



Winmostar V11サポート

パンフレット

2023年11月7日 株式会社クロスアビリティ

Winmostar V11サポートとは

- 本サービスは、Winmostar™を既に導入されたお客様や、これから導入されるお客様に、よりスピーディーにWinmostar™を使用して成果を挙げて頂くためのサービスです。
- 本サービスは、具体的に以下のようなご利用を想定しています。
 - 初めて計算化学を導入する職場において、Winmostar™を日常業務に使える環境をすぐに構築したい。
 - 社内・部内の計算化学担当者の育成、教育期間を短縮したい。
 - 計算化学に関する高難易度な課題を解決するために、タイムリーに解決策を手に入れたい。



Winmostar V11サポートの内容

- 様々なご要望にお応えできるよう、以下のサポート内容を用意しています。

- ① Winmostar基礎講習会（基礎理論の解説と実習を含む）
- ② メールでの操作サポート
- ③ インストール・設定作業代行
- ④ カスタマイズ可能な個別型の講習会
- ⑤ 実施された計算内容に関する個別フォローアップ
- ⑥ 計算業務の個別プランニング
- ⑦ Winmostar™のカスタマイズ

Winmostar V11サポートの導入方法

- ・ 民間企業・官公庁の方がWinmostar V11サポートを受ける方法には以下の2つがございます。

A) Winmostar V11本体製品に付属するサポートの利用

- － 基本的には、まずこちらをご利用頂くことになります。
- － B)のサポートの内容を個別に購入するより安く各種サポートを受けて頂けます。

B) サポートの内容の追加購入

- － A)のWinmostar V11本体製品に付属するサポートでは不足する分を柔軟に補うことができます。

A) Winmostar V11本体製品に付属するサポート

- 下表のサポートが、民間企業・官公庁向け製品本体に付属しています。

	プラチナサポート	ブロンズサポート	レギュラーサポート
特徴	主に、シミュレーションおよびWinmostarを初めて導入される方を対象とした、コンサルティングが充実しているプランです。	主に、シミュレーションの経験はあるが初めてWinmostarを導入される方を対象とした、導入支援が手厚いプランです。	主に、シミュレーションとWinmostarの経験がある程度ある方を対象とした、最低限のサポートでコストを抑えられるプランです。
①Winmostar基礎講習会	最大6回	最大6回	最大3回
②メールでの操作方法サポート	最大12回	最大12回	最大6回
③インストール・設定作業代行	最大1人日分	最大1人日分	
④個別講習会	最大2回	最大1回	
⑤実施された計算内容に関する個別フォローアップ	最大4回	最大2回	
⑥計算業務の個別プランニング	最大1回		
⑦Winmostar™の小規模なカスタマイズ			

B) サポートの内容の追加購入

- 製品本体に付属するサポートに加え、追加で下表のサポートを受けて頂くことができます。
- 実施する場所によっては、旅費交通費を別途請求することがあります。
- カスタマイズの費用は開発規模に応じて変化しますので、別途お問い合わせください。

	価格（税別）
①Winmostar 基礎講習会	1回・1人あたり 5万円
②メールでの操作方法 サポート	質問6回あたり 10万円
③インストール・ 設定作業代行	1人・日あたり 15万円
④個別講習会	1回あたり 25万円
⑤実施された計算内容に 関する個別フォローアップ	1回あたり 15万円
⑥計算業務の 個別プランニング	1回あたり 50万円

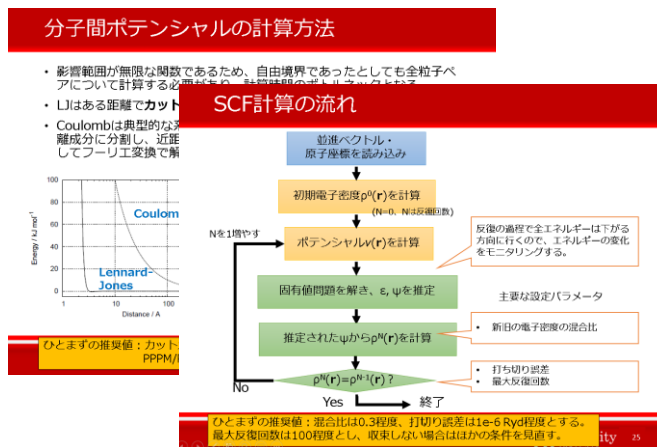
各項目の詳細 1/7

① Winmostar基礎講習会

- 量子化学、分子動力学、固体物理計算に関して定期的に弊社オフィスにて開催します。各種計算手法の原理を理解し、Winmostarを用いた具体的な計算手順を習得して頂けます。
- 教科書だけでは分かりにくい具体的な計算手順を、極力数式を使わずに解説します。

Winmostar基礎講習会の内容：

- 計算可能な物性・現象の紹介
- 産業界における適用事例の紹介
- 情報収集方法、学習方法の紹介
- 基礎理論と各種パラメータの解説
- 計算のプラン方法と推奨パラメータの紹介
- 計算の実習（基礎・応用）
- よくある質問と回答の紹介



Winmostar基礎講習会資料の一部

Winmostar講習会の様子

各項目の詳細 2/7

② メールでの操作方法サポート

- ご利用者からの質問に対し、弊社スタッフが専門知識に基づいてメールで回答します。
- 回答回数などの基準については契約書ひな形をご確認ください。
- 操作方法サポートの例：

【質問】 Gromacsを実行すると、ログファイルに以下のメッセージが表示され計算が異常終了しました。どのように対処したらいいでしょうか。

IMPORTANT: This should not happen in a stable simulation, so there is probably something wrong with your system. Only change the table-extension distance in the mdp file if you are really sure that is the reason.

(添付ファイル：water.gro, water.top, gmx_tmp.in)

【回答】 お問い合わせいただきありがとうございます。

サポートパックのメールでの操作方法サポートとして回答致します。

1. gmx_tmp.inを拝見すると、圧力制御が有効になっているので、まずはpcoupl=noneで実行をしてください。その際、ポテンシャルエネルギー、温度、圧力をモニタリングし、それらが定常状態になるまで計算を流してください。モニタリングするには[MD]-[Gromacs]-[エネルギー変化]を選択してください。
2. それでも異常終了する場合は、...

各項目の詳細 3/7

③ インストール・設定作業代行

- WindowsマシンへのWinmostar™、ソルバのインストールや、リモート接続用の設定ファイルの作成を行います。
- 必要に応じて旅費交通費等の実費を別途請求致します。
- 作業日までに、PCやリモートサーバにおいてソルバ等をインストールできるようにアクセス権限を変更し、リモートサーバへのSSH接続できるようにしてください。

各項目の詳細 4/7

④ 個別講習会

- Winmostar導入講習会、Winmostar基礎講習会とは異なりお客様以外が参加されないため、講習会中に気兼ねなくご質問頂くことが可能です。
- Winmostar基礎講習会の内容とチュートリアルの中からお希望の内容を選択し、講習会の内容をカスタマイズして頂けます。
- Winmostar基礎講習会とチュートリアルを超える内容の講習会をご希望の場合は、資料作成のため個別に見積もりを行います。
- 個別講習会は何人でもご参加頂けます。
- 個別講習の一例：

13:00-13:30	Winmostarの紹介
13:30-14:00	チュートリアル 分子モデリング 有機分子
14:00-15:00	量子化学計算の原理に関する講義
15:15-18:00	チュートリアル MOPAC 基礎編
	チュートリアル CNDO/S 基礎編
	チュートリアル Gaussian 基礎編
	チュートリアル Gaussian MEP・IRC計算

各項目の詳細 5/7

⑤ 実施された計算内容に関する個別フォローアップ

- 既にお客様が実施された計算の内容をご持参頂き、それに対するアドバイスを、弊社の計算化学の経験が豊富なスタッフが行います。
- 弊社以外で開催の場合は、必要に応じて旅費交通費等の実費を別途請求致します。
- 個別フォローアップの一例：

【お客様の持ち寄り内容】

とある文献のトレースして、分子動力学計算から自己拡散係数を評価したが、文献と異なる値が得られてしまった。

【弊社からのフォロー内容】

- まず、その文献で算出されているほかの物性（圧力、動径分布関数）についても取得するように提案した。
- 圧力、動径分布関数も異なることが分かったため、力場パラメータが異なる可能性が高いことをお伝えし、詳細な計算条件を調査したところ、実際に力場パラメータの設定が異なることが分かった。
- 文献と同じ力場パラメータ設定する方法をお伝えした。
- また、文献で報告された計算のステップ数が短かったため、算出された自己拡散係数の不確かさが大きくなっており、具体的に不確かさの見積もる方法をお伝えした。

各項目の詳細 6/7

⑥ 計算業務の個別プランニング

- お客様の社内で抱えられている問題を、計算化学や、場合によってはその他の方法を用いて解決するためのプランニングを、弊社の計算化学の経験が豊富なスタッフが行います。
- 先述の個別フォローアップと組み合わせることで、プランニングの効果確認を行うこともできます。
- 弊社以外で開催の場合は、必要に応じて旅費交通費等の実費を別途請求致します。
- 計算の実施または、手順書の作成も別途承りますので、ご相談ください。
- 個別プランニングの一例：

【お客様のニーズ】

フィルム材料における溶媒への透過性を評価したい。

【提案するプラン】

透過性を、溶解性と拡散性に分割して評価することを提案します。

まず溶解性について、ハンセン溶解度パラメータによる高速な評価方法と、エネルギー表示法による高精度な評価方法の具体的な手順を紹介します。

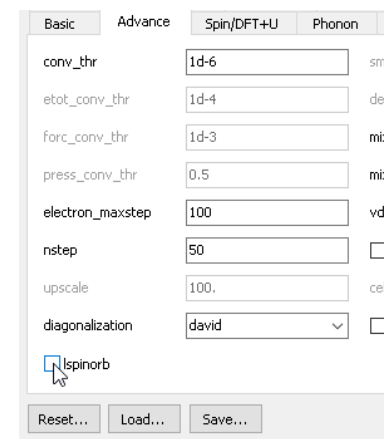
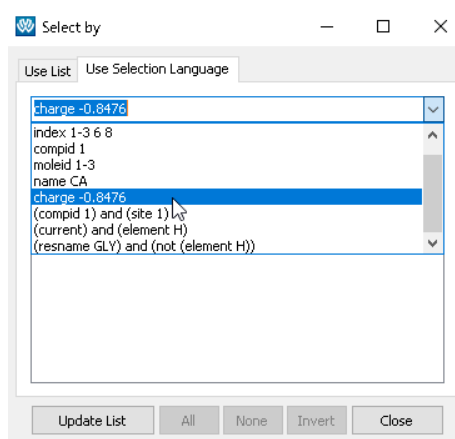
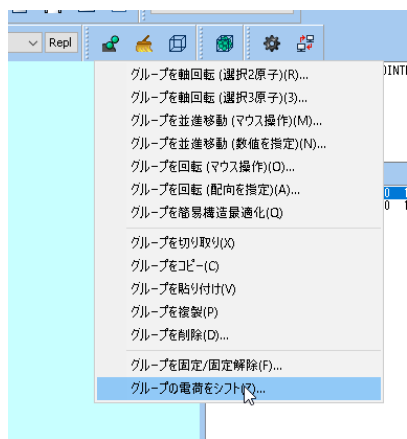
次に、拡散性について、分子動力学計算による自己拡散係数の評価方法の手順を紹介します。

各項目の詳細 7/7

⑦ Winmostar™の小規模なカスタマイズ

- 小規模な開発工数の範囲で、お客様のお望みの形で、優先的にWinmostar™を改良することができます。
- 先述の個別フォローアップ・プランニングの結果、Winmostarの改良で業務が加速することが判明した場合などにご利用頂くとより効果的です。
- 開発が大規模となる場合は、開発費用から該当工数分をお値引き致します。
- 小規模なカスタマイズの例：

- ・ 分子構造の編集機能の追加
- ・ 選択記述言語の追加
- ・ 計算条件キーワードの追加 など



利用条件、お見積り、お問合せ

- ご購入頂く上で、[サポートサービス規約](#)にご同意いただきます。[サポートサービス規約](#)には本サービスの内容の詳細が記載されています。
- 本サービスは民間企業、官公庁のお客様を対象としており、教育機関の方は導入頂けません。
- ご購入時に当サービスの利用者をご登録頂きます。複数人でサービスの利用をシェアすることが可能です。
- Winmostar™プロフェッショナル版の契約期間内のみご利用可能です。
- 料金は先払いとなります。サポート期間は契約開始から1年間です。
- 返金は不可ですが、繰り越し分を除く、当該年度ご購入された回数のうち、未使用分の半分（小数点以下は切り捨て）を翌年に繰り越すことができます。翌年は繰り越し分から消費され、2年以上繰り越すことはできません。
- ご購入後、下位のパックへの変更は不可能ですが（例えば、プラチナからブロンズなど）、上位のパックへの変更は可能です（例えば、レギュラーからブロンズなど）。契約期間を変更せず上位のパックへ変更する場合は、差額分と手数料10,000円（税別）のみ請求致します。
- 特定の項目のみ追加購入することも可能です。

お見積り、ご不明点はこちらよりお問合せください。

https://winmostar.com/jp/support_jp.php

以上