

 winmostar チュートリアル

Gromacs

界面張力

V10.4.3

2021年4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 V10の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方は[ビギナーズガイド](#)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。

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。

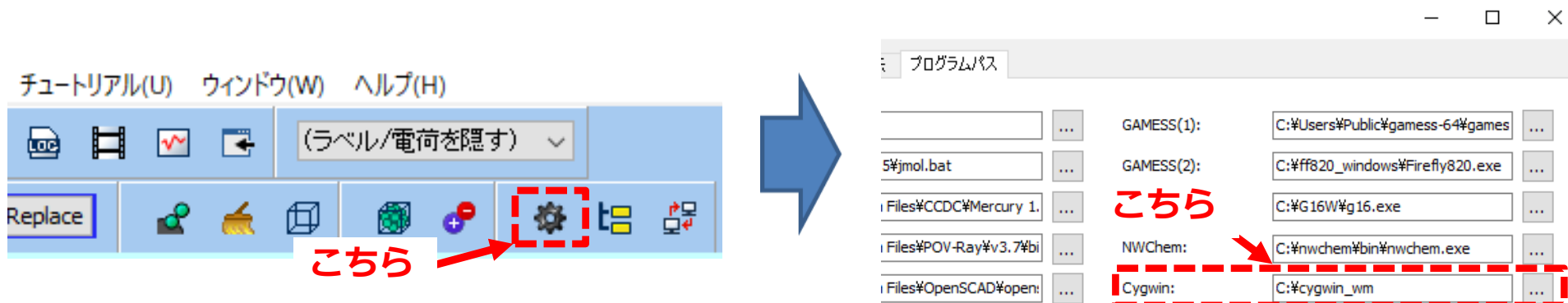
(6) 以下のいずれかのリンク先の手順でWinmostar用のCygwin環境 (cygwin_wmと呼びます) を構築します。

[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 \(非推奨、上級者向け\)](#)

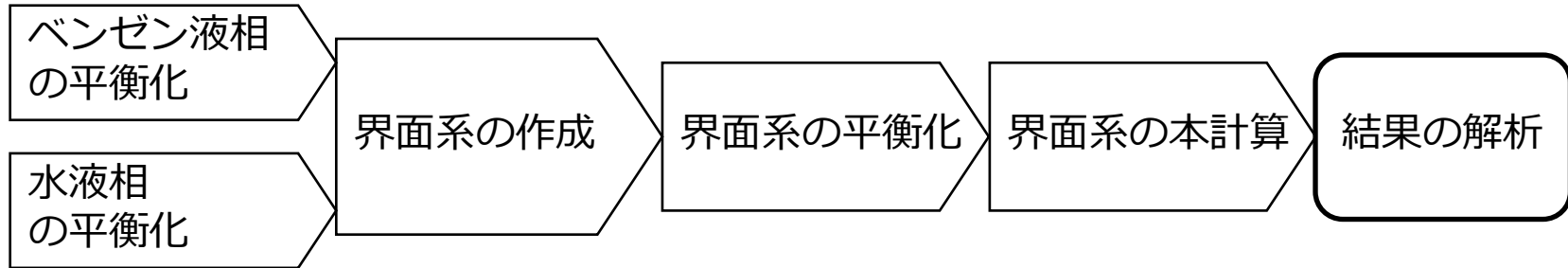
[Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合 \(ベータ版\)](#)

- 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。



概要

- 水-ベンゼンの液-液界面間の密度分布、平衡密度、界面張力を計算します。



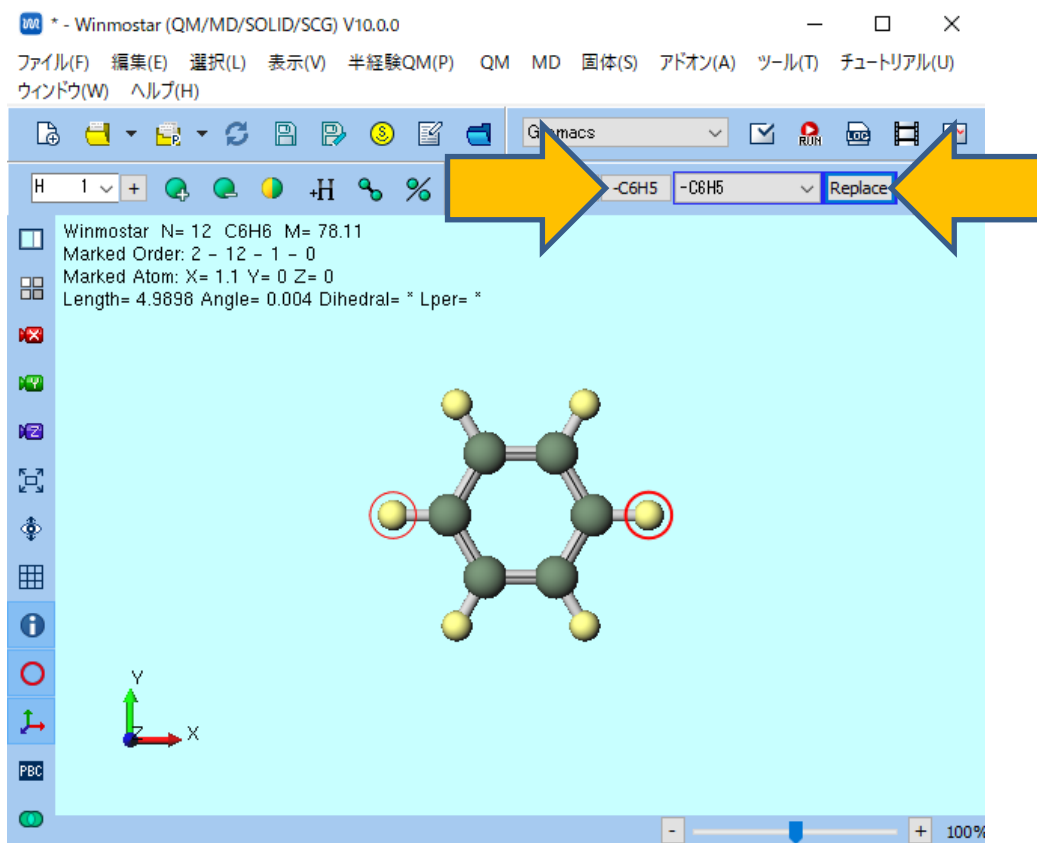
注意点：

- 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。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。

I. 成分1の液相のMD計算（モデリング）

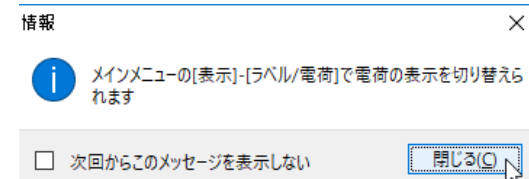
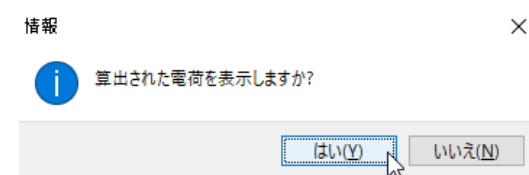
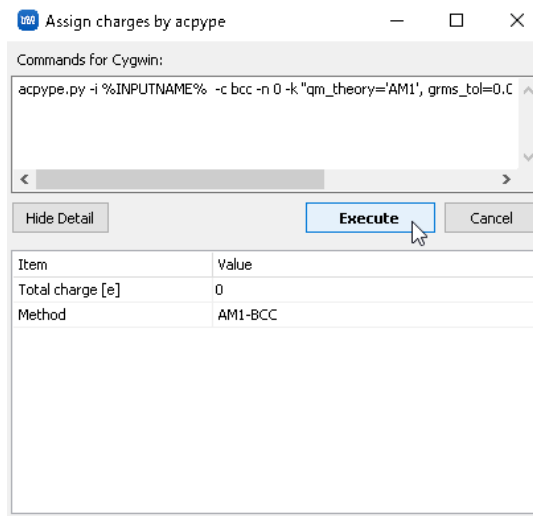
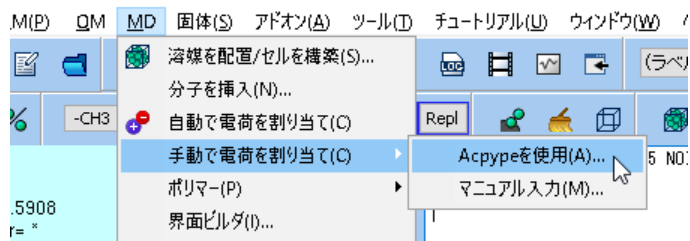
ここでは成分1をベンゼンとする。

1. -C6H5ボタンをクリックする。
2. Replaceボタンをクリックすることでベンゼンが作成される。



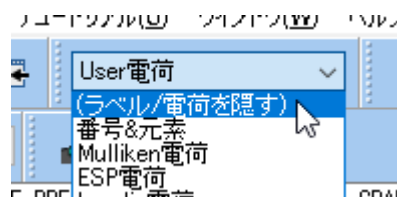
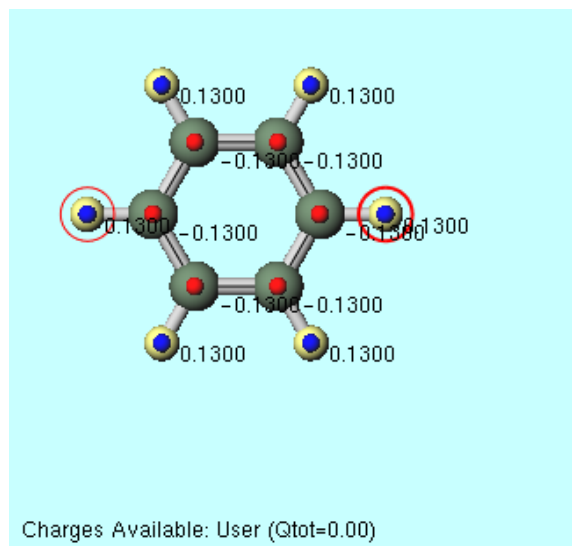
I. 成分1の液相のMD計算（モデリング）

1. MDメニュー | 手動で電荷を割り当て | Acpypeを使用をクリックする。
2. Assign charges by acpypeウィンドウでExecuteボタンを押す。
3. 情報ダイアログが2回出現したらいずれもはいボタンを押す。



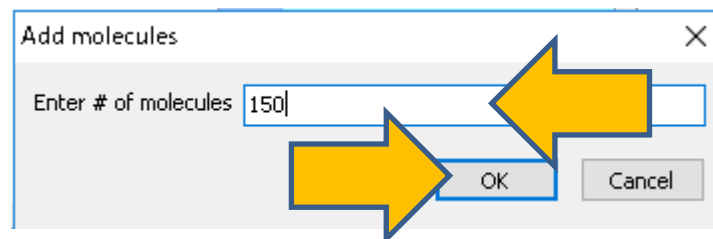
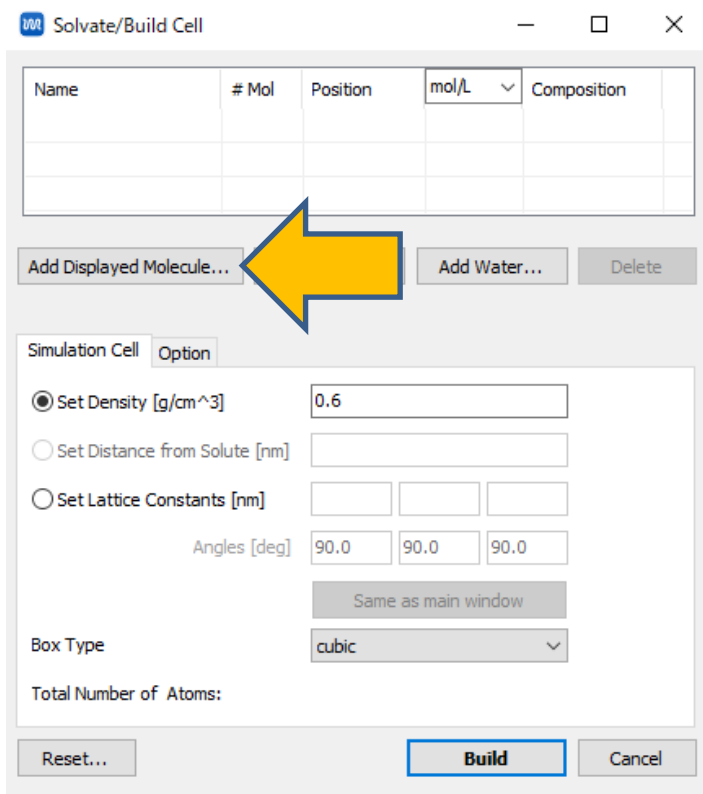
I. 成分1の液相のMD計算（モデリング）

1. 分子表示エリア下部に**Charges Avail: User**と表示され、割り当てられた電荷が表示されることを確認する。
2. ラベル/電荷プルダウンメニューで**(ラベル/電荷を隠す)**を選択し、電荷を非表示にする。



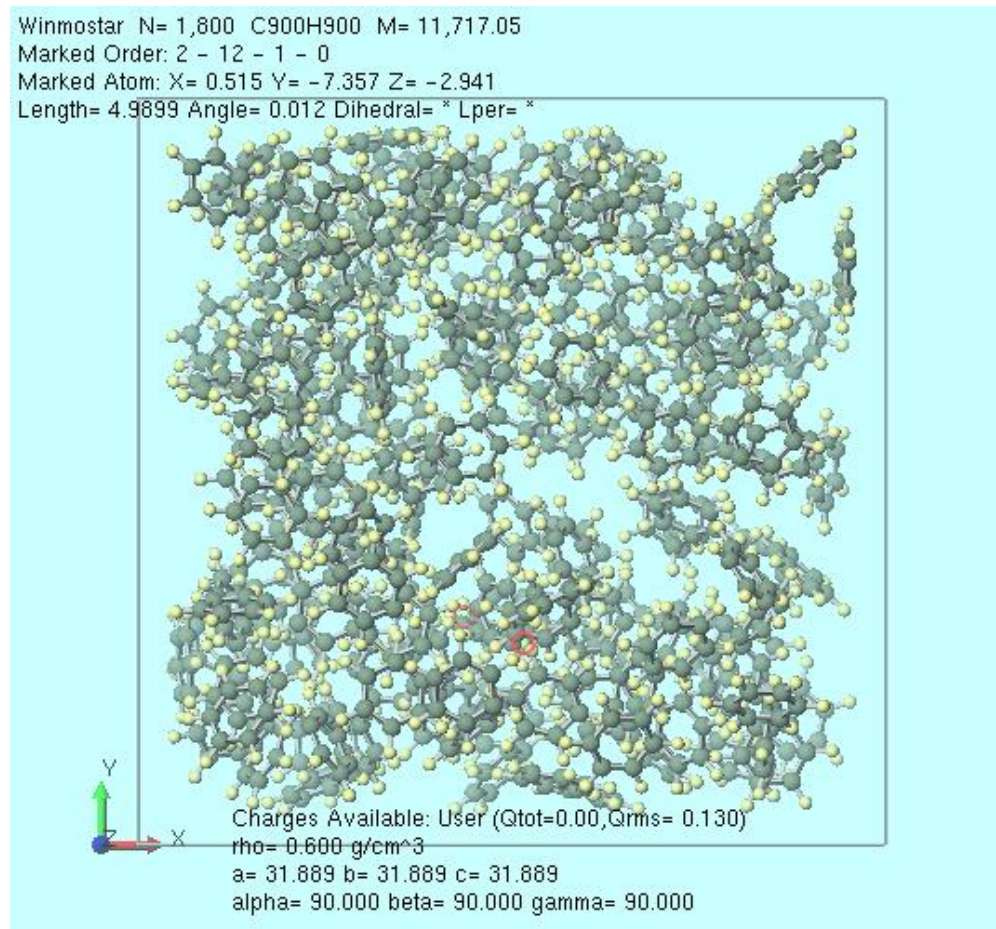
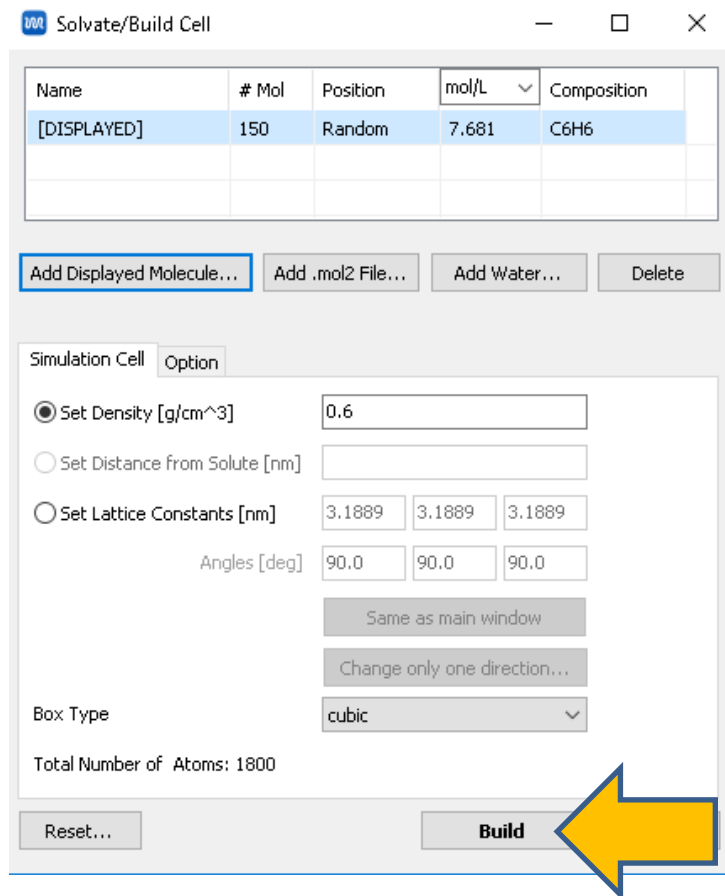
I. 成分1の液相のMD計算（系の作成）

1.  溶媒を配置/セルを構築をクリックする。
2. Add Displayed Moleculeをクリックし、Enter # of moleculesに150と入力しOKをクリックする。



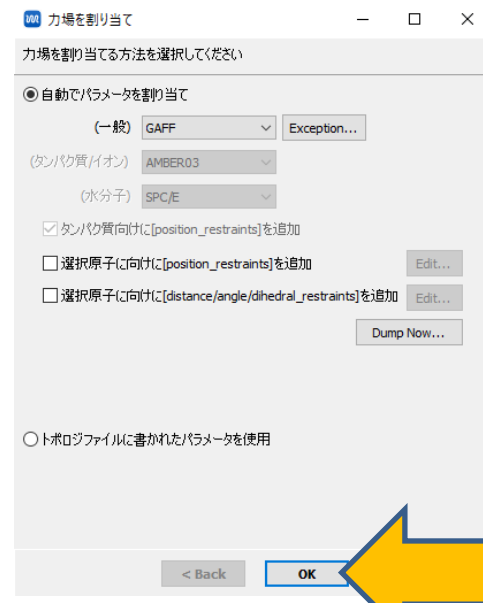
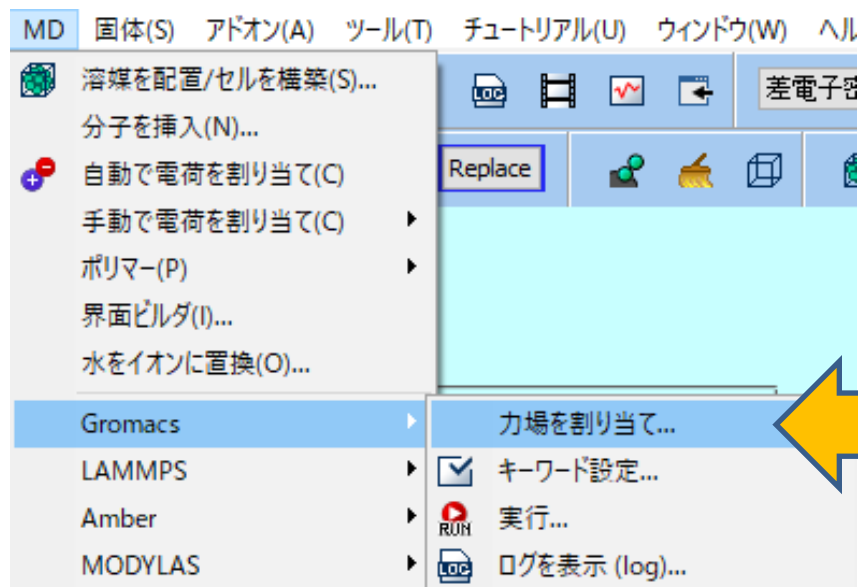
I. 成分1の液相のMD計算（系の作成）

1. Buildをクリックすると右図のような系が作成される。



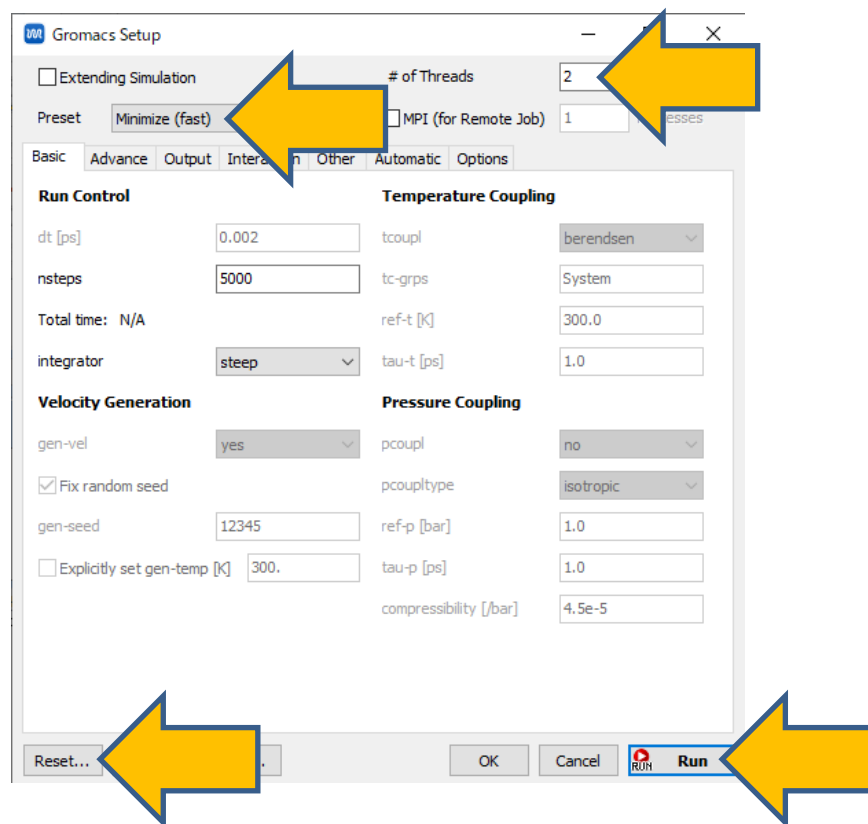
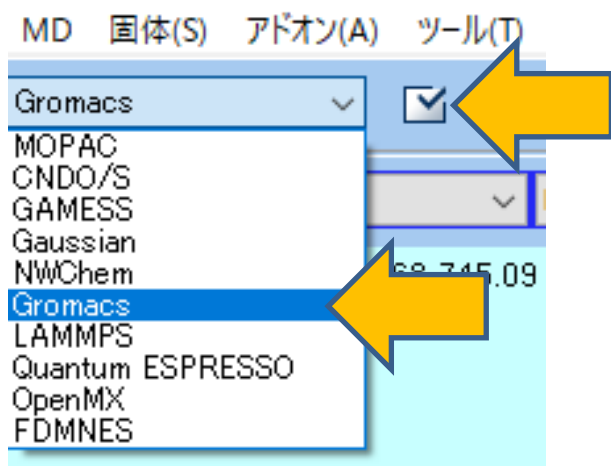
I. 成分1の液相のMD計算（平衡化1）

1. MD | Gromacs | カ場を割り当てをクリックする。
2. カ場を割り当てウィンドウでOKをクリックすると、設定したカ場が割り当てられる。



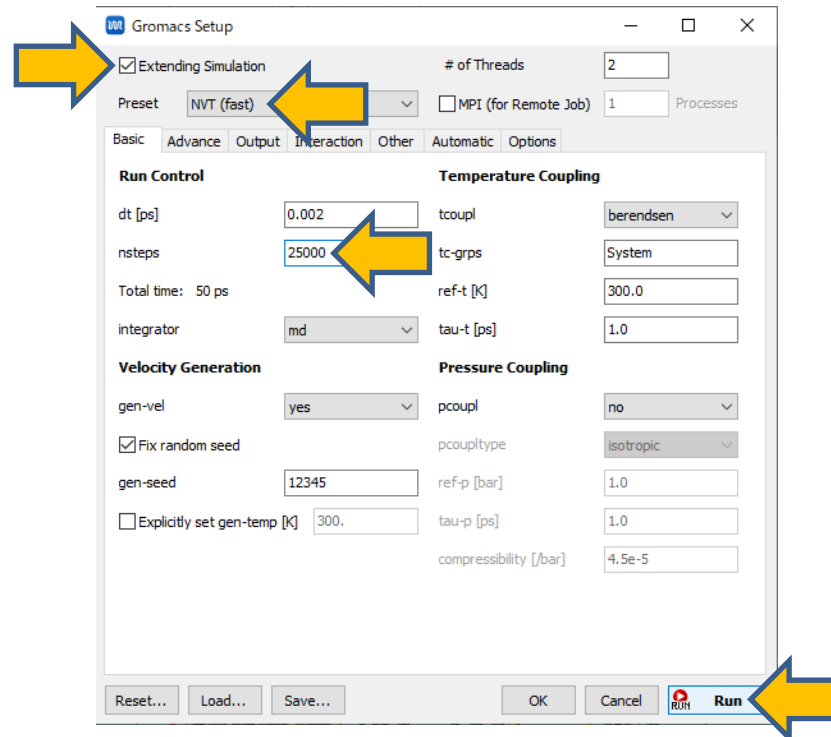
I. 成分1の液相のMD計算（平衡化1）

1. ソルバー一覧から**Gromacs**を選択し、 **キーワード設定**をクリックする。
2. **Reset**をクリックし、**# of Threads**に並列数を指定する。
3. **Preset**に**Minimize (fast)**を指定する。
4. **Run**をクリックする。ファイル名を**benzene.gro**, **benzene.top**として保存する。



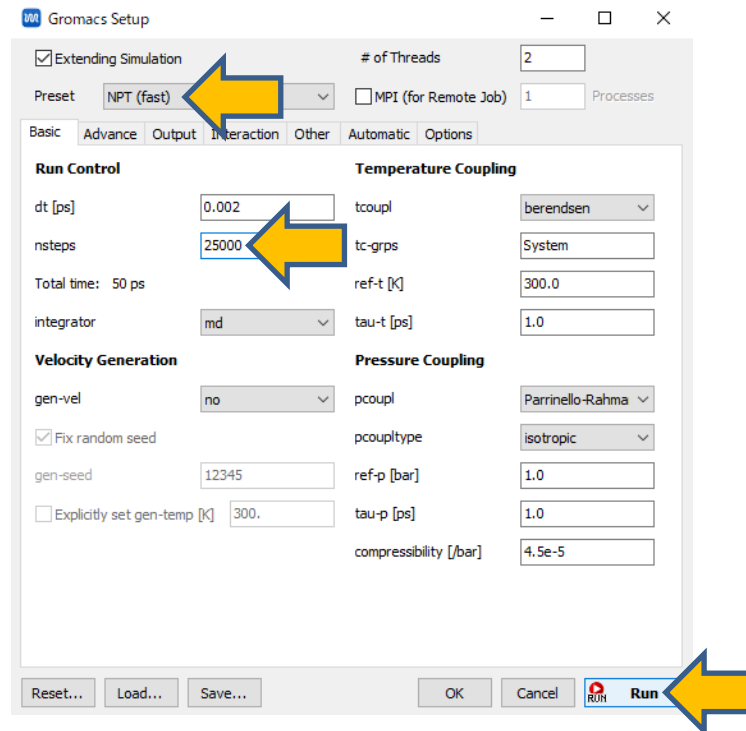
I. 成分1の液相のMD計算（平衡化2）

1. 計算終了後、 キーワード設定をクリックする。
2. Extending Simulationにチェックを入れる。
3. PresetにNVT (fast)を指定する。
4. Basicタブにてnstepsを25000に変更する。
5. Runをクリックする。



I. 成分1の液相のMD計算（平衡化3）

1. 計算終了後、 **キーワード設定**をクリックする。
2. **Preset**に**NPT (fast)**を指定する。
3. **Basic**タブにて**nsteps**を**25000**に変更する。
4. **Run**をクリックする。




I. 成分1の液相のMD計算（座標の編集）

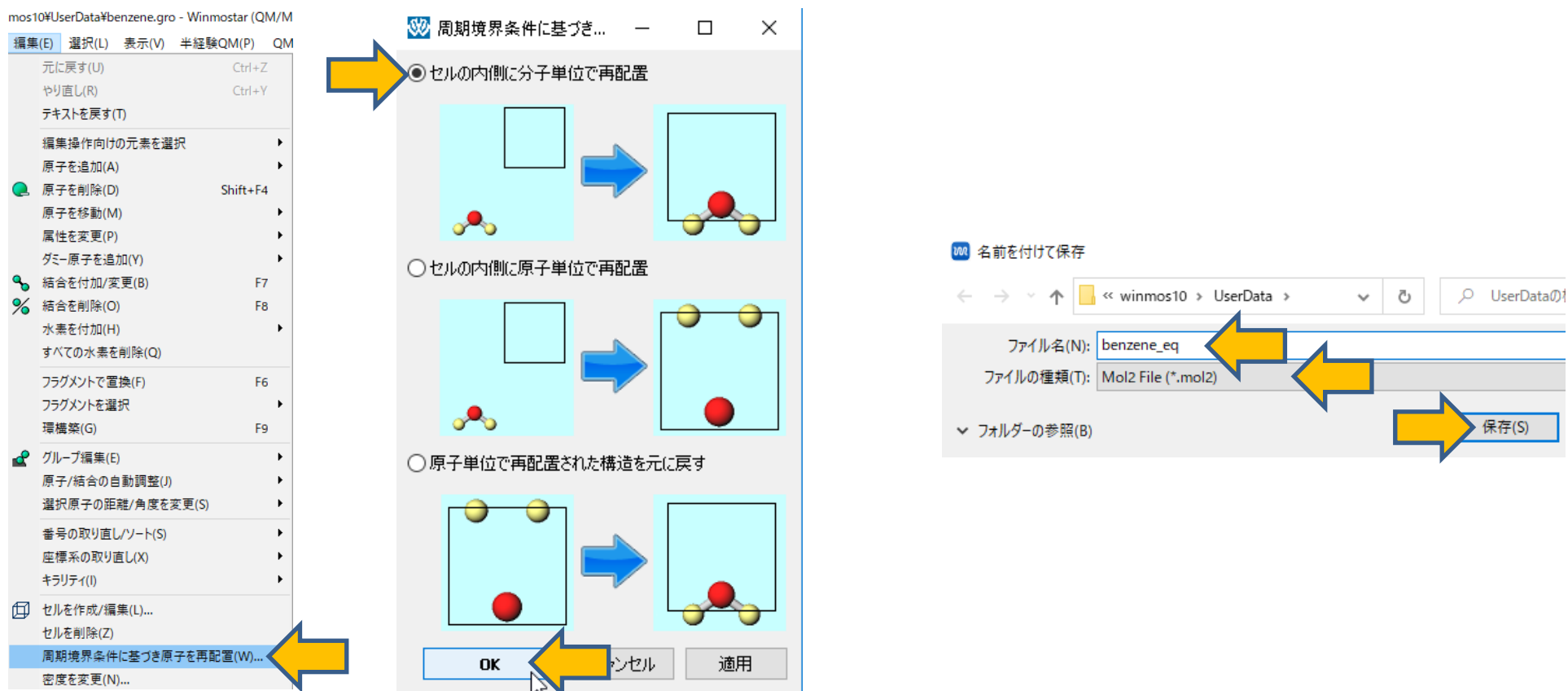
1. MD | Gromacs | 最終構造を読み込み (gro)をクリックする。
2. デフォルトで選択されるファイルを選択する。
3. 表示 | 周期境界条件の表現形式 | 再配置しないを選択する。

The screenshot illustrates the steps to load a Gromacs coordinate file and configure the periodic boundary conditions (PBC) display. It is divided into three main sections:

- File Selection:** A file browser window shows two files: `gmx_tmp_mdrun.gro` and `input.gro`, both of type "GRO ファイル" and size "122 KB". The file name field is set to `gmx_tmp_mdrun.gro` and the file type is `Gromacs coordinate (*.gro)`. A yellow arrow points to the "開く(O)" (Open) button.
- Main Menu:** The "表示(V)" (View) menu is open, showing various options. The "PBC 周期境界条件の表現形式(W)..." (PBC Periodic Boundary Conditions Display Form...) option is highlighted with a yellow arrow.
- PBC Display Configuration:** A dialog box titled "周期境界条件の表現形式..." is shown. It contains three radio button options:
 - 再配置しない (Do not reconfigure) - A yellow arrow points to this option.
 - セルの内側に分子単位で再配置 (Reconfigure in molecular units inside the cell)
 - セルの内側に原子単位で再配置 (Reconfigure in atomic units inside the cell)Each option is accompanied by a visual diagram showing a water molecule (red and white spheres) and a yellow sphere within a light blue rectangular cell. A blue arrow indicates the transition from the first option to the second, and another blue arrow indicates the transition from the second to the third. A "Close" button is at the bottom right.


I. 成分1の液相のMD計算（座標の編集）

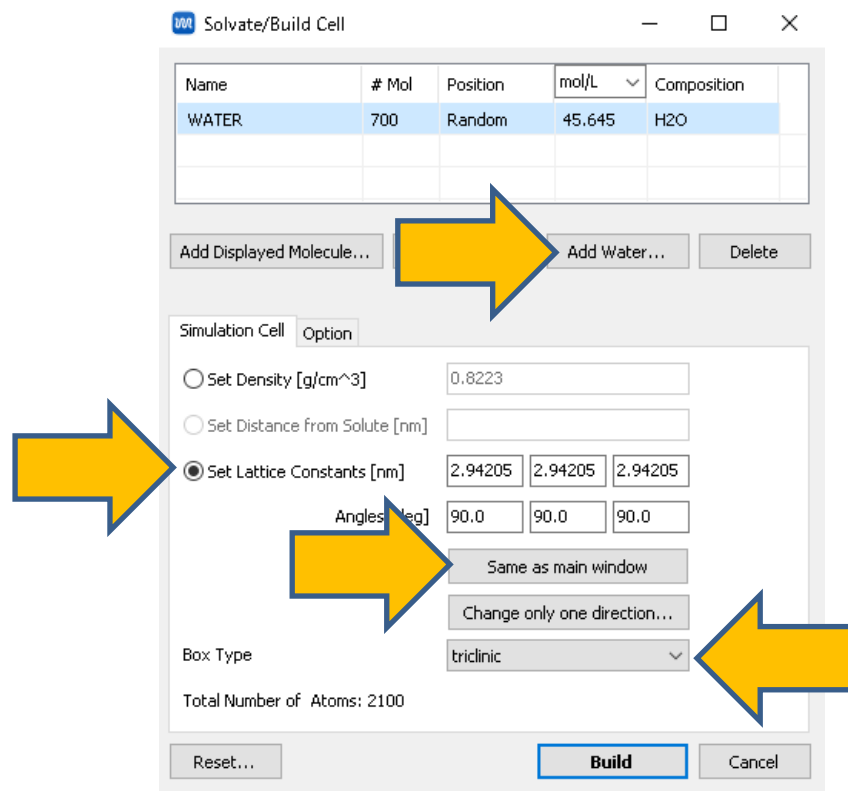
1. 編集 | 周期境界条件に基づき原子を再配置をクリックする。
2. セルの内側に分子単位で再配置を選択し、OKをクリックする。
3.  名前を付けて保存をクリックし、benzene_eq.mol2として保存する。



The screenshot illustrates the process of editing the coordinates of component 1 in the liquid phase. It shows the Winmostar interface with the '編集(E)' menu open, highlighting the '周期境界条件に基づき原子を再配置(W)...' option. The '周期境界条件に基づき...' dialog box is displayed, showing three options for reconfiguration: 'セルの内側に分子単位で再配置' (selected), 'セルの内側に原子単位で再配置', and '原子単位で再配置された構造を元に戻す'. The 'OK' button is highlighted. To the right, the '名前を付けて保存' dialog box shows the file name 'benzene_eq' and the file type 'Mol2 File (*.mol2)', with the '保存(S)' button highlighted.

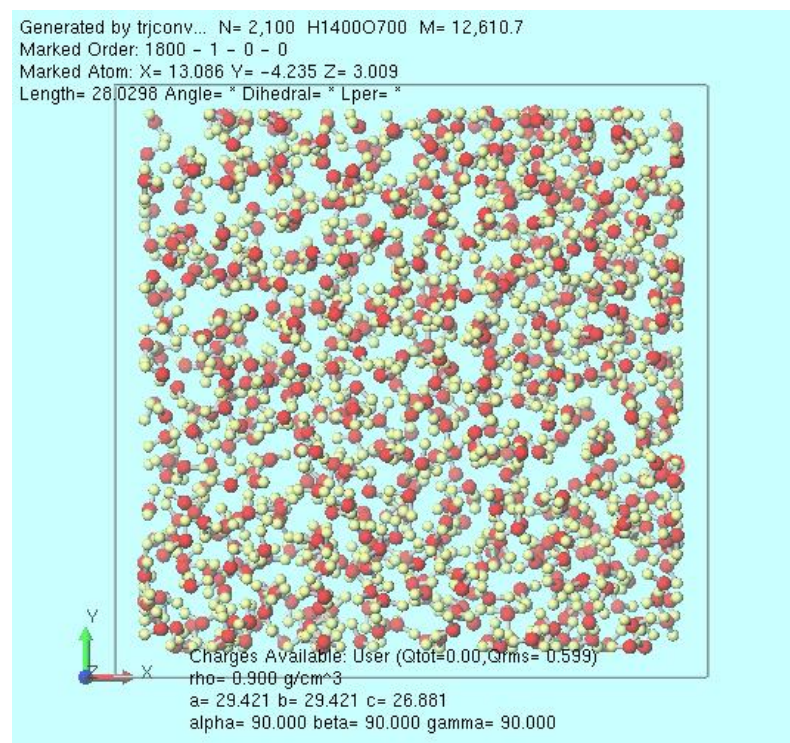
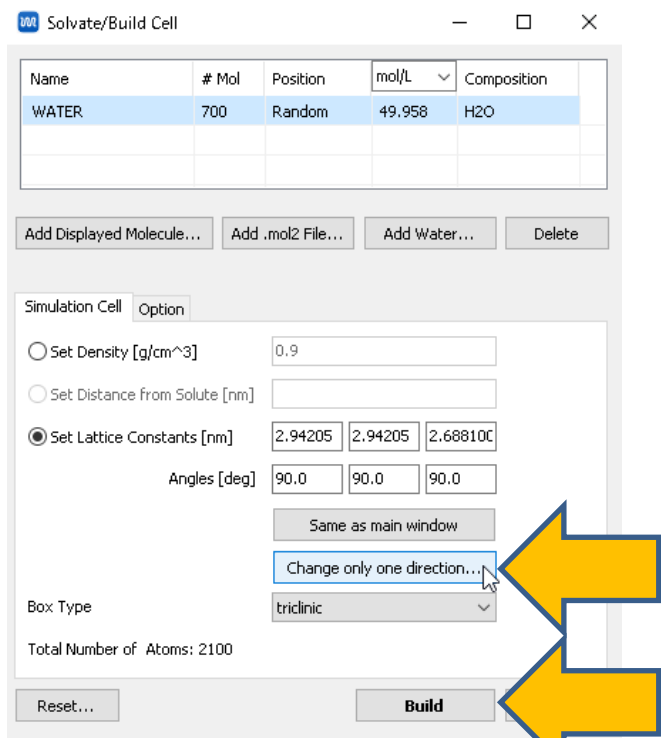
II. 成分2の液相のMD計算（系の作成）

1.  溶媒を配置/セルを構築をクリックする。
2. Add Waterをクリックし、Enter # of moleculesに「700」と入力しOKをクリックする。
3. Set Lattice Constantsを選択し、Same as main windowをクリックする。
4. Box TypeにTriclinicを選択する。



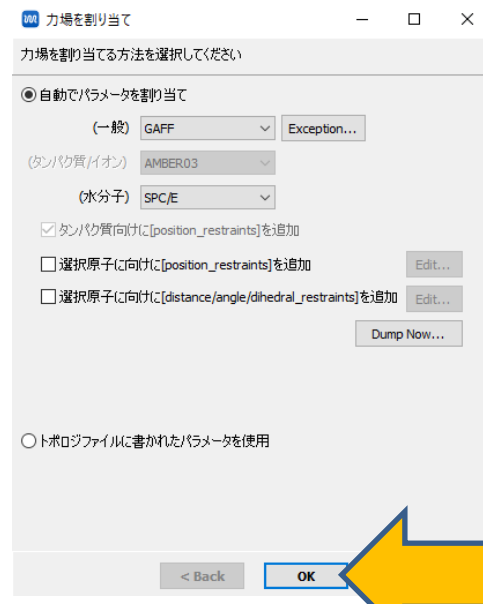
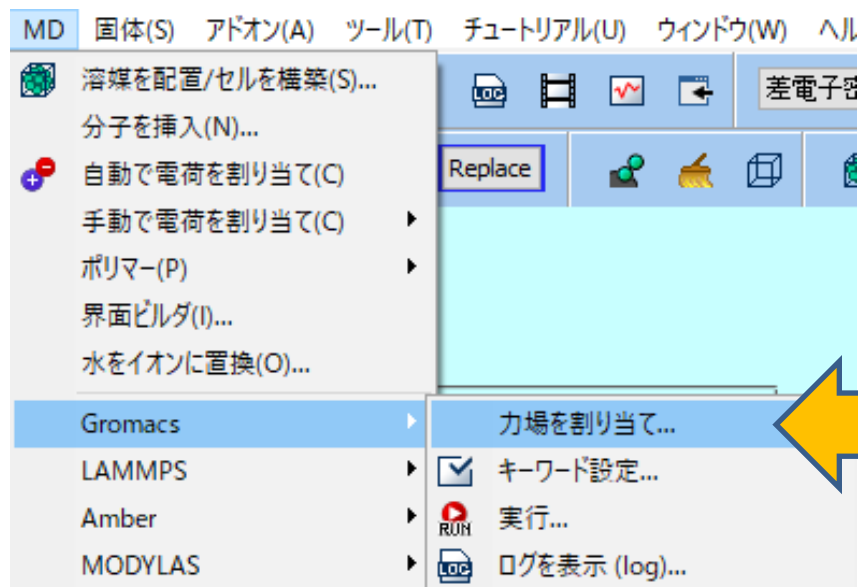
II. 成分2の液相のMD計算（系の作成）

1. x, y方向のセルサイズは後ほどbenzene_eq.mol2と接合するため固定したいが、z方向は初期密度に合わせ調整したいので、**Change only one direction**をクリックする。
2. **Select direction**でZを選択しOKをクリックする。
3. **Enter density**で「0.9」と入力し**OK**をクリックする。
4. **Build**をクリックすると右図のような系が作成される。



II. 成分2の液相のMD計算（平衡化1&2）

1. MD | Gromacs | カ場を割り当てをクリックする。
2. カ場を割り当てウインドウでOKをクリックすると、設定したカ場が割り当てられる。

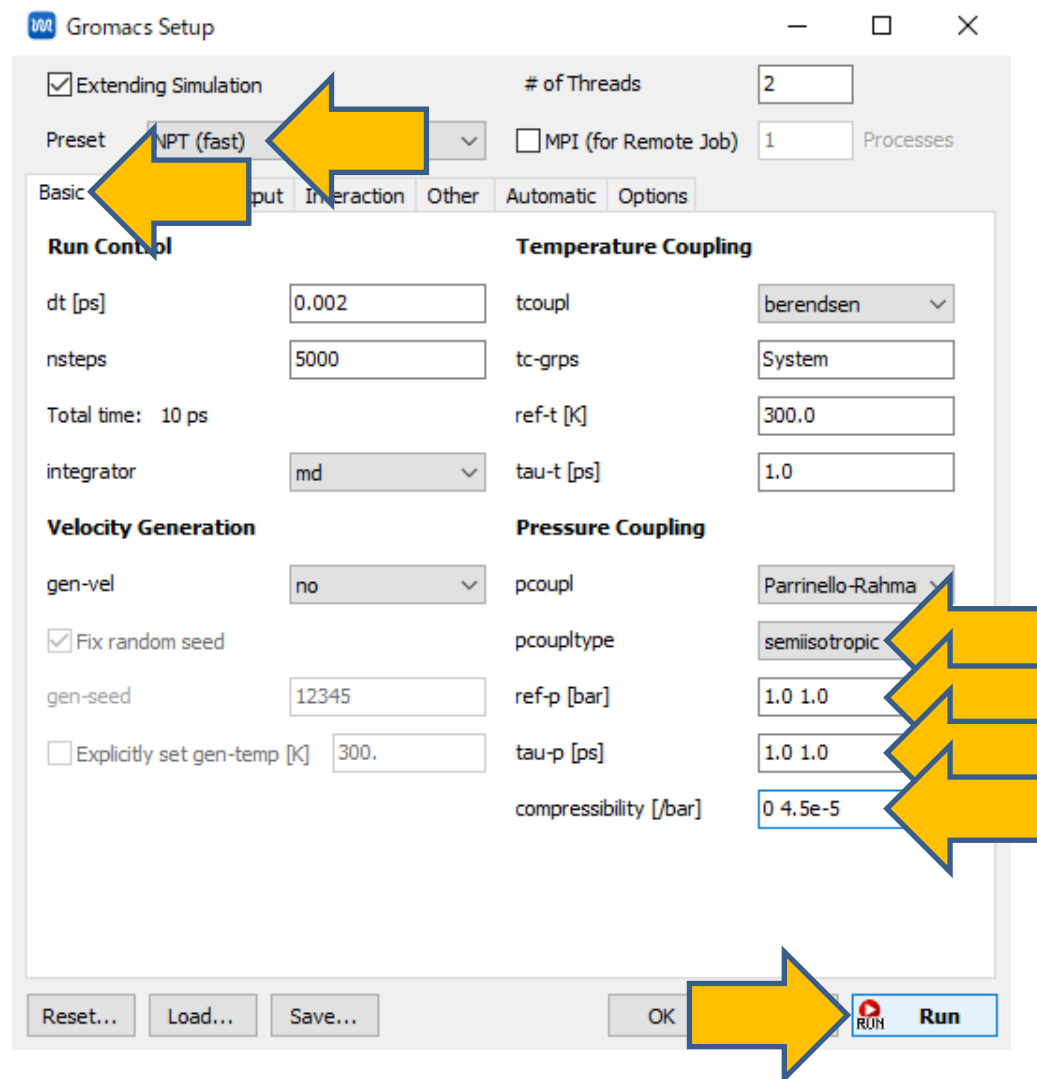


II. 成分2の液相のMD計算（平衡化1&2）


1. キーワード設定をクリックする。
2. **Extending Simulation**のチェックを外す。
3. **Preset**に**Minimize (fast)**を指定する。
4. **Run**をクリックする。ファイル名を**water.gro, water.top**として保存する。
5. 計算終了後、 キーワード設定をクリックする。
6. **Extending Simulation**にチェックを入れ**Preset**に**NVT (fast)**を指定する。
7. **Run**をクリックする。

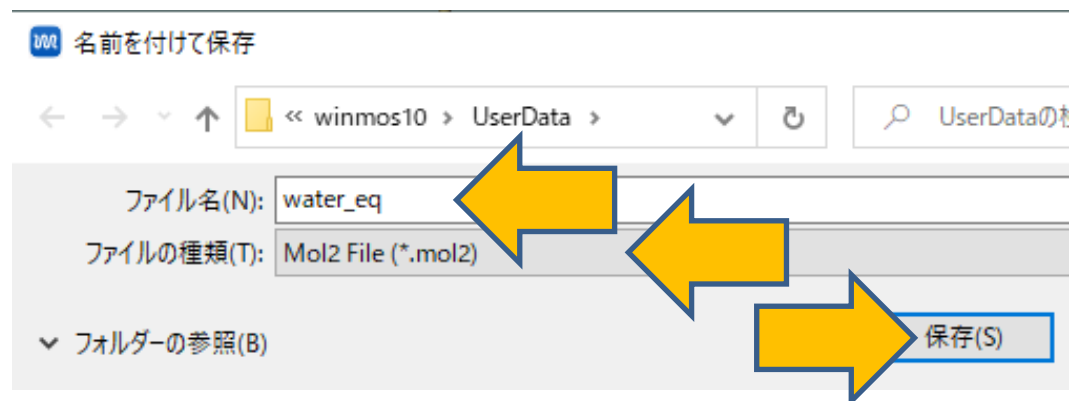
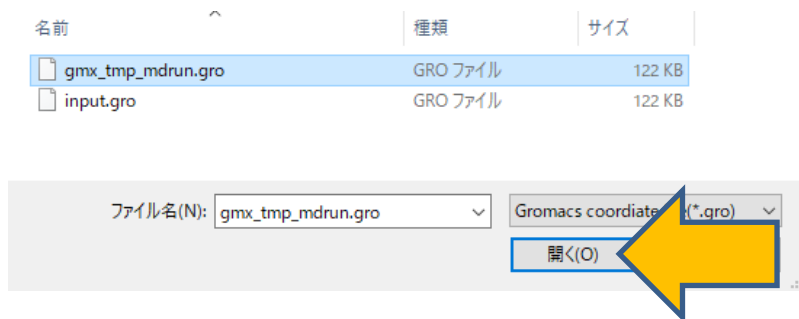
II. 成分2の液相のMD計算（平衡化3）

1. キーワード設定をクリックする。
2. PresetにNPT (fast)を指定する。
3. Basicタブにて以下の様に設定する。
pcoupltypeにsemiisotropic
ref-pに1.0 1.0
tau-pに1.0 1.0
compressibilityに0 4.5e-5
(x,y方向に圧力制御をしないための設定)
4. Runをクリックする。



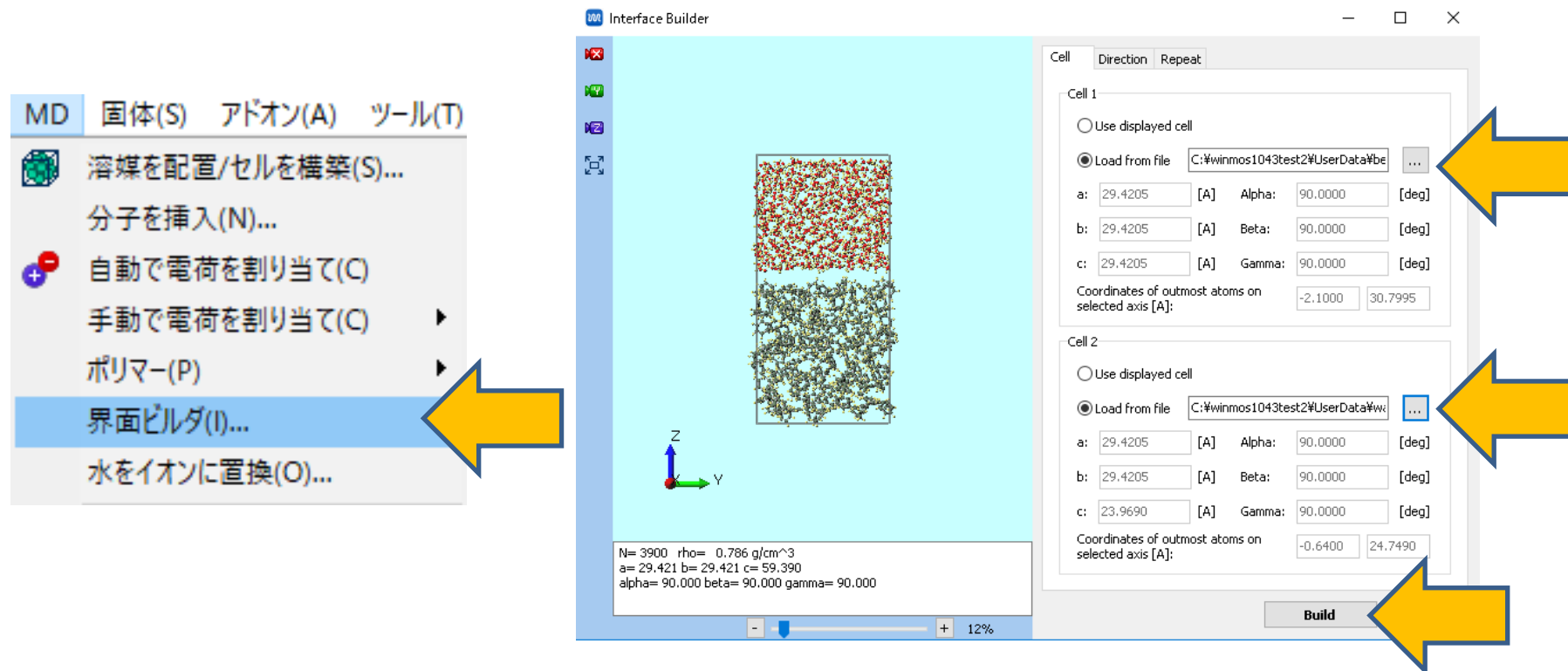
II. 成分2の液相のMD計算（座標の編集）

1. 成分1と同様に、**MD | Gromacs | 最終構造を読み込み (gro)**をクリックする。
2. デフォルトで選択されるファイルを選択する。
3. **編集 | 周期境界条件に基づき原子を再配置**をクリックする。
4. **セルの内側に分子単位で再配置**を選択し、**OK**をクリックする。
5.  **名前を付けて保存**をクリックし、**water_eq.mol2**として保存する。



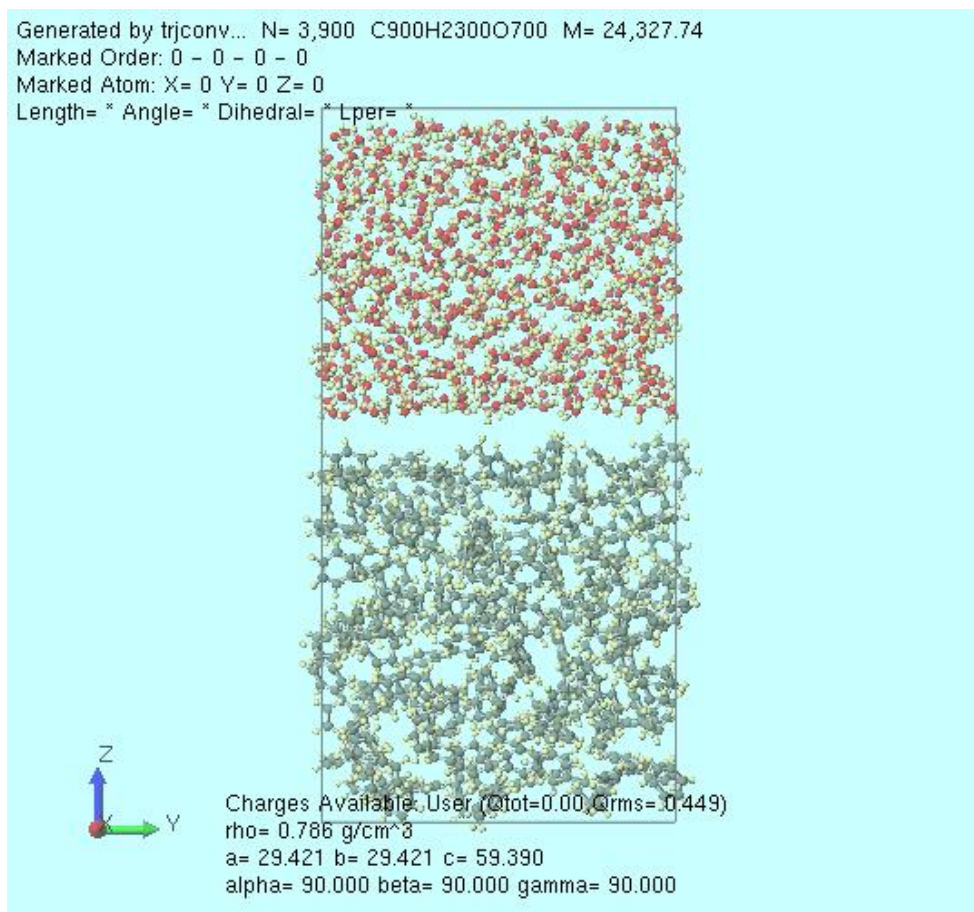
III. 界面系のMD計算（系の作成）

1. MD | 界面ビルダをクリックする。
2. Cell 1で...ボタンをクリックし、benzene_eq.mol2を選択する。
3. Cell 2で...ボタンをクリックし、water_eq.mol2を選択する。
4. Buildをクリックする。



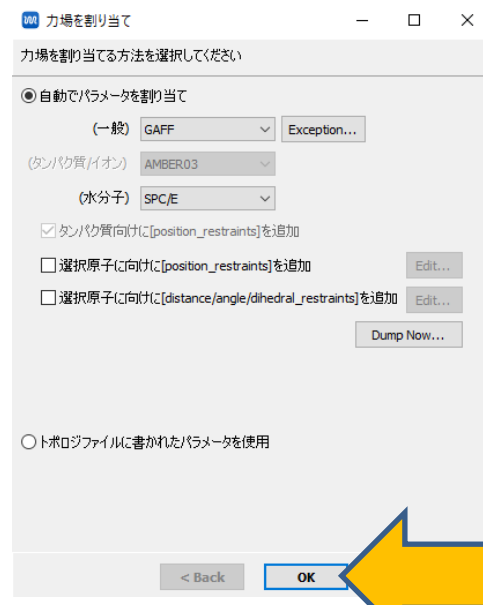
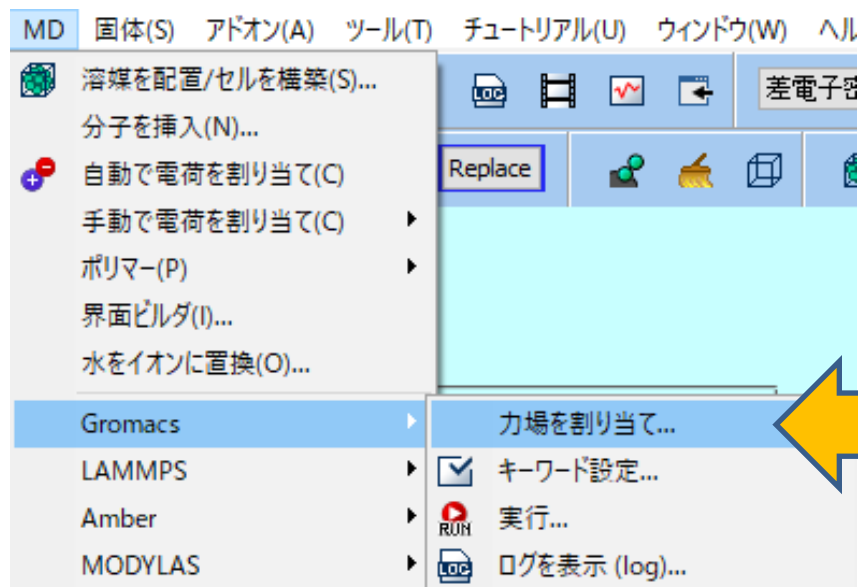
III. 界面系のMD計算（系の作成）

メインウィンドウで  X軸方向から表示ボタンと  ウィンドウに合わせるボタンをクリックし、作成されたモデルを確認する。



III. 界面系のMD計算（平衡化1～3）

1. MD | Gromacs | カ場を割り当てをクリックする。
2. カ場を割り当てウインドウでOKをクリックすると、設定したカ場が割り当てられる。



III. 界面系のMD計算（平衡化1～3）

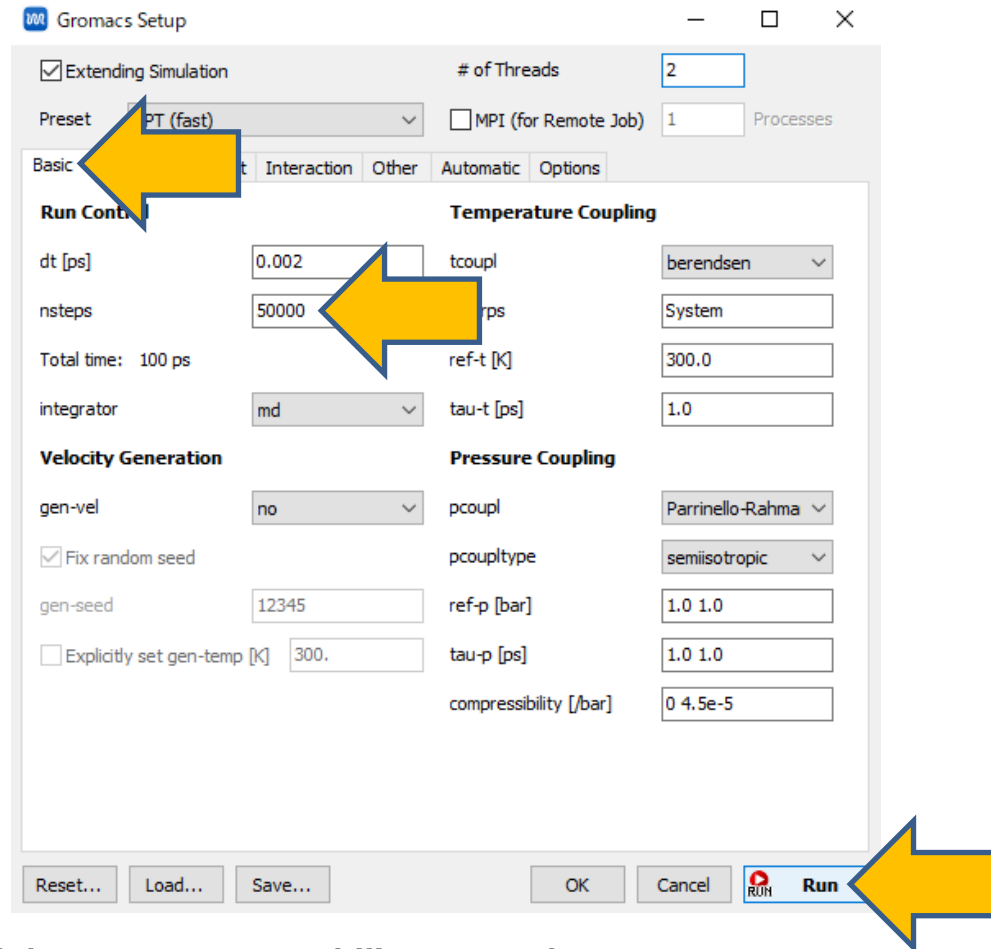
1. キーワード設定をクリックする。
2. **Extending Simulation**のチェックを外す。
3. **Preset**に**Minimize (fast)**を指定する。
4. **Run**をクリックする。ファイル名を**interface.gro, interface.top**として保存する。

5. 計算終了後、 キーワード設定をクリックする。
6. **Extending Simulation**にチェックを入れ**Preset**に**NVT (fast)**を指定する。
7. **Run**をクリックする。


8. 計算終了後、 キーワード設定をクリックする。
9. **Preset**に**NPT (fast)**を指定し、**Basicタブ**にて以下の様に設定する。
pcoupltypeに**semiisotropic**
ref-pに**1.0 1.0**
tau-pに**1.0 1.0**
compressibilityに**0 4.5e-5**
10. **Run**をクリックする。

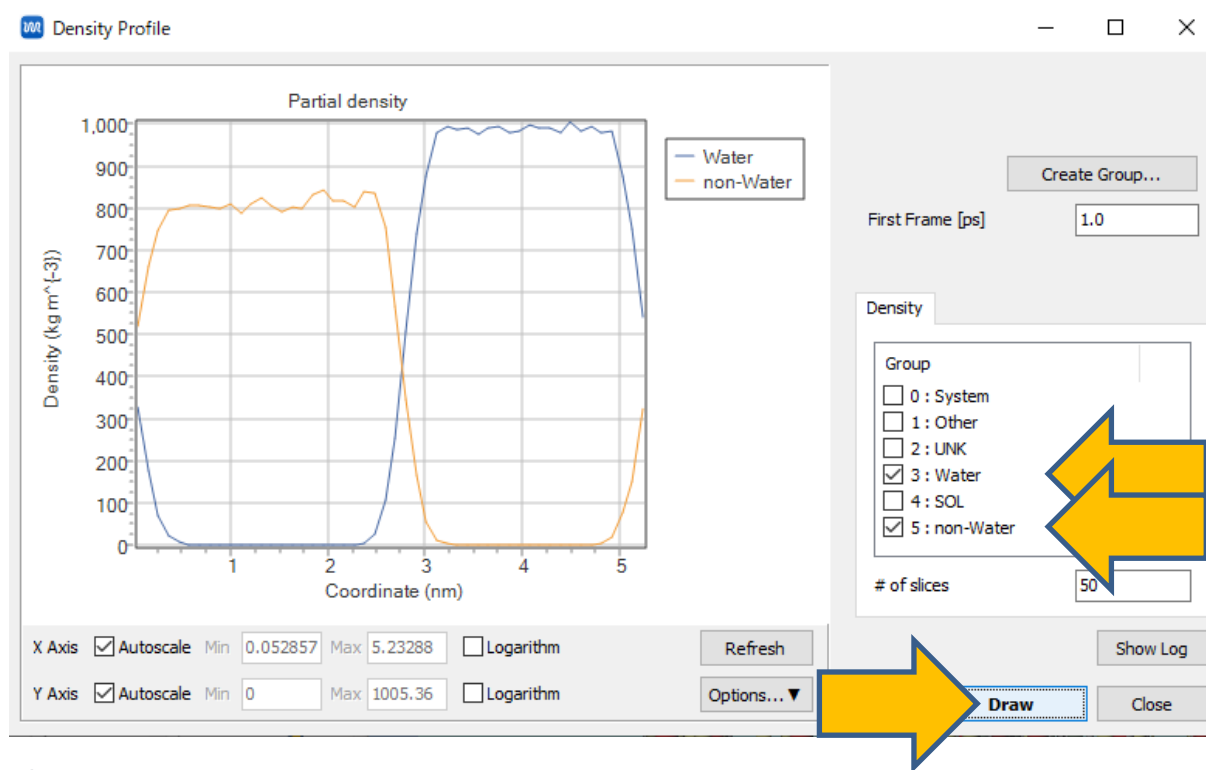
III. 界面系のMD計算（本計算）

1. 計算終了後、 キーワード設定をクリックする。
2. **Basic**タブにてnstepsを50000に変更する。
3. **Run**をクリックする。



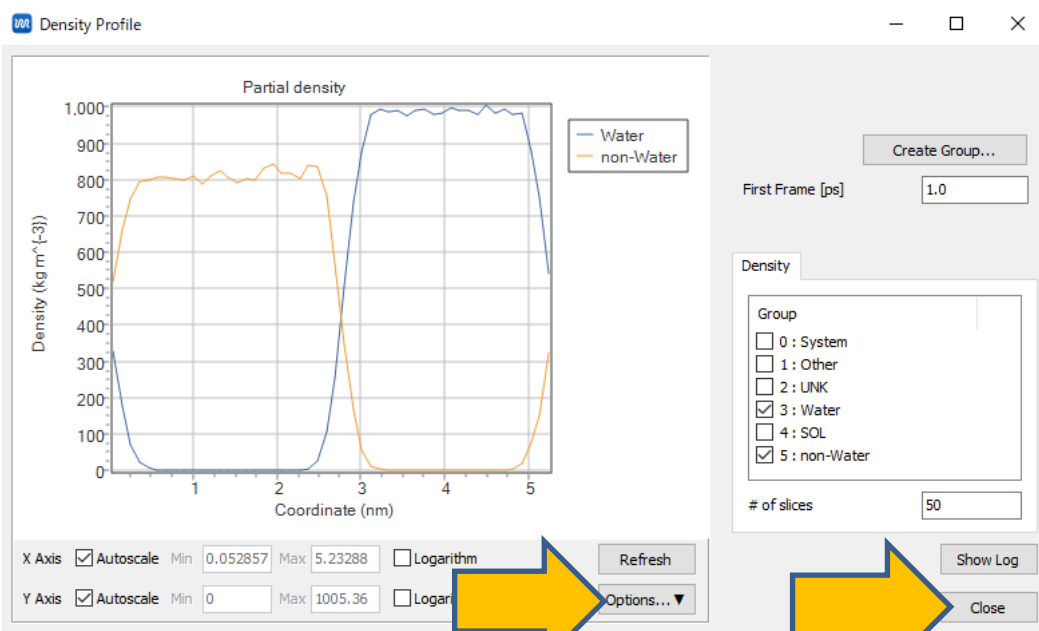
IV. 結果処理

1.  **結果解析** | **密度分布**をクリックし、デフォルトで選ばれる3つのファイルを開く。
2. **Group**で**3: Water**と**5: non-Water**にチェックを入れる。
3. **Draw**をクリックすると、z軸方向の密度分布が表示される。



IV. 結果処理

1. ベンゼンが主成分である相（およそ $z=0.8\sim 2.0$ の領域）の密度の平均値を求めるため、グラフ右下の**Options**ボタンをクリックし、**Calculate Average**をクリックする。
2. **Calculate average from**に「0.8」、**Calculate average to**に「2.0」と記入し**OK**ボタンをクリックする。
3. Averageウィンドウが開き、 $z=0.8\sim 2.0$ の領域のWaterおよびnon-Water（ベンゼン）の密度の統計量が表示される。この値から局所的な濃度の算出などが可能である。
4. **Close**をクリックする。Density Profileウィンドウでも同様にCloseボタンをクリックする。



Range

Calculate average from 0.8

OK Cancel

Range


Calculate average to 2.0

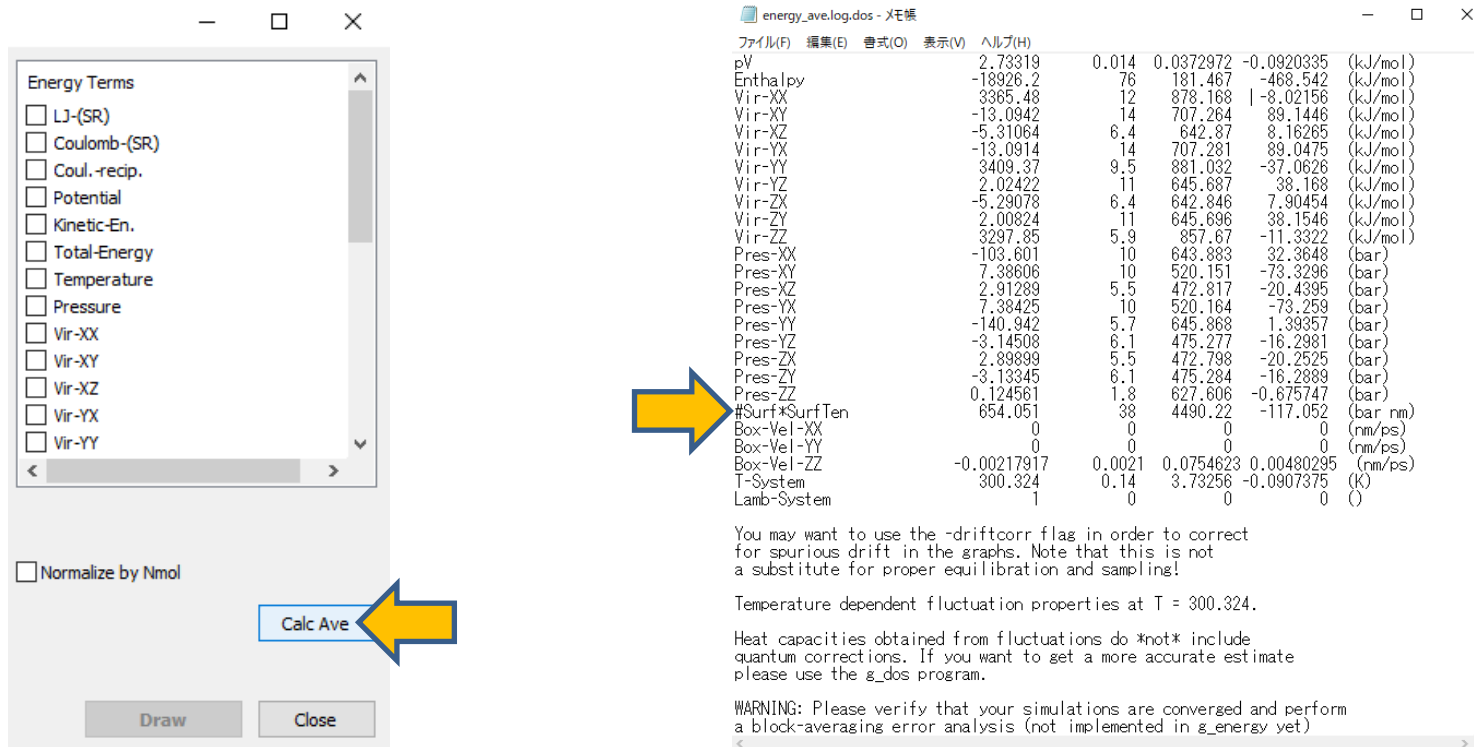
OK Cancel

	Average	Standard deviation	Standard error
Water	0.0003429845	0.0010846124	0.0003270229
non-Water	808.5768181818	10.5263337468	3.1738090415

Close

IV. 結果処理

1.  エネルギー変化をクリックし、デフォルトで選ばれるedrファイルを開く。
2. Calc Aveをクリックし、デフォルトで選ばれるgroファイルを開く。
3. Enter first frame to readは0のままOKをクリックする。
#Surf*SurfTenに界面数(2)と界面張力の積（単位はbar*nm）が書かれる。



The screenshot shows the 'energy_ave.log.dos' window with the 'Energy Terms' dialog box open. The 'Calc Ave' button is highlighted with a yellow arrow. The output table shows the following data:

File (F)	Edit (E)	Format (O)	View (V)	Header (H)	
pV	2.73319	0.014	0.0372972	-0.0920335	(kJ/mol)
Enthalpy	-18926.2	76	181.467	-468.542	(kJ/mol)
Vir-XX	3365.48	12	878.168	-8.02156	(kJ/mol)
Vir-XY	-13.0942	14	707.264	89.1446	(kJ/mol)
Vir-XZ	-5.31064	6.4	642.87	8.16265	(kJ/mol)
Vir-YX	-13.0914	14	707.281	89.0475	(kJ/mol)
Vir-YY	3409.37	9.5	881.032	-37.0626	(kJ/mol)
Vir-YZ	2.02422	11	645.687	38.168	(kJ/mol)
Vir-ZX	-5.29078	6.4	642.846	7.90454	(kJ/mol)
Vir-ZY	2.00824	11	645.696	38.1546	(kJ/mol)
Vir-ZZ	3297.85	5.9	857.67	-11.3322	(kJ/mol)
Pres-XX	-103.601	10	643.883	32.3648	(bar)
Pres-XY	7.38606	10	520.151	-73.3296	(bar)
Pres-XZ	2.91289	5.5	472.817	-20.4395	(bar)
Pres-YX	7.38425	10	520.164	-73.259	(bar)
Pres-YY	-140.942	5.7	645.868	1.39357	(bar)
Pres-YZ	-3.14508	6.1	475.277	-16.2981	(bar)
Pres-ZX	2.89899	5.5	472.798	-20.2525	(bar)
Pres-ZY	-3.13345	6.1	475.284	-16.2889	(bar)
Pres-ZZ	0.124561	1.8	627.606	-0.675747	(bar)
#Surf*SurfTen	654.051	38	4490.22	-117.052	(bar nm)
Box-Vel-XX	0	0	0	0	(nm/ps)
Box-Vel-YY	0	0	0	0	(nm/ps)
Box-Vel-ZZ	-0.00217917	0.0021	0.0754623	0.00480295	(nm/ps)
T-System	300.324	0.14	3.73256	-0.0907375	(K)
Lamb-System	1	0	0	0	()

You may want to use the -driftcorr flag in order to correct for spurious drift in the graphs. Note that this is not a substitute for proper equilibration and sampling!

Temperature dependent fluctuation properties at T = 300.324.

Heat capacities obtained from fluctuations do *not* include quantum corrections. If you want to get a more accurate estimate please use the g_dos program.

WARNING: Please verify that your simulations are converged and perform a block-averaging error analysis (not implemented in g_energy yet)

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