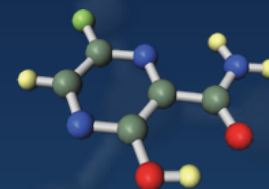


Winmostar



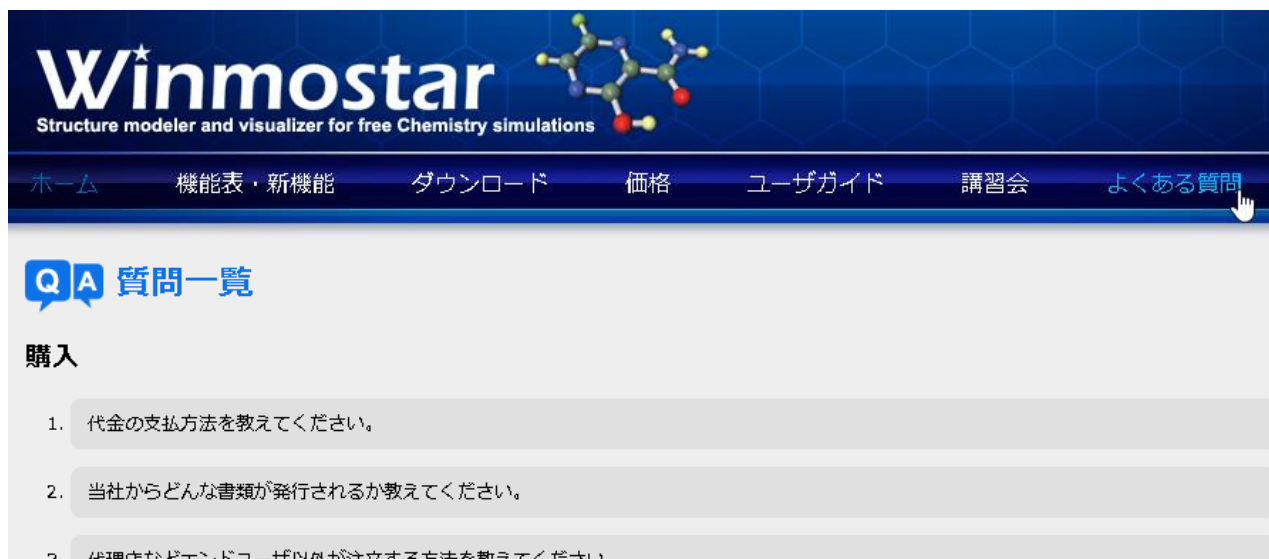
v9 ビギナーズガイド



2019年5月16日 株式会社クロスアビリティ

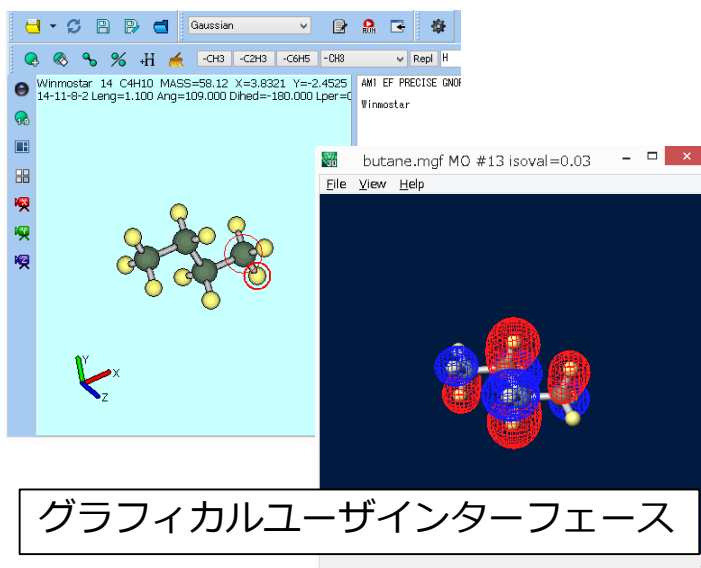
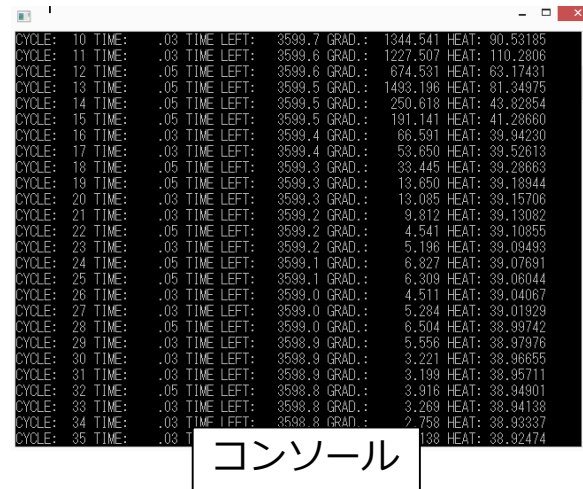
本書について

- 本書では、Winmostar™を初めて使う人を対象に、その導入手順と基本操作を紹介します。
- 不明な点がある場合や本書の通りに動かない場合はまず、随時更新されているよくある質問 https://winmostar.com/jp/qa_jp.php をご確認ください。



Winmostar™とは

- Winmostar™はMOPAC、GAMESS、Gaussian、LAMMPS、Quantum ESPRESSOなどの、通常はコンソールの操作が必要なシミュレーションソフトウェア（**ソルバ**と呼ぶ）に対し、グラフィカルユーザインターフェース（GUI）を提供します。

The image shows a console window displaying the output of a simulation. The output is a log of simulation cycles, showing time, time left, energy, and heat. A text box at the bottom of the image reads 'コンソール' (Console).

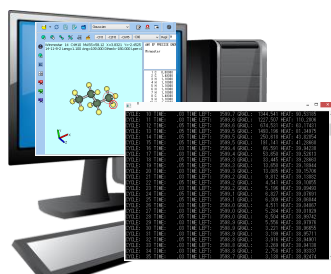
CYCLE	TIME	TIME LEFT	ENERGY	HEAT
10	TIME	.03	3589.7	1344.541
11	TIME	.03	3589.6	1227.507
12	TIME	.05	3589.6	674.531
13	TIME	.05	3589.5	1493.196
14	TIME	.05	3589.5	250.618
15	TIME	.05	3589.5	191.141
16	TIME	.03	3589.4	66.591
17	TIME	.03	3589.4	53.650
18	TIME	.05	3589.3	33.445
19	TIME	.05	3589.3	13.650
20	TIME	.03	3589.3	13.085
21	TIME	.03	3589.2	9.812
22	TIME	.05	3589.2	4.541
23	TIME	.03	3589.2	5.196
24	TIME	.05	3589.1	6.827
25	TIME	.05	3589.1	6.309
26	TIME	.03	3589.0	4.511
27	TIME	.03	3589.0	5.284
28	TIME	.05	3589.0	6.504
29	TIME	.03	3588.9	5.556
30	TIME	.03	3588.9	3.221
31	TIME	.03	3588.9	3.199
32	TIME	.05	3588.8	3.916
33	TIME	.03	3588.8	3.269
34	TIME	.03	3588.8	2.758
35	TIME	.03	3588.8	38.92474

Winmostar™の基本動作

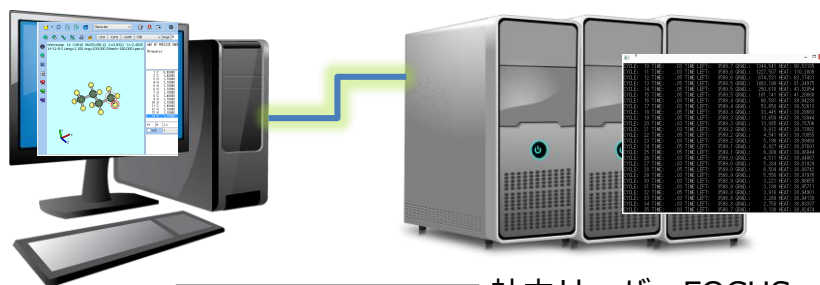
- Winmostar™の主要な機能は以下の3つです。

1. 各種ソルバの入力ファイルを作成
2. 各種ソルバを実行（起動）してシミュレーションを実施
3. シミュレーション結果を解析および可視化

- ソルバを、Winmostar™が動作するWindows PC上で実行するか（**ローカルジョブ**と呼ぶ）、ネットワーク上のLinuxサーバ上で実行するか（**リモートジョブ**と呼ぶ）選ぶことができます。



ローカルジョブ



リモートジョブ

社内サーバ、FOCUS、TSUBAME、
各種計算機センター・クラウド対応

Winmostar™のダウンロードとインストール

- ダウンロード https://winmostar.com/jp/download_jp.html

に移動し、ページ上部にある**安定版最新バージョン**のインストーラを入手します。

- 下図は2019年3月5日時点のものです。現時点の**安定版最新バージョン**を入手します。

バージョン	リリース日	インストーラ	備考
9.1.1	2019/3/3	winmostar0_setup_9.1.1.exe	開発版最新バージョン 変更点
9.0.3	2019/3/3	winmostar0_setup_9.0.3.exe	安定版最新バージョン 変更点



- 続けて**ダウンロード**ページ中部にある**インストール方法**の指示に従ってインストールします。
 - Winmostar™だけでなく、各種ソルバもここに記載の方法でインストールします。

インストール方法

(1) winmostar0_setup_X.XXX.exeを適当なフォルダに保存し、実行します。
※ マシンの推奨スペックはソルバの推奨スペックに準じますが、分からない場合は**よくある質問**をご確認ください。

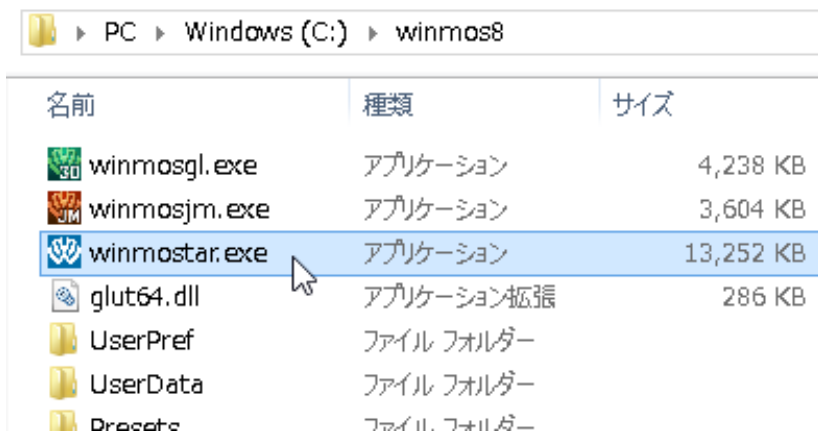
(2) 64bit版Windowsの場合は、インストールするWinmostarの種類（64bit版または32bit版）を選択します。

(3) インストール先フォルダを指定し（デフォルトはC:\winmos8）、インストールを開始します。
インストール完了後、スタートメニューとデスクトップにショートカットが作成されます。

Winmostar™のファイル構成

- Winmostar™をインストールしたフォルダの内容は以下の通りです。（一部のみ記載）

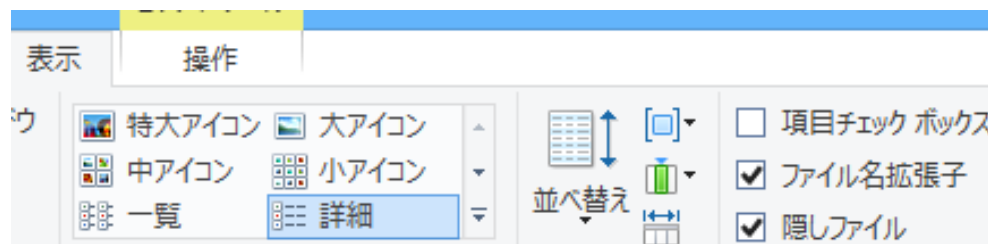
winmostar.exe	: Winmostar™本体のアプリケーション	(Winmostar)
winmosjm.exe	: ローカルジョブを管理するアプリケーション	(Winmostar Job Manager)
winmosgl.exe	: 分子軌道などを表示するアプリケーション	(Winmostar Viewer)
UserPref¥	: Winmostarのユーザ設定を収めたフォルダ	
UserData¥	: 各種シミュレーション用ファイルのデフォルトの保存先となるフォルダ	
samples¥	: サンプルデータを収めたフォルダ	



PC > Windows (C:) > winmos8		
名前	種類	サイズ
 winmosgl.exe	アプリケーション	4,238 KB
 winmosjm.exe	アプリケーション	3,604 KB
 winmostar.exe	アプリケーション	13,252 KB
 glut64.dll	アプリケーション拡張	286 KB
 UserPref	ファイル フォルダー	
 UserData	ファイル フォルダー	
 Dracato	ファイル フォルダー	

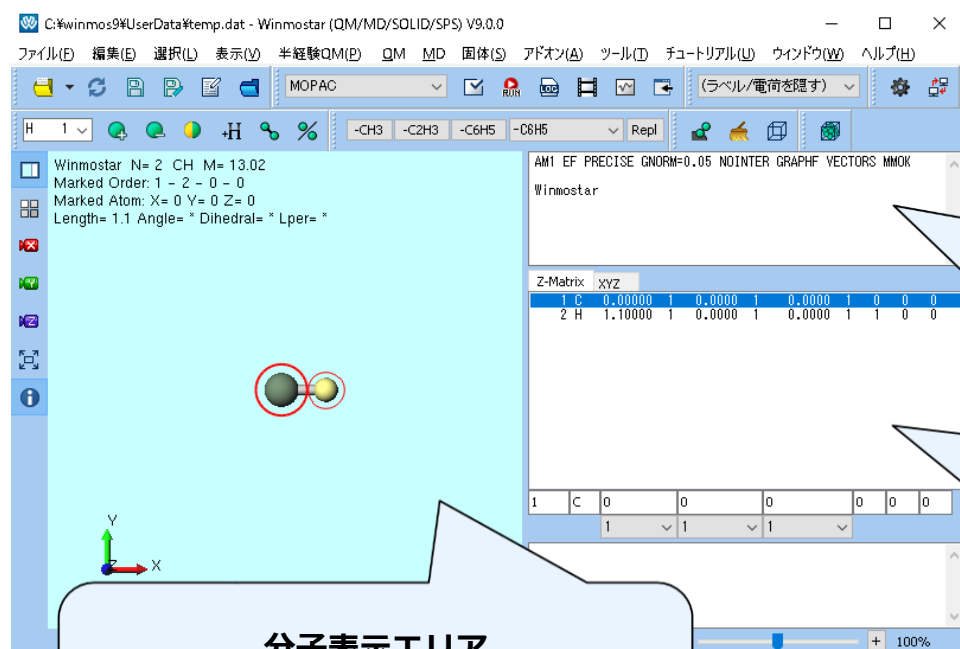
Winmostar™を使う前に

- Winmostarは、同名で異なる拡張子のファイル（例えばmethane.datとmethane.logなど）を多数生成するため、エクスプローラ上で拡張子を表示することを推奨します。
 - Windows 7での設定方法：
 - エクスプローラを開く→Altキーを押す→[ツール]→[フォルダーオプション]→[表示]→[登録されている拡張子は表示しない]のチェックが外れた状態にする
 - Windows 8、10での設定方法：
 - エクスプローラを開く→[表示]→[ファイル名拡張子]のチェックが付いた状態にする



Winmostarの起動

- winmostar.exeまたはそのショートカットをダブルクリックすると**メインウィンドウ**が開きます。
- 起動直後、**分子表示エリア**と**座標表示エリア**に**C原子（緑）**と**H原子（黄）**が結合した分子が、**キーワード表示エリア**にはMOPACの構造最適化計算用のキーワードが出現します。



キーワード表示エリア

分子表示エリアに表示中の分子構造を実際に計算する際の計算条件が、選択されたソルバの入力ファイルの形式で表示される

座標表示エリア

分子表示エリアに表示中の分子構造の座標がZ-MatrixまたはXYZ形式で表示される

分子表示エリア

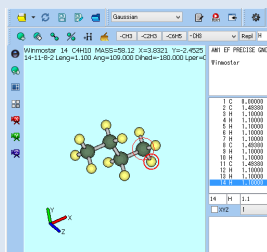
編集中原子・分子構造が表示される

メインウィンドウの構成

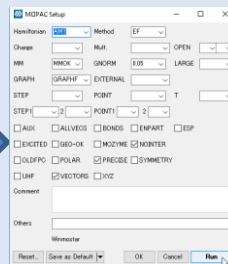
Winmostarの基本的な処理の流れ

ユーザ操作

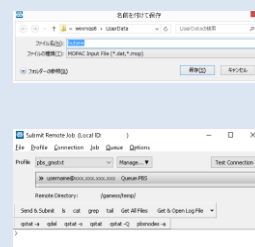
分子構造を作成、または
既存のファイルを読み込む



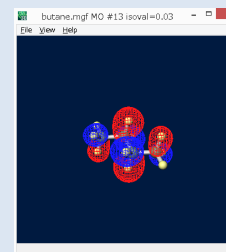
キーワードを設定する



入力ファイル名を指定し
ソルバを実行する



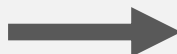
計算結果のファイルを
可視化・解析する



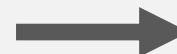
バックグラウンド処理



使用するソルバの形式で、分子
構造とキーワードが記載された
入力ファイルを保存される



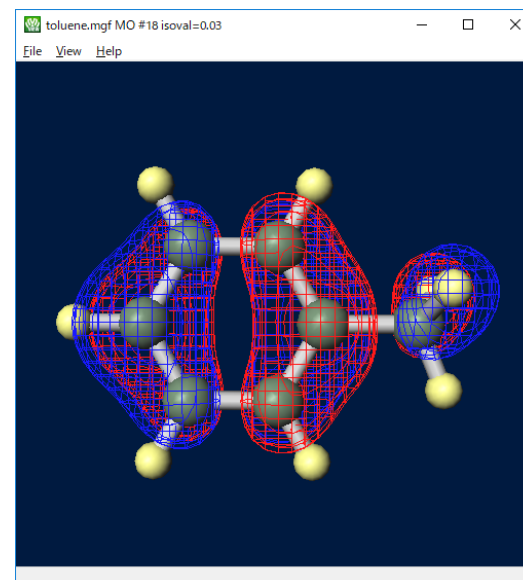
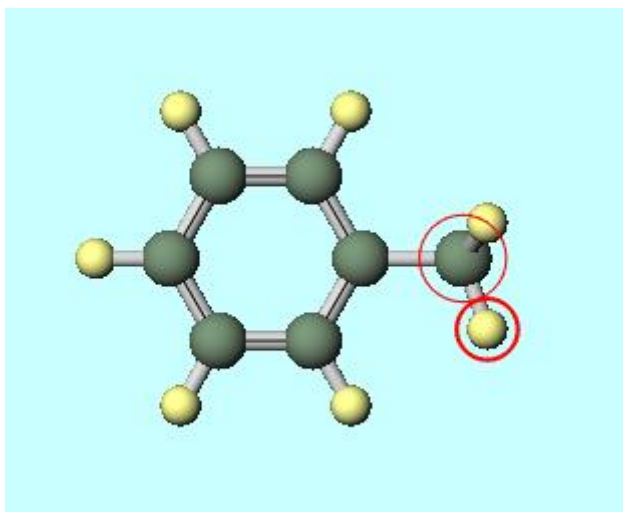
ソルバを起動し入力ファイルを
読み込ませる



ソルバが計算結果のファイルを
出力する

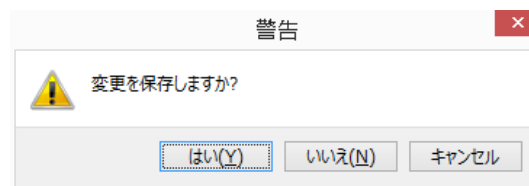
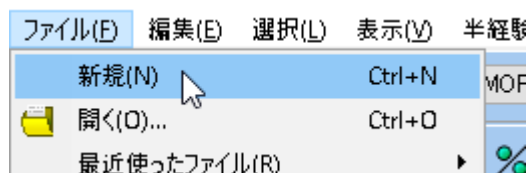
例題：トルエン分子のMO計算

- 最初の例題として、孤立したトルエン分子の分子軌道を、MOPACを用いて計算します。
 - MOPACは半経験的量子化学計算のソルバの一つです。
 - トルエン分子の電子状態を計算し、得られた結果のうちHOMO準位の分子軌道を可視化します。

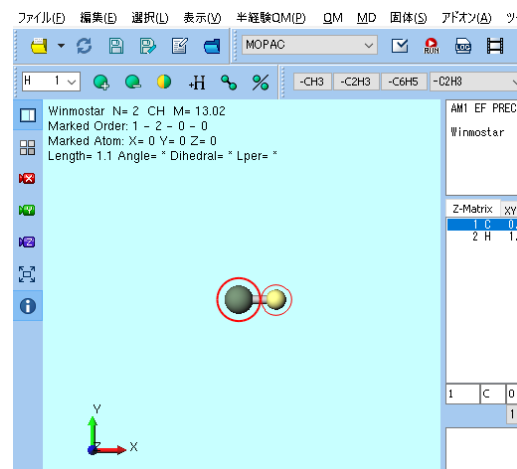


例題：トルエン分子のMO計算（モデリング）

- まずトルエン分子の構造を作成します（**モデリング**と呼ぶ）。
- メインウィンドウのメニューの[ファイル]-[新規]をクリックします。
 - 「変更を保存しますか？」と聞かれたら[いいえ]をクリックします。



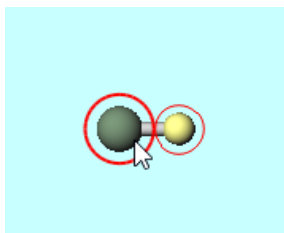
- メインウィンドウが初期状態に戻ります。



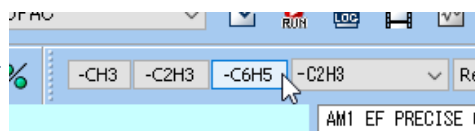
例題：トルエン分子のMO計算（モデリング）

- 分子表示エリアで、太い赤丸（**マーカー**と呼ぶ）で選択した原子を様々な原子団（置換基）に置換していくことでトルエン分子をモデリングします。

緑のC原子を左クリックし
マーカーで選択された状態に



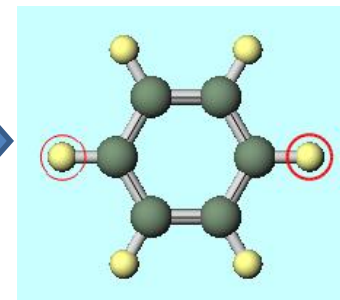
[-C6H5]ボタンをクリック



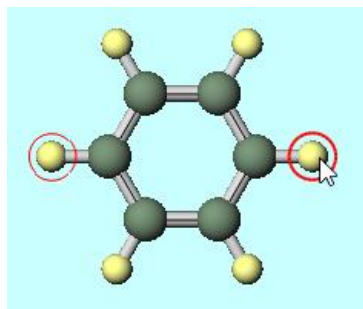
[Repl]ボタンをクリック



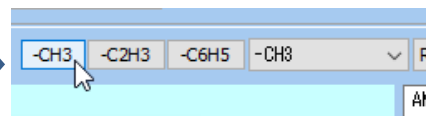
ベンゼンに変化



上図のH原子を左クリックし
マーカーで選択された状態に



[-CH3]ボタンをクリック



[Repl]ボタンをクリック

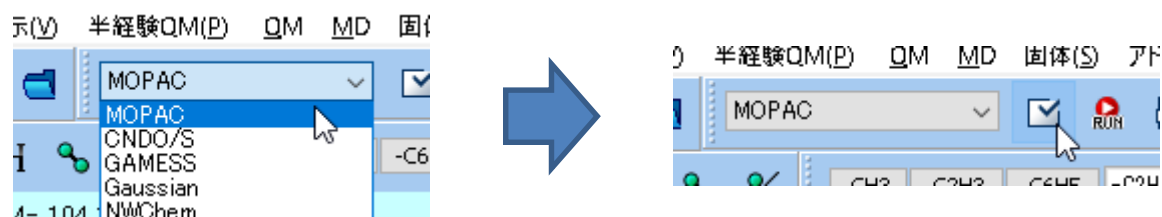


トルエンに変化



例題：トルエン分子のMO計算（キーワード設定）

- MOPACの計算条件（**キーワード**と呼ぶ）を設定します。
- メインウィンドウ上部の[ソルバープログラム]プルダウンでMOPACを選択し、その右にある[キーワード設定]ボタンを押します。（ボタン名はポインタを合わせると表示されます）

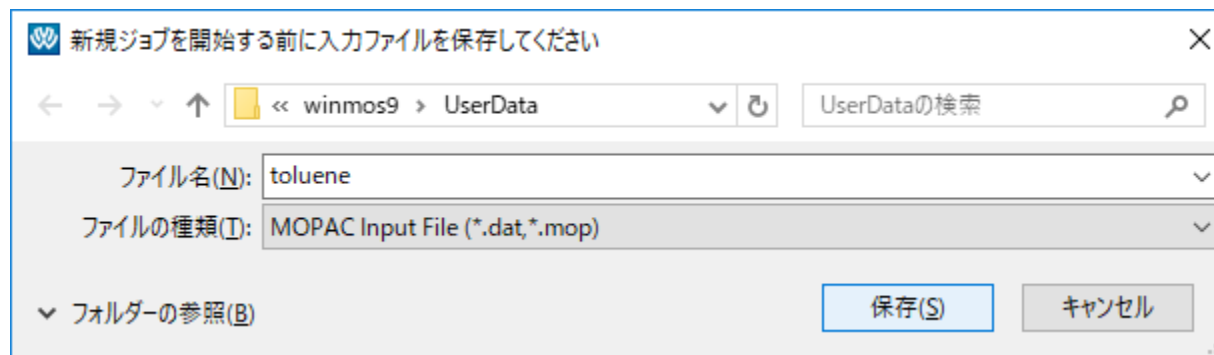


- 開いたMOPAC Setupウィンドウで計算条件に応じてキーワードを変更することが可能ですが、ここではデフォルトの設定を使うので何も変更せずウィンドウ右下の[Run]ボタンを押します。



例題：トルエン分子のMO計算（ソルバの実行）

- [新規ジョブを開始する前に入力ファイルを保存してください]というダイアログが出現します。[ファイル名]に「toluene」と入力し[保存]ボタンを押すと、winmos9¥UserDataの下にtoluene.datというファイルが作成され、続けてWinmostarがtoluene.datを入力ファイルとしてMOPACを起動します。



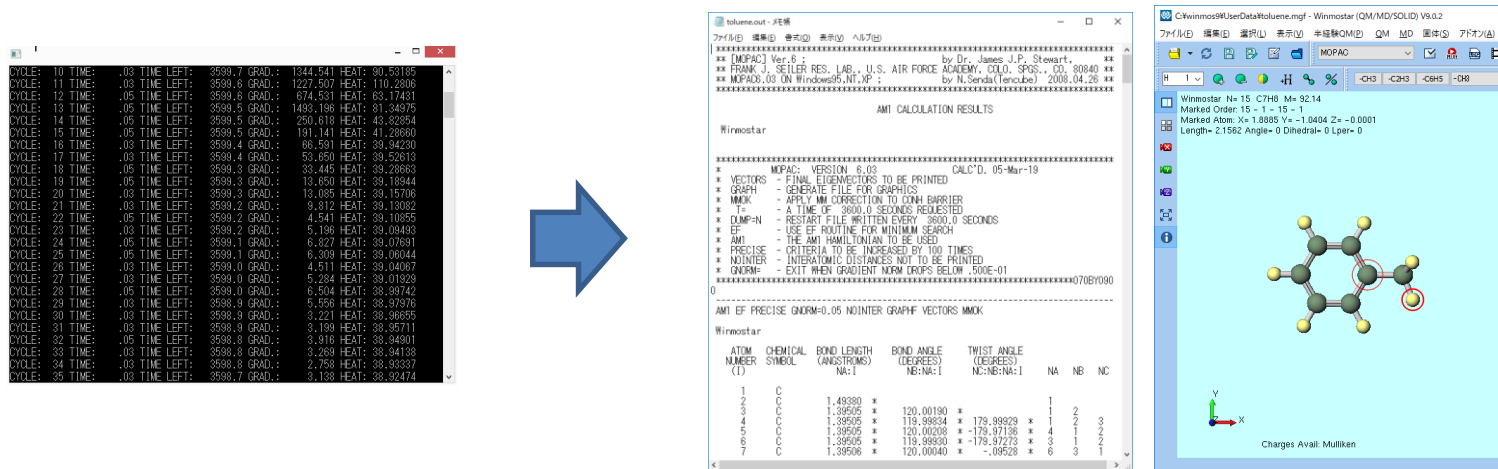
注：MOPAC, CNDO/S以外のソルバの場合は、Winmostar Job Managerが起動し、Winmostar Job Manager経由でソルバが起動する。

ファイル名に関する注意

- Winmostarから何かしらのファイルを保存する際に、そのファイルと、そのファイルが置かれるフォルダ（上位階層全て含む）の名前に、**半角英数以外が含まれる**と、Winmostarから呼び出される一部の外部プログラムにおいてまれに処理に失敗する場合があります。
 - 問題がないケース：
 - C:¥winmos9¥UserData¥methane.dat
 - D:¥MyDocument¥methane_2.dat (アンダースコアは可)
 - 推奨されないケース：
 - C:¥winmos9¥UserData¥M E T H A N E .dat (全角文字は非推奨)
 - C:¥winmos9¥UserData¥メタン.dat (日本語は非推奨)
 - C:¥winmos9¥UserData¥methane 2.dat (スペースは非推奨)
 - C:¥Users¥sato¥データ¥methane.dat (フォルダ名が非推奨文字)
 - C:¥Users¥佐藤¥methane.dat (ユーザ名が日本語のためフォルダ名が非推奨文字)

例題：トルエン分子のMO計算（ソルバの実行）

- ソルバの実行中（今回の計算では1秒もかからない）はプロンプトウィンドウが出現します。
- MOPACの場合のみ、ソルバの実行直後に自動で以下の様に動作します。
 - 処理のログ（toluene.out）がテキストファイルで開かれます。
 - 計算で得られた分子構造が書かれてたファイル（toluene.arc）がメインウィンドウで開かれます。
- 計算の終了後は、ログファイルを見て計算が正常終了または異常終了したか確認します。



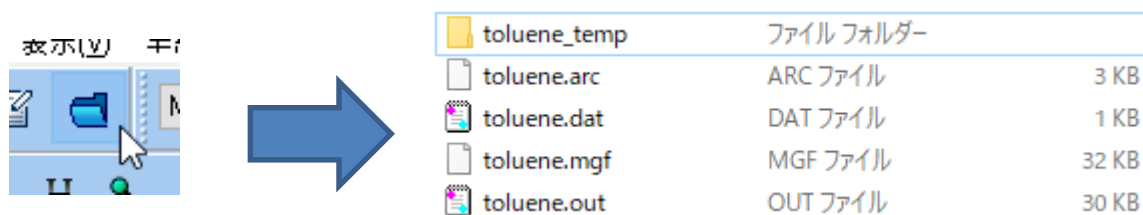
The screenshot illustrates the Winmostar software interface during a MOPAC calculation for toluene. The interface is divided into three main windows:

- Left Window (toluene.out):** Displays the output log file. It shows the progress of the calculation, including the number of cycles, time, and energy. The log file is titled "toluene.out - 文書".
- Middle Window (AM1 CALCULATION RESULTS):** Displays the results of the AM1 calculation. It includes a table of atomic parameters (Atom Number, Chemical Symbol, Bond Length, Bond Angle, Twist Angle) and a table of molecular parameters (NA, NB, NC).
- Right Window (Winmostar):** Displays the molecular structure of toluene (C₇H₈). The structure is shown as a ball-and-stick model with carbon atoms in grey and hydrogen atoms in white. The window title is "Winmostar (QM/MD/SOLID) V9.0.2".

A large blue arrow points from the log file window to the molecular structure window, indicating the flow of data from the calculation results to the visualization.

例題：トルエン分子のMO計算（ソルバの実行）

- 生成されたファイルを確認するためにメインウィンドウ上部の[フォルダを開く]ボタンを押し、現在開かれているファイルが置かれたフォルダを表示します。



- Winmostarでは、ソルバを実行して生成する各種出力ファイルが

(入力ファイル名の拡張子を除いた文字列) .out

(入力ファイル名の拡張子を除いた文字列) .arc ...

といった具合に命名されます。拡張子はソルバにより異なります。

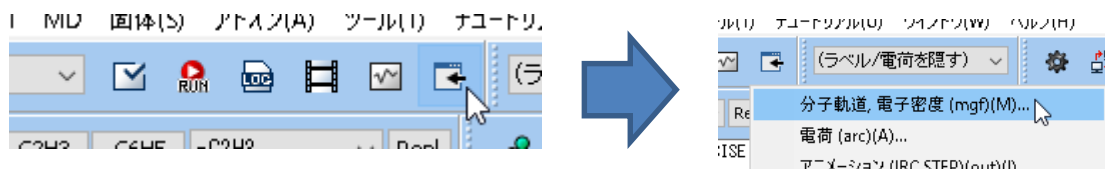
- 同様に、複数の出力ファイル（場合によっては入力ファイルも）が収められた

(入力ファイル名の拡張子を除いた文字列) _temp¥

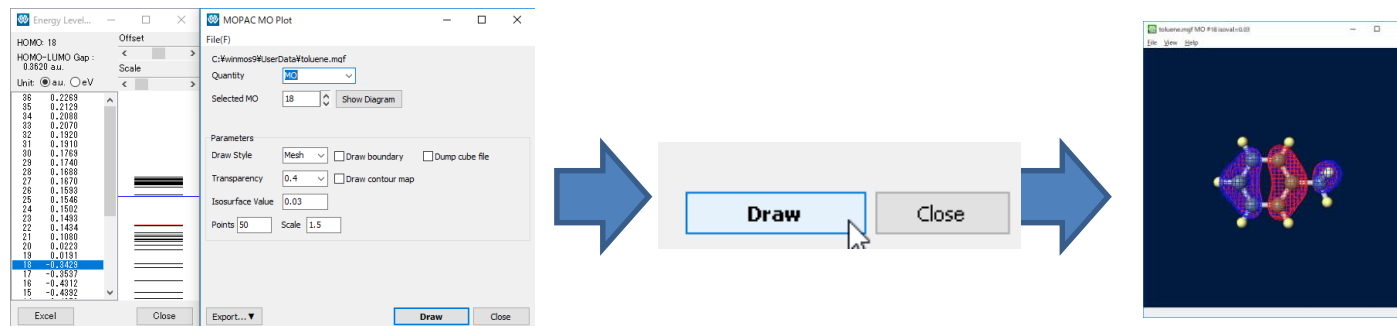
という名前のフォルダも生成されます。フォルダ名の接尾辞はソルバにより異なります。

例題：トルエン分子のMO計算（計算結果の可視化）

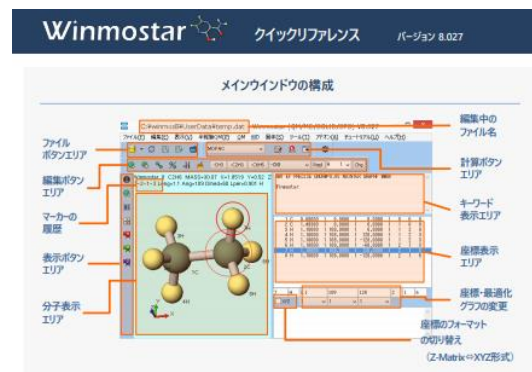
- MOPACが出力したファイルの可視化を行います。
- メインウインドウ上部の[結果解析]ボタンを押し[分子軌道、電子密度 (mgf)]を選択すると[開く]ダイアログが開きます。デフォルトでは、メインウインドウで開かれているファイルに紐付けられたファイルが選択されるので、そのまま[開く]ボタンを押します。（toluene.mgf）



- Energy Level DiagramウインドウとMOPAC MO Plotウインドウが開きます。MOPAC MO Plotウインドウの[Draw]ボタンを押すとWinmostar Viewerが起動しHOMOの分子軌道が出現します。



-



- よくある質問
- https://winmostar.com/jp/ga_jp.php
- をご確認ください。

サポート

- インストールがうまくいかない方は、
 - ノードロックライセンス搭載高性能ワークステーション

https://winmostar.com/jp/purchase_jp.html

- Winmostarサポートパック

https://winmostar.com/jp/wm_supportpack.pdf

の導入をご検討ください。

- **Winmostarサポートパック**

- メールでの操作サポート、各種講習会、個別フォローアップ、個別プランニング、Winmostar™のカスタマイズなどのサポートを受けて頂くことができます。
- 詳細は https://winmostar.com/jp/wm_supportpack.pdf をご確認ください。

以上