

 winmostar チュートリアル

LAMMPS/Gromacs

蒸気圧・表面張力

V11.13.0

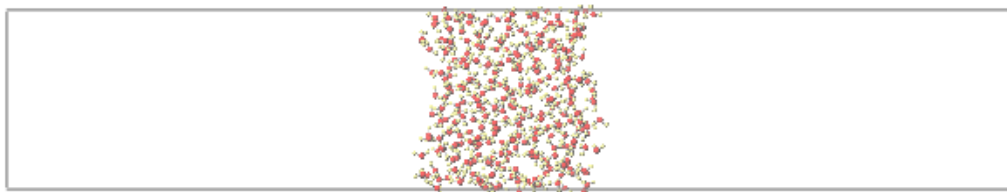
2025年 7月 1日 株式会社クロスアビリティ

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[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[ユーザマニュアル](#)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。
 - [Winmostar基礎講習会](#)：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、[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。

概要

- 以下の手順で300 Kの水の気液平衡系を計算し、蒸気圧、気液平衡密度、表面張力を算出します。
 1. 液相の作成
 2. 液相の平衡化計算 (エネルギー極小化計算→温度一定MD計算)
 3. 気液平衡系の作成
 4. 気液平衡系の平衡化計算 (エネルギー極小化計算→温度一定MD計算)
 5. 気液平衡系の本計算 (温度一定MD計算)



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。特に界面張力の算出値の収束は遅いです。
- 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。

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。LAMMPSを用いるためにはLAMMPS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Windows用のLAMMPSとCygwinの設定手順に従います。

(6) **こちらの手順**に従いWinmostar用のCygwin環境（CygwinWM）を構築します。

(7) WinmostarをインストールしたWindows PC（ローカルマシン）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。リモートサーバでのみ計算を行う場合もインストールしてください。

量子化学計算を実行する方 : [GAMESS](#) [NWChem](#) [Gaussian](#)

分子動力学計算を実行する方 : **[LAMMPS](#)**

固体物理計算を実行する方 : [Quantum ESPRESSO](#) [FDMNES](#)

Fragment ER（別売）を実行する方 : [NAMD](#)

※ポリマービルダを利用するためにはLAMMPSのインストールが必要です。

※使用する予定のないソルバをインストールする必要はありません。

※Gromacs, Amber, MODYLAS, OpenMXは前の手順でインストールするCygwinに含まれます。

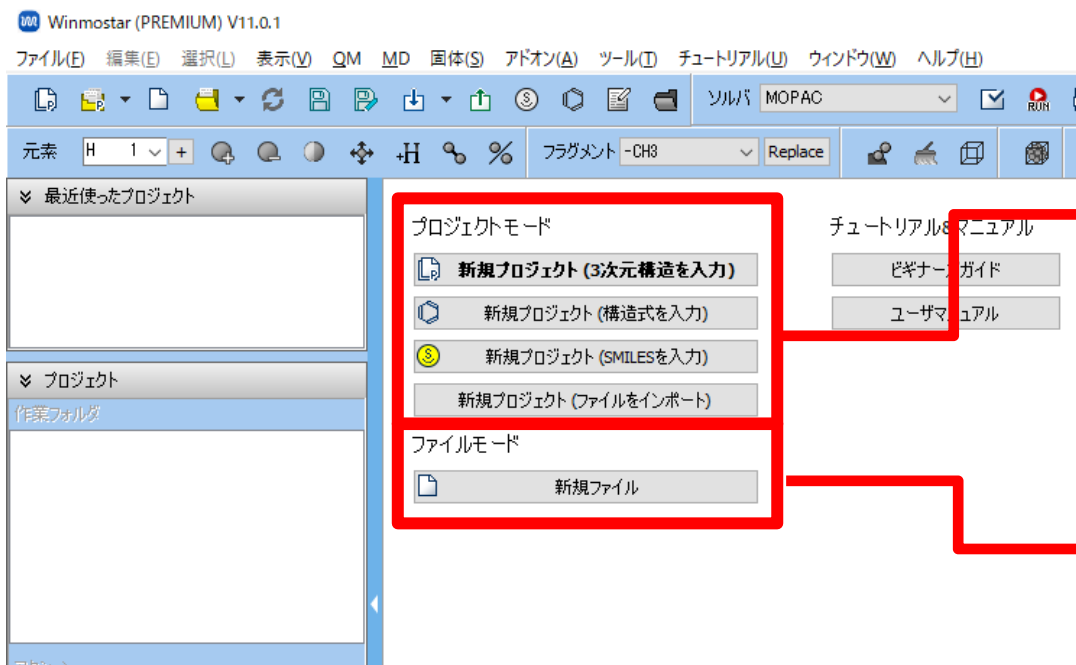
※最大原子数を拡張したMOPAC6を使う場合は[こちら](#)から入手してください（動作未保障）。

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。



プロジェクトモード **V11新機能**

ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。
基本的にこのモードを推奨します。

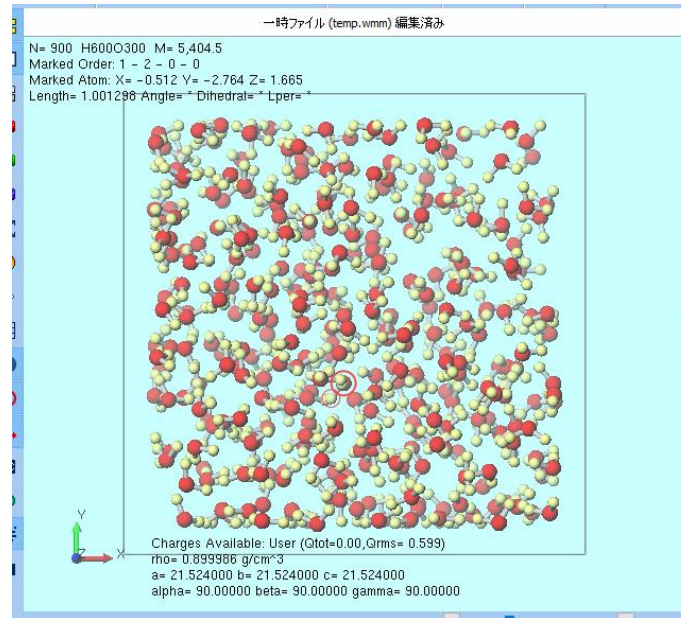
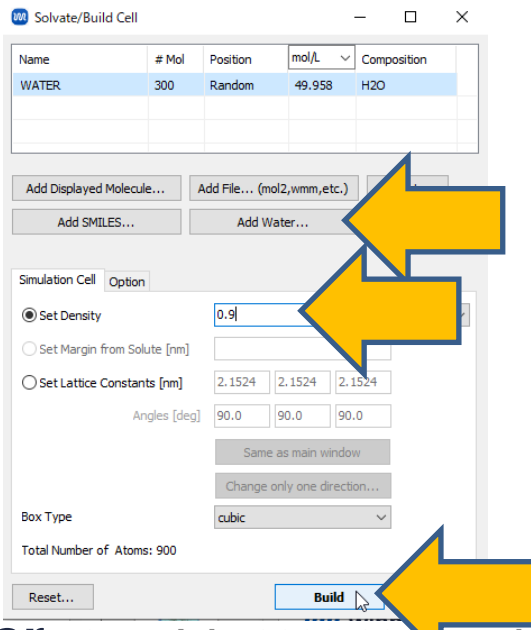
ファイルモード

ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

I. 系のモデリング（液相）

基本的な操作方は[LAMMPS基礎編チュートリアル](#)または[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_vle」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、**Add Water**をクリックし、**Enter # of molecules**と表示されたら「300」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。「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。



II. 計算の実行（液相の平衡化計算）

1. ソルバで「LAMMPS」または「Gromacs」を選択し、☒ (ワークフロー設定) をクリックし、**OK**をクリックします。「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。
2. **Preset**を「Fluid/Amorphous/Crystal NVT Equilibrium」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**1st job**と**2nd job**の**Precision**を「Low」に変更します。
4. **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 Workflow Setup

Preset: Fluid/Amorphous/Crystal NVT Equilibrium

of Jobs: 2

☐ Enable scan calculation Config...

1st job

Ensemble: Minimize Temperature [K]: 300 Pressure [atm]: 1

Simulation time [ps]: 10 # of snapshots: 50 Initial velocity: From parent

☐ Free boudnary condition Precision: Medium Details...

2nd job

Ensemble: NVT Temperature [K]: 300 Pressure [atm]: 1

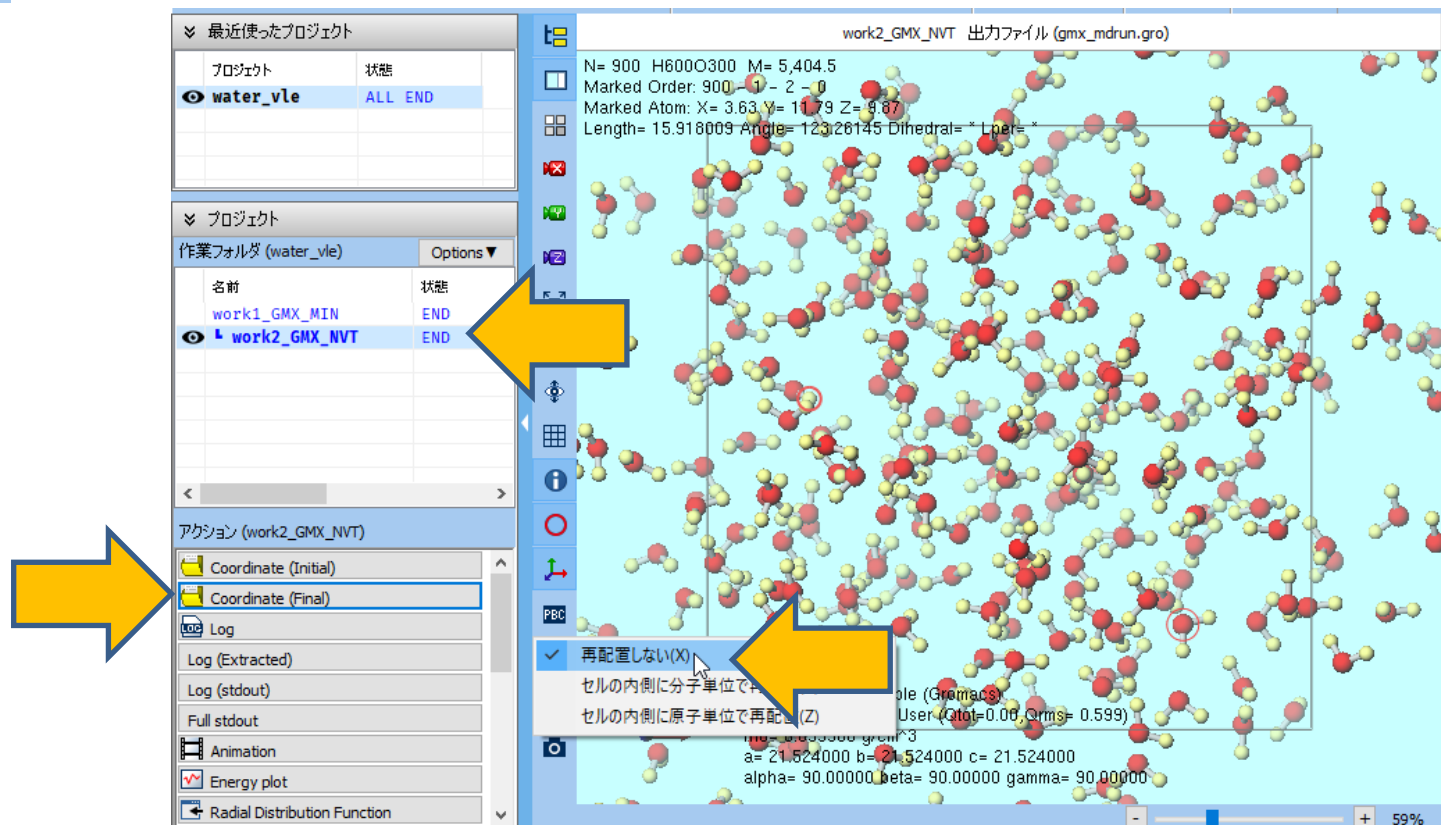
Simulation time [ps]: 50 # of snapshots: 50 Initial velocity: Random

☐ Free boudnary condition Precision: Medium Details...

Reset... Import... Export... OK

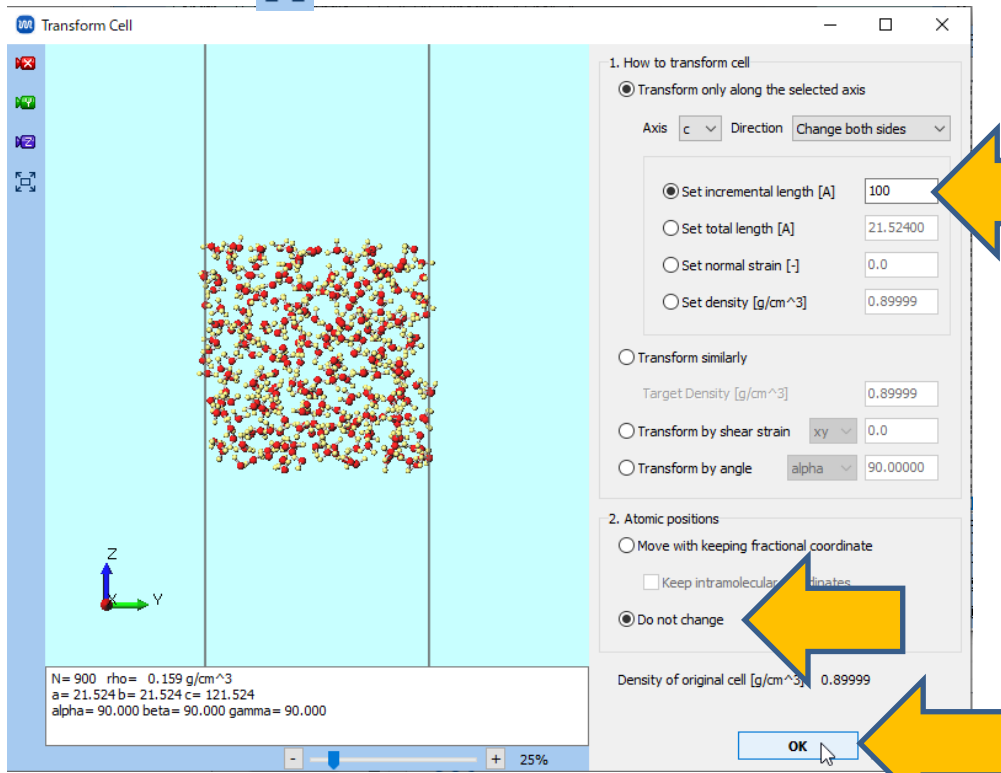
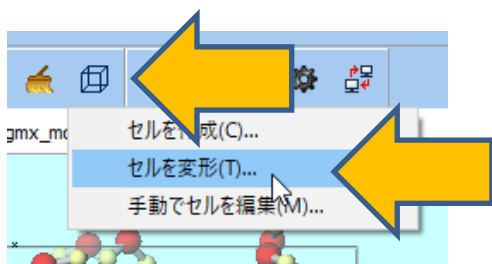
III.系のモデリング（気液平衡系）

1. work1とwork2の作業フォルダの状態が**END**または**END(-)**に変化したら、作業フォルダでwork2をクリックしてからアクションの**Coordinate (Final)**をクリックし、NVT計算の最終構造を表示します。
2. **PBC**（周期境界条件の表現形式）をクリックし**再配置しない(X)**をクリックします。



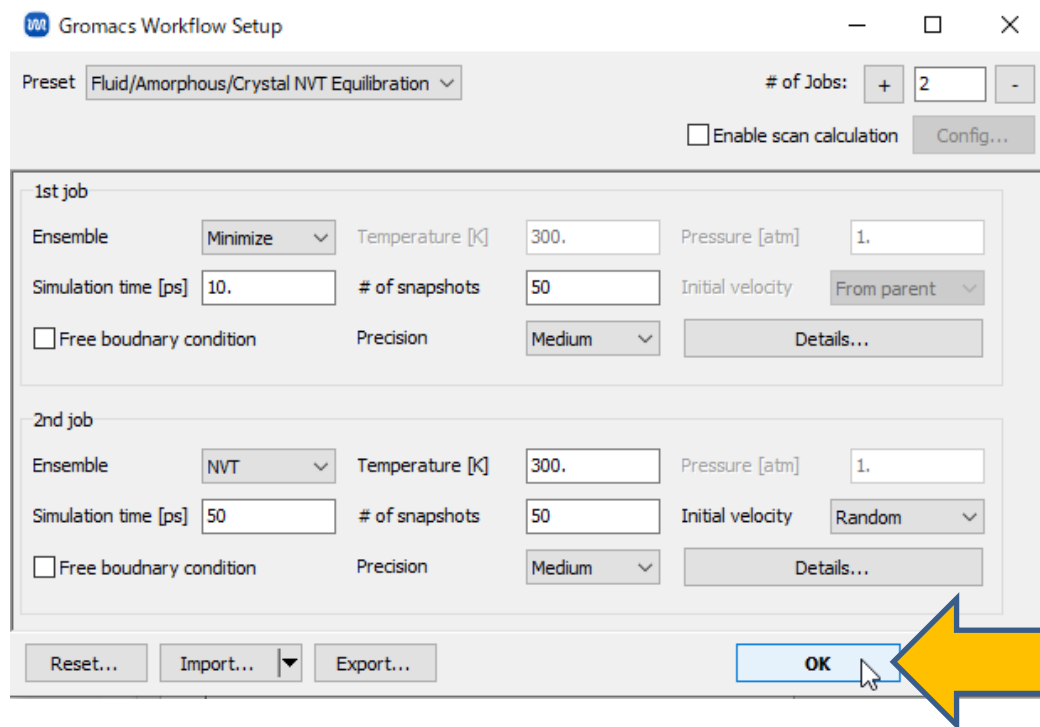
III.系のモデリング（気液平衡系）

1. 編集 | 周期境界条件に基づき原子を再配置をクリックしOKをクリックします。
2.  セルを作成/編集 | セルを変形をクリックします。
3. Set incremental lengthの値を「100」に変更し、Atomic positionsでDo not changeにチェックを入れてからOKボタンをクリックします。
4.  (X軸方向から表示) をクリックしてから  (ウィンドウに合わせる) をクリックします。



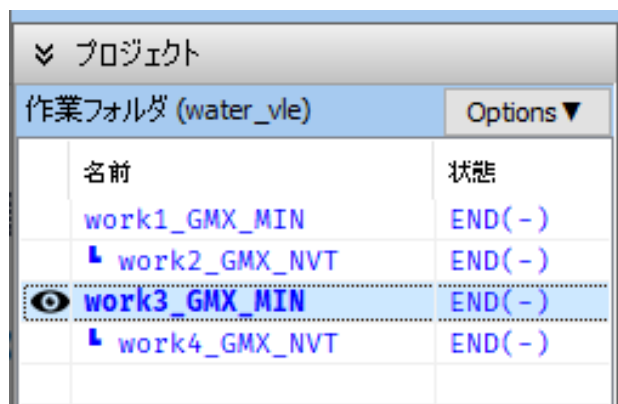
IV.計算の実行（気液平衡系の平衡化計算）

1. ☒ (ワークフロー設定) をクリックします。「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。力場を割り当てウィンドウでOKをクリックします。
2. LAMMPSまたはGromacs Workflow Setupウィンドウで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。

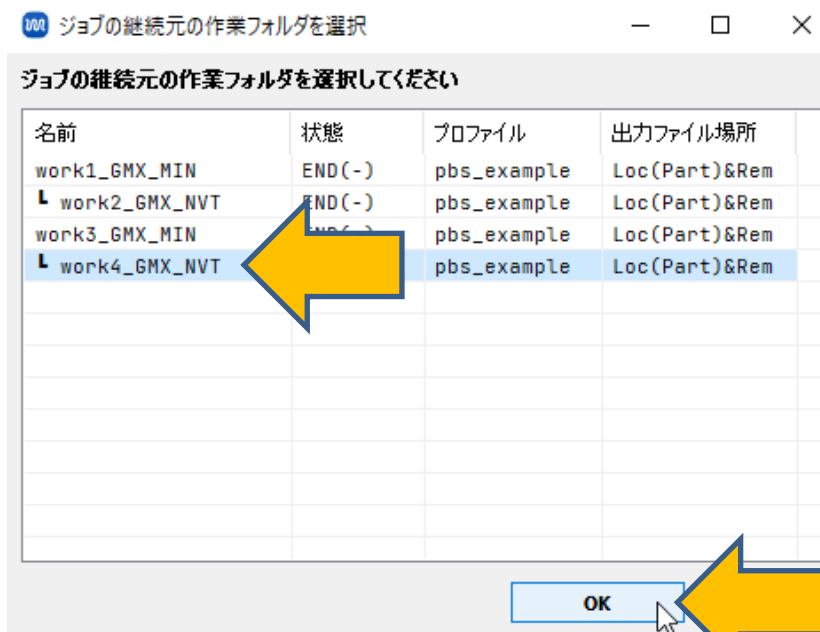


V. 計算の実行（気液平衡系の本計算）

1. work3とwork4の作業フォルダの状態が**END**または**END(-)**に変化したら、☒（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. work4_LMP_NVTまたはwork4_GMX_NVTを選択し**OK**をクリックします。
4. **Preset**を「Fluid/Amorphous/Crystal NVT Production」に変更し**OK**をクリックします。
 - 表面張力の算出には比較的長時間の計算が必要なため適宜**Simulation time**を変更します。
5. **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。



プロジェクト	
作業フォルダ (water_vle)	
名前	状態
work1_GMX_MIN	END(-)
work2_GMX_NVT	END(-)
 work3_GMX_MIN	END(-)
work4_GMX_NVT	END(-)



ジョブの継続元の作業フォルダを選択

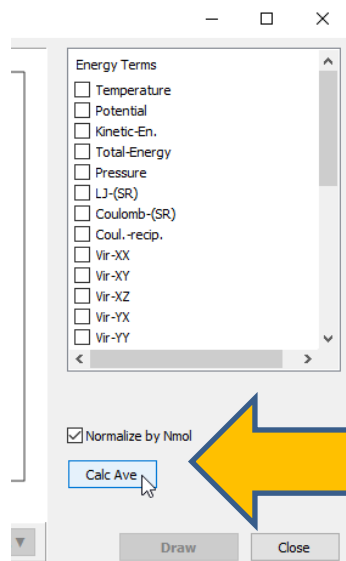
ジョブの継続元の作業フォルダを選択してください

名前	状態	プロファイル	出力ファイル場所
work1_GMX_MIN	END(-)	pbs_example	Loc(Part)&Rem
work2_GMX_NVT	END(-)	pbs_example	Loc(Part)&Rem
work3_GMX_MIN	END(-)	pbs_example	Loc(Part)&Rem
 work4_GMX_NVT	END(-)	pbs_example	Loc(Part)&Rem

 OK

VI.結果解析

- work5の**状態**が**END**または**END(-)**に変化したらwork5_LMP_NVTまたはwork5_GMX_NVTをクリックしてから**アクション**の**Energy plot**をクリックし**Calc Ave**をクリックします。
Gromacsの場合は「Enter first frame to read」と表示されたら**OK**をクリックします。
- LAMMPSの場合は蒸気圧を**Pzz**（単位はatm）、界面数(2)と表面張力の積を**GamNsurf**または**v_GamNsurf**（単位はmN/m）、Gromacsの場合は蒸気圧を**Pres-ZZ**（単位はbar）、界面数(2)と表面張力の積を**#Surf*SurfTen**（単位はbar*nm）から読み取ります。読み取り後**Close**をクリックします。単位を変換したい場合は**ツール | 単位を変換**を使用します。
 - ステップ数が不十分な場合は下図のように蒸気圧の平均値が負になる場合もありますが、長時間計算することにより正の妥当な値に収束します。



LAMMPSの場合

Lz (A)	121.523999999999646	0.000000000000000
Pxx (atm)	-104.370197231387550	3.638368206887786
Pyy (atm)	99.9441957319999951	0.418599793191991
Pzz (atm)	-1.959768756168735	3.358497899472351
Pxy (atm)	5.7671111131272219	2.399991957999925
Pxz (atm)	0.611087119381448	2.001650707936097
Pyz (atm)	0.575812991579919	1.395911129997599
GamNsurf (mN/m)	122.576884697608875	4.372392807600217
E-pair (kcal/mol)	0.000000000000000	0.000000000000000

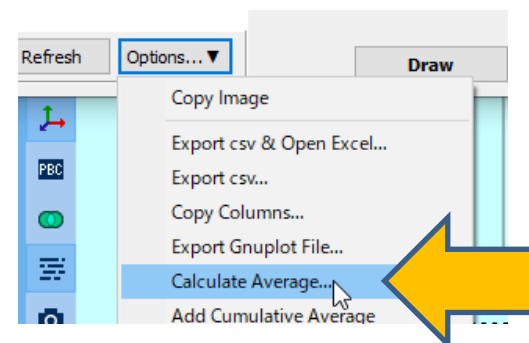
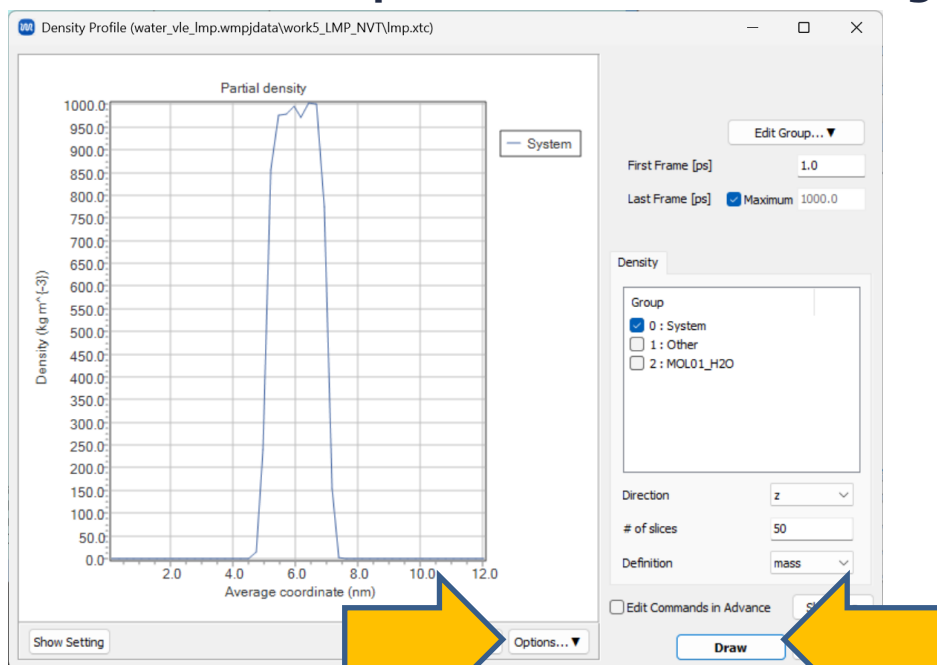
Gromacsの場合

Pres-YY	0.031800	0.84	104.014	-0.203318 (bar)
Pres-ZX	0.720705	1.9	105.379	-2.46764 (bar)
Pres-ZY	0.621905	0.94	104.914	0.262219 (bar)
Pres-ZZ	2.36327	2.4	168.808	7.73189 (bar)
#Surf*SurfTen	868.82	82	2196.24	-47.6619 (bar nm)
T-System	288.188	0.18	18.8817	0.816884 (K)
Xi-System	0.0877739	0.002	0.0350108	-0.000775973 (1/ps)
Xi-System	0.0000000	0.000	0.170488	0.00770602 (1/ps)

参考文献 : R. Sakamaki et al., J. Chem. Phys., 134, 124708 (2011).

VI.結果解析

1. リモートジョブの場合は先にwork5の**Receive all remote output files**をクリックし出力ファイルを取得します。
2. work5の**アクション**の**Density Profile**をクリックし**Draw**をクリックすると、z軸方向の密度分布が表示されます。
3. 液相、気相それぞれの平衡密度を取得する際は、グラフ右下の**Options | Open Excel**をクリックし、csvファイルを生成し、各種のグラフソフトでtanh関数などへのフィッティングを行います。または、**Options | Calculate Average**を使ってグラフの区間平均を求めます。



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。



[ユーザマニュアル](#)



[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、[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