

Winmostar チュートリアル

Gromacs

粘度・誘電率

V8.000

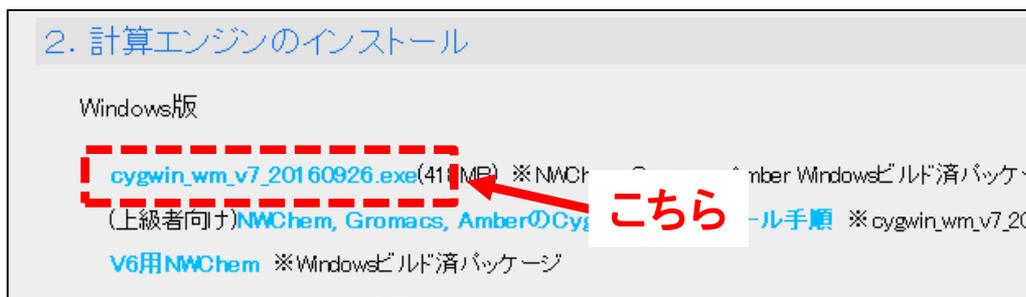
株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2017/10/01

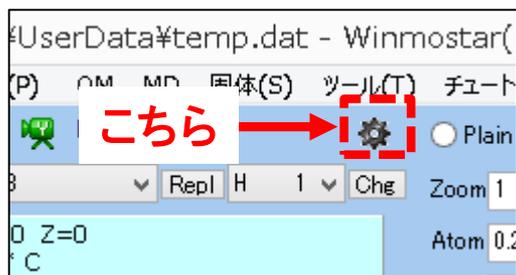
動作環境設定

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。

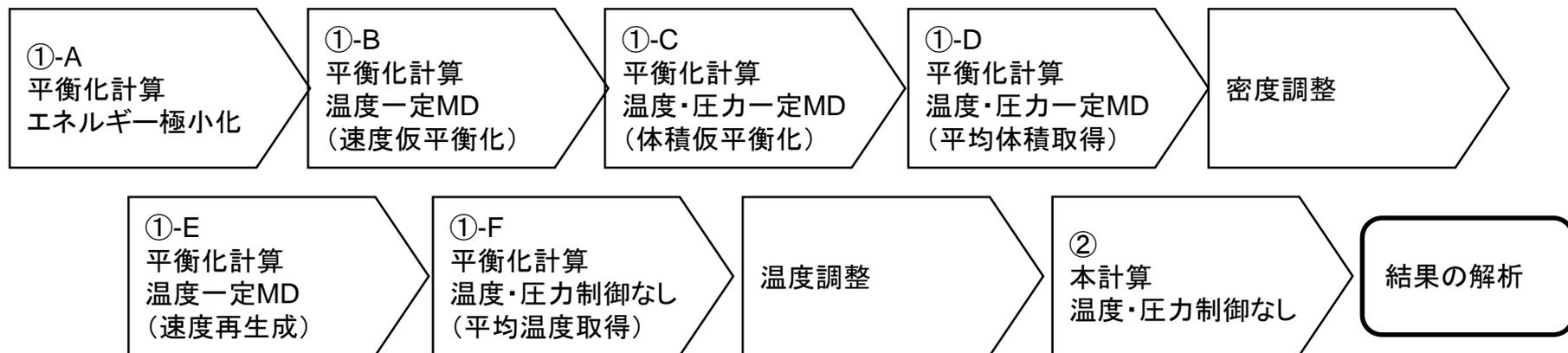


- デフォルトではC:¥直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」>「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



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)で実施する。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 radio buttons: 'Set Density [g/cm^3]' (selected), 'Set Distance from Solute [nm]', and 'Set Box Size [nm]'. The 'Set Density' option has a value of 0.6. There are also input fields for 'Angles' (90.0, 90.0, 90.0) and a 'Box Type' dropdown set to 'cubic'. At the bottom of the dialog are 'Reset', 'Build', and 'Cancel' buttons. A yellow arrow points to the 'Add Water' button, and another yellow arrow points to the 'Put the molecule on main window as solute' checkbox. A blue arrow points from the 'MD' menu in the background to the dialog box.

The background shows the 'MD' menu with the following options:

- 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
- 界面ビルダ

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:

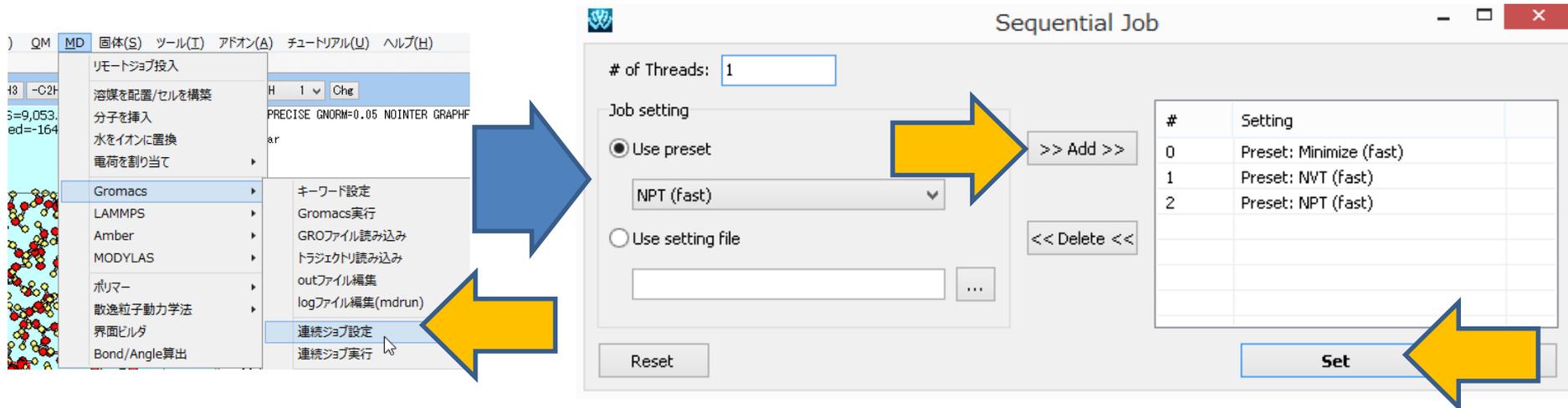
- Add water dialog:** A small window where the number of water molecules is set to 500. A yellow arrow points to the input field, and another points to the 'OK' button.
- Solvate/Build MD Cell window:** The main configuration window. It contains a table with the following data:

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 fields 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.
- 3D Molecular Model:** A window showing the resulting simulation cell with a central solute molecule (yellow and red spheres) surrounded by 500 water molecules (red and white spheres).

II. 平衡化計算 (A~C)

「MD > Gromacs > 連続ジョブ設定」を選択する。
 「Use preset」で「Minimize (fast)」を選び「>>> Add >>>」を1回、
 「Use preset」で「NVT (fast)」を選び「>>> Add >>>」を1回、
 「Use preset」で「NPT (fast)」を選び「>>> Add >>>」を1回、順番にクリックし、
 最後に「Set」ボタンを押す。続けて「MD > Gromacs > 連続ジョブ実行」
 を選択してファイル名を指定しジョブを開始する。

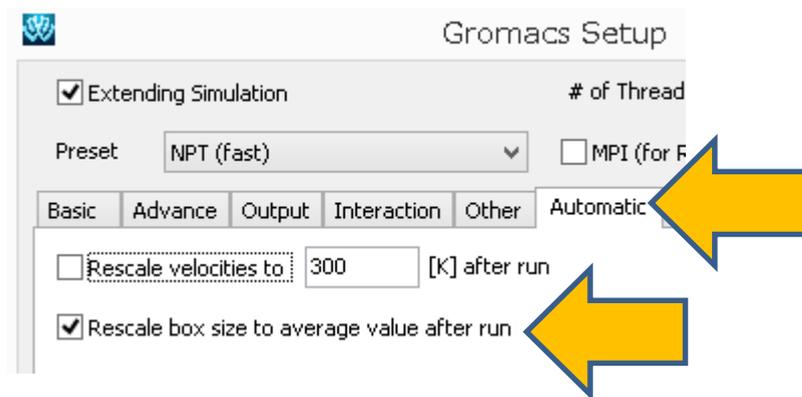
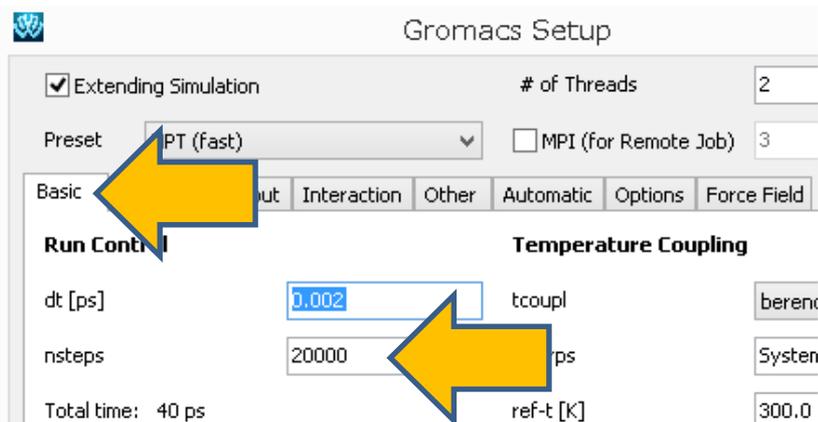


The screenshot shows the 'Sequential Job' configuration window. The 'MD > Gromacs > 連続ジョブ設定' menu path is highlighted in the left sidebar. The 'Sequential Job' window shows 'Use preset' selected, 'NPT (fast)' chosen in the dropdown, and three presets listed in the table: 0: Minimize (fast), 1: NVT (fast), 2: NPT (fast). The 'Set' button is highlighted at the bottom right.

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

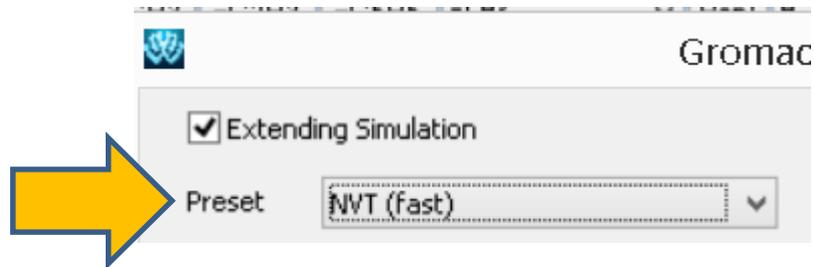
II. 平衡化計算(D)+密度調整

計算終了後、「MD>Gromacs>キーワード設定」にて
「Basic」タブの「nsteps」に“25000”、「Automatic」タブの「Rescale box size...」
にチェックを入れ、「OK」ボタンをおす。次に「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。



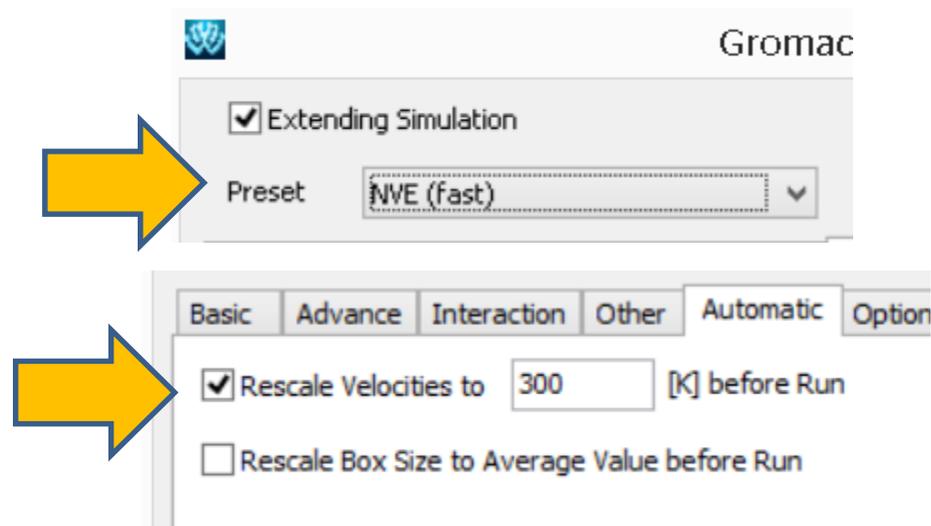
II. 平衡化計算(E)

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)」を指定して「OK」ボタンをクリックし、「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。



II. 平衡化計算(F)

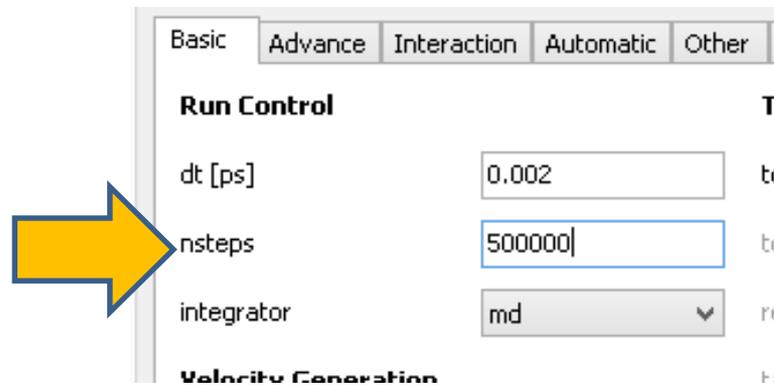
計算終了後、同様に「MD>Gromacs>キーワード設定」にて
まず「Preset」に「NVE (fast)」を指定する。そして、「Automatic」タブの
「Rescale Velocities to ...」をチェックする。
次に、「OK」ボタンをクリックし、「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。



III. 本計算

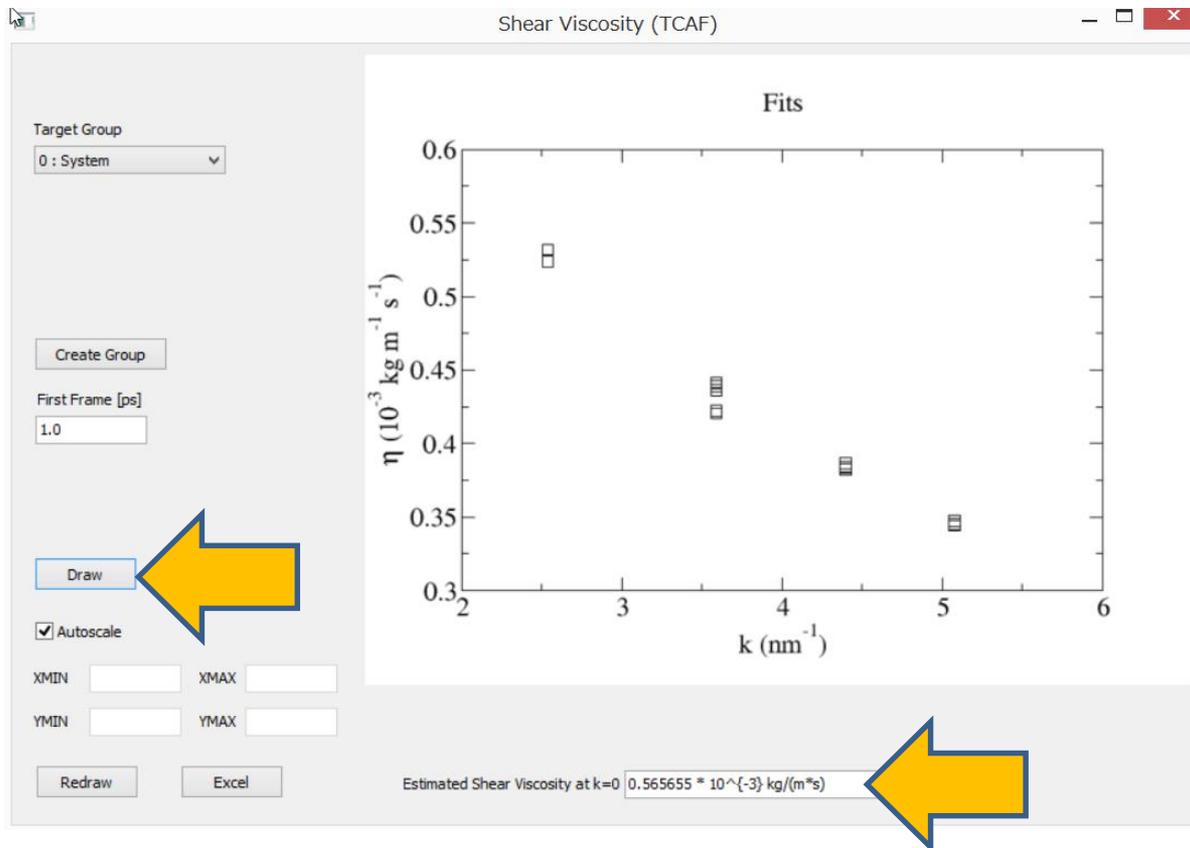
計算終了後、同様に「MD>Gromacs>キーワード設定」を開く。「Basic」タブの「nsteps」に“500000”を指定する。

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



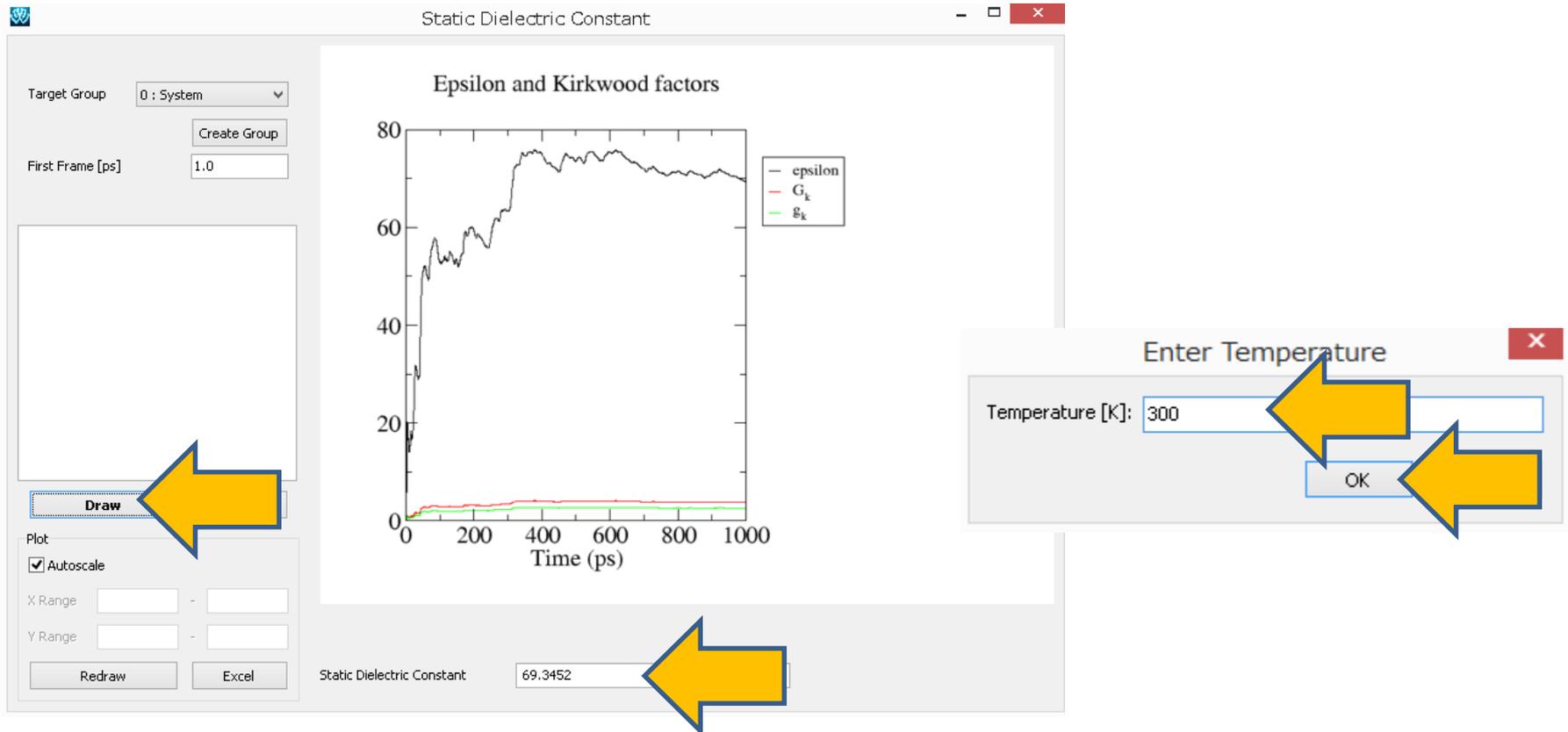
IV. 粘度の算出

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!