

Winmostar チュートリアル

Gromacs

粘度・誘電率

V7.016

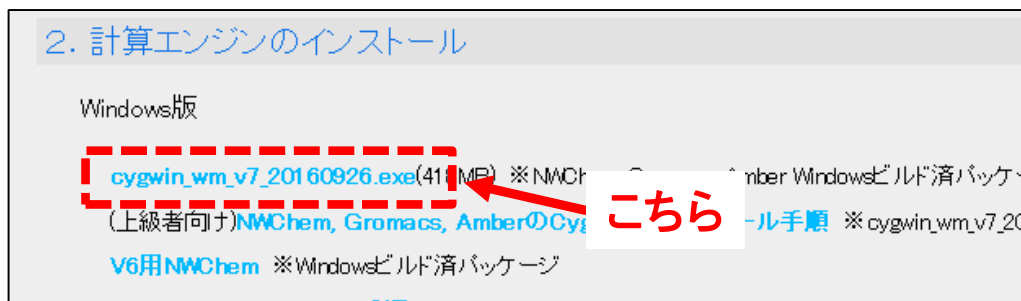
株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2017/4/19

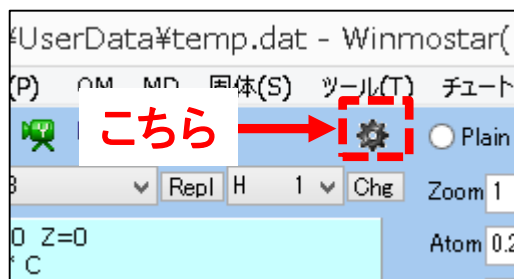
動作環境設定

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/manual_jp.htmlの「2. 計算エンジンのインストール」から、Cygwinの自己解凍書庫(exe)を入手し実行してください。



- 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。



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

「MD>溶媒を配置/セルを作成」にて、「Put the molecule on main window as solute」のチェックを外し、「Add Water」ボタンを押す。

The image shows the 'Solvate/Build MD Cell' dialog box in the X-Ability software. The dialog has a checkbox 'Put the molecule on main window as solute' which is unchecked. Below this is a table with columns: Name, # Mol, Position, mol/L, and Composition. At the bottom of the dialog, there are three tabs: 'Simulation Cell', 'Option', and 'mol2 File'. The 'Simulation Cell' tab is active, showing options for 'Set Density [g/cm^3]' (set to 0.6), 'Set Distance from Solute [nm]', and 'Set Box Size [nm]'. The 'Box Type' is set to 'cubic' and 'Angles' are 90.0, 90.0, 90.0. The 'Total Number of Atoms' is shown at the bottom. Buttons for 'Reset', 'Build', and 'Cancel' are at the very bottom. A yellow arrow points to the 'Add Water' button, and a blue arrow points to the 'Simulation Cell' tab.

In the background, the 'MD' menu is open, showing options like 'リモートジョブ投入', '溶媒を配置/セルを作成', '水をイオンに置換', 'Gromacs', 'LAMMPS', 'Amber', 'ポリマー', '散逸粒子動力学法', and '界面ビルダ'. A yellow arrow points to the '溶媒を配置/セルを作成' option.

I. 系の作成

「Add water」ウインドウで“500”と入力し「OK」をクリックする。「Set Density」に“0.9”と入力し「Build」ボタンをクリックする。

The screenshot illustrates the process of creating a simulation system. It shows three main components:

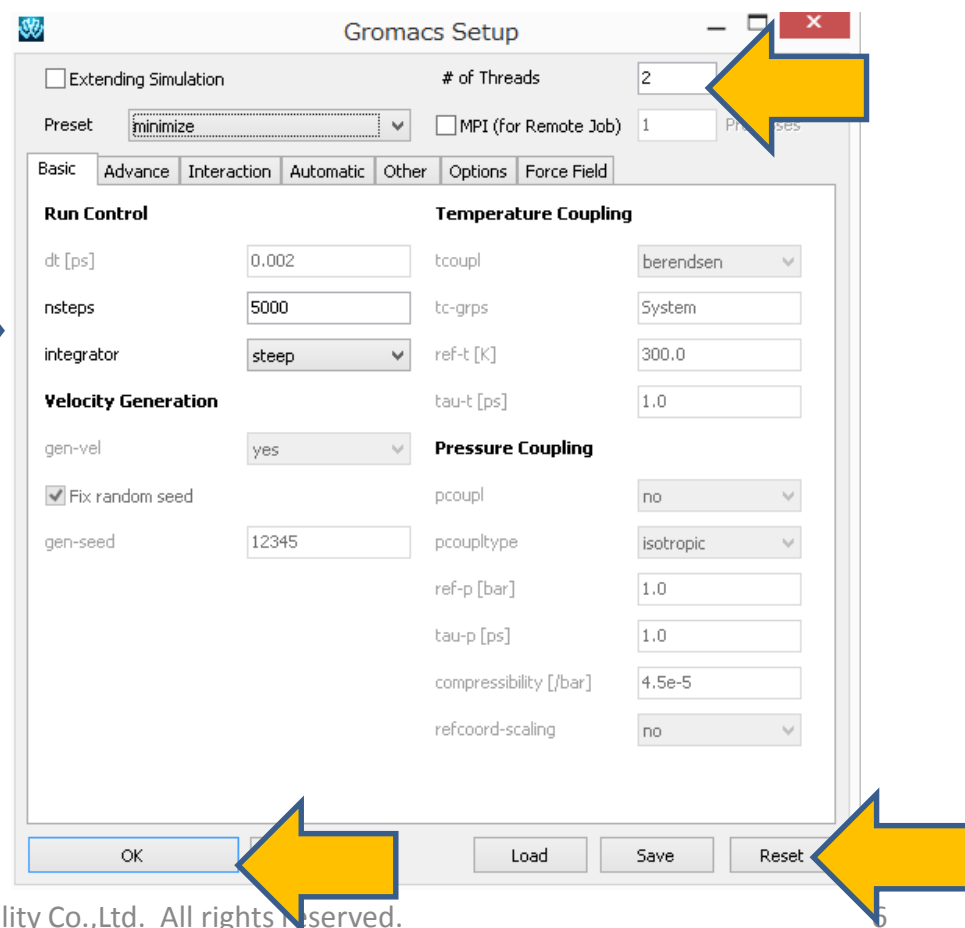
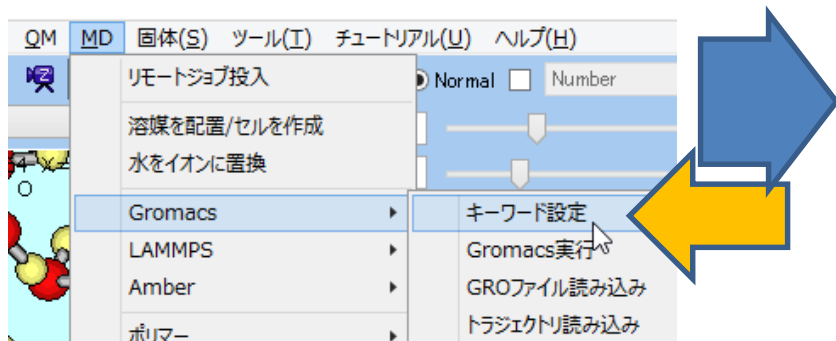
- Add water dialog:** A small window where the number of molecules is set to 500. A yellow arrow points to the input field, and another points to the OK button.
- Solvate/Build MD Cell window:** The main configuration window. It contains a table with the following data:

Name	# Mol	Position	mol/L	Composition
WATER	500	Random	49.955	H2O

 Below the table are buttons for 'Add Water', 'Add .mol2 File', and 'Delete'. The 'Simulation Cell' section has radio buttons for 'Set Density [g/cm³]', 'Set Distance from Solute [nm]', and 'Set Box Size [nm]'. The 'Set Density' option is selected, with a value of 0.9 entered in the adjacent field. Other parameters include box size (2.552 nm), angles (90.0), and box type (cubic). The total number of atoms is 1500. A yellow arrow points to the '0.9' field, and another points to the 'Build' button at the bottom.
- Main Simulation Cell View:** A 3D ball-and-stick model of the simulation cell, showing a dense packing of water molecules (red and white spheres) with a central solute molecule (yellow and red spheres). A blue arrow points from the 'Solvate/Build MD Cell' window to this view.

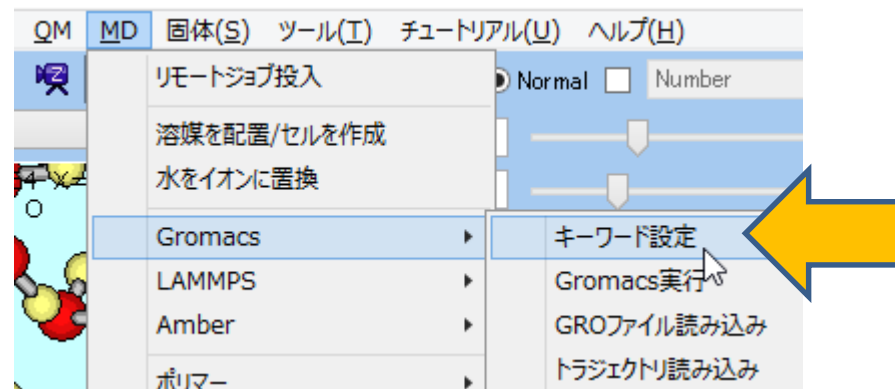
II. 平衡化計算(エネルギー最小化)

「MD > Gromacs > キーワード設定」において、まず「Reset」ボタンをクリックし、「# of Threads」に並列数を指定し、「OK」する。



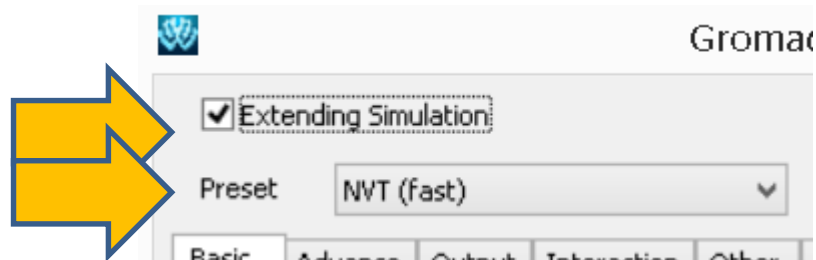
II. 平衡化計算(エネルギー最小化)

「MD>Gromacs>Gromacs実行」において、最初に聞かれる座標ファイルの名前は「water.gro」、次に聞かれるトポロジファイルの名前は「water.top」とする。
その後、cygwinが立ち上がりGromacsの処理が開始される。



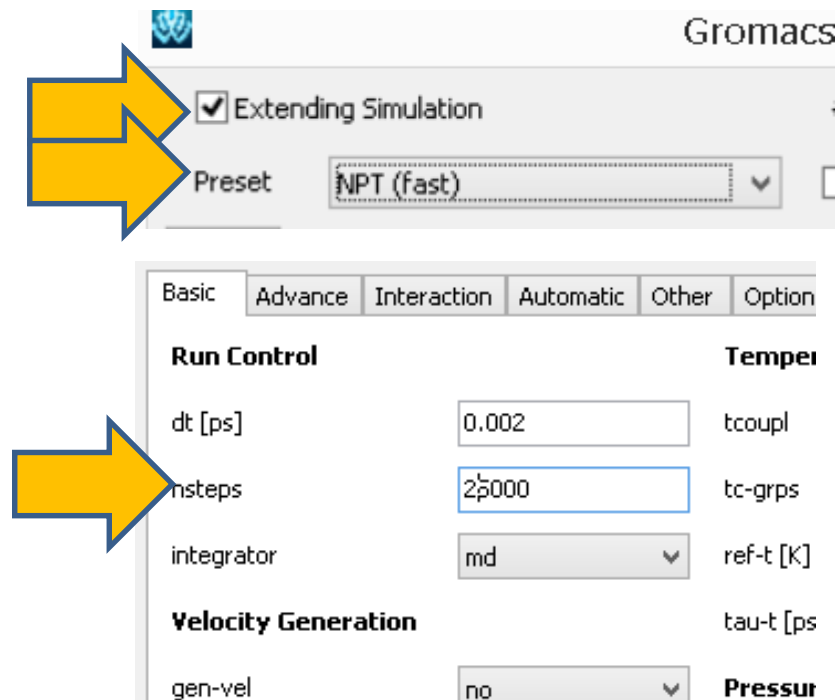
II. 平衡化計算(温度一定)

計算終了後、同様に「MD>Gromacs>キーワード設定」にて
まず「Extending Simulation」をチェックし「Preset」に「NVT (fast)」を指定する。
次に、「OK」ボタンをクリックし、「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。



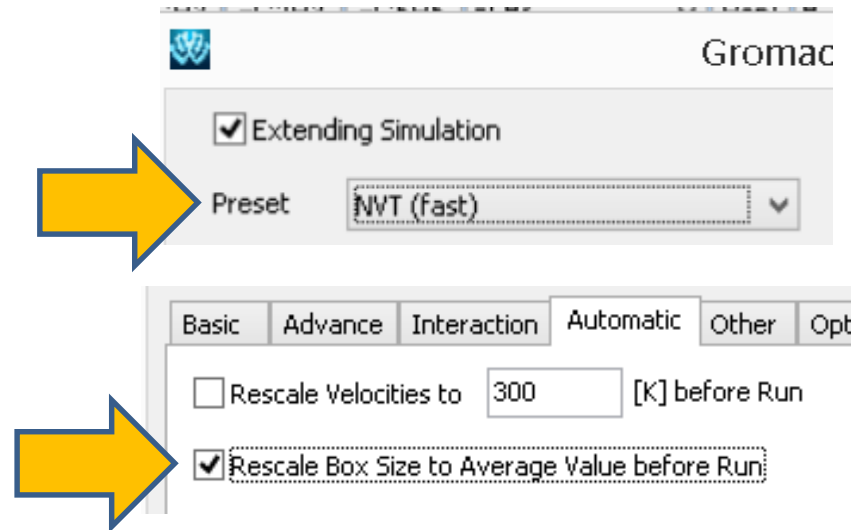
II. 平衡化計算(温度圧力一定)

計算終了後、同様に「MD>Gromacs>キーワード設定」にて
まず「Preset」に「NPT (fast)」を指定する。そして、「nsteps」に“25000”を指定する。
(nstepsを変更した時点で「Preset」の表示は自動的に「(custom)」となる。)
次に、「OK」ボタンをクリックし、「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。



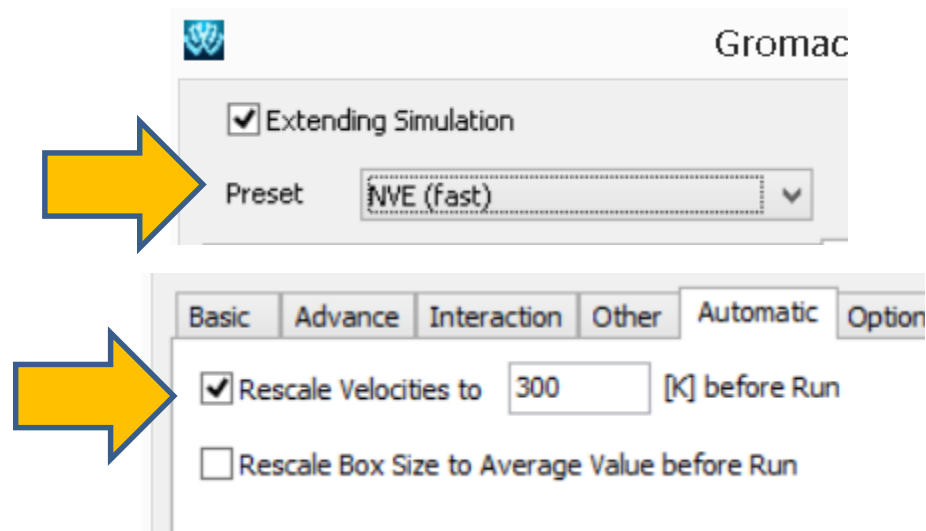
II. 平衡化計算(温度一定2)

計算終了後、同様に「MD>Gromacs>キーワード設定」にて
まず「Preset」に「NVT (fast)」を指定する。そして、「Automatic」タブの
「Rescale Box Size to Average Value before Run」をチェックする。
次に、「OK」ボタンをクリックし、「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。



II. 平衡化計算(温度圧力制御なし)

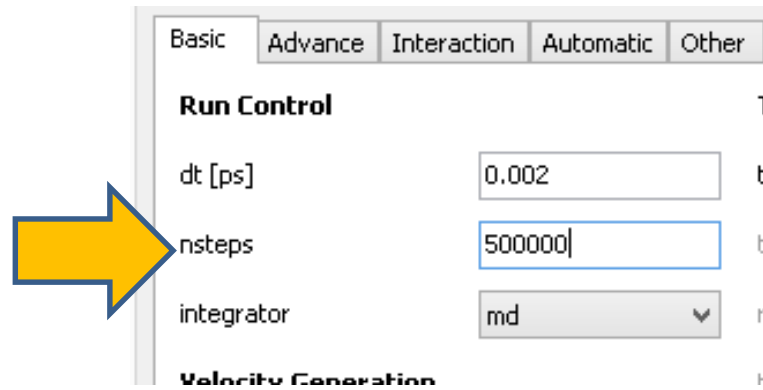
計算終了後、同様に「MD>Gromacs>キーワード設定」にて
まず「Preset」に「NVE (fast)」を指定する。そして、「Automatic」タブの
「Rescale Velocities to ...」をチェックする。
次に、「OK」ボタンをクリックし、「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。



III. 本計算

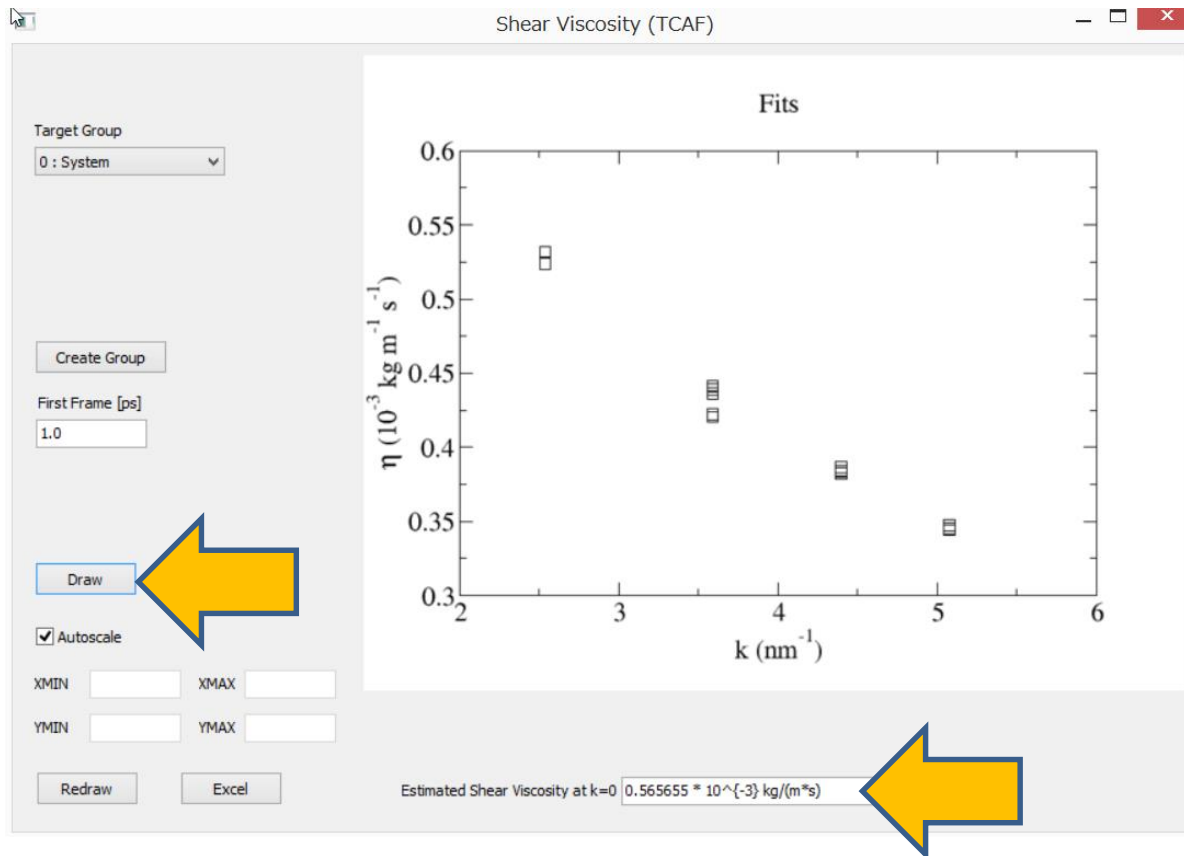
計算終了後、同様に「MD>Gromacs>キーワード設定」を開く。「Basic」タブの「nsteps」に“500000”を指定する。

次に、「OK」ボタンをクリックし、「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。



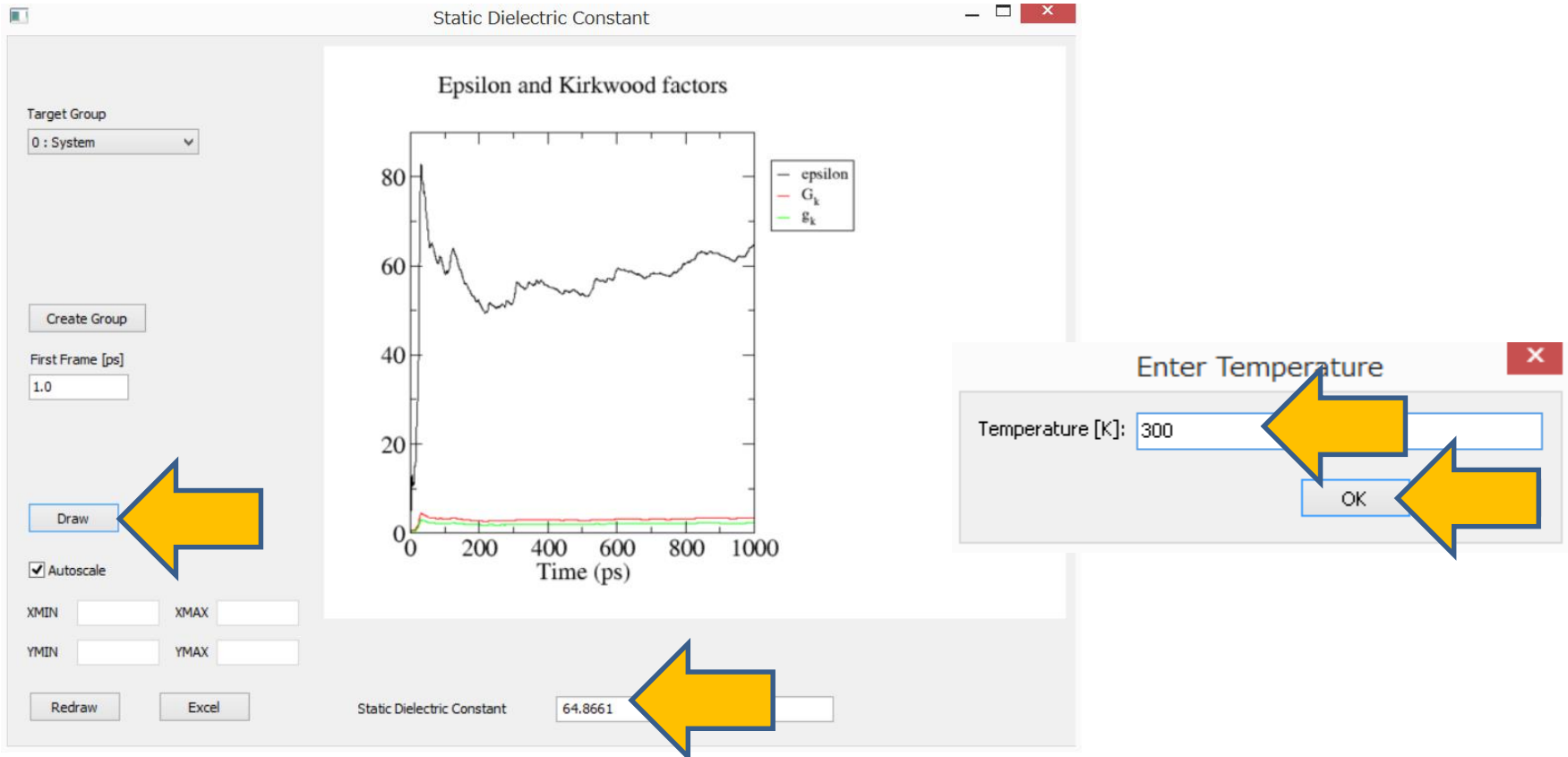
IV. 粘度の算出

計算終了後、「MD>Gromacs>粘度」をクリックする。デフォルトで選択されるファイルを開く操作を3回繰り返す。「Draw」ボタンをクリックすると、粘度の推測値が下に表示される。



V. 誘電率の算出

計算終了後、「MD>Gromacs>比誘電率」をクリックする。デフォルトで選択されるファイルを開く操作を3回繰り返す。「Draw」ボタンをクリックし、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。



facebook アカウント登録

メールアドレスまたは携帯番号 パスワード

ログインしたままにする

X-Ability Co.,Ltd.
さんはFacebookを利用しています。
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の

アカウント登録 ログイン

X-Ability Co.,Ltd.
コンピュータ・テクノロジー

タイムライン 基本データ 写真 いいね! 動画

ユーザー

いいね! 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ビジター投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30

最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。
http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_detailpage_o00_s00...

山口 達明

フロンティアオービタルによる新有機化学教程
フロンティアオービタルによる新有機化学教程
AMAZON.CO.JP

いいね! コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)
11月9日 21:38

👍 いいね!