

 winmostar チュートリアル

# Towhee

## 単成分気液平衡GEMC

V11.6.0

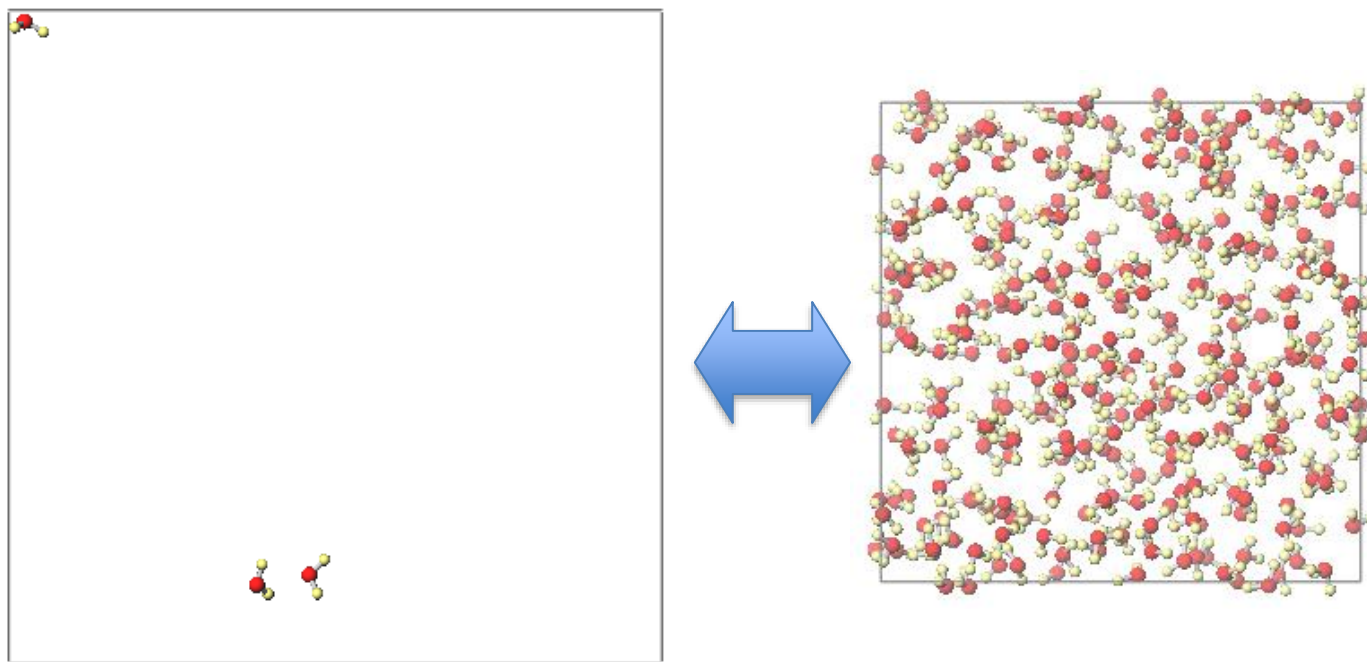
2023年10月2日 株式会社クロスアビリティ

# 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

- 本チュートリアルの実施にはWinmostar V11プロフェッショナル版エリートが必要です。
- 水分子(SPC/E)の気液平衡のギブスアンサンブルモンテカルロ（GEMC）法計算を実施し、気液平衡密度、蒸気圧の算出を行います。



注意：

- GEMCではギブスの相律に基づいて適切に成分数と指定する示量変数の数を設定する必要があります。本書の方法では単成分系にのみ適用できます。

# 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。

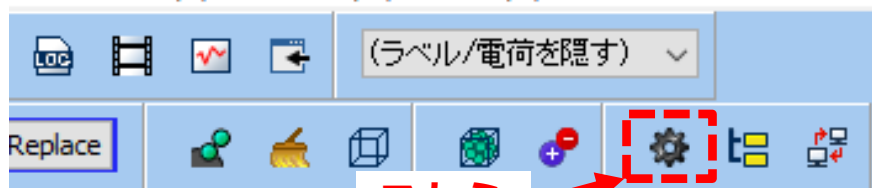
**ビルド済みのcygwin\_wmをインストールする場合 (推奨)** ← **こちら**

[cygwin\\_wmをビルドする場合 \(非推奨、上級者向け\)](#)

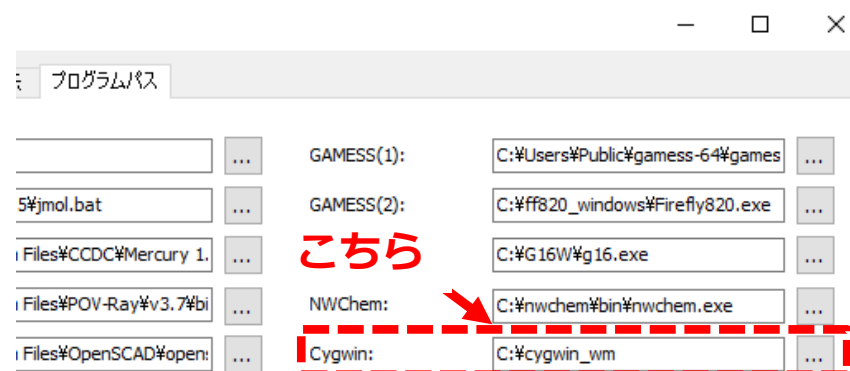
[Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合 \(ベータ版\)](#)

- 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。

チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)

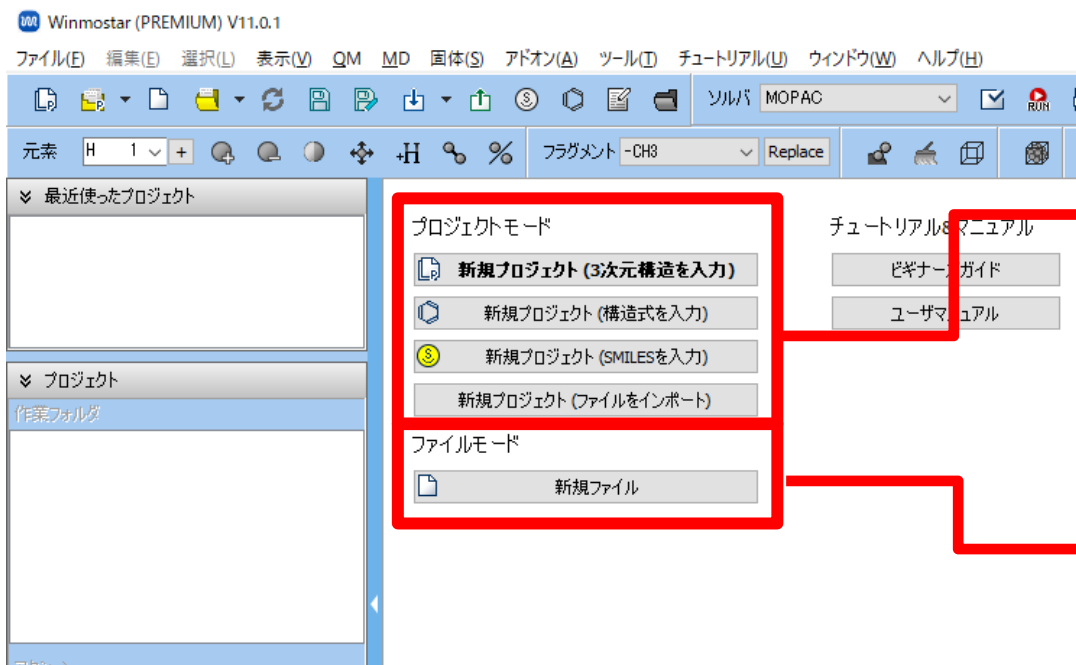


こちら



# 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。



## プロジェクトモード **V11新機能**

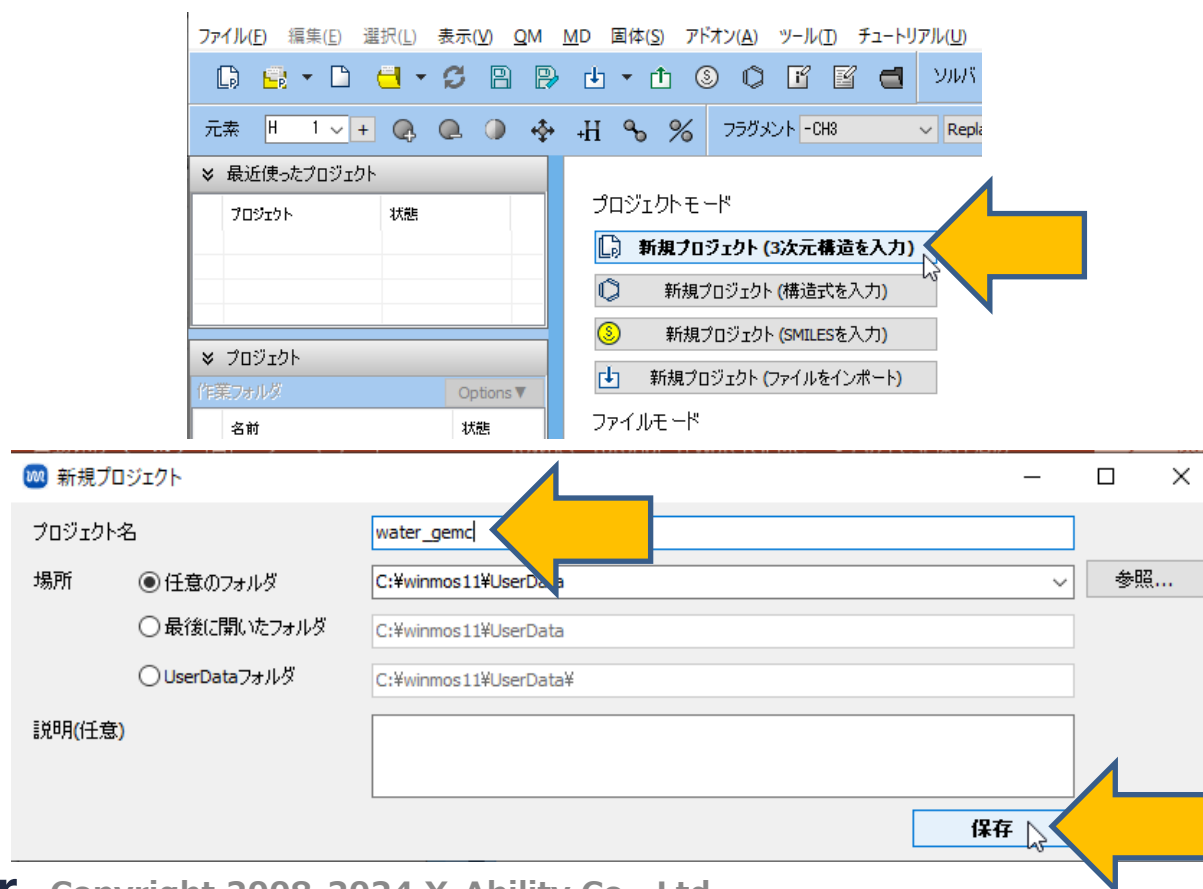
ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。  
基本的にこのモードを推奨します。

## 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 ①液相の作成


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「water\_gemc」と入力し**保存**をクリックします。

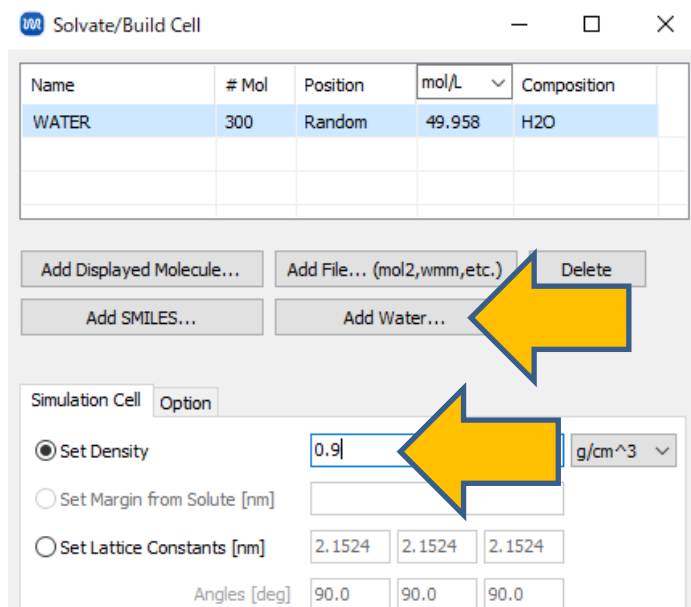


# I. 系のモデリング ①液相の作成

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。

ここでは内部に登録されている水分子の構造を用います。

1.  **溶媒を配置/セルを構築**ボタンをクリックします。
2. **Add Water**ボタンをクリックし、出現したダイアログで「**300**」と入力し**OK**ボタンをクリックします。
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。



Name	# Mol	Position	mol/L	Composition
WATER	300	Random	49.958	H2O

Buttons: Add Displayed Molecule..., Add File... (mol2, wmm, etc.), Delete, Add SMILES..., Add Water...

Simulation Cell Option

☒ Set Density: 0.9 g/cm<sup>3</sup>

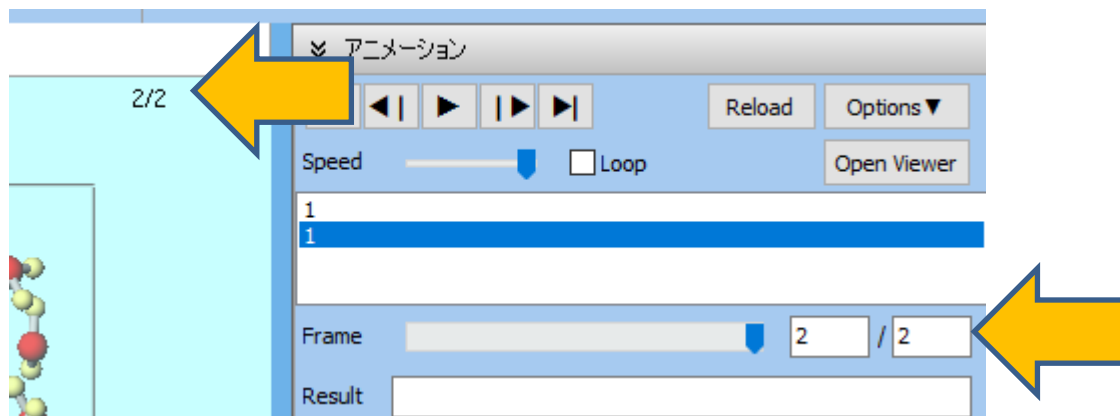
☐ Set Margin from Solute [nm]:

☐ Set Lattice Constants [nm]: 2.1524 2.1524 2.1524

Angles [deg]: 90.0 90.0 90.0


# I. 系のモデリング ②気相の作成

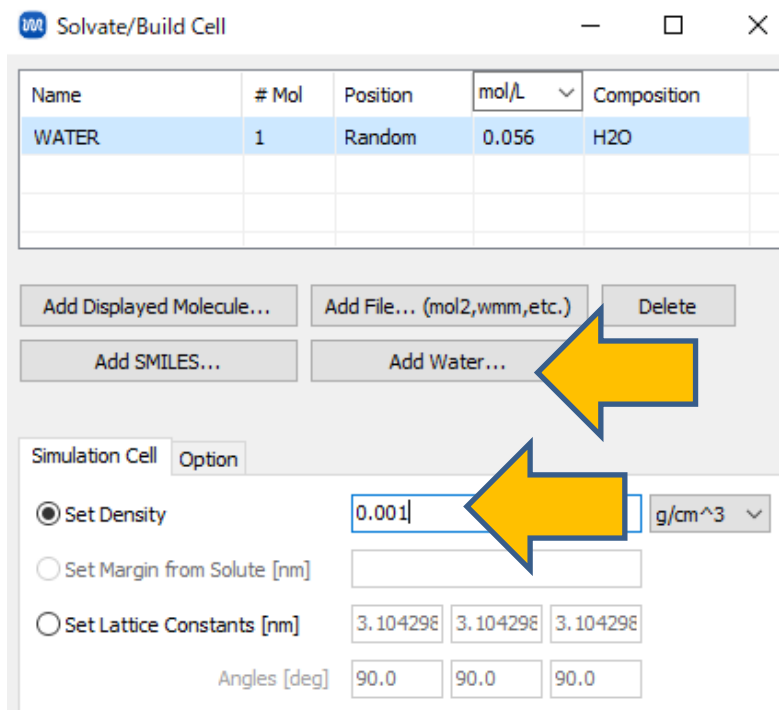
1. ツール | アニメーション | アニメーションに切り替えをクリックし、「Are you sure you want to switch to animation?…」と表示されたら**はい**をクリックします。
2. ツール | アニメーション | フレームを追加をクリックし「Appended a new frame」と表示されたら**OK**をクリックします。
3. 分子表示エリア右上およびアニメーション操作エリアの**Frame**で「2/2」と表示されている（2番目のフレームが選ばれている）のを確認します。





# I. 系のモデリング ②気相の作成

1.  溶媒を配置/セルを構築ボタンをクリックします。
2. **Add Water**ボタンをクリックし、出現したダイアログで「1」と入力し**OK**ボタンをクリックします。
3. **Set Density**に「0.001」と入力し**Build**をクリックします。「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。



Name	# Mol	Position	mol/L	Composition
WATER	1	Random	0.056	H2O

Buttons: Add Displayed Molecule..., Add File... (mol2, wmm, etc.), Delete, Add SMILES..., Add Water...

Simulation Cell Option

☒ Set Density 0.001 g/cm<sup>3</sup>

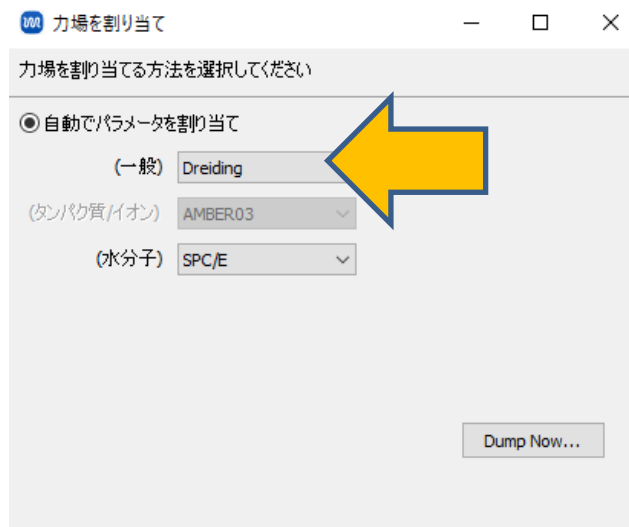
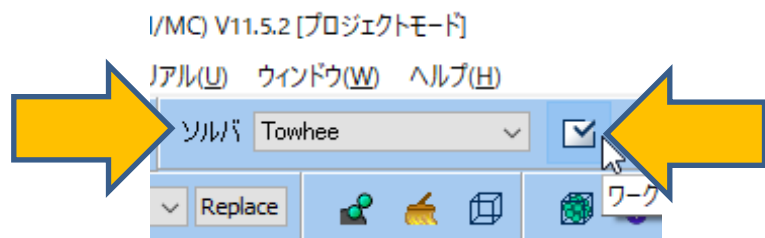
☐ Set Margin from Solute [nm]

☐ Set Lattice Constants [nm] 3.104298 3.104298 3.104298

Angles [deg] 90.0 90.0 90.0

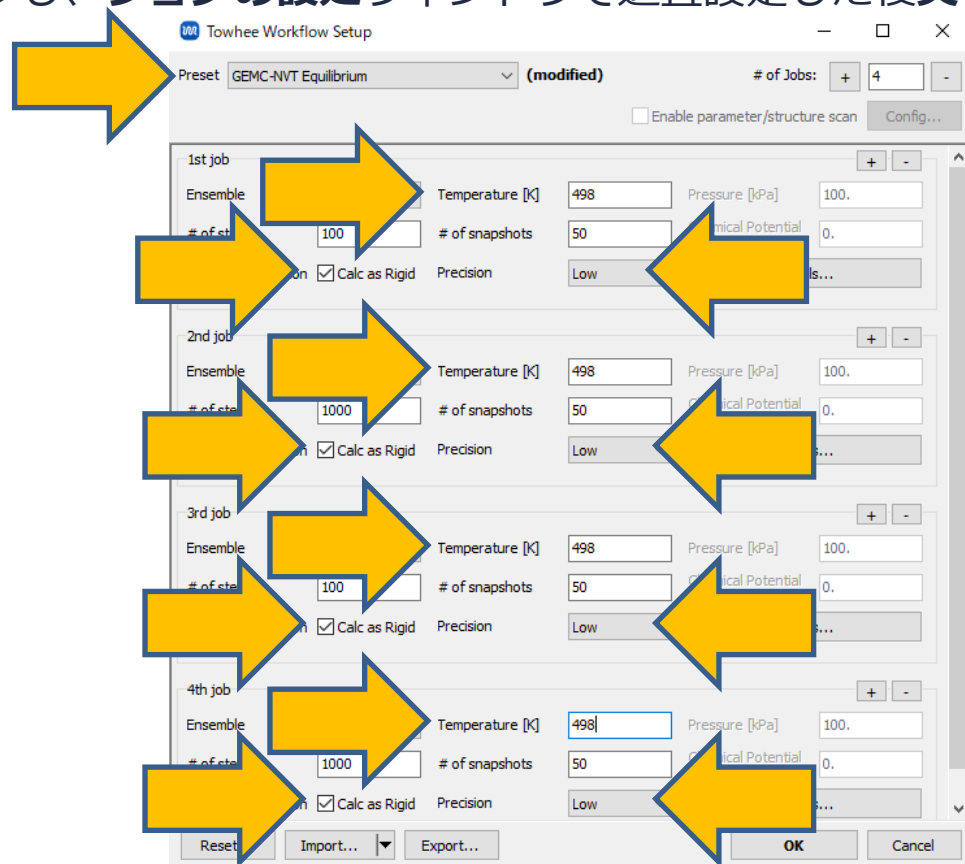
## II. 計算の実行 ①力場の割り当て

1. ツールバーの**ソルバ**から**Towhee**を選択します。
2. ☒ **(ワークフロー設定)** をクリックします。
3. 「Do you want to configure for GCMC or Gibbs ensemble for first and second frames?」と表示されたら**はい**をクリックします。
4. **力場を割り当て**ウインドウが開いたら、(一般)で「Dreiding」を選択し、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。
  - 本書の計算ではH2Oしか計算しないので実際には**(一般)**の選択肢は効果をなさないが、V11.6.0時点ではDreiding, UFFしかサポートされていないためDreidingを選択



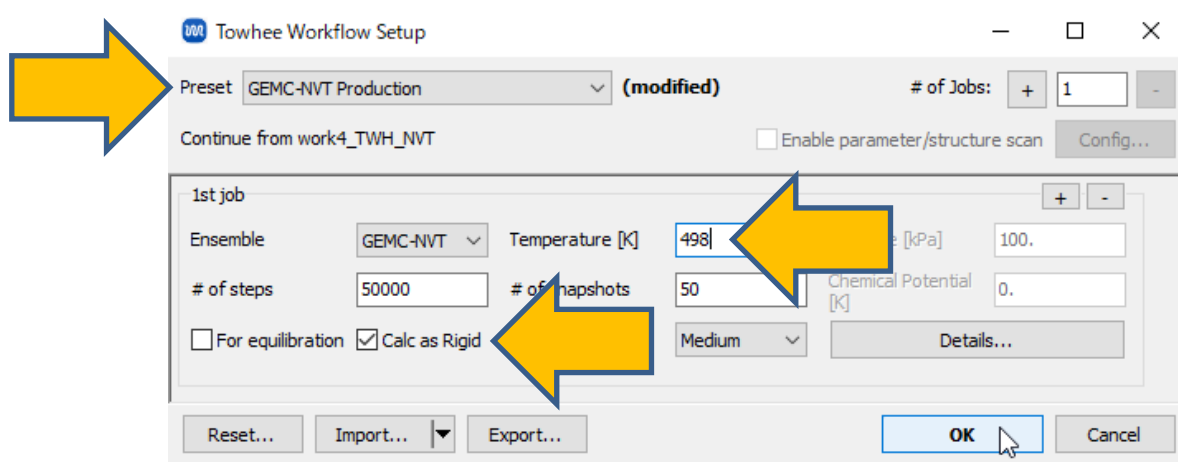
## II. 計算の実行 ②平衡化計算

1. **Preset**で「GEMC-NVT Equilibration」を選択し、**1st、2nd、3rd、4th job**全てについて、**Temperature**を「498」に変更し、**Calc as Rigid**にチェックを入れ、**Precision**を「Low」に変更します。
2. **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。



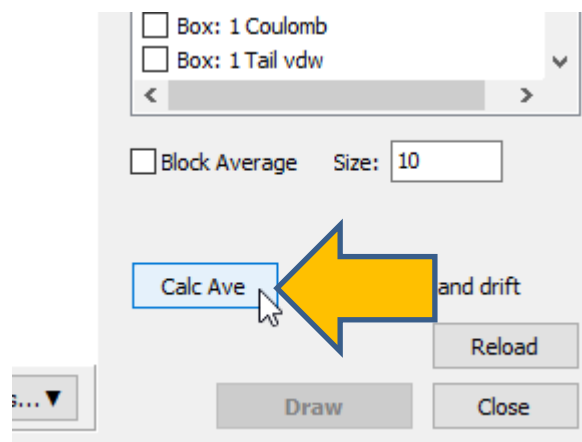
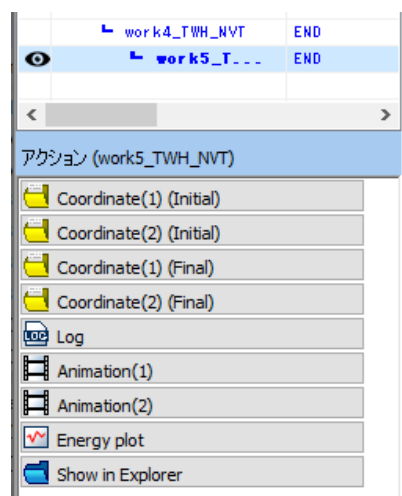
## II. 計算の実行 ③本計算

1. work1\_TWH\_NVTからwork4\_TWH\_NVTまでの4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. work4\_TWH\_NVTを選択し**OK**をクリックします。
4. **Preset**で「GEMC-NVT Production」を選択し、**Temperature**を「498」に変更し、**Calc as Rigid**にチェックを入れ、**# of steps**を「50000」に変更します。
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。



## II. 結果解析

1. work5\_TWHLMP\_NVTの作業フォルダの**状態**が**END**または**END(-)**に変化したら、「work5\_TWH\_NVT」をクリックします。
2. **アクション**で**Coordinate(1) (Initial)**、**Coordinate(1) (Final)**または**Animation(1)**をクリックすると、1相目（液相）の始状態、終状態、アニメーションを確認できます。同様に**Coordinate(2) (Initial)**、**Coordinate(2) (Final)**または**Animation(2)**をクリックすると、2相目（気相）の始状態、終状態、アニメーションを確認できます。
3. **アクション**で**Energy plot**をクリックすると、各項目の変化を可視化できます。**Calc Ave**ボタンをクリックすると各項目の平均値と標準誤差を取得できます。液相の平衡密度は「Box: 1 Specific density」、気相の平衡密度は「Box: 2 Specific density」、蒸気圧は「Box: 1 (または2) Virial Pressure」で確認することができます。



energy\_ave.log - メモ帳

# data	Average	Standard error
Box: 1 Volume [A^3]	10965.580346599984000	5.796586494155409
Box: 1 V^2 [A^6]	120415119.379399980000000	128155.502382302540000
Box: 1 Specific density [g/ml]	0.797790373025999	0.000360302244034
Box: 1 Virial Pressure [kPa]	1036.409676207599400	971.970379999392380
Box: 1 Total Classical	-1220385.320000003400000	382.935561005620030
Box: 1 Inter vdw	183099.275662000000000	185.768431148266270
Box: 1 Angle	822.222773965996930	0.257449710517433
Box: 1 Torsion	0.000000000000000	0.000000000000000
Box: 1 Intra vdw	0.000000000000000	0.000000000000000

# 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、[Winmostar導入講習会](#)、[Winmostar基礎講習会](#)、または[個別講習会](#)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