てる方法	去を選択してください)			
チュトリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)	○自動でパラメータを	割り当て			Winmostar	~
VILIN Gromacs	検出された分子	約日5次 C4H8O GAFF	分子数 100	種類 →般	力場が設定されました	
一時ファ Quantum ESPRESSO DCDFTBMD	(タンパク質)	AMBER03				K2
M= 7.210.7	(水分子)	SPC/E	×			
	✓ タンパク質向け	(C[position_restrain)	ints]を追加			
	□ 選択原子(こ向)(†([position_rest	raints]を追加	Edit		
	□ 選択原子(こ向)け(こ[distance/ang	le/dihedral_restraint	s]を追加 Edit		
	□割り当て後編	集ウィンドウを開く		Dump Now		
	 ○ トポロジファイルに ○ パラメータの書り 	書かれたパラメータを すてをスキップ < Back	E使用 OK			
						4.2

- **1. Gromacs Workflow Setup**ウィンドウで計算のフローを確認します。ここでは特に設定を 変更しません。この設定では、エネルギー極小化(Minimize)、温度一定MD(NVT)、温 度・圧力一定MD(NPT)の合計3つのジョブが続けて実行されます。
- 各計算のシミュレーション時間(Simulation time)・温度(Temperature)・圧力 (Pressure)を変更する場合は該当箇所を変更します。(本書では不要)

eset Fluid/Amorph	ious NPT Equi	libration	~			# of]	obs: + 3	_
				(Ena	ble parameter/stru	cture scan	Config.
1st job							+	
Ensemble	Minimize	✓ Temp	erature [K]	300.		Pressure [atm]	1,	
Simulation time [ps] 10.		# of	snapshots erv 0.20 ps)	50		Initial velocity	From parent 🛛 🗸	
Free boudnary condition			sion	Medium	~	De	tails	
2nd job							+)
Ensemble	NVT	~ Temp	erature [K]	300.		Pressure [atm]	1.	
Simulation time [ps]	10.	# of	snapshots erv 0, 20 ps)	50		Initial velocity	Random	\sim
Free boudnary co	ondition	Preci	sion	Medium	~	Details		
3rd job							+) []]-
Ensemble	NPT	✓ Temp	erature [K]	300.		Pressure [atm]	1.	
Simulation time [ps]	50	# of	snapshots	50		Initial velocity	From parent	t ~
Free boudnary condition Precision		sion	Medium ~		Details			

- 1. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は1st job、2nd job、3rd jobすべての Precisionを「Low」に変更します。そうでない場合は次のページに進みます。
- 注:計算精度を落とさない場合、マシンスペックによっては数時間~半日程度掛かることがありますが、落とす と数分程度になります。落とした場合は計算の安定性が低下することがあります。

Gromacs Workt	low Setup					- U ;
reset Fluid/Amorph	ous NPT Equi	ilibrati	on v (mo	dified)	# of	Jobs: + 3
					Enable parameter/str	ucture scan Config
1st job						+ •
Ensemble	Minimize	\sim	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.
Simulation time [ps]	10.		# of snapshots	50	Init velocity	From parent 🔍
Free boudnary co	ondition		Precision	Low		ils
2nd job					N	+ -
Ensemble	NVT	\sim	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.
Simulation time [ps]	10.		# of snapshots (Every 0,20 ps)	50	Initi velocity	Random 🗸
Free boudnary co	ondition		Precision	Low		ils
Brd job					N	+ •
Ensemble	NPT	\sim	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.
Simulation time [ps]	50		# of snapshots (Every 1.00 ps)	50	Initia velocity	From parent \sim
Free boudnary co	ondition		Precision	Low		ils
Reset Im	port 🖛	E	xport			OK Cancel



今回のケースでは、①Minimizeの計算が実行された後に②NVTの計算が実行されます。連続して 実行される計算の間で原子座標・速度の情報は自動で引き継がれ、①の最終構造は②の初期構造 と一致します。同様に②NVTの計算の後に③NPTの計算が実行されます。各計算は個別の作業 フォルダの中で実行されます。

Gromacs Workflow	Setup					_	
Preset Fluid/Amorphous	NPT Equilibrati	on v			# of J	obs: +	3
			C	Enab	ole parameter/stru	cture scan	Config
1st job							+
Ensemble Min	imize 🗸	Temperature [K]	300.		Pressure [atm]	1.	
Simulation time [ps] 10.		# of snapshots	50		Initial velocity	From pa	rent 🗸
Free boudnary condition	ion	Precision	Medium	~	De	tails	
2nd job							+ -
Ensemble NVT	r ~	Temperature [K]	300.		Pressure [atm]	1.	
Simulation time [ps] 10.		# of snapshots	50		Initial velocity	Random	~
Free boudnary condition	ion	Precision	Medium	~	De	tails	
3rd job							+ -
Ensemble NPT	r v	Temperature [K]	300.		Pressure [atm]	1.	
Simulation time [ps] 50		# of snapshots	50		Initial velocity	From pa	rent 🗸
Free boudnary condition	ion	Precision	Medium	~	De	tails	
Reset Import	ion - E	Precision	Medium	~	De	tails	Cancel

(リモートジョブの場合は先に<u>こちら</u>に進んでください。)

- 1. Gromacs Workflow Setupウィンドウ右下のOKをクリックします。
- 2. ジョブの設定ウィンドウで実行をクリックします。バックグラウンドでWinmostar Job Managerが起動し、右図のような黒いコンソールウィンドウが出現し、計算が開始されます。

🕺 ジョブの設定	- 🗆 ×	西	- 🗆 X
●このマシンでジョブを実行		Step= 95, Dmax= 2.9e-03 nm, Epot= 3.28572e+03 Fmax= 1.11727e+03, atom= 708 Step= 97, Dmax= 1.7e-03 nm, Epot= 3.26947e+03 Fmax= 2.25241e+02, atom= 708 Step= 98, Dmax= 1.40-02 nm, Epot= 2.05773e+02 Fmax= 2.25241e+02, atom= 708	^
○リモートマシンでジョブを実行		Step= 99, Dmax= 2.5e-03 nm, Epot= 3.25076e+03 Fmax= 1.27314e+00, atom= 708 Step= 101 Dmax= 2.5e-03 nm, Epot= 3.25066e+03 Fmax= 4.73800e+02 atom= 708	
プロファイル pbs_example	✓ Config	Step= 102, Dmax= 1.8e-03 nm, Epot= 3.244266e+03 Fmax= 4.75060e+02, atom= 708 Step= 102, Dmax= 1.8e-03 nm, Epot= 3.24566e+03 Fmax= 6.98889e+02 atom= 708	
ソルバ gromacs	~	Step= 105, Dmax= 1.3e-03 nm, Epot= 3.22735e+03 Fmax= 3.07548e+02, atom= 708 Step= 106, Dmax= 1.5e-03 nm, Epot= 3.27494e+03 Fmax= 8.36813e+02, atom= 708	
テンプレートスクリプト (Default)	✓ New Edit	Step= 107, Dmax= 1.9e-03 nm, Epot= 3.21678e+03 Fmax= 6.06481e+02, atom= 708 Step= 109, Dmax= 1.1e-03 nm, Epot= 3.21007e+03 Fmax= 2.36204e+02, atom= 707	
オプション - I nodes=1:ppn=%WI	M_NUM_PROC% -I walltime=23:50:00	Step= 110, Dmax= 1.3e-03 nm, Epot= 3.20682e+03 Fmax= 8.28040e+02, atom= 708 Step= 111, Dmax= 1.6e-03 nm, Epot= 3.19749e+03 Fmax= 3.89607e+02, atom= 708	
Test Conne	ction 📴 Control	Step= 113, Dmax= 9.6e-04 nm, Epot= 3.19276e+03 Fmax= 3.68343e+02, atom= 708 Step= 114, Dmax= 1.2e-03 nm, Epot= 3.18876e+03 Fmax= 4.94439e+02, atom= 708	
ジョブ終了後の自動処理 ログなど一部のファイル	のみ転送 ~	Step= 115, Dmax= 1.4e-03 nm, Epot= 3.18492e+03 Fmax= 5.90117e+02, atom= 708 Step= 116, Dmax= 1.7e-03 nm, Epot= 3.18156e+03 Fmax= 6.65902e+02, atom= 708	
接続情報		Step= 117, Dmax= 2.0e-03 nm, Epot= 3.18035e+03 Fmax= 8.87398e+02, atom= 708 Step= 118, Dmax= 2.4e-03 nm, Epot= 3.17732e+03 Fmax= 9.31568e+02, atom= 708	
		Step= 12U, Umax= 1.4e-U3 nm, Epot= 3.16423e+U3 Fmax= 1.9482/e+U2, atom= 563 Step= 121, Dmax= 1.7e-U3 nm, Epot= 3.16205e+U3 Fmax= 9.89970e+U2, atom= 708	
□ファイルの保存後ジョブを実行しない		ptep= 122, Umax= 2.1e-03 nm, Epot= 3.150050+03 Fmax= 6.10349e+02, atom= 708 Step= 124, Umax= 1.2e-03 nm, Epot= 3.14421e+03 Fmax= 6.28683e+02, atom= 708 Stop= 126 Denz= 7.4e-04 nm, Epot= 2.12906ea42 Emax= 2.76200e402, atom= 562	
並列数		Step= 127, Dmax= 8.9e-04 nm, Epot= 3.13530e+03 nmax= 2.70200e+02, atom= 708 Step= 127, Dmax= 8.9e-04 nm, Epot= 3.13550e+03 Fmax= 5.04682e+02, atom= 708	
# of MPI Procs 1 v # of Threads / MP	PI Proc 8 V	Step= 120, Dmax= 1.3e-03 nm, Epot= 3.12839e+03 Fmax= 4.49295e+02, atom= 560 Step= 130, Dmax= 1.3e-03 nm, Epot= 3.12804e+03 Fmax= 7.86667e+02, atom= 560	
		Step= 131, Dmax= 1.9e-03 nm, Epot= 3.12189e+03 Fmax= 6.06814e+02, atom= 560	
「F未ノオルジーム WORK			
コ・ 入力ファイルをÉ	日分で修正したい提合や	リモートサーバに白分でコピーレて庙田レたい埋今け 💲	ジョブの設

補足:入力ファイルを自分で修正したい場合やリモートサーバに自分でコピーして使用したい場合は、ジョブの設定ウィンドウでファイルの保存後ジョブを実行しないにチェックを入れ実行をクリックします。保存後に計算を実行したい場合はファイル | プロジェクト | 選択された作業フォルダ | Runをクリックします。

- 1. メインウィンドウに戻ると(計算実行中でも構いません)、プロジェクト表示エリアにGromacs Workflow Setupウィンドウの各ジョブに対応する3つの作業フォルダの親子関係がツリー状に表 示されます。
- 2. 分子表示エリアには自動的に最初の作業フォルダ(work1_GMX_MIN)の入力ファイルが開かれ ます。**分子表示エリア**の上部でもそのことを確認できます。



- 計算の進行状況に応じて、プロジェクト表示エリアで各作業フォルダの状態がPEND(黒) →RUN(緑)→END(青)と変化します。
- 2. 全ての作業フォルダの状態がEND(青)に変化するまで待ちます。この際最近使ったプロ ジェクトの「thf_liquid」の状態もALL END(青)に変化します。

プロジェクト 状態 ● thf_liquid RUN(1) > ブロジェクト 化価値 ※ ブロジェクト ● 作業フォルダ (thf_liquid) Options ▼ 名前 状態 ● work1_GMX_MIN RUN ▶ work2_GMX_NVT PEND ▶ work3_GMX_NPT PEND	≽	最近使ったプロジェクト			*	最近使ったプロジェ	クト	
 ● thf_liquid RUN(1) ● thf_liquid ALL END ● thf_liquid ALL END		プロジェクト	状態			プロジェクト	状態	
× プロジェクト × プロジェクト × プロジェクト × プロジェクト × プロジェクト × オルダ (thf_liquid) Options × A前 × X態 × 3前 • work1_GMX_MIN RUN • work2_GMX_NVT PEND • work3_GMX_NPT PEND	0	thf_liquid	RUN(1))	Q	thf_liquid	ALL E	ND
ジ プロジェクト ド業フォルダ (thf_liquid) Options▼ 名前 状態 び work1_GMX_MIN RUN Work2_GMX_NVT PEND Work3_GMX_NPT PEND Work3_GMX_NPT PEND Work3_GMX_NPT END Work3_GMX_NPT END								
ジ プロジェクト								
 ※ プロジェクト 作業フォルダ (thf_liquid) Options▼ 名前 状態 work1_GMX_MIN work2_GMX_NVT PEND work3_GMX_NPT PEND Work3_GMX_NPT 		i				1		
作業フォルダ (thf_liquid) Options▼ 名前 状態 名前 状態 ● work1_GMX_MIN RUN ■ work2_GMX_NVT PEND ■ work3_GMX_NPT PEND	≽	プロジェクト			×	プロジェクト		
名前 状態 ● work1_GMX_MIN RUN ■ work2_GMX_NVT PEND ■ work3_GMX_NPT PEND A work3_GMX_NPT END A work3_GMX_NPT END	作講	業フォルダ (thf_liquid)		Options V	(°E)	業フォルダ (thf_liquid)	Option
Image: Work1_GMX_MIN RUN Image: Work2_GMX_NVT Image: Work2_GMX_NVT END Image: Work3_GMX_NPT PEND Image: Work3_GMX_NPT END		名前		状態		名前		状態
work2_GMX_NVT PEND work2_GMX_NVT END work3_GMX_NPT PEND work3_GMX_NPT END	Θ	work1_GMX_MIN		RUN	G	work1_GMX_MI	N	END
<pre>work3_GMX_NPT PEND</pre> Work3_GMX_NPT END		work2_GMX_NVT		PEND		work2_GMX_	NVT	END
		work3_GMX_NF	РТ	PEND		work3_GM	X_NPT	END

- 1. 各計算のログの主要な内容を見たい場合は、プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象と なる計算の作業フォルダをクリックして選択し、アクションのLog (Extracted)をクリック します。(プロフェッショナル版プレミアム限定の機能です)
- 2. 完全なログを見たい場合はLogをクリックします。



補足 平衡化計算における熱力学量の収束の確認

P.24の手順により、平衡化計算で温度・ポテンシャルエネルギー・圧力・密度などが収束していることを確認する必要があります。収束していない場合は、収束するまでP.21-22の手順で適宜計算条件を調整しながら追加で計算を実行します。



※特に密度の収束は遅いこと があるので注意 ※本書の例でも収束の判断に は不十分なためより長時間の 計算が望ましい

II.計算の実行 ③本計算

- 1. 継続元の作業フォルダ(ここではwork3_GMX_NPTとします)の状態がEND(青)に変化し たあと、 🗹 **(ワークフロー設定)** をクリックします。
- 1. 情報ダイアログではいをクリックします。

Pre Cor

> En Sir

- 3. ジョブの継続元の作業フォルダを選択で継続元の作業フォルダ(work3 GMX NPT)を選択 してからOKをクリックします。
- 4. Presetに「Fluid/Amorphous NPT Production」を選択します。
- 5. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合はPrecisionを「Low」に変更します。

情報	×	🚾 ジョブの継続元の作業フォ	tルダを選択		_		×
		ジョブの維続元の作業フォル	ダを選択して	ください			
いいえの場合は表示中の構造	査で新規ジョブが作成されます。	名前 work1_GMX_MIN ┗ work2_GMX_NVT	状態 END END	プロファイル Local Job	出力ファイ Local Local	ル場所	
	いいえ(N) +ヤノセル	L work3_GMX_NPT	END	pb	Local		
reset Fluid/Amorphous NPT Equilibration (modified)	# of Jobs: + 3 -						
Fluid/Amorphous NPT Equilibration Continu Fluid/Amorphous NPT Production Fluid/Amorphous/Crystal NVT Equilibra	Enable parameter/structure scan Config						
Fluid/Amorphous/Crystal NVT Production Fluid/Amorphous/Crystal NVE Production Crystal NPT Equilibration Ensem Crystal NPT production Isolated system NVT Equilibration Simula Isolated system NVT Production	+ • Pressure [atm] 1. Initial velocity From parent				ок 📐	1_	
					WF VF		

WINMOSTAR Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

II.計算の実行 ③本計算

1. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで実行をクリックします。

Gromacs Workflow Setup	- O X
Preset Fluid/Amorphous NPT Production ~	# of Jobs: + 1 -
Continue from work3_GMX_NPT	Enable parameter/structure scan Config
1st job	+ •
Ensemble NPT \checkmark Temperature [K]	300. Pressure [atm] 1.
Simulation time [ps] 50 # of snapshots (Every 0.20 ps)	250 Initial velocity From parent
Free boudnary condition Precision	Medium V Details
Reset Import 💌 Export	ОК Cancel

🥺 ジョブの設定		—		\times
○このマシンでジョブを実行				
プログラム	Gromacs \checkmark			
パス	C:¥cygwin_wm_250413			
○リモートマシンでジョブを実行				
プロファイル	pbs_example ~	Config		
ソルバ	gromacs \checkmark			
テンプレートスクリプト	(Default) ~	New	Edit	
オプション	-I nodes=1:ppn=%WM_NUM_PROC%			\sim
	Test Connection	Control		
ジョブ終了後の自動処理	ログなど一部のファイルのみ転送	~		
接続情報				
□ ファイルの保存後ジョブを実行	テしない			
並列数				
# of MPI Procs 1 \checkmark	# of Threads / MPI Proc 8 ~]		
作業フォルダ名	work			
ジョブの説明(オプション)				
		里行	***/1711	
	RUN	×II		

III.結果解析 アニメーション

以降、確認したい解析項目以外はスキップ可能です。

- 1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる作業フォルダ(ここでは work1_GMX_MINとします)をクリックします。
- 2. アクションでAnimationをクリックすると、メインウィンドウ右側にアニメーション表示エ リアが出現します。 → ボタンをクリックすると計算の様子がアニメーション表示されま



III.結果解析 エネルギー等の時間変化、平均値

- 1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる作業フォルダ(ここでは work1_GMX_MINとします)をクリックします。
- 2. アクションでEnergy plotをクリックすると、Energy Plotウィンドウが出現します。 Energy Termsで可視化したい物理量(ここでは「Potential(ポテンシャルエネルギー)」 とします)にチェックを入れ、Drawをクリックすると時間変化のグラフが表示されます。



III.結果解析 エネルギー等の時間変化、平均値

- 1. 平均値を確認したいときは**Calc Ave**をクリックします。「Enter first frame to read」と表示されたら**OK**をクリックします。テキストファイルが開き、そこには各種物理量の平均値と標準誤差が出力されます。平均値は、ある程度平衡化した後の計算(本書ではwork4_GMX_NPTに該当)以外は物理的に意味がない点にご注意ください。
- 2. 確認後でCloseをクリックしEnergy Plotウィンドウを閉じます。



Statistics over 385 steps [0.0000 through 384.0000 ps], 31 data sets All statistics are over 303 points (frames)

Energy	Average	Err.Est.	RMSD	Tot-Drift	
Bond	0.743619	0.12	0.322569	-0.77006	(kJ/mol)
Angle	16.5976	0.59	1.32669	-3.81215	(kJ/mol)
Proper Dih.	32.8043	0.19	0.395245	1.13/34	(kJ/mol)
LJ-14	0.483663	0.029	0.059184	-0.184298	(kJ/mol)
Coulomb-14	-9.42845	0.034	0.0727914	0.224893	(kJ/mol)
LJ (SR)	-17.4943	1.8	4.1965	-12.0134	(kJ/mol)
Coulomb (SR)	6.69129	0.11	0.221198	-0.752635	(kJ/mol)
Coul. recip.	2.78927	0.048	0.09/512	-0.33481	(kJ/mol)
Potential	33.187	2.5	5./1558	-16.5051	(kJ/mol)
Pressure	b195.4b	1500	3571.13	-9829.29	(bar)
Constr. rmsd	8.0555Ze-08	be-08	3.75824e-U	/ -3.015/be	-07 ()
YIF-XX	-43.0100	9.9	23.0704	00.1505	(KJ/mol)
YIF-XY	-1.4934	0.13	0.351674	0.899914	(KJ/mol)
YIF-XZ	1.32588	0.52	1.414	-3.42914	(KJ/mol)
VIC-YX	-1.4934	U.13	0.351674	0.899914	(KJ/mol)
	-33.2087	8.Z	20.413	55.3285	(KJ/mol)
	2.03200	0.89	1.93808	-0.0298/	(KJ/MOT)
VIT-ZX	1.32088	0.02	1.414	-3.42914	(KJ/MOT)
VIT-ZY	2.03200	0.89	1.93808	-0.02987	(KJ/MOT)
	-34.80	0.3	20.3044	11000 7	(KJ/MOT)
Pres-XX	7208.40	1000	3940.ZI	-11009.7	(bar)
Pres-At	248.03 000 RE0	21	08.0202	-149.703 EZO 675	(bar)
PIES-AZ Drop-VV	-ZZU.UUZ 240 E2	07	Z00.017 E0 E0E0	-140 762	(bar)
Drop-VV	240.00 5526 56	1400	00.0Z0Z	-149.703	(bar)
Pres-11 Drop-V7	-420.00	1400	2027.12	-9ZU7.73	(bar)
Prog=7Y	-220 652	97	225 217	570 675	(bar)
Prog=7V	-429 107	150	200.017	026 019	(bar)
Pres=77	5801 38	1400	3370 04	-9270 44	(bar)
#Surf*SurfTen	0001.00	1400	0078.04	0270.44	(bar pm)
T-System	0	n	0	0	(K)
1 07000	0	0	0	0	(1)/

You may want to use the -driftcorr flag in order to correct

for spurious drift in the graphs. Note that this is not

a substitute for proper equilibration and sampling!

You should select the temperature in order to obtain fluctuation properties.

III.結果解析 動径分布関数

- 1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる作業フォルダ(ここでは work4_GMX_NPTとします)をクリックします。
- 2. アクションでRadial Distribution Functionをクリックすると、Radial Distribution Functionウィンドウが出現します。ここでは全原子間ではなく特定原子間の動径分布関数を 取得するためにEdit Group...をクリックしCreate Group (by Element)を選択します。

♥ ブロジェクト						~		
乍業フォルダ (thf_liquid)	Options ▼	Radial Distribution Function (thr	f_liquid.wmpjdata\work4_GMX_NP1\gmx_mdrun.trr)		- U	×		
名前	状態			Reference Group	0 : System	~	1	
work1_GMX_MIN	END			Target Group	0 : System			
work2_GMX_NVT	END				Edit Group			
work3_GMX_NPT	END			First Frame [ps]	1.0			
work4_GMX_NP	T END			Last Same [as]				
				Last Frame [ps]	Maximum 1000.	0		
				RDF				
	>			Definition	Atom	\sim		
クション (work4_GMX_NPT)				Output	RDF	~		- 🗆 ×
				Temperature [K]	300.		Reference Group	0:System V
Coordinate (Initial)	[^]						Target Group	0 : System 🗸
Coordinate (Final)								Edit Group
🖻 Log							First Frame [ps]	Create Group (by Element)
Log (Extracted)							Last Frame [ps]	Create Group (by Selecting Atoms in
Log (stdout)								Select ndx File
Full stdout								
Animation								
				Edit Commands i	n Advance Show	Log		
🔄 Radial Distribution Function		Charus Catting	Bofrech Ontiona					

III.結果解析 動径分布関数

- **1. Create Group**ウインドウにおいて、**Current Group**で**2: MOL01**(今回はTHFを意味する)、**Extracted Atom Names**で**O3**を選択し**Create**をクリックします。
 - 事前にメインウィンドウで表示 | ラベル/電荷 | 名前をチェックしておくと、分子表示エリアで各原子のAtom Nameを確認できます。
 - また、MD | Gromacs | 結果解析 | 動径分布関数をクリックし、予め作成したndxファイルを選択すれば、解析対象グループをさらに細かく調整できます。ndxファイルはメインウィンドウの選択メニューで作成できます。(詳細はユーザマニュアルを参照)
- 2. New Group Nameと表示されたら「oxygen」と入力しOKをクリックします。
- 3. ターミナルウインドウが出現し処理が終了したらCloseをクリックします。



III.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ます。
- 2. グラフを確認後Closeをクリックします。



III.結果解析 自己拡散係数

- 1. プロジェクト表示エリアの作業フォルダで対象となる作業フォルダ(ここでは work4_GMX_NPTとします)をクリックして選択します。
- **2. アクション**で**Diffusion Constant/MSD**をクリックすると、 **Diffusion Constant/Mean Square Displacement**ウィンドウが出現します。**Draw**をクリックすると平均二乗変位のグラ フと自己拡散係数(**Diffusion Constant**)が出現します。

補足:自己拡散係数は本来NVT計算から求める方が望ましいですが、本書では簡易的にNPT計算から求めていま





• 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