



LAMMPS/Gromacs 溶解度/X/DPDパラメータの算出

V11.15.0

2025年12月29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

- 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。以下の4通りのMD計算を実行します。
 - 成分Aの液相のMD（エネルギー極小化→NVT→NPT →NPT）
 - 成分Aの気相のMD（エネルギー極小化→NVT→NVT）
 - 成分Bの液相のMD（エネルギー極小化→NVT→NPT →NPT）
 - 成分Bの気相のMD（エネルギー極小化→NVT→NVT）

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DPDパラメータの計算に必要な圧縮率の計算にはより長い計算が必要です。
- 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。
- 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となるのと、本書で水以外の物質を計算する際の手順を示したいため、本書では水の気相の計算も実行します。

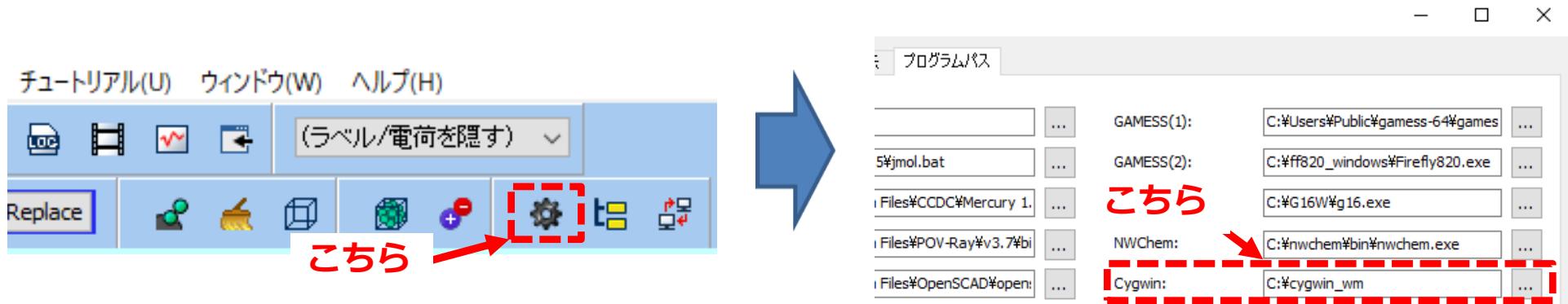
動作環境設定

- 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。

[ビルト済みのcygwin_wmをインストールする場合 \(推奨\) ← こちら](#)
[cygwin_wmをビルトする場合 \(非推奨、上級者向け\)](#)
[Cygwinの代わりにWindows Subsystem 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。

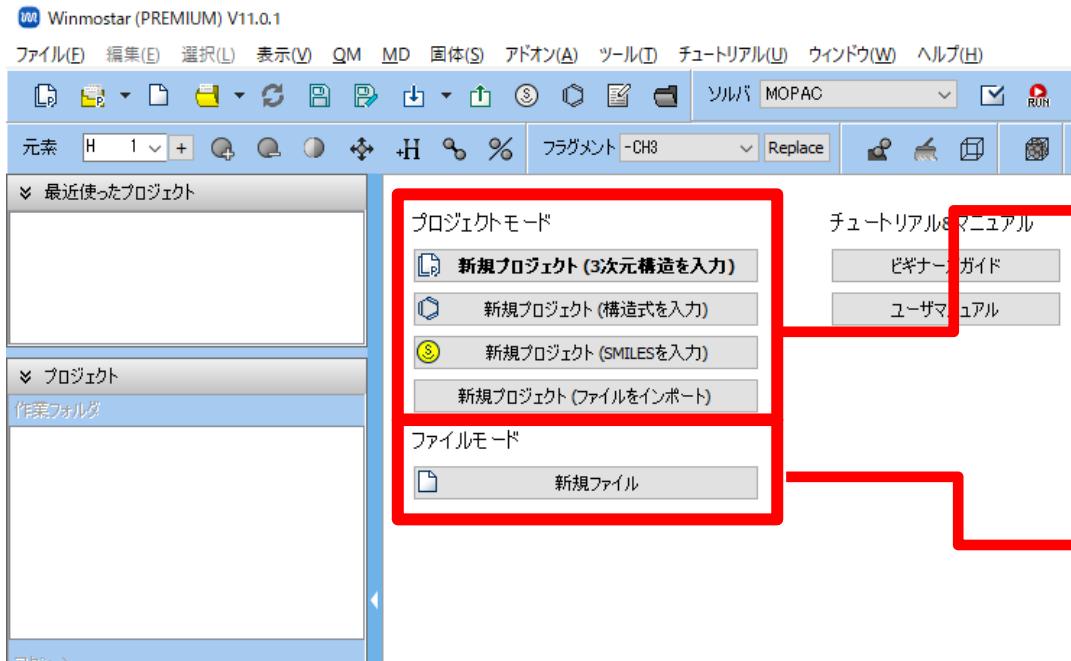


Winmostar V11の動作モード

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。

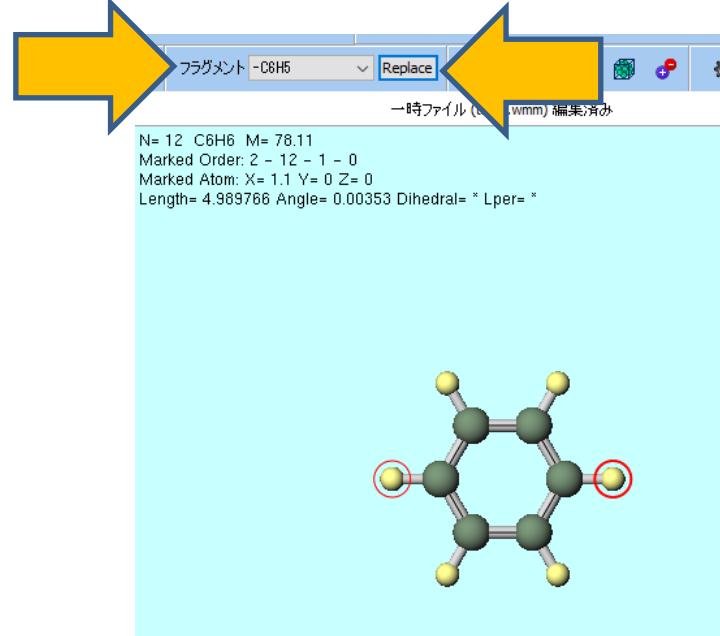
ファイルモード

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（成分A液相）

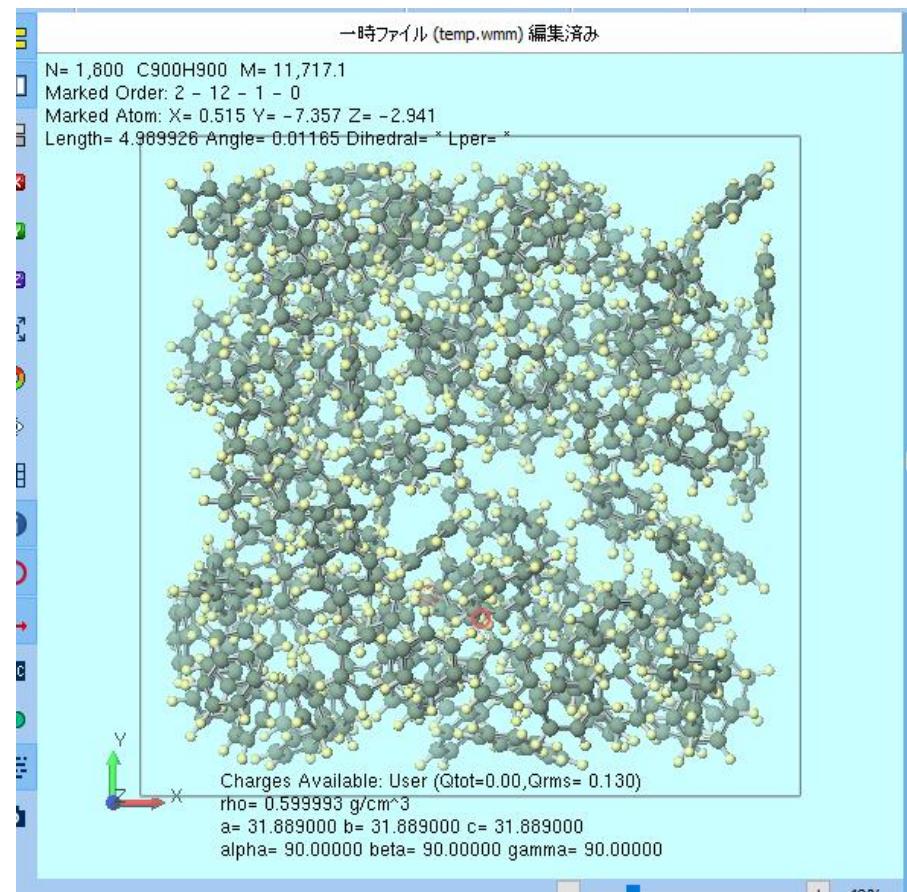
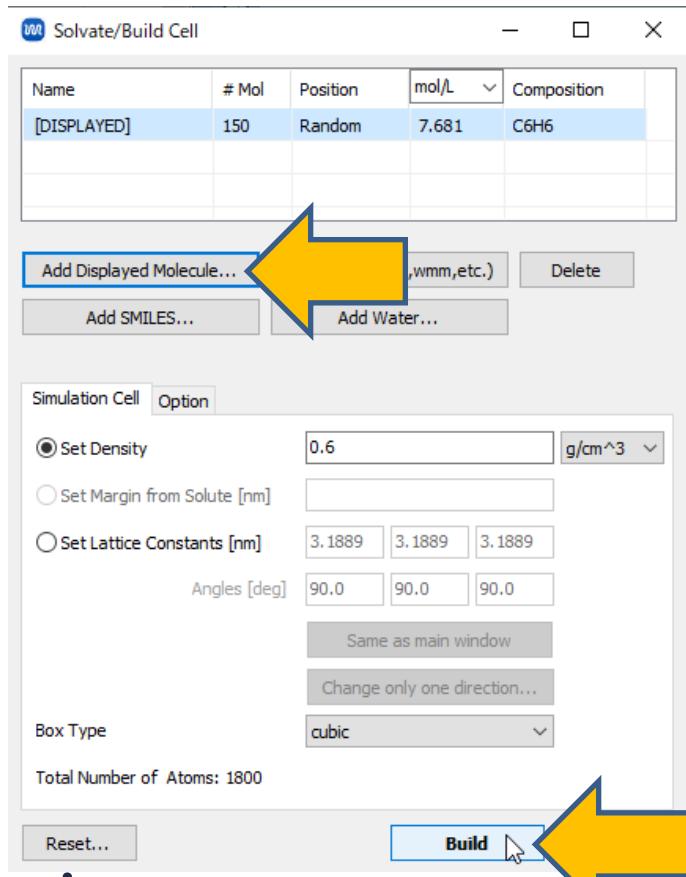
基本的な操作方法は[LAMMPS基礎編チュートリアル](#)または[Gromacs基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

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「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.  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.mol2」として保存します。



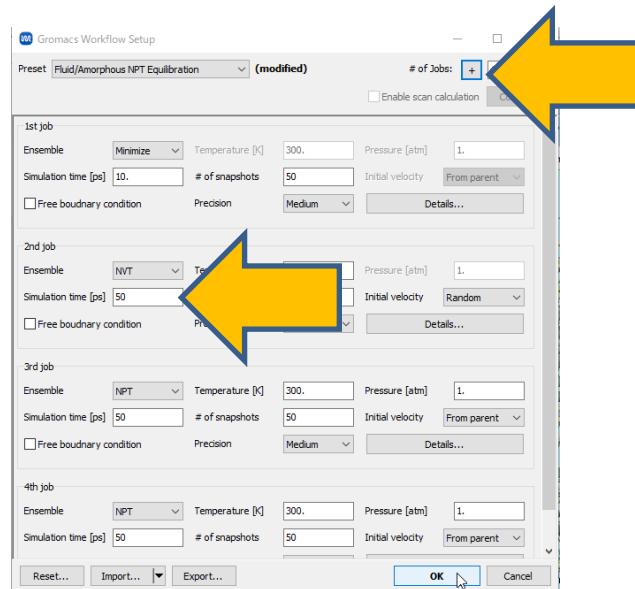
I. 系のモデリング (成分A液相)

1.  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。



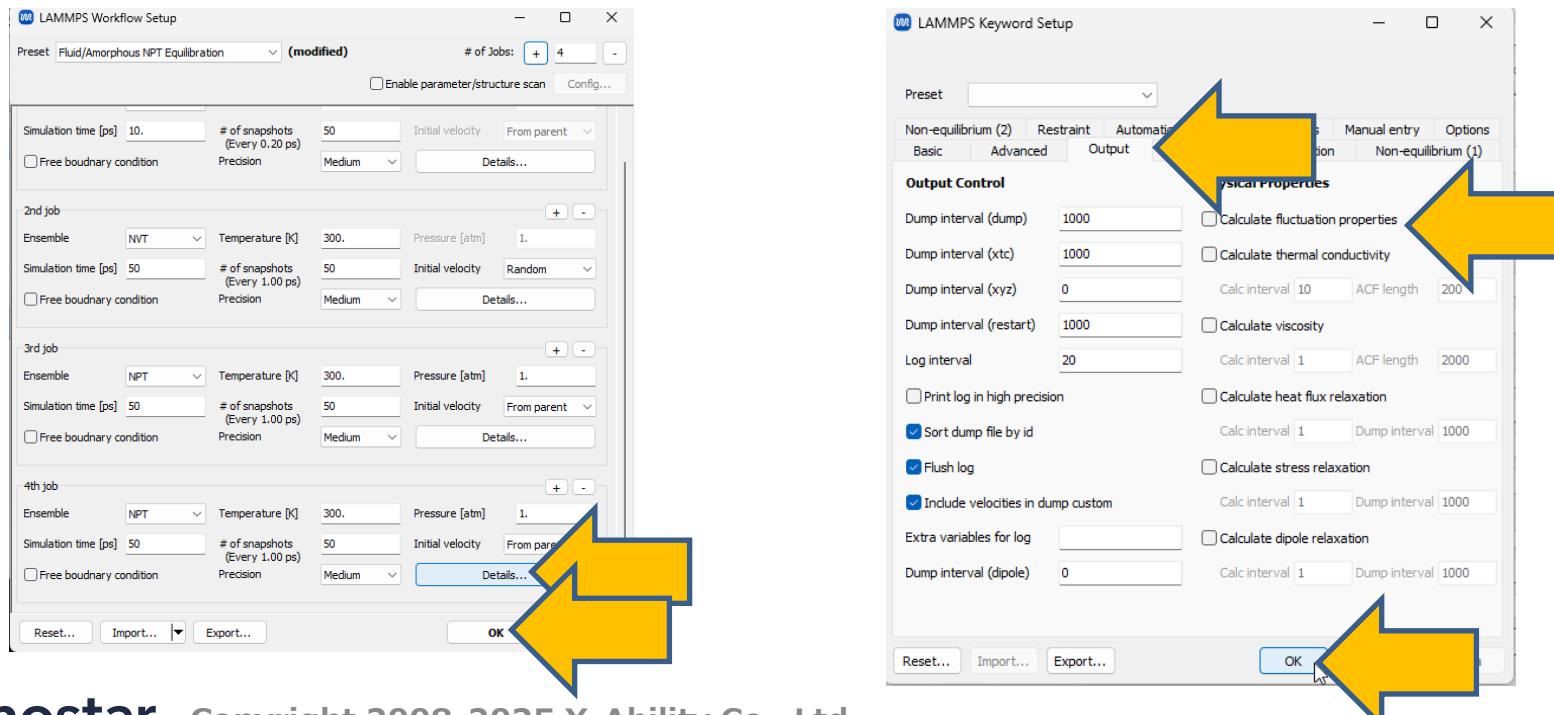
II. 計算の実行（成分A液相）

1. ソルバからLAMMPSまたは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。



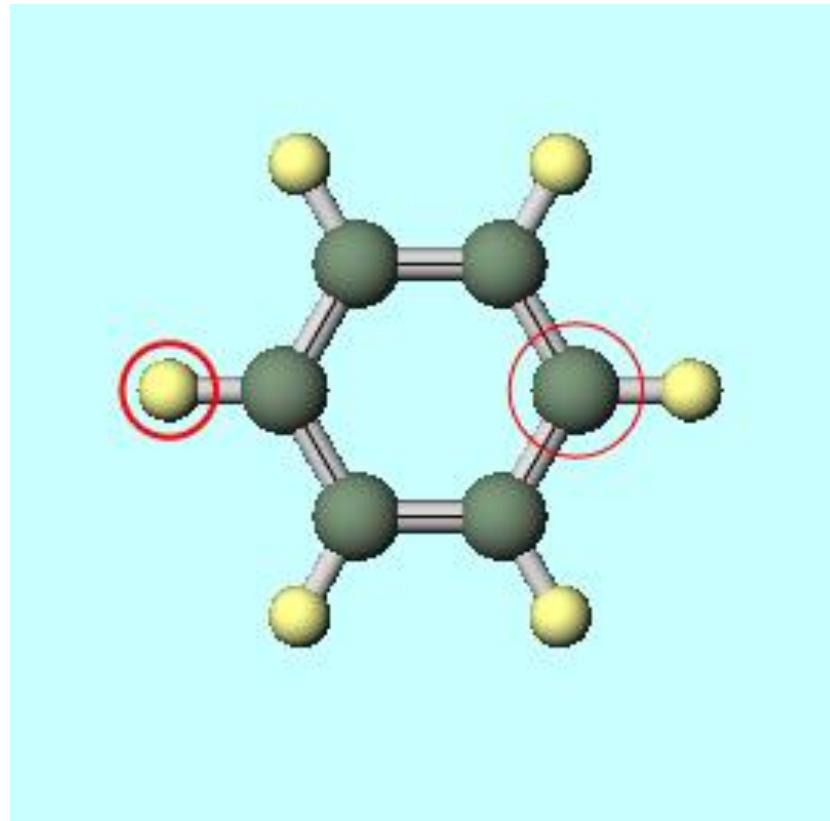
II. 計算の実行（成分A液相）

1. (LAMMPSの場合のみ) **4th job**の**Details**をクリックし、**Output**タブの**Calculate fluctuation properties**にチェックを入れ**OK**をクリックします。
 - 圧縮率からDPDパラメータを計算するために必要な項目のため、DPDパラメータの計算が不要な場合は省略できます。
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。



III.系のモデリング（成分A気相）

1.  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.mol2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。

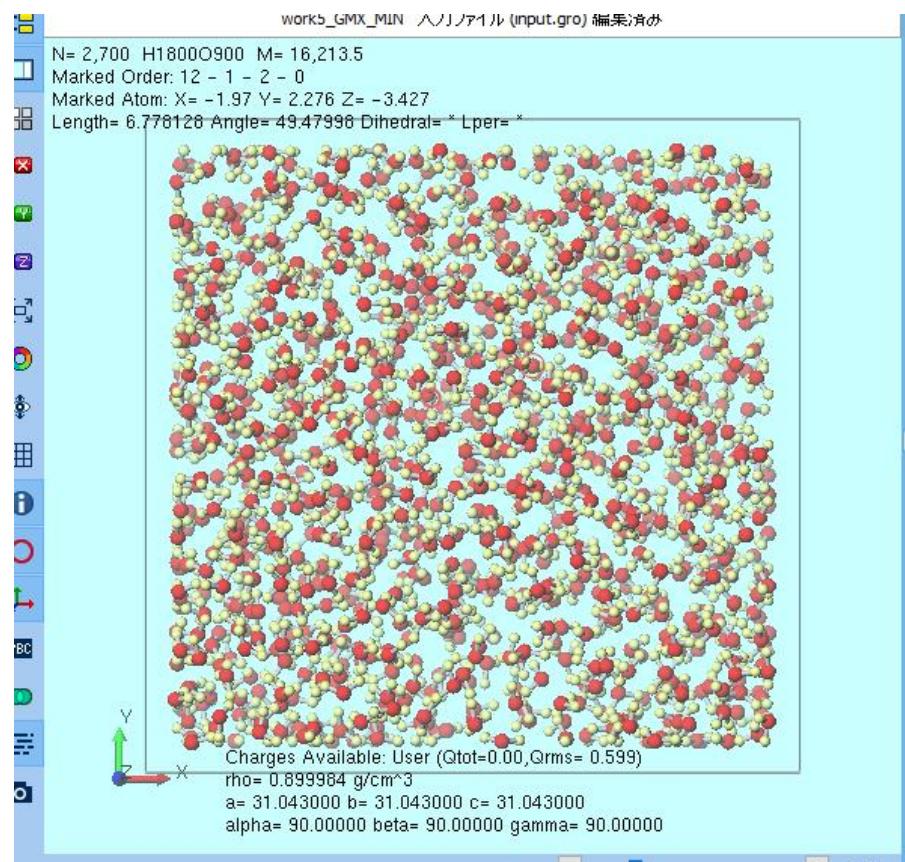
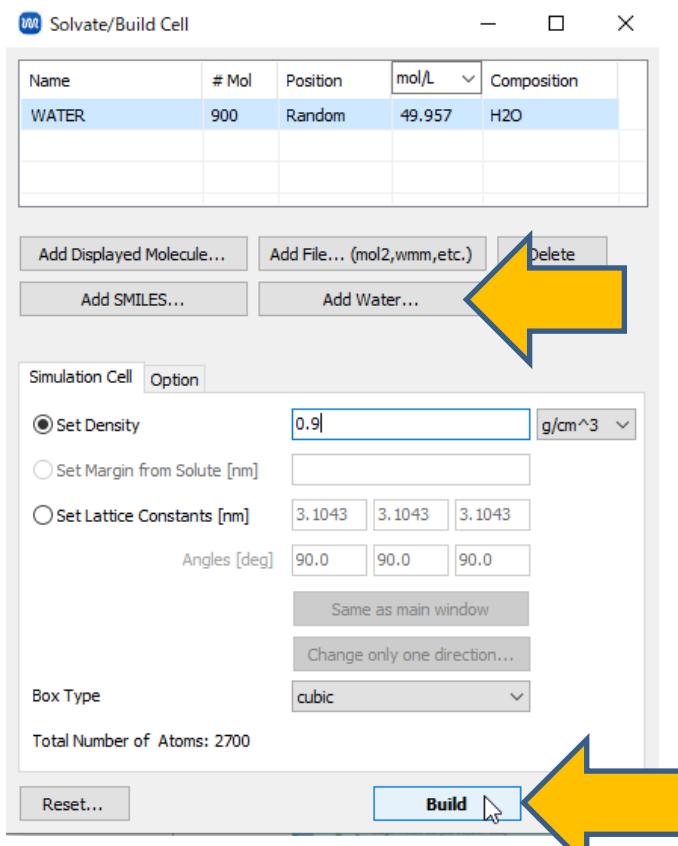


IV. 計算の実行（成分A気相）

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**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. **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。
 - 原子数が小さいため並列数を1に設定しないと計算が異常終了します。
- 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。

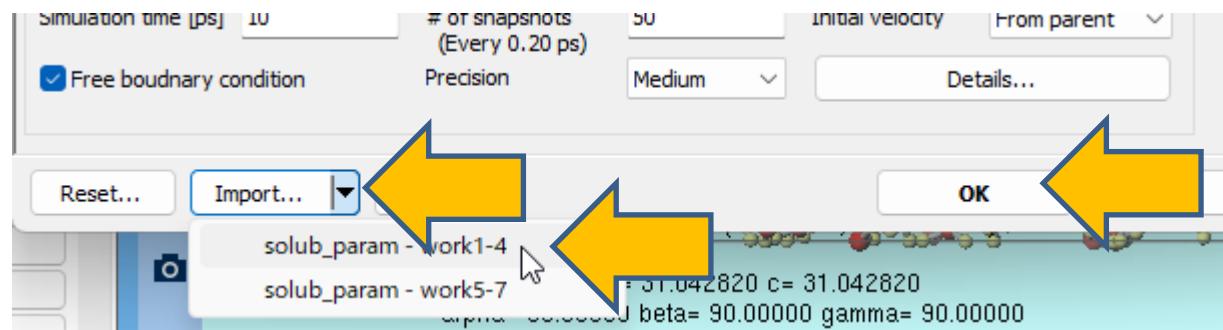
V. 系のモデリング（成分B液相）

1.  溶媒を配置/セルを構築をクリックします。
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。



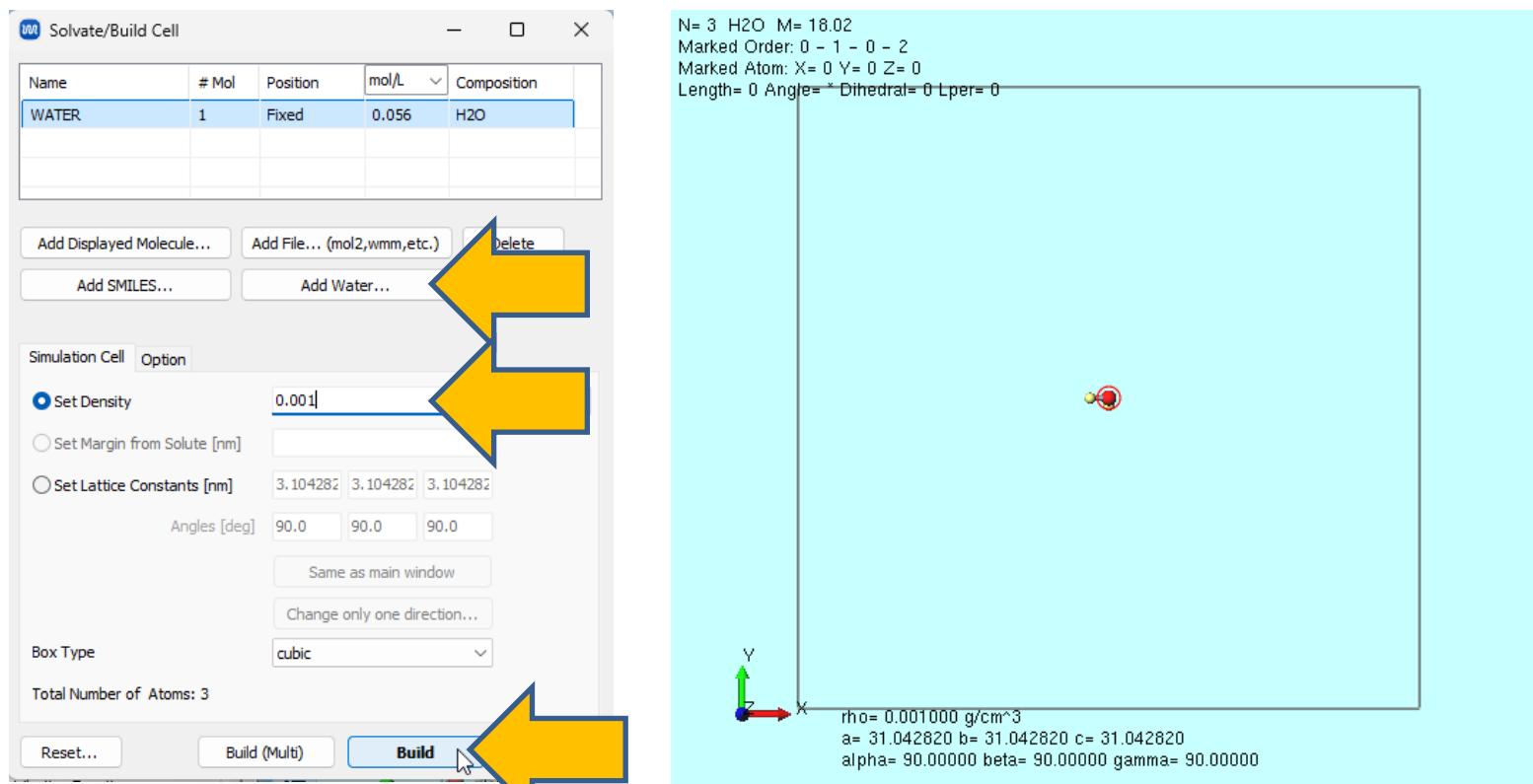
VI. 計算の実行 (成分B液相)

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. 左下の**Import**の右の▼をクリックし「work1-4」(成分A液相の設定)をクリックします。
5. **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。



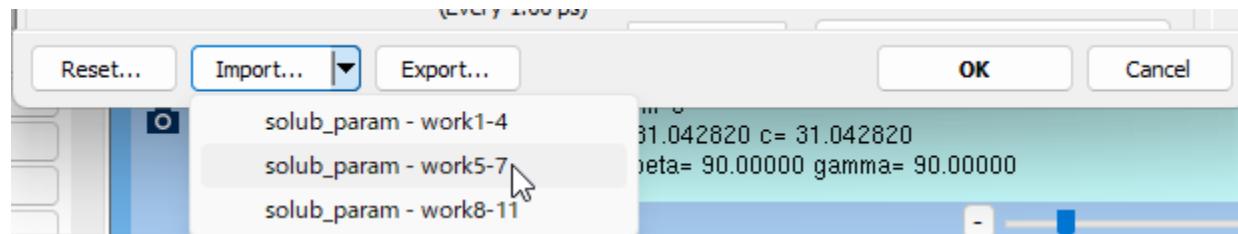
VII. 系のモデリング (成分B気相)

1.  溶媒を配置/セルを構築をクリックします。
2. Add Waterをクリックし「1」と入力しOKをクリックします。
3. 「この分子を乱数的に配置しますか？」と表示されたらいいえをクリックします。
4. Set Densityに「0.001」と入力し、Buildをクリックします。



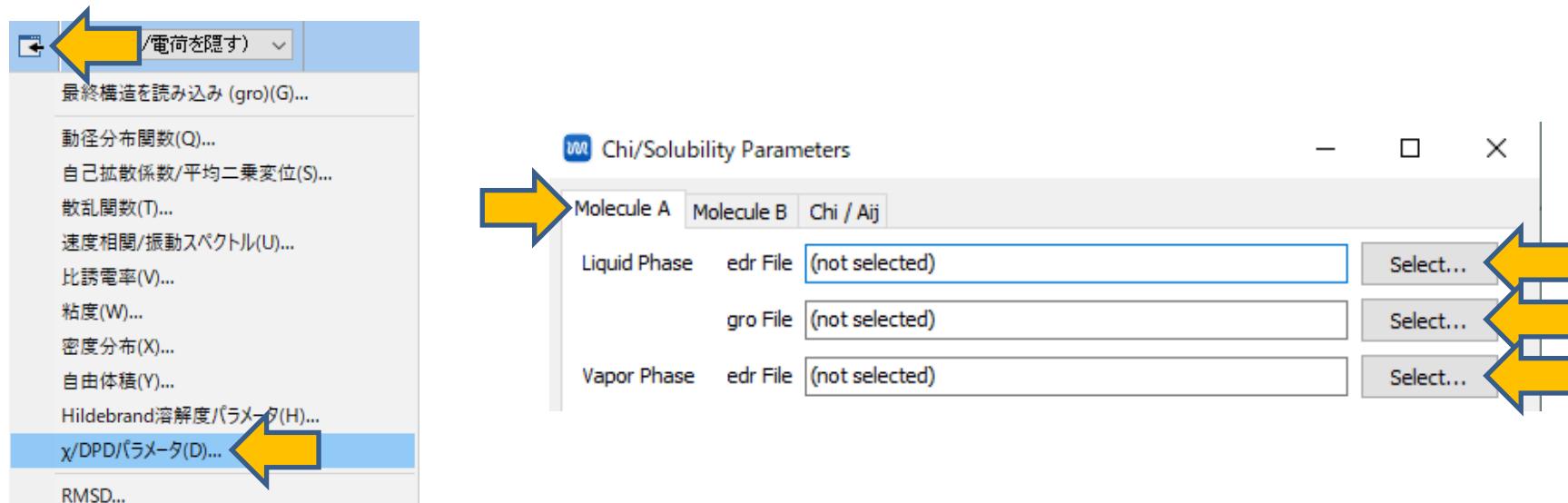
VIII. 計算の実行（成分B気相）

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. 「…電荷を設定しますか？」と表示されたらいいえをクリックします。
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. 左下の**Import**の右の▼をクリックし「work5-7」（成分A気相の設定）をクリックします。
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。
 - 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となるのと、本書で水以外の物質を計算する際の手順を示したいため、本書では水の気相の計算も実行します。
 - 原子数が小さいため並列数を1に設定しないと計算が異常終了します。
 - 剛体モデルの気相の計算でGromacsは異常終了しますが先に進んで問題ありません。



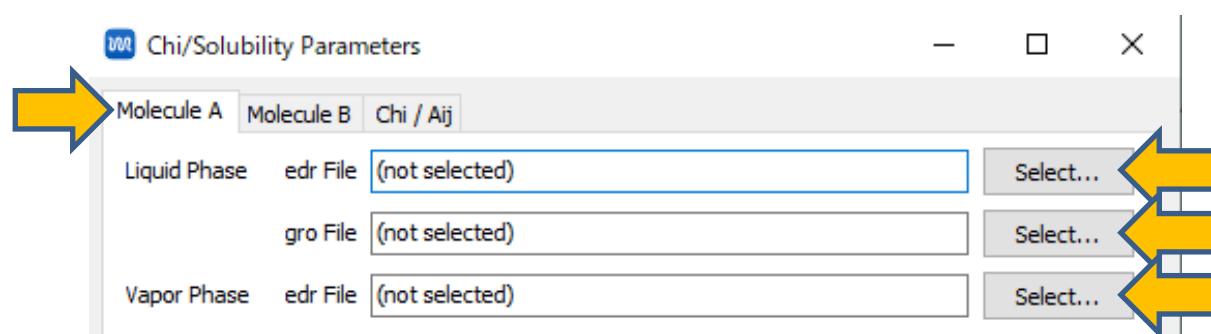
IX. 結果解析(LAMMPSの場合)

1. 全ての計算が終了後、 結果解析 | x/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log FileのSelectをクリックし、work4_LMP_NPT以下のlmp.logを選択します。
3. Liquid Phaseのgro FileのSelectをクリックし、work4_LMP_NPT以下のlmp.groを選択します。
4. Vapor Phaseのlog FileのSelectをクリックし、work7_LMP_NVT以下のlmp.logを選択します。



IX. 結果解析(Gromacsの場合)

1. 全ての計算が終了後、 結果解析 | x/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。



IX. 結果解析

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）

Chi/Solubility Parameters

Molecule A Molecule B Chi / Aij

Liquid Phase edr File :solub_param.wmpjdata#work4_GMX_NPT#gmx_mdrun.edr Select...

gro File :solub_param.wmpjdata#work4_GMX_NPT#gmx_mdrun.gro Select...

Vapor Phase edr File :solub_param.wmpjdata#work7_GMX_NVT#gmx_mdrun.edr Select...

Properties

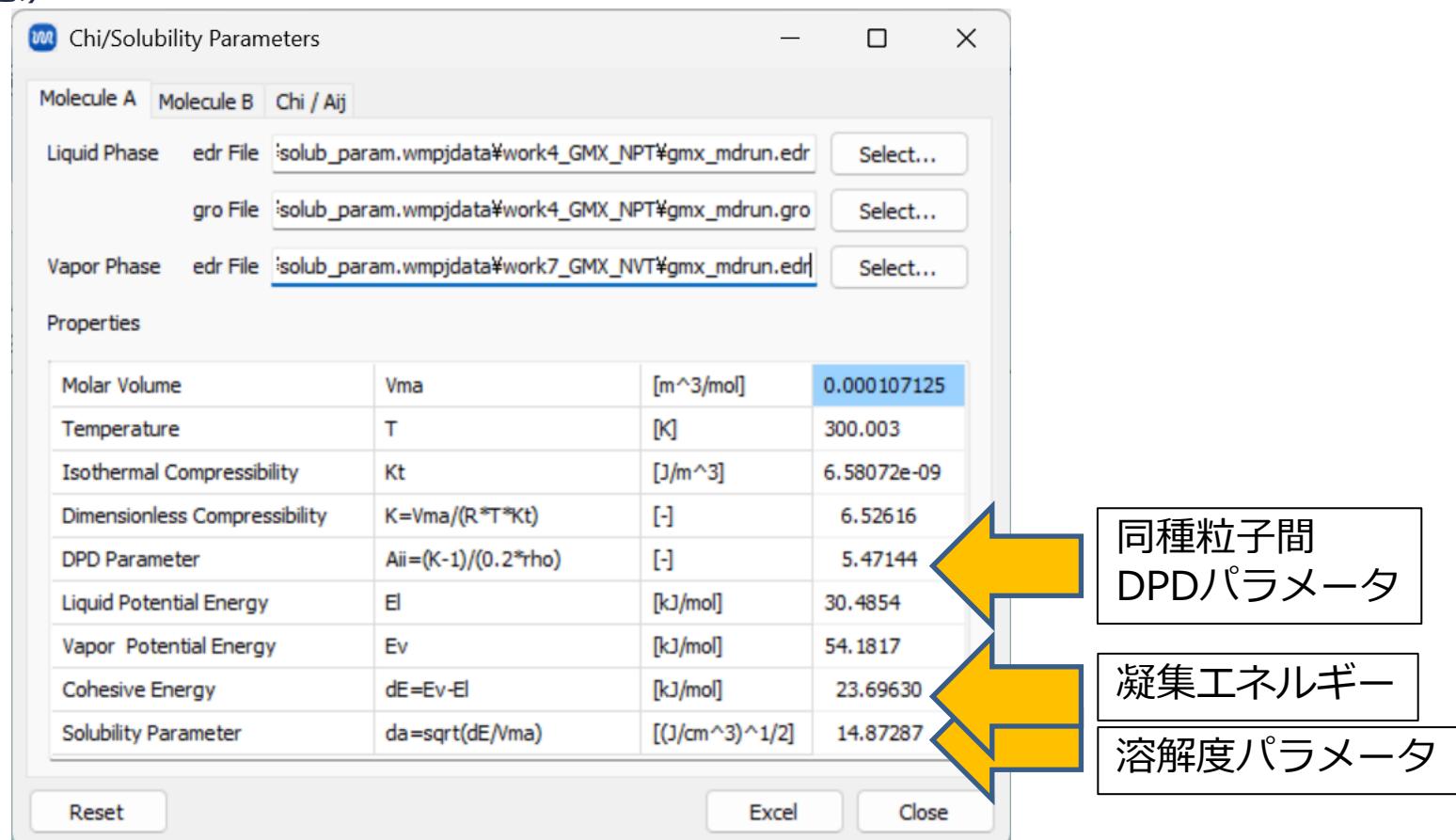
Molar Volume	Vma	[m ³ /mol]	0.000107125
Temperature	T	[K]	300.003
Isothermal Compressibility	Kt	[J/m ³]	6.58072e-09
Dimensionless Compressibility	K=Vma/(R*T*Kt)	[·]	6.52616
DPD Parameter	$A_{ii}=(K-1)/(0.2*\rho)$	[·]	5.47144
Liquid Potential Energy	E _l	[kJ/mol]	30.4854
Vapor Potential Energy	E _v	[kJ/mol]	54.1817
Cohesive Energy	dE=E _v -E _l	[kJ/mol]	23.69630
Solubility Parameter	$\delta_a=\sqrt{dE/Vma}$	[(J/cm ³) ^{1/2}]	14.87287

同種粒子間 DPDパラメータ

凝集エネルギー

溶解度パラメータ

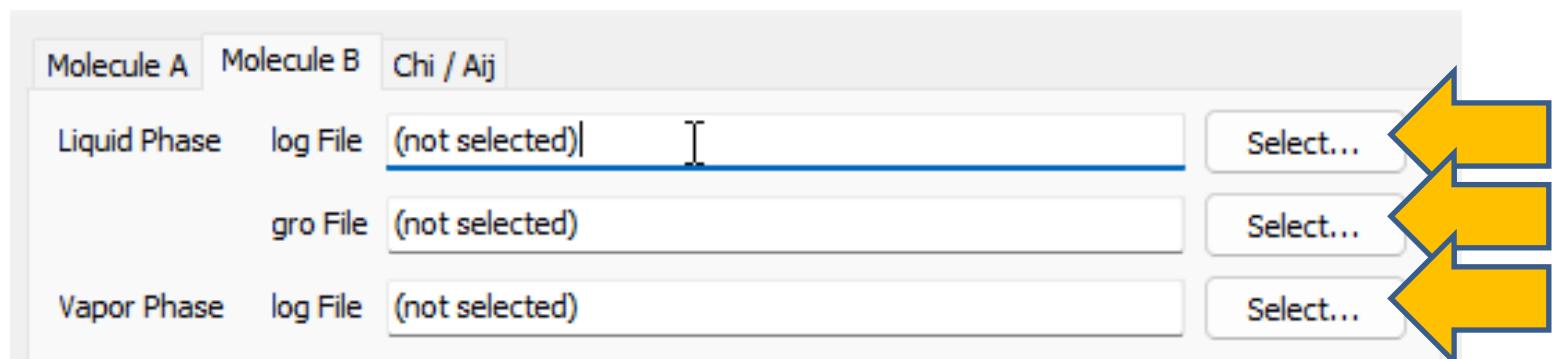
Reset Excel Close



IX. 結果解析(LAMMPSの場合)

χ およびDPDパラメータ A_{ij} を求める場合

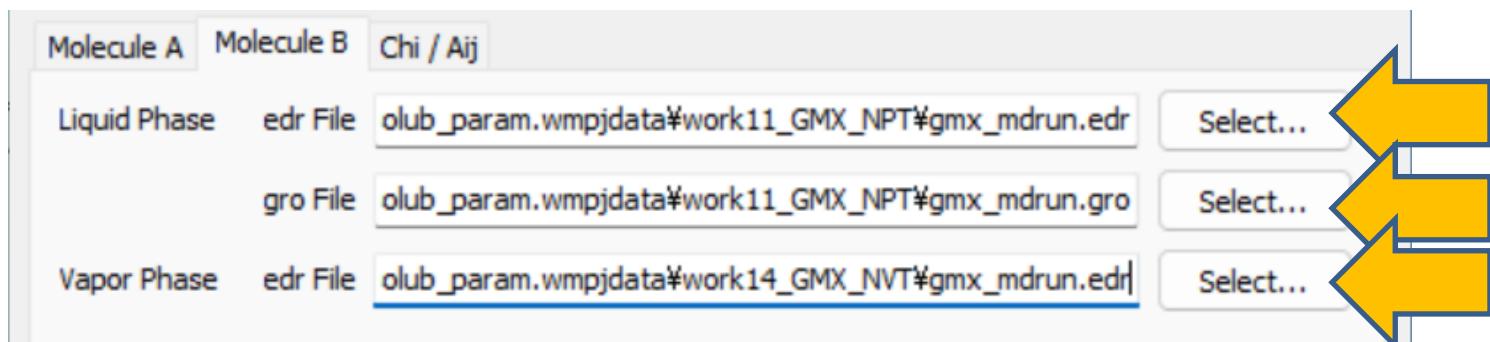
1. **Molecule Bタブ**をクリックします。
2. **Liquid Phase**の**log File**の**Select**をクリックし、
work11_LMP_NPT以下の1mp.logを選択します。
3. **Liquid Phase**の**gro File**の**Select**をクリックし、
work11_LMP_NPT以下の1mp.groを選択します。
4. **Vapor Phase**の**log File**の**Select**をクリックし、
work12_LMP_MIN以下の1mp.logを選択します。 (本書で計算した剛体モデルの水の場合は
work13以降が意味のある計算ではないためwork12を選択しますが、他の物質の場合は
work14_LMP_NVTを選択します。)



IX. 結果解析(Gromacsの場合)

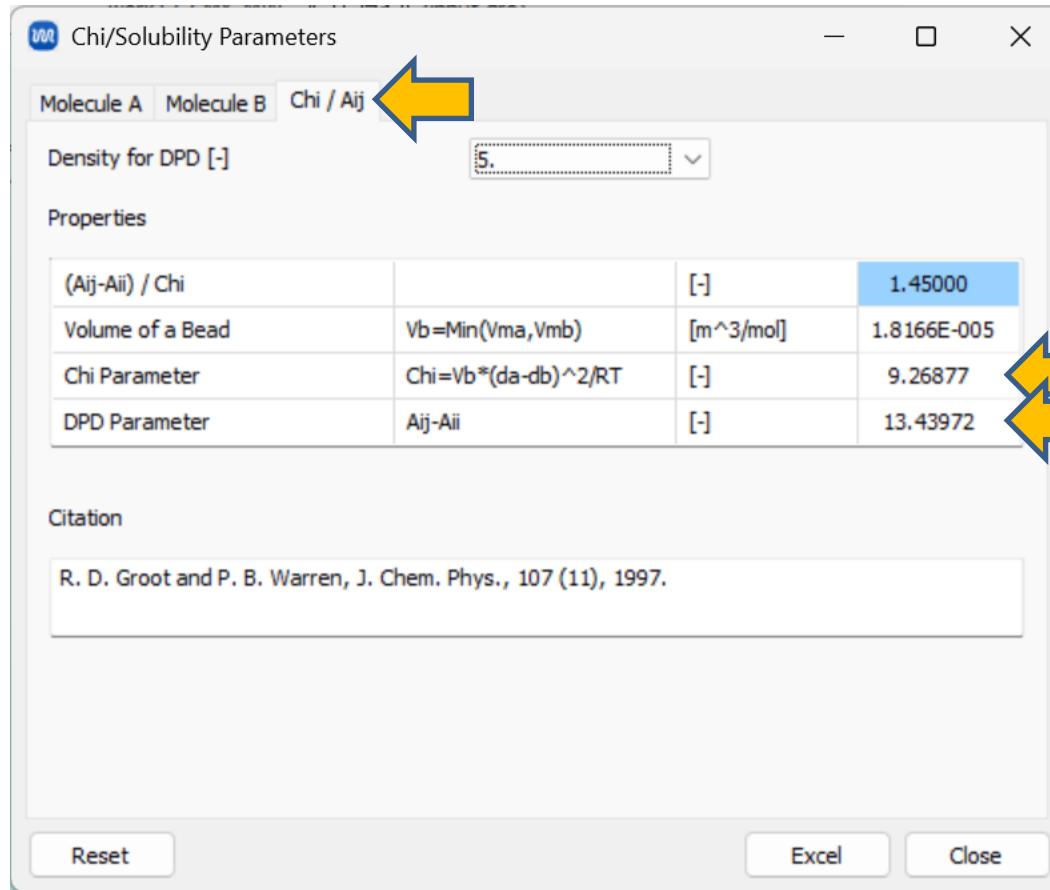
χ およびDPDパラメータ A_{ij} を求める場合

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、
work12_GMX_MIN以下のgmx_mdrun.edrを選択します。 (本書で計算した剛体モデルの水
の場合はwork13以降が異常終了するためwork12を選択しますが、他の物質の場合は
work14_GMX_NVTを選択します。)



IX. 結果解析

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。



Chi/Solubility Parameters

Molecule A Molecule B Chi / Aij

Density for DPD [-] 5.

Properties

(A _{ij} -A _{ii}) / Chi		[-]	1.45000
Volume of a Bead	V _b =Min(V _{ma} ,V _{mb})	[m ³ /mol]	1.8166E-005
Chi Parameter	Chi=V _b *(d _a -d _b) ² /RT	[-]	9.26877
DPD Parameter	A _{ij} -A _{ii}	[-]	13.43972

Citation

R. D. Groot and P. B. Warren, J. Chem. Phys., 107 (11), 1997.

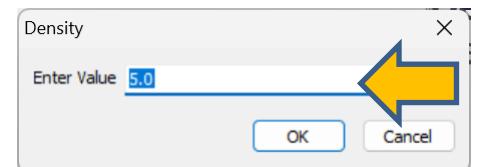
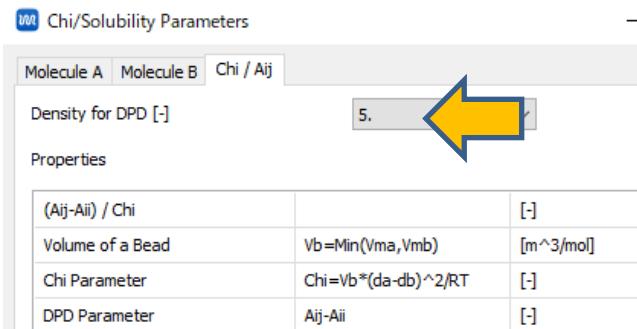
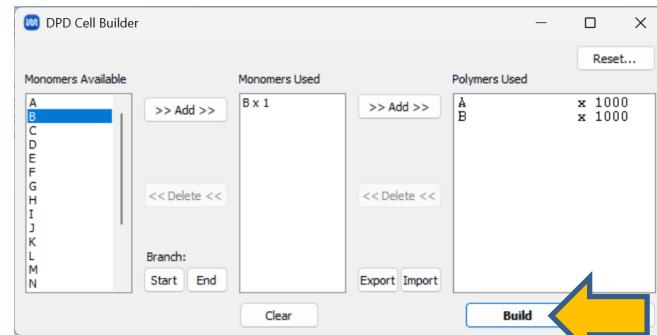
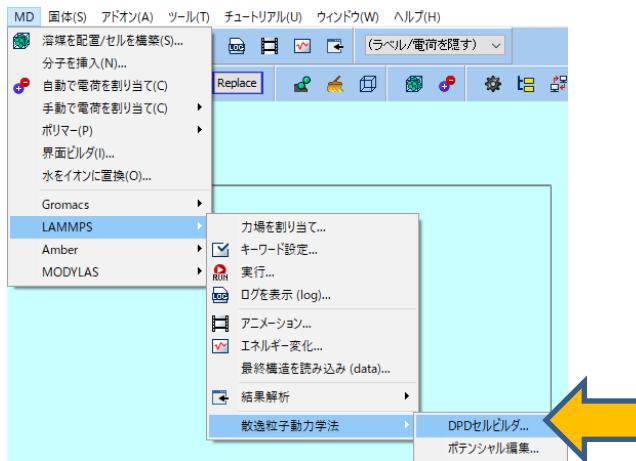
Reset Excel Close

χパラメータ

異種粒子間
DPDパラメータ

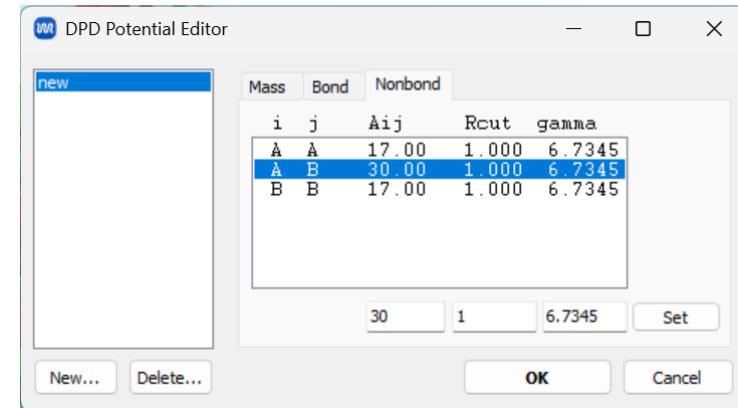
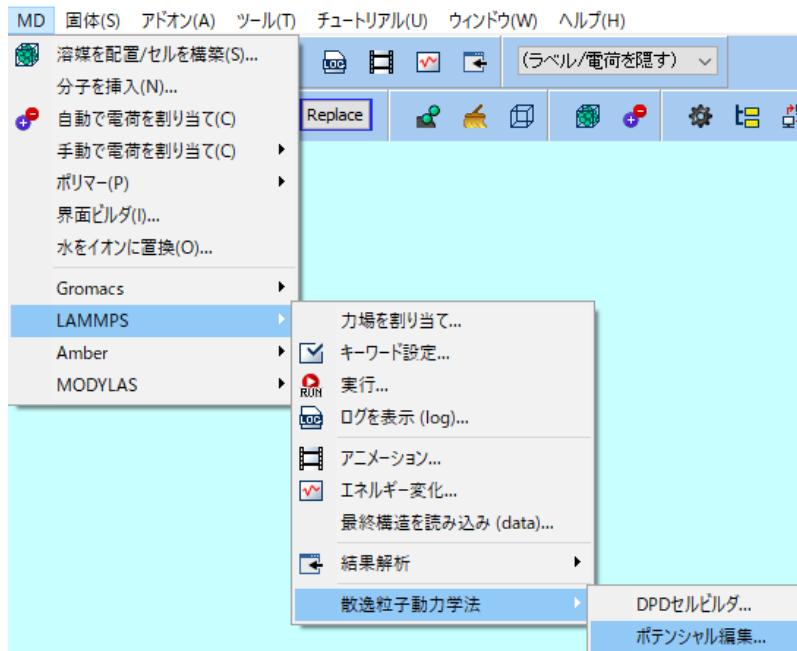
補足 DPD計算の設定

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 Parameters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。



補足 DPD計算の設定

1. 次に、MD | LAMMPS | 散逸粒子動力学 | ポテンシャル編集のNonbondタブにおいて、A-A間やB-B間の 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 ($A_{ij} - A_{ii}$) 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にH₂O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。



The screenshot shows the 'Winmostar User Manual' website. The main content area is titled 'Winmostar™ ユーザマニュアル' and contains a table of contents. The table of contents includes:

- はじめに
- インストール方法
- 画面の使用・操作方法
- 基本的な操作の流れ
- 初期構造の作成方法
- 各種メニュー・ウィンドウ
- リモート・タブ
- アドオン
- その他のピック
- 戻りの不具合
- よくある質問・トラブル・チューティング

Below the table of contents, there is a note about the manual being a general guide to Winmostar's features and operations. It also includes a note about the 'よくある質問' (FAQ) section being updated periodically.



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