M winmostar チュートリアル

Gromacs 粘度・誘電率

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。
 - 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。



- 本チュートリアルでは、常温常圧の水の誘電率・粘度をGromacsのモジュールを用いて計算する方法を紹介します。ここでは目標の温度・圧力でNVT一定計算を実行するための平衡化手順(以下)を適用します。(必ずしもNVT一定で計算する必要はなく、結果を検証の上NVE, NPT一定で計算することも可能です。)
 - 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-定: : 粒子速度の平衡化
 - 7. NVT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。特に緩和の遅い物質(高粘度物質など)では本手法で妥当な値が得られない場合があります。
- 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。

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。 ビルド済みのcygwin wmをインストールする場合 (推奨) ← こちら

<u>cygwin wmをビルドする場合</u>(非推奨、上級者向け) Cygwinの代わりにWindows Sub*s*ystem for Linuxを用いる場合(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。

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		L	^
🞰 🛱 🕶 📑 (ラベル/電荷を隠す) 🗸	 5¥jmol.bat	GAMESS(1): GAMESS(2):	C:¥Users¥Public¥gamess-64¥games C:¥ff820_windows¥Firefly820.exe	
Replace 🕜 🍝 🗇 🚳 🔗 🏘 🖽 🛱	Files¥CCDC¥Mercury 1	こちら NWChem:	C:¥G16W¥g16.exe C:¥nwchem¥bin¥nwchem.exe	
255	Files¥OpenSCAD¥open:	Cygwin:	C:¥cygwin_wm	

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V10のチュートリアル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

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「water_eps_mu」と入力して 保存をクリックします。
- 2.
 (溶媒を配置/セルを構築)をクリックします。
- 3. Add Waterをクリックし「500」と入力しOKをクリックします。
- **4. Simulation CellのSet Density**の右に「0.9」と入力し**Build**をクリックします。
- 5. 「系の作成に成功しました」と表示されたら**OK**をクリックします。

🗅 🗟 • 🗅 🖯 • 🖉 🗎	•) * 🖞 🚯 🕼 🖹 😰 🚭 ソルバ Quantum ESPRESSO 🗸 🗹 🤮 🖬 🗹 💽 ラベル/電荷額す) 🗸	
元素 📙 1 🗸 🕂 💽 🍕	+H	💊 % 75ガメント -CH8 🗸 Replace 🛃 🖆 🚳 🖑 🏶 🖧	
≫ 最近使ったブロジェクト	te	ー時ファイル (temp.wmm) 編集済み >> アニメーション	
プロジェクト 状態 の water_gk		N= 1,500 H10000500 M= 9,007.5 Marked Order 1 - 2 - 0 - 0 Marked Adm: x = -4.232 Y = 11.056 Z = -0.287	
thf_liquid ABORT(1/3)		Length= 1.001552 Angle= * Dihedrat= * Lper= * V 座標	
	103	表示形式 ① XYZ O Z Matrix	
ジ プロジェクト	100		_
作業フォルダ (water_gk) Options ▼	12	2 H -5.2200 11.1550 -0.6670 3 H -4.0270 10.1550 -0.6670 4 - 9.000 11750 -0.6670	
名前 初期	æ	5 H -7,8080 0,2300 2,2830 6 H -9,0130 1,3360 2,2180	
	0	7 0 3.0210 -10.3430 -9.8640 8 H 3.2210 -11.0560 -8.3040 9 H 3.2210 -11.0550 -8.3040	
	*	10 0 -2.4320 -6.5130 1.0470 11 0 -2.4320 -6.5130 1.0470	
	¥ س	12 H -3.2730 -6.3130 0.5490 13 0 6.3810 -5.0100 6.3840	
< >>	ш П	14 H 5.3250 -5.8230 6.5430 15 H 6.8680 -5.5240 10 -3.4410 -9.9650 10.8150	
アクション	0	17 H -4.1350 8.55000 10.6420 18 H -3.7690 9.9920 11.2630	
	0	19 0 0.3850 -10.0400 -4.7430 20 H 0.66770 -9.1280 -4.4420	
	Ĵ.	21 H 0.3060 -10.7360 -4.1520 22 0 4.3210 2.5540 -5.5680 23 H 4.8290 8.26560	
	PBC	24 H 4.6800 2.8580 -4.6470 25 0 -2.6980 -1.0210 -10.0980	
	0	28 H -2.0850 -1.6808 -10.6260 27 H -2.3330 -0.0920 -10.0580 29 A 5510 -1.809 -11.220	
	Ŧ		~
	ā	Charges Available: User (Globel.UU), Urms= 0.333) 教行項目 職題化779 日間何 二名前 作ho= 0.899335 g/cm*3 原性 番号 1 元素 0	
		a = 25.520000 b = 25.520000 c = 25.520000 alpha = 90.00000 座標 -4.232 11.056 -0.287	
		+ 50% 最適化75岁 1 1 1	~

II.計算の実行(平衡化)

- 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. Presetを「Fuild/Amorphous NPT Equilibration for NVT」に変更します。
- **4. 4th job**のSimulation timeを「100」に変更します。
- 5. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は**1st job**から**6th job**まですべての **Precision**を「Low」に変更します。
- 6. 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。

		🚾 Gromacs Work	flow Setup				- 🗆	ı X
		Preset Fluid/Amorph	hous NPT Equilibra	tion for NVT		# of Jo	bs: + 6	-
						ameter/stru	cture scan	Config
		1st job					+	•
		Ensemble	Minimize \lor	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.	
		Simulation time [ps]	10.	# of snapshots (Every 0.20 ps)	50	Initial velocity	From parent	~
		Free boudnary o	condition	Precision	Medium \sim	De	tails	
		2nd job					+	
		Ensemble	NVT ~	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.	
		Simulation time [ps]	10.	# of snapshots (Every 0, 20 ps)	50	Initial velocity	Random	~
		Free boudnary o	condition	Precision	Medium \vee	De	tails	
		3rd job					+	
		Ensemble	NPT ~	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.	
		Simulation time [ps]	50	# of snapshots	50	Initial velocity	From parent	~
		Free boudnary o	condition	Precision	Medium \sim	De	tails	
		4th job		4			+	
		Ensemble	NPT+Rescal		.	Pressure [atm]	1.	
		Simulation time [ps]	100			Initial velocity	From parent	
		Reset In	mport 🔽	EX		0	к	
M winmostar	Copyright 200)8-202	25 X-A	bility	Co., I	.td.		

III.計算の実行(本計算)

×

作業

Θ

- work1_GMX_MINからwork6_GMX_NVTまでの6つの作業フォルダの状態がENDまたは END(-)に変化したら、再び ○ (ワークフロー設定)をクリックします。
- 2. 「継続ジョブを実行しますか?…」と表示されたらはいをクリックします。
- 3. work6_GMX_NVTを選択しOKをクリックします。

パロジェクト		🕺 ジョブの継続元の作業フォル	ダを選択				_		
フォルダ (water_eps_mu)	Options 🔻	ジョブの維続元の作業フォルダ	を選択してください	1					
名前	状態	名前	状態	プロファイル	出力ファイル場所	説明			
vork1_GMX_MIN	END	work1_GMX_MIN	END	Local Job	Local				
work2_GMX_NVT	END	work2_GMX_NVT	END	Local Job	Local				
work3_GMX_NPT	END	work3_GMX_NPT	END	Local Job	Local				
work4_GMX_NPT	END	work5_GMX_MIN	END	Local Job	Local				
work5_GMX_MIN	END	► workδ_GMX_NVT	END	Local Job	Local				
work6_6MX_NV	VT END								
	>								
						ОК		キャン	セ

III.計算の実行(本計算)

- 1. Presetを「Fluid/Amorphous/Crystal NVT Production」に変更します。
- 2. Simulation timeを「1000」(可能ならばより大きい値)に変更します。
- 3. 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」、**Simulation time** を「50」に変更します。
- 4. OKをクリックします。
- 5. ジョブの設定ウィンドウで適宜設定を変更し実行をクリックします。

Gromacs Workflow Setup	- 🗆 ×				
Preset Fluid/Amorphous/Crystal NVT Production	ied) # of Jobs: + 1 -				
Continue from work6_GMX_NVT	Enable parameter/structure scan Config				
1st job	+ -				
Ensemble NVT Temperature [K]	300. Pressure [atm] 1.				
Simulation time [ps] 1000 snapshots	250 Initial velocity From parent \checkmark				
Free boudnary condition Precision	Medium V Details				
Reset Import 🔻 Export					

III.結果解析 誘電率

- work7_GMX_NVTの作業フォルダの状態がENDに変化したら、作業フォルダで work7_GMX_NVTをクリックしてからアクションのStatic Dielectric Constantをクリック します。
- 2. Drawをクリックし「Enter Temperature」と表示されたら「300」(今回の目標温度)と入 カしOKをクリックします。グラフ中のepsilonの最終値およびグラフ下の数値が比誘電率で す。(今回の計算では十分収束しておらず、収束にはより長時間の計算が必要です)



III.結果解析 自己相関関数 (誘電率関係)

- **1.** Autocorrelation function of dipole momentにチェックを入れDrawをクリックします。
- 2. 双極子モーメントの自己相関関数が表示されます。これが十分0に収束するかは、誘電率計算の 収束判定の一つの基準になります。必要に応じて**Show Setting**をクリックし**Logarithm**に チェックを入れ対数プロットで形を確認します。(今回の計算では十分収束しておらず、収束 にはより長時間の計算が必要です)



III.結果解析 粘度

- **1. 作業フォルダ**でwork7_GMX_NVEをクリックしてから**アクション**の**Shear Viscosity**をクリックします。
- 2. Drawをクリックすると、粘度の推測値が下に表示されます。(今回のケースでは計算時間が 不十分なため算出された粘度の精度は高くありません。)





• 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<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、<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