M winmostar チュートリアル

Gromacs 溶解度/x/DPDパラメータの算出

V11.13.0

2025年 7月 1日 株式会社クロスアビリティ

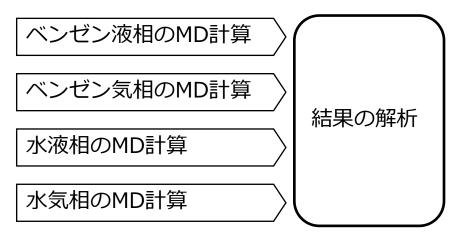
本書について

- 本書はWinmostar 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<u>ビギナーズマニュアル</u>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、<u>お問合せフォーム</u>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

• 本チュートリアルでは、ベンゼン(成分A)と水(成分B)それぞれの凝集エネルギー、 Hildebrand溶解度パラメータおよび、水・ベンゼン間の χ パラメータ、DPDの A_{ij} パラメータを 算出します。



注意点:

- 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。
- "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。
- 力場の種類、相互作用の計算条件も計算結果に大きく影響を与えます。
- 剛体モデルの水を用いるため本来なら水の気相の計算は不要ですが、現在のWinmostar™の仕様上エネルギーファイルが必要なため計算を実施します。



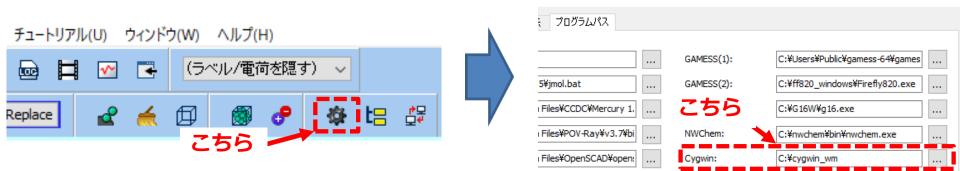
動作環境設定

- 本機能を用いるためには、Cygwinのセットアップが必要です。
- https://winmostar.com/jp/installation/ 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</u>(推奨)

 <u>cygwin_wmをビルドする場合</u>(非推奨、上級者向け)

 <u>Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合</u>(ベータ版)
- 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。

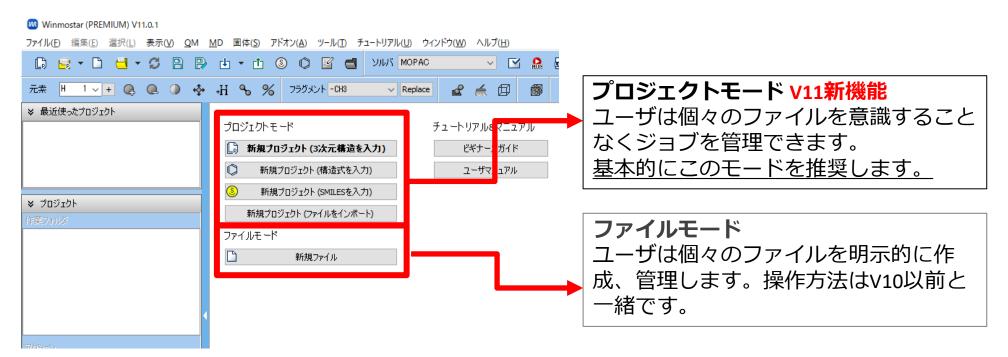


Winmostar V11の動作モード

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。

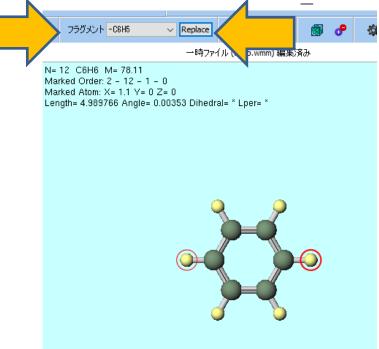
ファイルモードの操作方法は<u>V10のチュートリアル</u>を参照してください。



I. 系のモデリング(成分A液相)

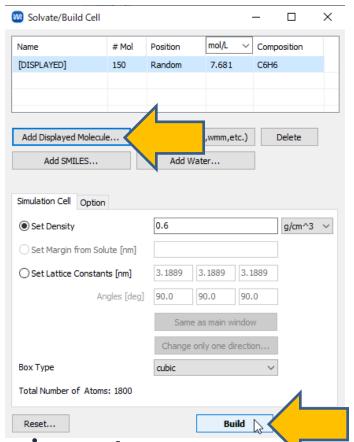
基本的な操作方法はGromacs基礎編チュートリアルを参照してください。

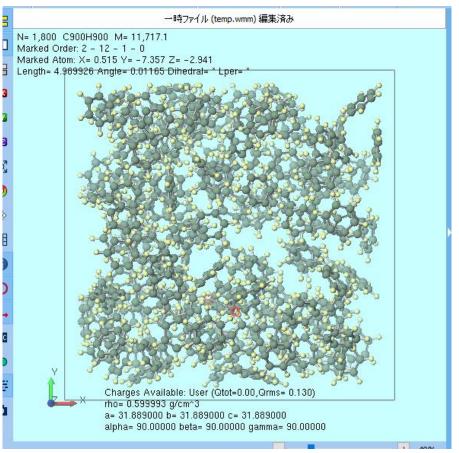
- 1. ファイル|新規プロジェクトをクリックし、プロジェクト名に「solub_param」と入力して 保存をクリックします。
- 2. フラグメントで「-C6H5」を選択しReplaceをクリックしベンゼンを作成します。
- 3. **伊 自動で電荷を割り当て**をクリックし**OK**をクリックします。
- 4. 「† ファイルをエクスポートをクリックし「benzene am1bcc.mo12」として保存します。



I. 系のモデリング(成分A液相)

- 1. **彦 溶媒を配置/セルを構築**をクリックします。
- 2. Add Displayed Moleculeをクリックし「150」と入力しOKをクリックします。
- 3. Buildをクリックします。



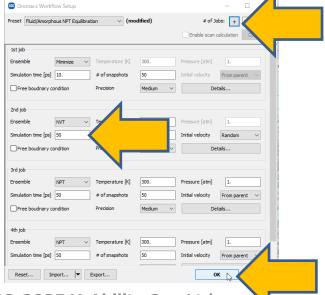




II. 計算の実行(成分A液相)

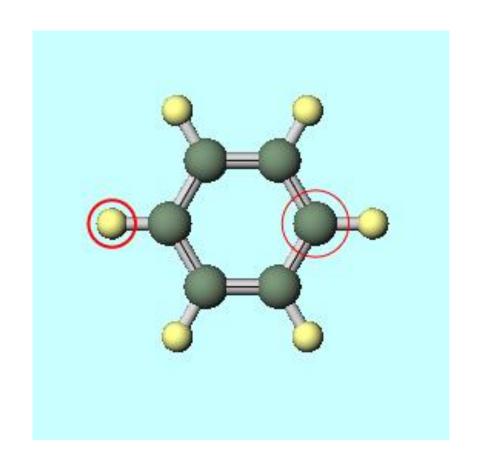
- 1. ソルバからGromacsを選択し、 (ワークフロー設定)を開きます。
- 2. OKをクリックし、「力場が設定されました」と表示されたらOKをクリックします。
- 3. 2nd jobのSimulation timeを「50」に変更します。
- 4. 適宜Simulation time, Temperature, Pressureを変更します。(本書では変更不要)
- 5. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は**1st job**から**3rd job**まですべての **Precision**を「Low」に変更します。
- **6.** # of jobsの+を1回クリックします。

7. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。



III.系のモデリング(成分A気相)

- 1. **ウ**ファイルをインポートをクリックしP.6で保存したbenzene_am1bcc.mo12を選択します。
- 2. 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。

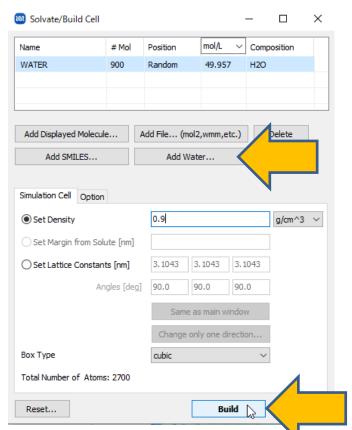


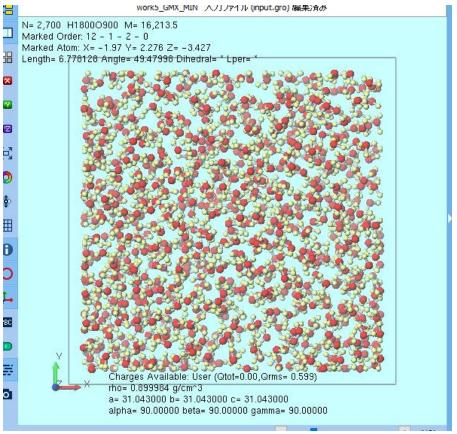
IV.計算の実行(成分A気相)

- 1. **(ワークフロー設定**)を開きます。
- 2. 「継続ジョブを実行しますか?」と表示されたら**いいえ**をクリックします。
- 3. 「分子とセル境界の間の距離を入力」と表示されたら**OK**をクリックします。
- **4. 力場を割り当て**ウィンドウで**OK**をクリックし、「力場が設定されました」と表示されたら**OK** をクリックします。
- **5. Preset**を「Isolated system NVT Equilibration」に変更します。
- 6. 適宜Simulation time, Temperature, Pressureを変更します。(本書では変更不要)
- 7. 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**と**2nd job**の**Precision**を「Low」に変更します。
- **8.** # of jobsの+を1回クリックします。
- 9. 3rd jobのInitial velocityを「From Parent」に変更します。
- 10.0Kをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。
- 成分Aの溶解度パラメータのみ必要なときは「IX.結果解析」に進みます。

V. 系のモデリング(成分B液相)

- 2. Add Waterをクリックし「900」と入力しOKをクリックします。
- **3. Set Density**に「**0.9**」と入力し、**Build**をクリックします。



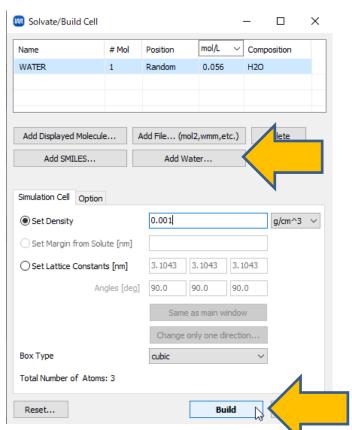


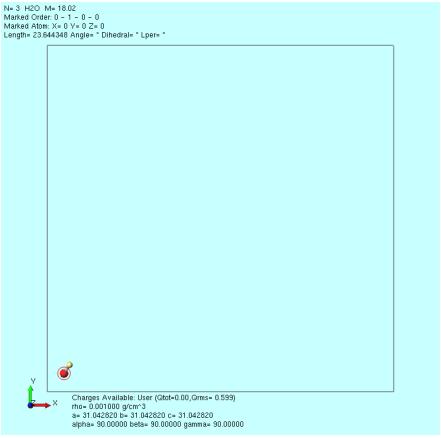
VI.計算の実行(成分B液相)

- 1. **(ワークフロー設定**)を開きます。
- 2. 「継続ジョブを実行しますか?」と表示されたら**いいえ**をクリックします。
- 3. OKをクリックし、「力場が設定されました」と表示されたらOKをクリックします。
- 4. Presetを「Fluid/Amorphous NPT Equilibration」に変更します。
- **5. 2nd jobのSimulation time**を「50」に変更します。
- 6. 適宜Simulation time, Temperature, Pressureを変更します。(本書では変更不要)
- 7. 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**から**3rd job**まですべての **Precision**を「Low」に変更します。
- 8. # of jobsの+を1回クリックします。
- 9. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。

VII.系のモデリング(成分B気相)

- 2. Add Waterをクリックし「1」と入力しOKをクリックします。
- **3. Set Density**に「**0.001**」と入力し、**Build**をクリックします。



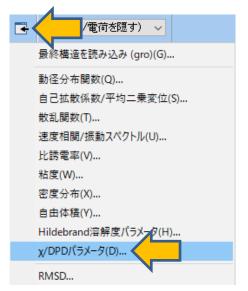


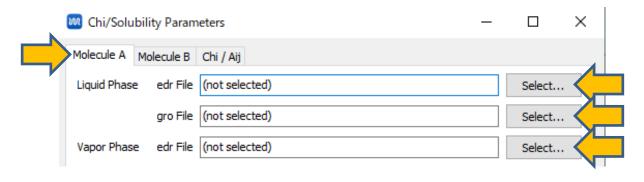
winmostar Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

VIII.計算の実行(成分B気相)

- 1. **(ワークフロー設定**)を開きます。
- 2. 「継続ジョブを実行しますか?」と表示されたら**いいえ**をクリックします。
- **3. 力場を割り当て**ウィンドウで**OK**をクリックし、「力場が設定されました」と表示されたら**OK** をクリックします。
- 4. Presetを「Isolated system NVT Equilibration」に変更します。
- 5. 適宜Simulation time, Temperature, Pressureを変更します。(本書では変更不要)
- 6. 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と2nd jobのPrecision**を「Low」に変更します。
- **7.** # of jobsの+を1回クリックします。
- 8. 3rd jobのInitial velocityを「From Parent」に変更します。
- 9. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。

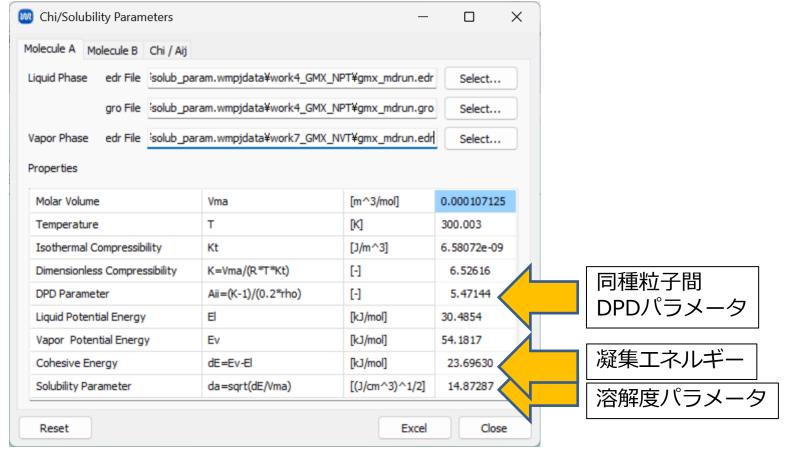
- 1. 全ての計算が終了後、 **福果解析 | χ/DPDパラメータ**をクリックし、 **Molecule Aタブ**をク リックします。
- **2. Liquid Phaseのedr FileのSelect**をクリックし、 work4 GMX NPT以下のgmx mdrun.edrを選択します。
- **3. Liquid Phaseのgro FileのSelect**をクリックし、 work4 GMX NPT以下のgmx mdrun.groを選択します。
- **4. Vapor Phaseのedr FileのSelect**をクリックし、 work7 GMX NVT以下のgmx mdrun.edrを選択します。





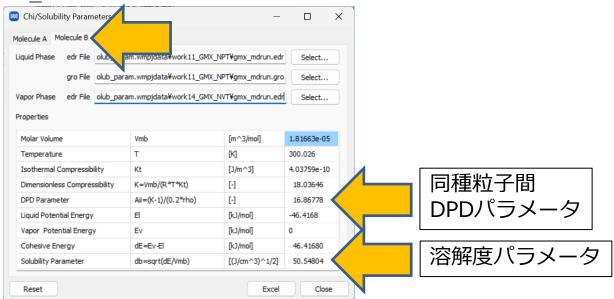


1. Molecule A(ここではベンゼン)の**Hildebrand溶解度パラメータ** δ および、**Molecule A**同士の**DPDパラメータA_{ii}**は以下の場所に出力されます。(文献値等と比較の際には、単位に注意)

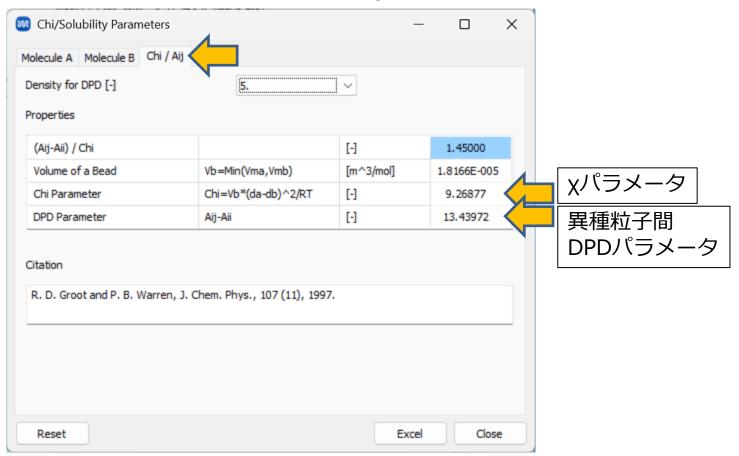


 χ およびDPDパラメータ A_{ij} を求める場合

- **1. Molecule Bタブ**をクリックします。
- 2. Liquid Phaseのedr FileのSelectをクリックし、work11_GMX_NPT以下のgmx_mdrun.edrを選択します。
- 3. Liquid Phaseのgro FileのSelectをクリックし、work11_GMX_NPT以下のgmx_mdrun.groを選択します。
- **4. Vapor Phaseのedr FileのSelect**をクリックし、work14_GMX_NVT以下のgmx_mdrun.edrを選択します。



1. Chi/Aijタブに、 χ パラメータおよびDPDパラメータ $(A_{ij}$ - A_{ii}) が出力されます。



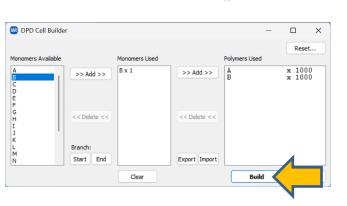
補足 DPD計算の設定

- 1. DPD計算を行わない場合は本章を省略する。
- 2. DPD計算の詳細な設定方法は 「Winmostar™ LAMMPSチュートリアル 散逸粒子動力学」を参照のこと。

3. MD | LAMMPS | 散逸粒子動力学法 | DPDセルビルダにおいて系を作成する際、Buildク リック後に現れるDensity欄にはChi/Solubility PatametersウインドウのChi/Aijタブに 表示されているDensity for DPDの値を入力する。

■ Chi/Solubility Parameters -





Molecule A Molecule B Chi / Aij

Density for DPD [-]

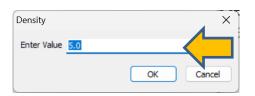
(Aij-Aii) / Chi

Chi Parameter

DPD Parameter

Volume of a Bead

Properties



[-]

[-]

[m^3/mol]

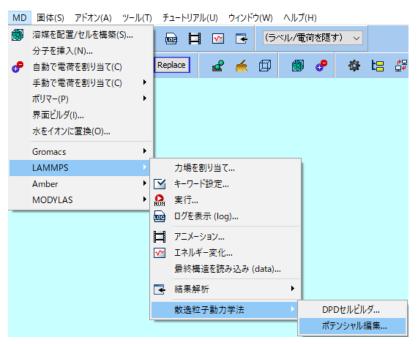
Vb=Min(Vma,Vmb)

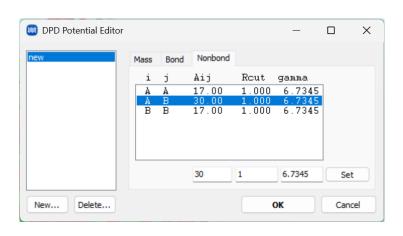
Aij-Aii

Chi=Vb*(da-db)^2/RT

補足 DPD計算の設定

- 1. 次に、 $MD \mid LAMMPS \mid 散逸粒子動力学 \mid ポテンシャル編集のNonbondタブ</mark>において、 A-A間やB-B間の<math>A_{ij}$ については、MonomerA, MonomerBタブでそれぞれ取得した同種粒子間DPDパラメータ A_{ii} を指定する。ただし、成分1あるいは2のどちらかの値に統一する。 A-B間の A_{ij} は、上で採用した同種粒子間DPDパラメータに、取得した異種粒子間DPDパラメータ($A_{ii} A_{ii}$)を足した値を入力する。
- 2. 水-ベンゼンのDPDパラメータの算出に関しては 文献[A. Maiti and S. McGrother, J. Chem. Phys., 120 (3), 2004, 1594.]を参考にした。





この例では、同種粒子間パラメータ CH_2O の値を採用し、小数点以下の 値は四捨五入している。

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。



<u>ユーザマニュアル</u>



Winmostar 講習会の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、基礎編チュートリアルについてはWinmostar基礎講習会へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては個別講習会のご依頼をご検討ください。
- 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、<u>お問合せフォーム</u>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