

 winmostar チュートリアル

Gromacs

粘度・誘電率

V10.0.0

2020年3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 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。

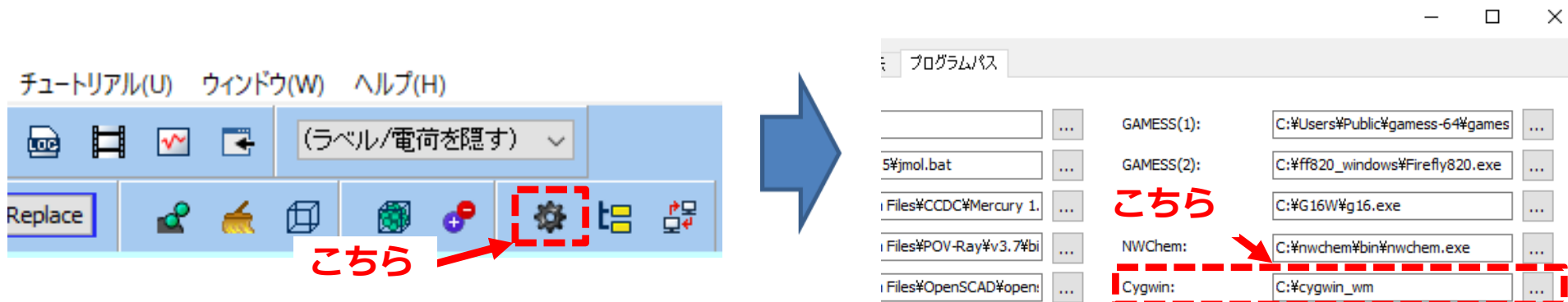
(6) 以下のいずれかのリンク先の手順でWinmostar用のCygwin環境 (cygwin_wmと呼びます) を構築します。

[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 \(非推奨、上級者向け\)](#)

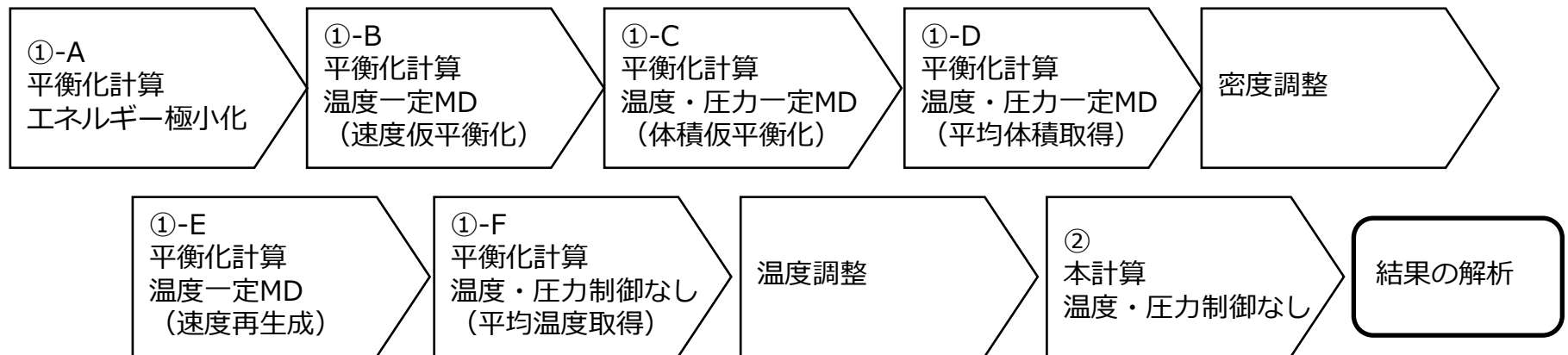
[Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合 \(ベータ版\)](#)

- 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


- 本チュートリアルでは、水の液体の粘度と誘電率の計算を実施します。分子の微妙な運動に敏感な物性を計算するため、本計算はNVEアンサンブル（温度・圧力制御なし）で行います。目標温度・圧力下でNVEアンサンブルの計算をするための平衡化手順も示します。

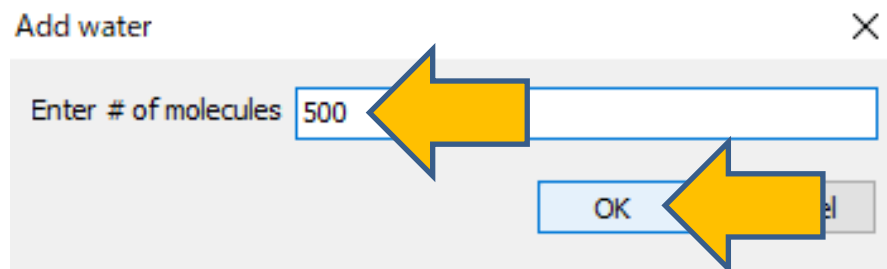
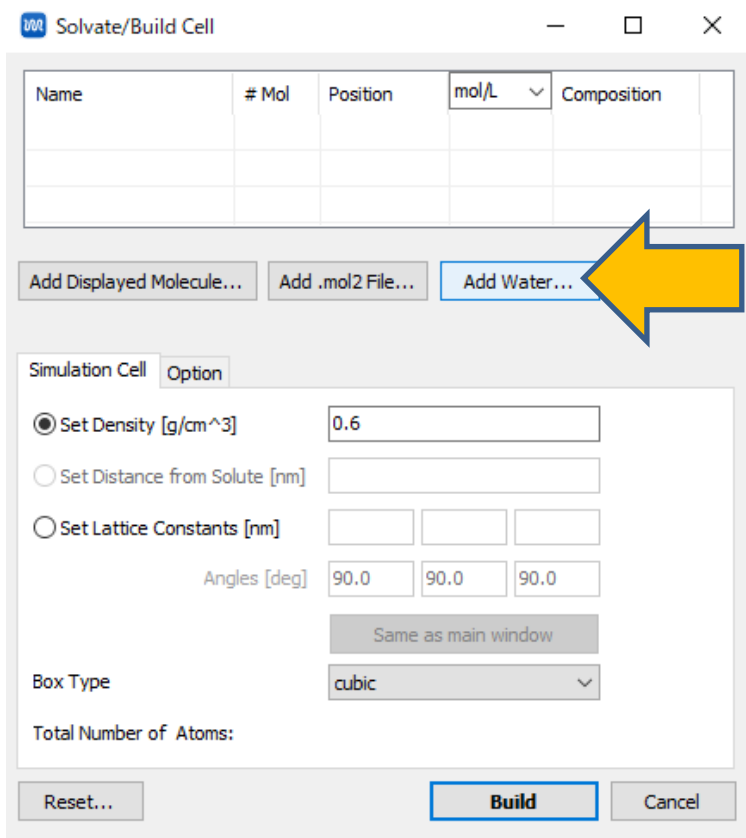


注意点：

- 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。
- 力場の種類、相互作用の計算条件、系のサイズなどが計算結果に影響を与えます。

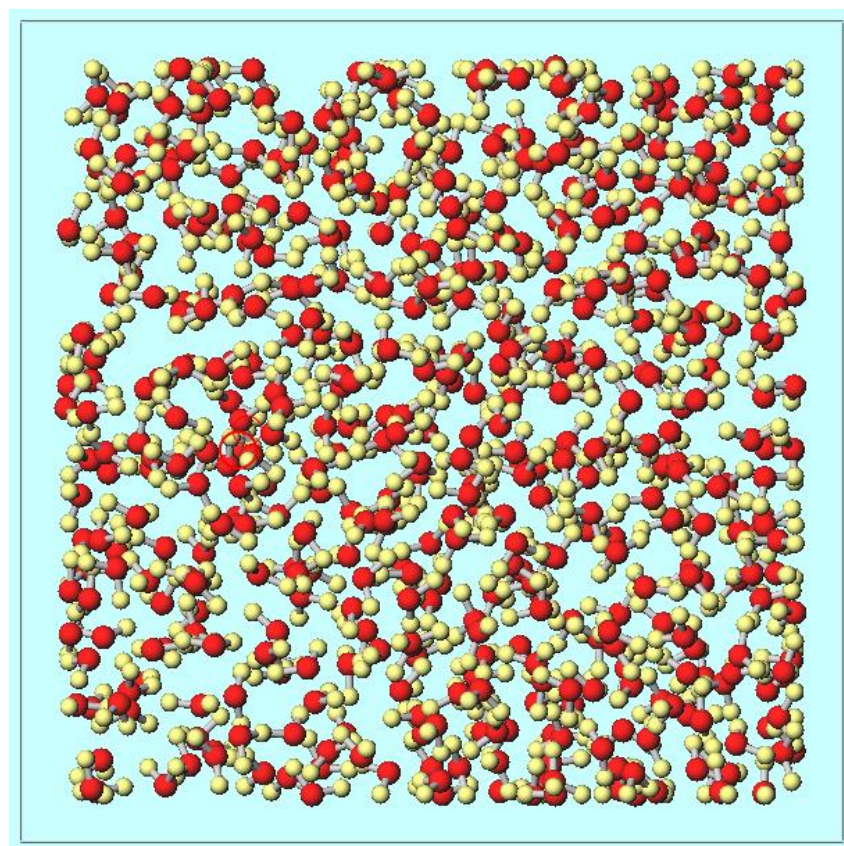
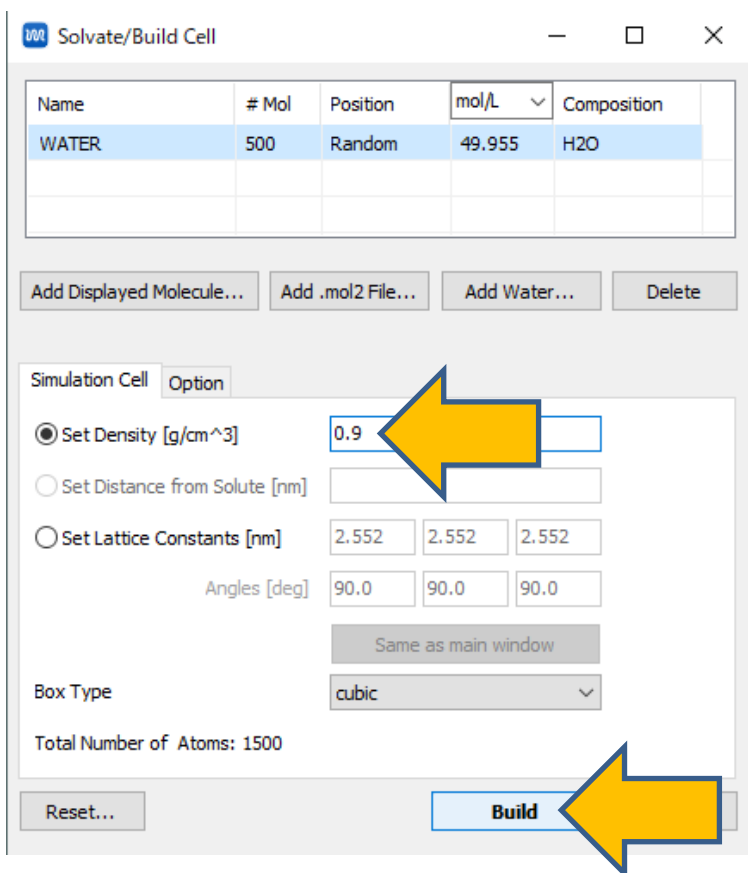
I. 系の作成

1.  溶媒を配置/セルを構築をクリックする。
2. Add Waterをクリックする。
3. Enter # of moleculesに500と入力し、OKをクリックする。



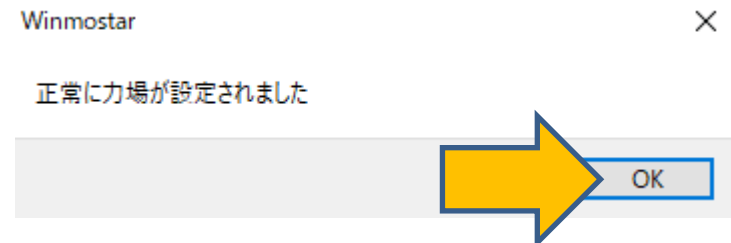
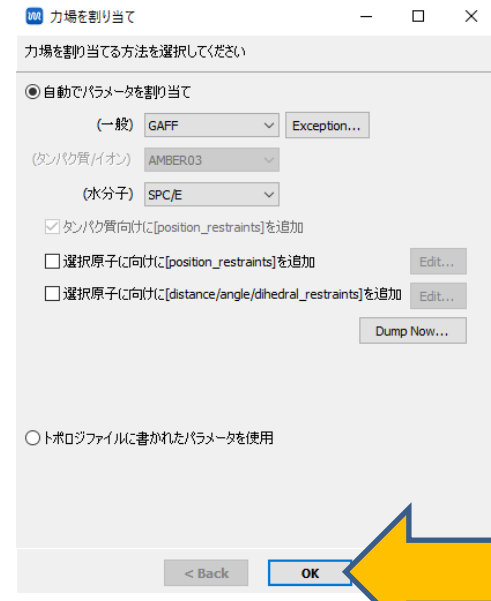
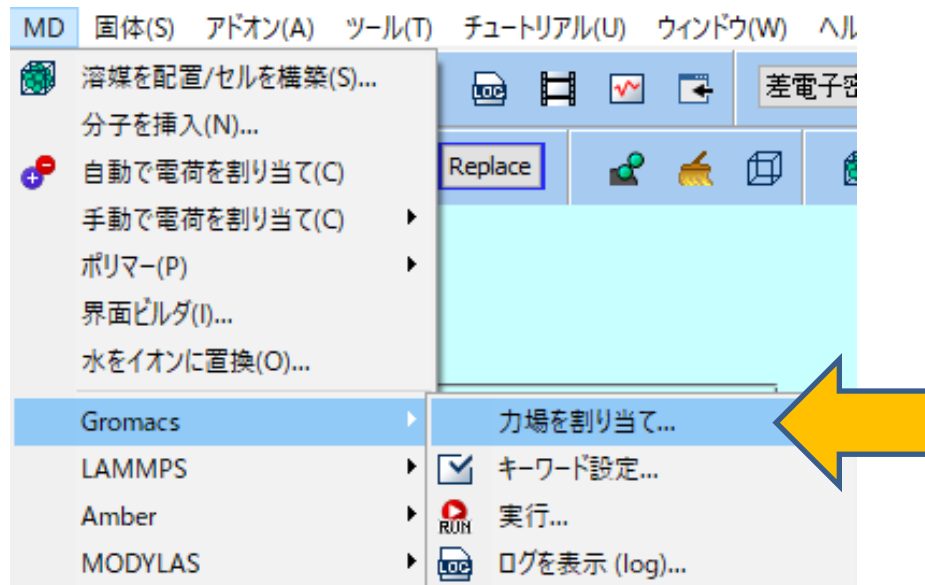
I. 系の作成

1. Set Densityに0.9と入力する。
2. Buildをクリックする。



I. 系の作成

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. 平衡化計算(A~C)

1. MD | Gromacs | 連続ジョブ設定をクリックする。
2. # of Threadsに並列数を指定する。
3. Use presetでMinimize (fast)を選び>>> Add >>>を1回クリックする。
4. Use presetでNVT (fast)を選び>>> Add >>>を1回クリックする。
5. Use presetでNPT (fast)を選び>>> Add >>>を1回クリックする。
6. Setをクリックする。
7. MD | Gromacs | 連続ジョブ実行をクリックする。
8. ファイル名をvdc.gro, vdc.topとして保存する。

The image shows two parts of the software interface. On the left is the Gromacs menu, and on the right is the 'Sequential Job' configuration window.

Gromacs Menu:

- Gromacs
- LAMMPS
- Amber
- MODYLAS
- 力場を割り当て...
- キーワード設定...
- 実行...
- ログを表示 (log)...
- 標準出力を表示...
- アニメーション...
- エネルギー変化...
- 最終構造を読み込み (gro)...
- 連続ジョブ設定...
- 連続ジョブ実行...

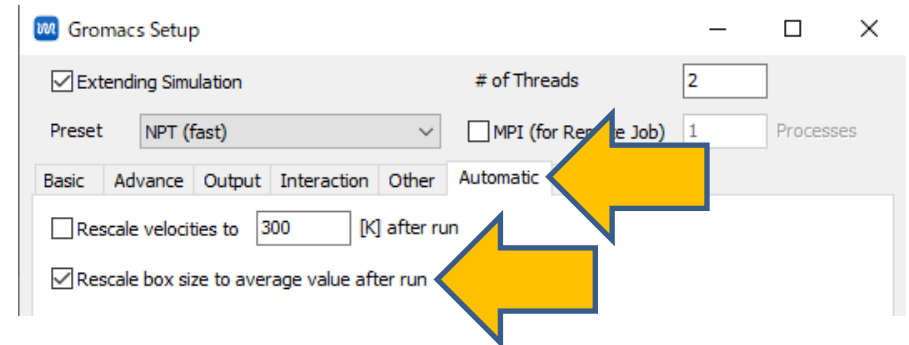
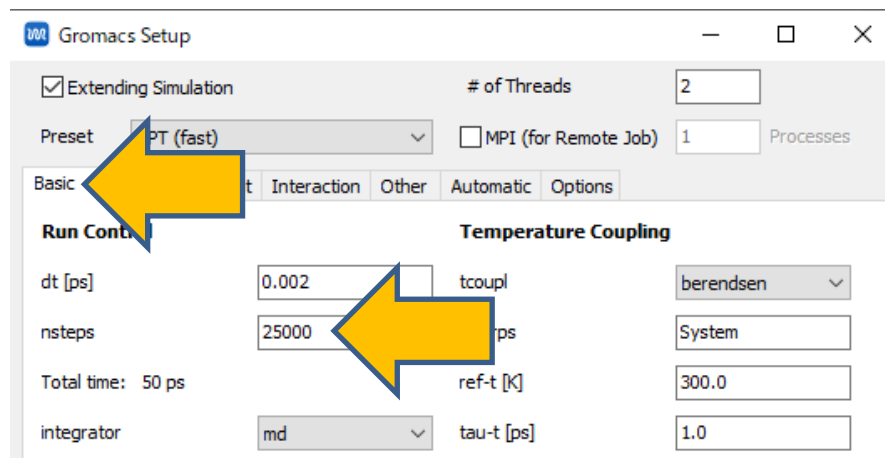
Sequential Job Configuration Window:

- Sequential Job
- # of Threads: 2
- Job Setting
 - Use preset
 - NPT (fast)
 - Use setting file
- Buttons: >>> Add >>>, <<< Delete <<<, Reset...
- Table:

#	Setting
0	Preset: Minimize (fast)
1	Preset: NVT (fast)
2	Preset: NPT (fast)
- Buttons: Set

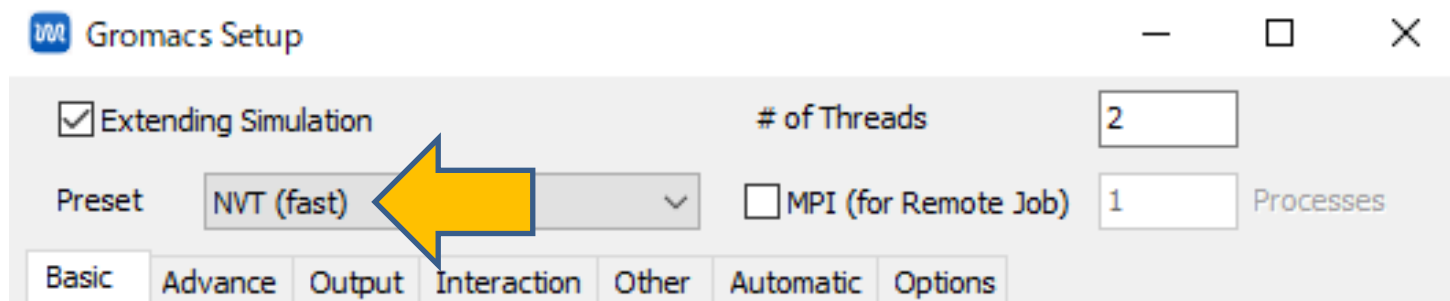
II. 平衡化計算(D)+密度調整

1. 計算終了後、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. **Basicタブ**にて**nsteps**を**25000**に変更する。
3. **Automaticタブ**にて**Rescale box size...**にチェックを入れる。
4. **Run**をクリックする。



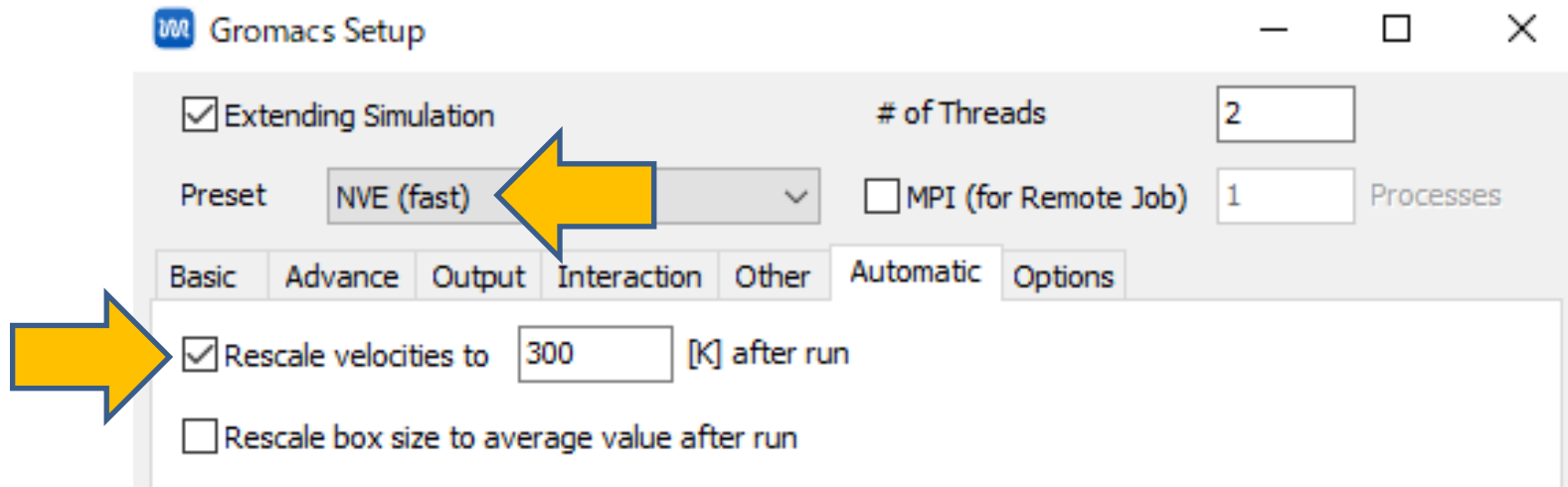
II. 平衡化計算(E)

1. 計算終了後、 **キーワード設定**をクリックする。
2. **Preset**に**NVT (fast)** を指定する。
3. **Run**をクリックする。



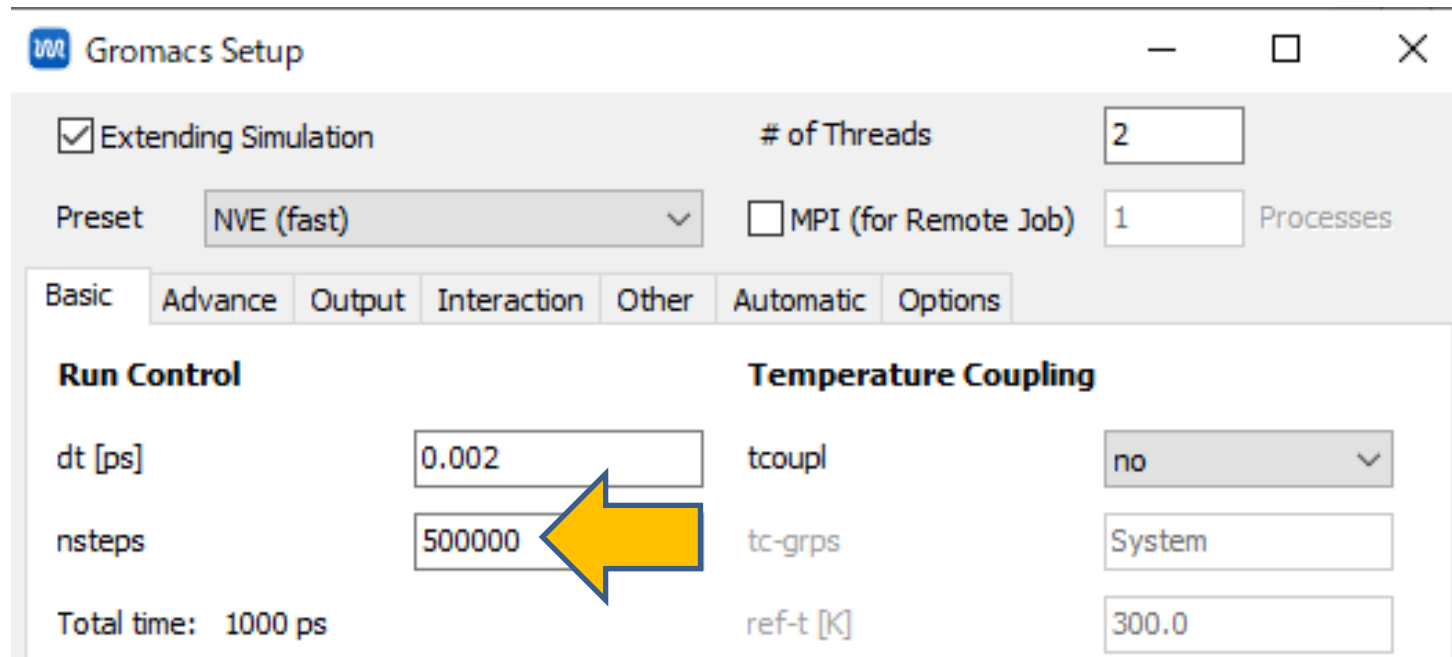
II. 平衡化計算(F)

1. 計算終了後、 **キーワード設定**をクリックする。
2. **Preset**に**NVE (fast)** を指定する。
3. **Automatic**タブにて**Rescale velocities to...**にチェックを入れる。
4. **Run**をクリックする。



III.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**に**500000**を指定する。
3. **Run**をクリックする。

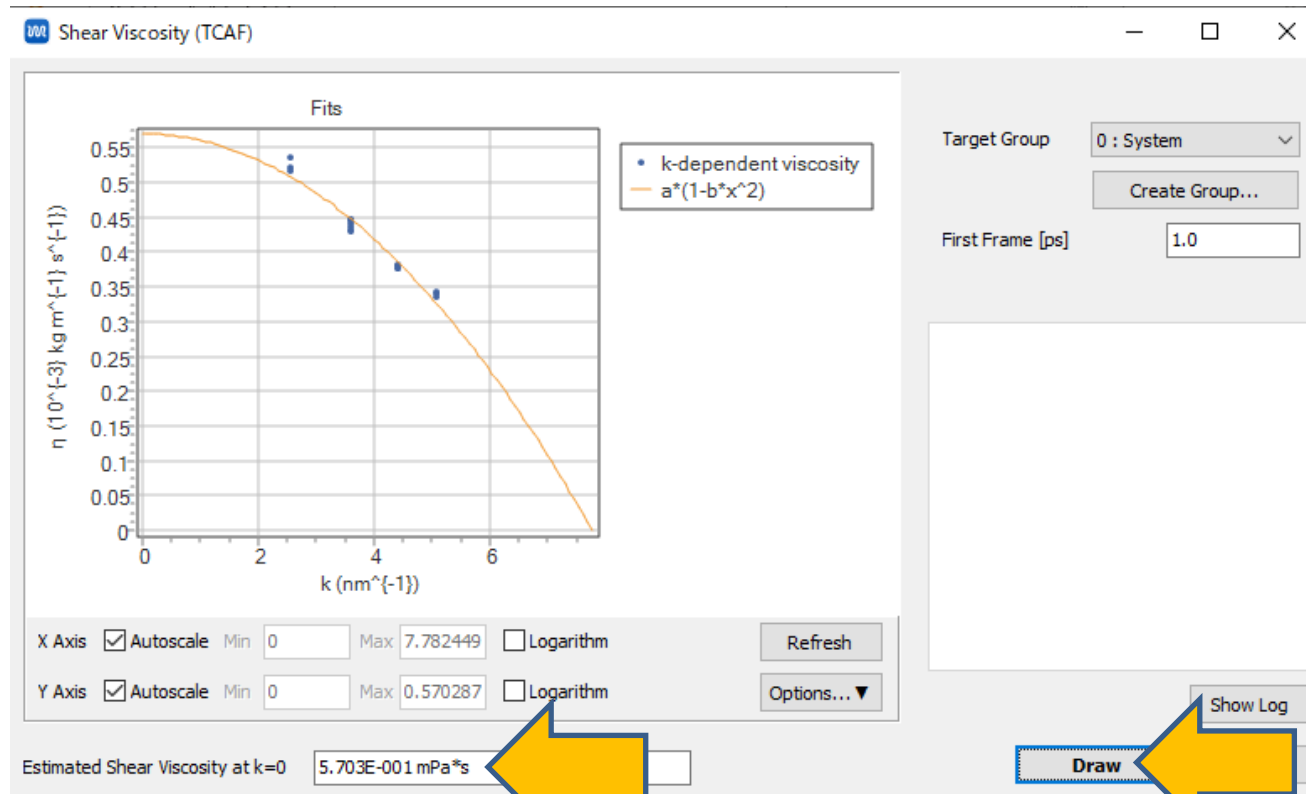


The screenshot shows the Gromacs Setup window with the following configuration:


- Extending Simulation
- # of Threads: 2
- Preset: NVE (fast)
- MPI (for Remote Job)
- Processes: 1
- Basic tab selected
- Run Control: dt [ps] = 0.002, nsteps = 500000 (highlighted with a yellow arrow), Total time: 1000 ps
- Temperature Coupling: tcoupl = no, tc-grps = System, ref-t [K] = 300.0

IV. 粘度の算出

1. 計算終了後、 **結果解析 | 粘度**をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるファイルを開く操作を3回繰り返す。
3. **Draw**をクリックすると、粘度の推測値が下に表示される。



V. 誘電率の算出

1. 計算終了後、 **結果解析 | 比誘電率**をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるファイルを開く操作を3回繰り返す。
3. **Draw**をクリックし、**設定温度(300)**を入力すると、誘電率の推測値が下に表示される。



Enter Temperature X

Temperature [K]: 300

OK

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