

 winmostar チュートリアル

Gromacs

基礎編

V10.4.3

2021年4月1日

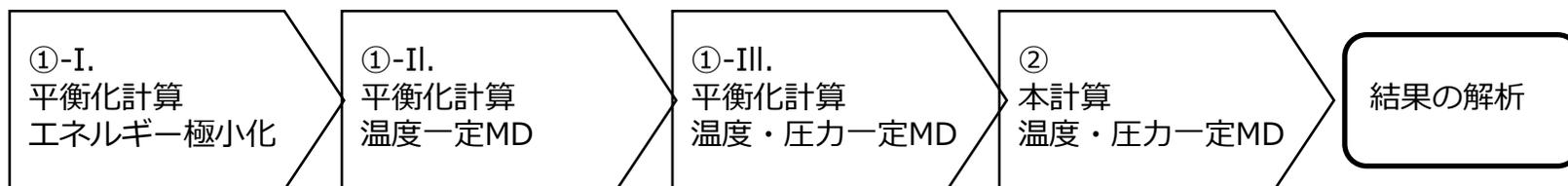
株式会社クロスアビリティ

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。

概要

- 常温常圧のテトラヒドロフラン（THF）の液体について、系の作成と平衡化計算と本計算を実行し、各種エネルギーとトラジェクトリの確認、比熱、圧縮率、動径分布関数、自己拡散係数の算出を行います。



注意点：

- 本チュートリアルでは、実施時間を短縮するため平衡化計算のステップ数を短めに設定しています。
- 同様の理由で計算精度は落とし、ソルバ間で完全に計算条件を一致させることは難しいため、他のソルバで計算した結果と異なることがあります。
- 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。
- 平衡化計算、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。
- 相互作用計算方法や力場の種類も、計算結果に大きく影響します。

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。

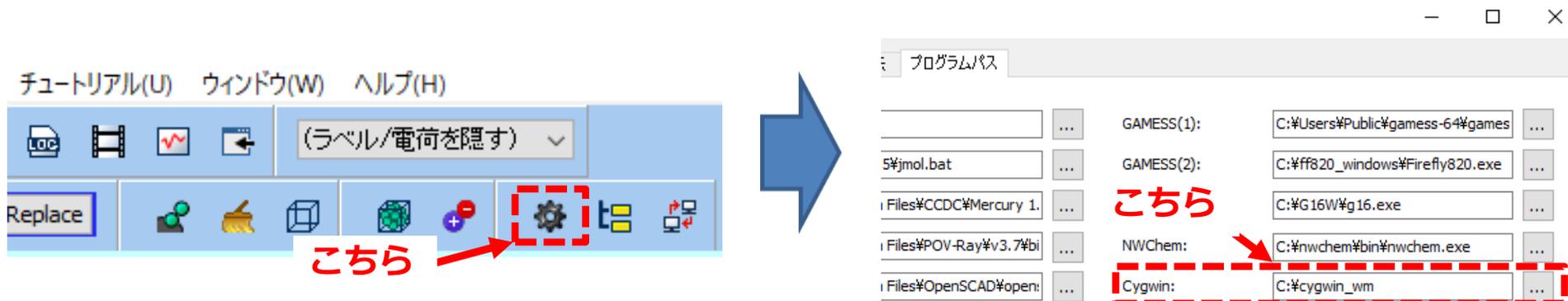
(6) 以下のいずれかのリンク先の手順でWinmostar用のCygwin環境 (cygwin_wmと呼びます) を構築します。

[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 \(非推奨、上級者向け\)](#)

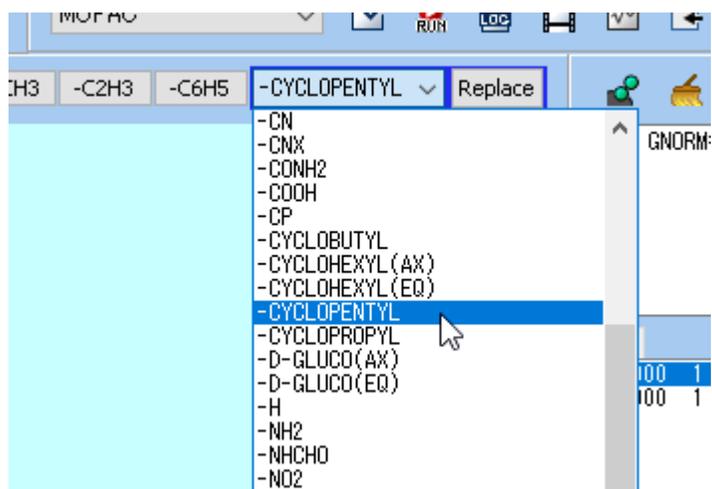
[Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合 \(ベータ版\)](#)

- 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。

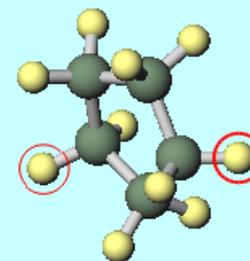


I. 分子を作成

1. ファイルメニュー | 新規をクリックする。
2. ツールバーの**フラグメント**を選択プルダウンメニューで**-CYCLOPENTYL**を選択する。
3. **Replace**ボタンをクリックするとシクロペンタンが作成される。

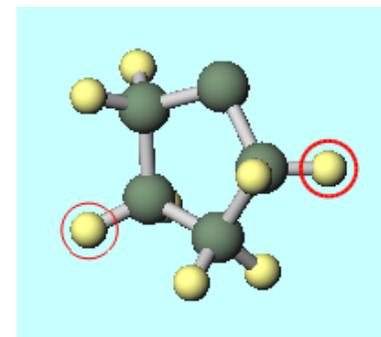
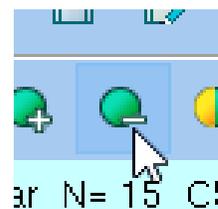
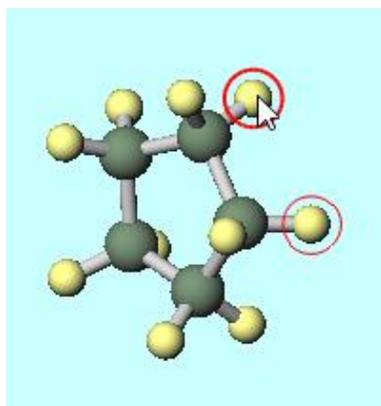


Winmostar N= 15 C5H10 M= 70.13
Marked Order: 2 - 15 - 1 - 0
Marked Atom: X= 1.1 Y= 0 Z= 0
Length= 4.1707 Angle= 10.069 Dihedral= * Lper= *



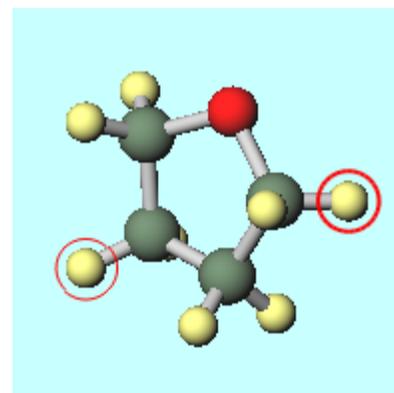
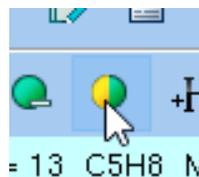
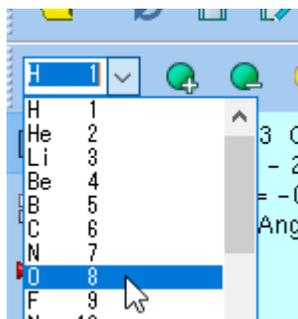
I. 分子を作成

1. ある炭素（緑）に接続した2つの水素（黄色）を続けてクリックする。
2. 原子を削除ボタンを2回押す。



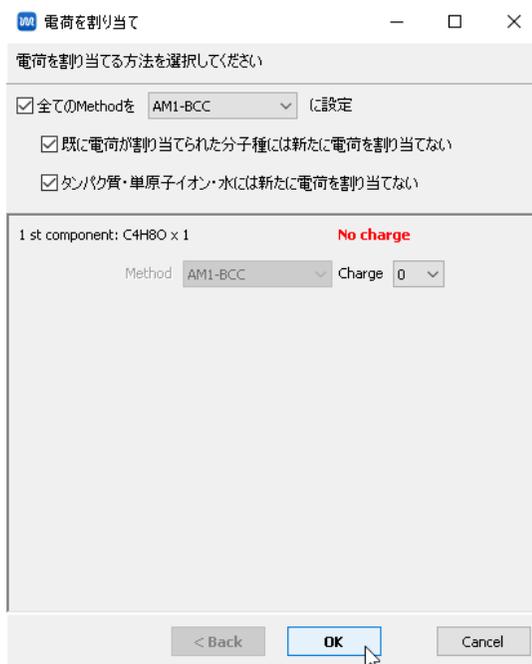
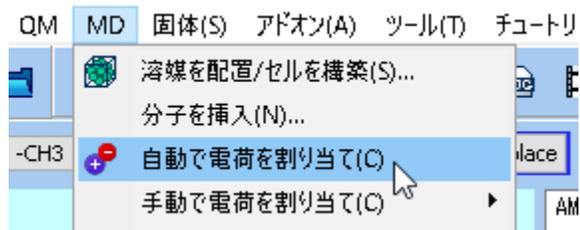
I. 分子を作成

1. 水素を削除した炭素をクリックする。
2. 編集操作向けの元素を選択プルダウンメニューから「O 8」（酸素）を選択する。
3.  元素を変更ボタンをクリックするとTHF分子となる。
4.  簡易構造最適化ボタンを押し原子配置を自動調整する。



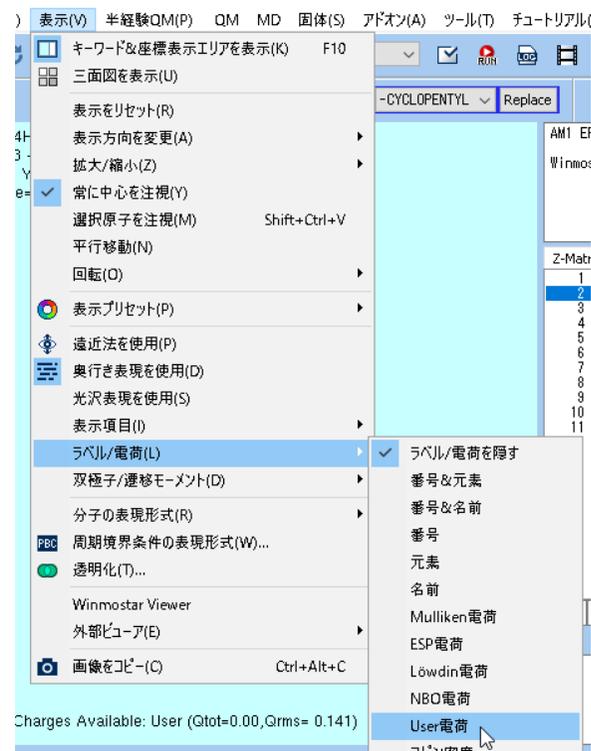
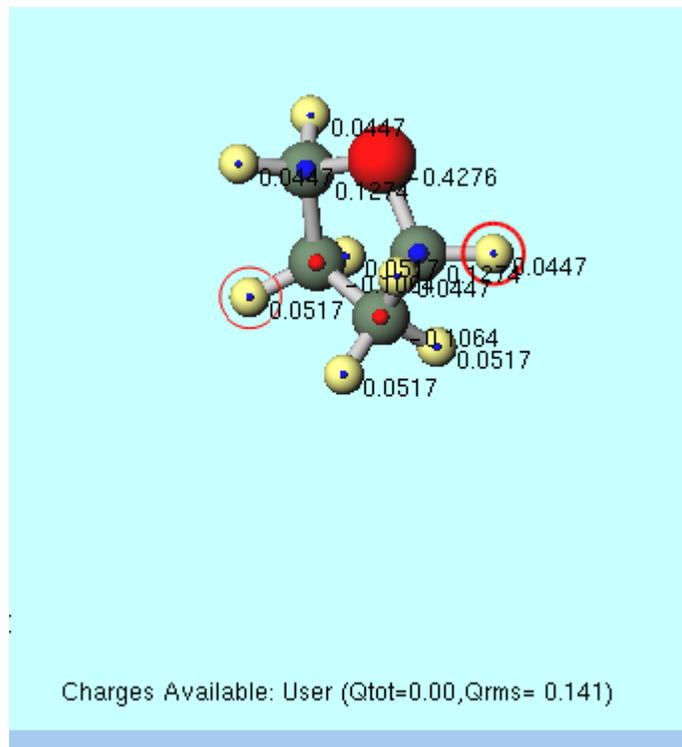
II. 電荷を割り当て

1. MDメニュー | 自動で電荷を割り当てをクリックする。
2. 電荷を割り当てウィンドウでOKボタンを押す。
3. 黒いウィンドウが何度か出現した後、「正常に電荷が設定されました」と表示されたらOKボタンを押す。



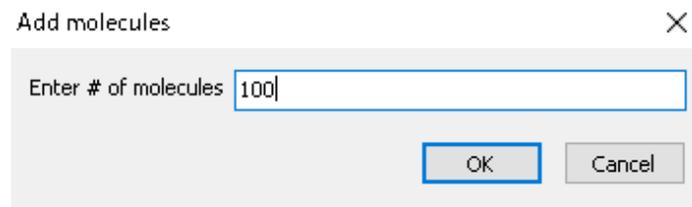
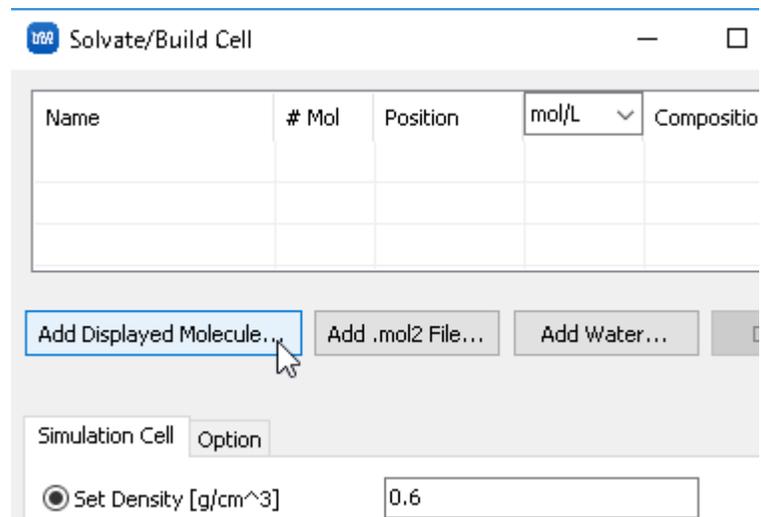
II. 電荷を割り当て

1. 分子表示エリア下部に「Charges Available: User (Qtot=0.00, Qrms=0.141)」と表示され、合計値が0かつ、各原子に0以外のUser電荷が割り振られたことを確認する。
2. 電荷をグラフィカルに表示したい場合は**表示 | ラベル/電荷 | User電荷**をクリックする。
3. 電荷のグラフィカル表示を解除したい場合は**表示 | ラベル/電荷 | ラベル/電荷を隠す**をクリックする。



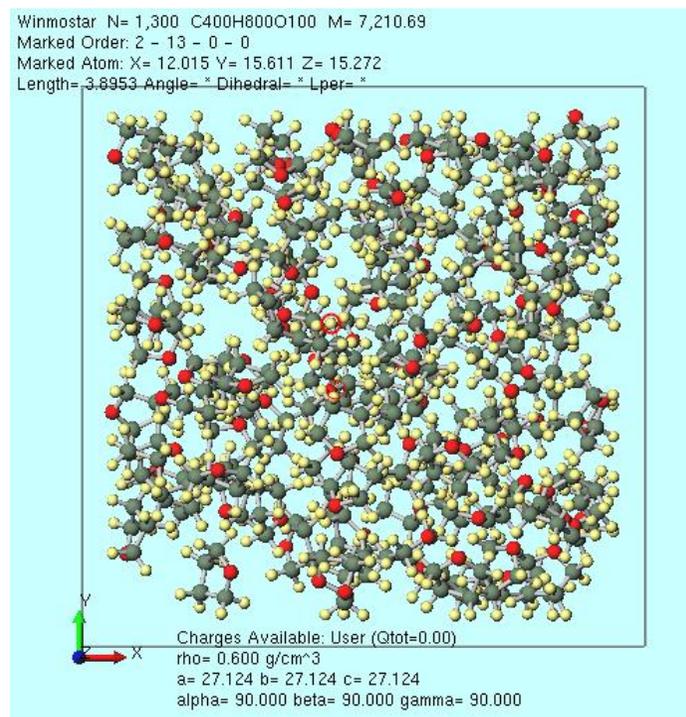
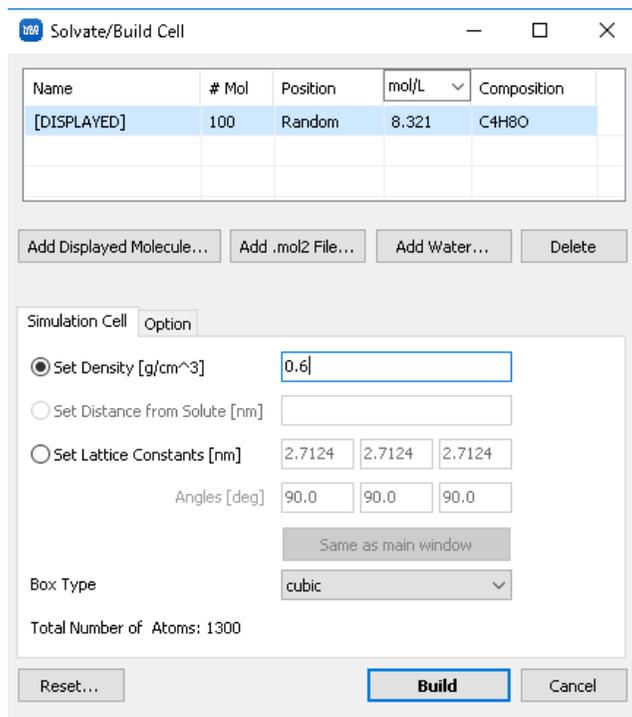
III.液相を作成

1.  溶媒を配置/セルを構築ボタンをクリックする。
2. **Add Displayed Molecule**ボタンをクリックし、出現したダイアログで「**100**」と入力し**OK**ボタンを押す。



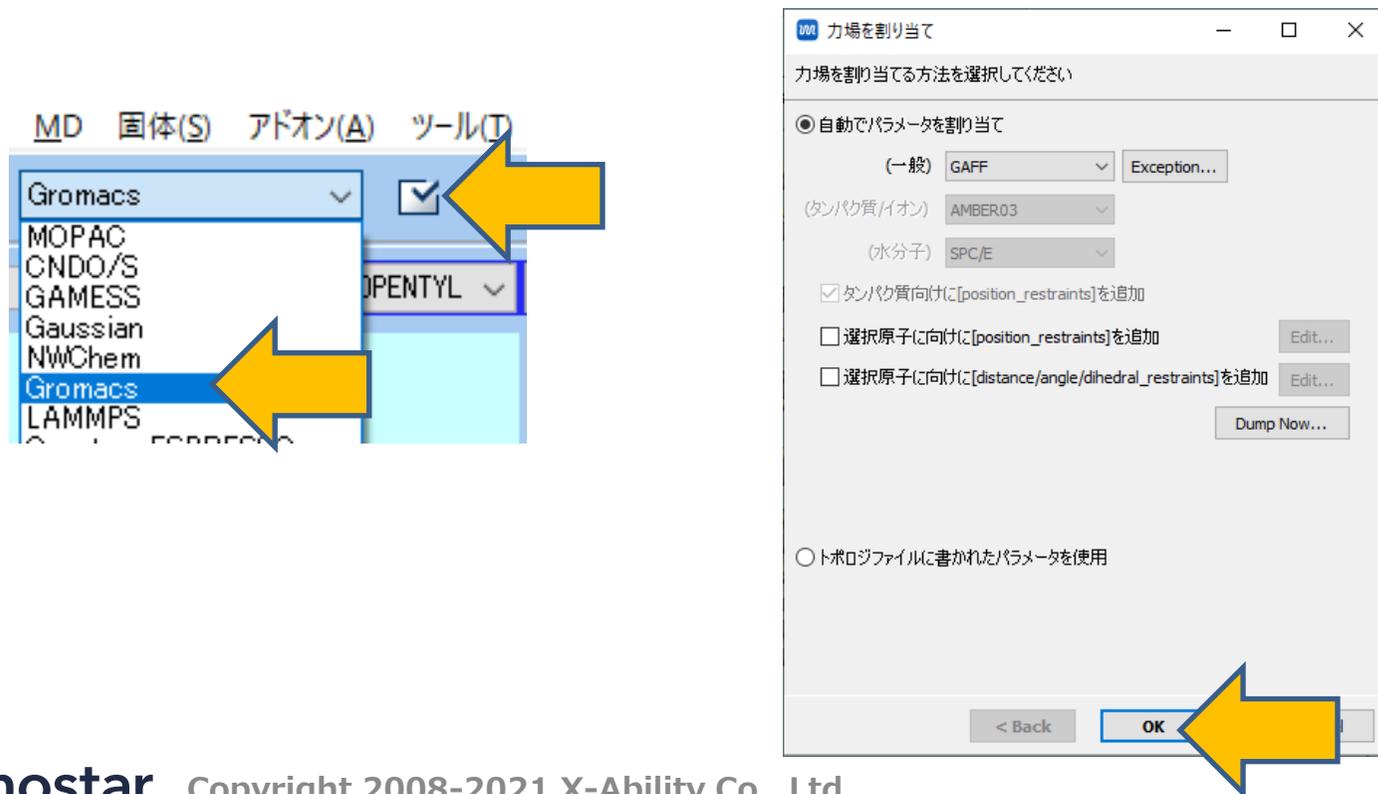
III.液相を作成

1. **Lattice Constants [nm]**に作成される系のサイズが表示されるので、使用予定のカットオフ半径（今回は1.0 nm）の倍より大きいことを確認する。
2. **Build**ボタンを押すと黒いターミナルウィンドウが数秒間出現し、処理に成功すると「**系の作成に成功しました**」と表示される。THF分子が0.6 g/cm³で100個並んだ系が出現する。系のサイズ、密度は分子表示エリア下部に表示される。



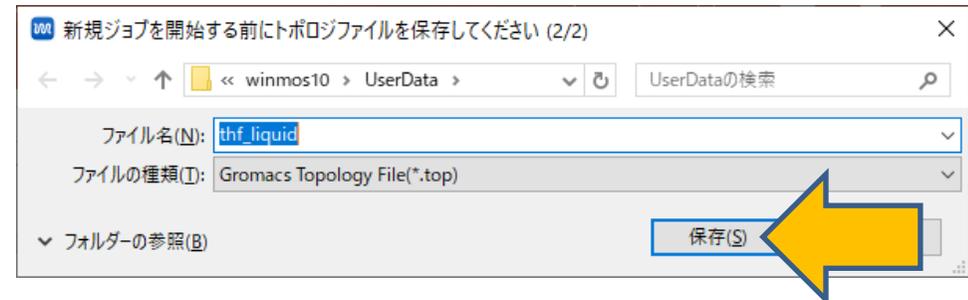
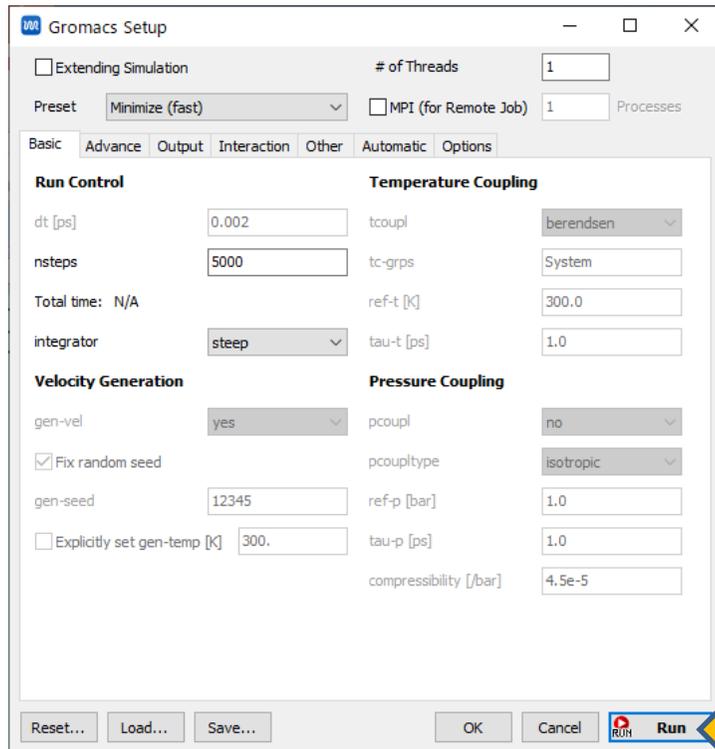
IV. 平衡化（エネルギー極小化）

1. ソルバを選択プルダウンメニューで**Gromacs**を選択する。
2. **キーワード設定**ボタンを押す。
3. 力場を割り当てウィンドウが開いたら、右下の**OK**ボタンを押す。黒いターミナルウィンドウが数秒間出現し、処理に成功すると「**正常に力場が設定されました**」と表示される。
4. **OK**をクリックすると、**Gromacs Setup**ウィンドウが開く。



IV. 平衡化 (エネルギー極小化)

1. Gromacs Setup ウィンドウ左下の **Reset** ボタンを押し、警告ダイアログで **はい** ボタンをクリックする。
2. ウィンドウ右下の **Run** ボタンをクリックし、座標ファイル、トポロジファイルの名前をどちらも「**thf_liquid**」として入力し **保存** ボタンを押す。
3. ジョブマネージャが起動し、順次 Gromacs が開始される。



補足 Gromacs計算のファイル

1. ファイルを確認するため、ターミナルウィンドウが消えた後、**エクスプローラで表示ボタン**を押す。メインウィンドウで開かれているthf_liquid.groが置かれたフォルダが開く。
2. 各ファイル・フォルダの説明を以下に示す。
 - thf_liquid.gro : 先ほど保存した座標ファイル (メインウィンドウで開かれている)
 - thf_liquid.top : 先ほど保存したトポロジファイル
 - thf_liquid_gmx_tmp : トラジェクトリファイル・リスタート用ファイルなどを含む作業フォルダ (working directory)
 - thf_liquid.sh, thf_liquid_remoteconf.d, thf_liquid.bat, thf_liquid.out : ジョブ実行に必要なその他ファイル



名前	種類
builder_tmp	ファイル フォルダ
charge_tmp	ファイル フォルダ
top_tmp	ファイル フォルダ
thf_liquid_gmx_tmp	ファイル フォルダ
thf_liquid.top	TOP ファイル
thf_liquid.gro	GRO ファイル
thf_liquid.sh	SH ファイル
thf_liquid_remoteconf.d	D ファイル
thf_liquid.bat	Windows バッチ ファ...
thf_liquid.out	OUT ファイル

補足 Gromacs計算のworking directory

作業フォルダ（working directory）内の主要なファイルの説明を以下に示す。

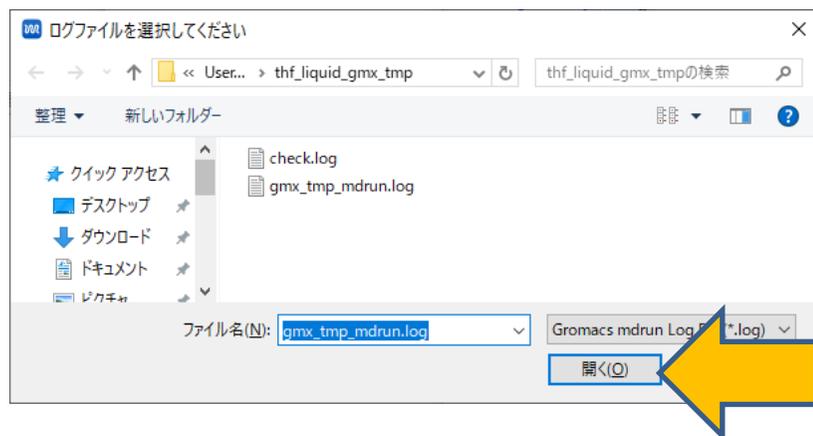
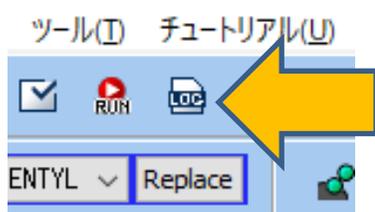
- input.gro : 始状態の座標ファイル（thf_liquid.groのコピー）
- gmx_tmp_mdrun.gro : 最終状態の座標ファイル（継続する場合はこれが入力となる）
- gmx_tmp_mdrun.log : 計算のログ
- gmx_tmp_mdrun.trr : アニメーション、結果解析に使うトラジェクトリファイル



名前	種類	サイズ
check.log	テキストドキュメント	2 KB
gmx_tmp.mdp	MDP ファイル	2 KB
gmx_tmp.top	TOP ファイル	4 KB
gmx_tmp_mdrun.edr	EDR ファイル	17 KB
gmx_tmp_mdrun.gro	GRO ファイル	58 KB
gmx_tmp_mdrun.log	テキストドキュメント	56 KB
gmx_tmp_mdrun.ndx	NDX ファイル	20 KB
gmx_tmp_mdrun.pdb	PDB ファイル	101 KB
gmx_tmp_mdrun.tpr	TPR ファイル	37 KB
gmx_tmp_mdrun.trr	TRR ファイル	16 KB
input.gro	GRO ファイル	59 KB
mdout.mdp	MDP ファイル	12 KB

IV. 平衡化 (エネルギー極小化)

1. ログを表示ボタンを押す。
2. 出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。
3. 先ほどの計算のログがテキストエディタで表示されるので、そこでエラーの表示がないことを確認し、テキストエディタを終了する。(分子作成手順の細かな違いにより、収束回数などに多少違いが出ることはあるが、統計平均を取るため最終的な結果解析には影響はない。)



```
gmx_tmp_mdrun.log - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
5.91628e+02 2.78882e+02 2.71855e+03 8.39061e+02 2.34070e-05

Step      Time      Lambda
  90      90.00000  0.00000

Step      Time      Lambda
  91      91.00000  0.00000

Energies (kJ/mol)
Angle Proper Dih.    LJ-14  Coulomb-14  LJ (SR)
1.20516e+03 3.54040e+03 3.56301e+01 -9.07305e+02 -2.03762e+03
Coulomb (SR) Coul. recip. Potential Pressure (bar) Constr. rmsd
5.91440e+02 2.78832e+02 2.70654e+03 8.16586e+02 8.85364e-06

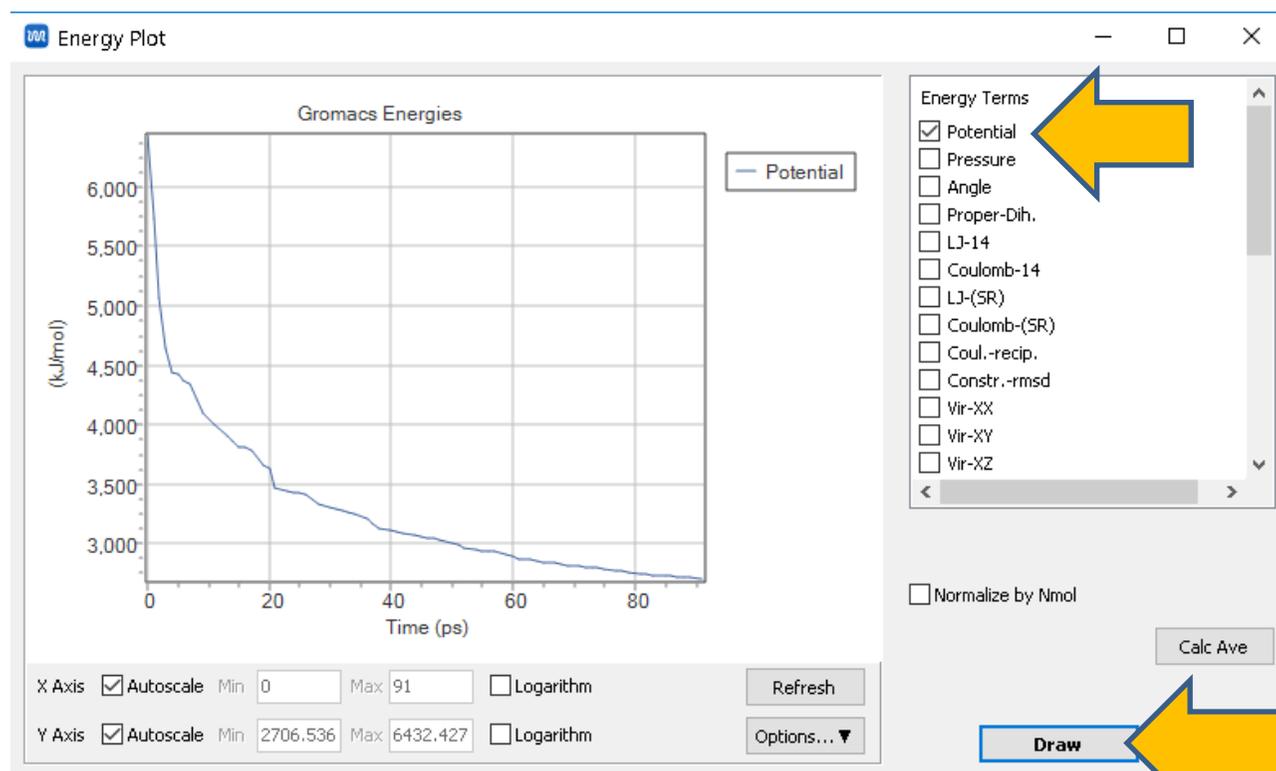
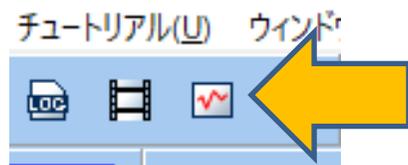
Steepest Descents converged to Fmax < 100 in 92 steps
Potential Energy = 2.7065366e+03
Maximum force   = 9.8298981e+01 on atom 929
Norm of force   = 2.2805275e+01

MEGA-FLOPS ACCOUNTING

NB=Group-cutoff nonbonded kernels NxN=N-by-N cluster Verlet kernels
RF=Reaction-Field VdW=Van der Waals QSTab=quadratic-spline table
```

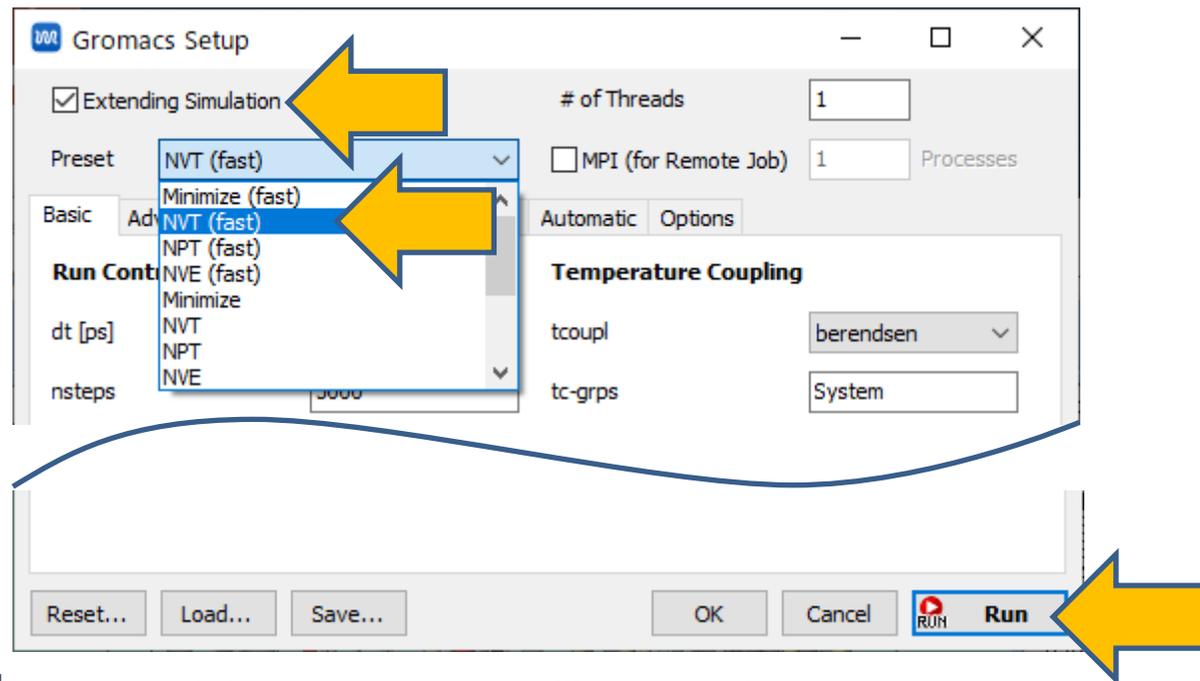
IV. 平衡化（エネルギー極小化）

1. ポテンシャルエネルギーが低下した様子を確認するため**エネルギー変化**ボタンを押す。
2. 出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。
3. **Energy Terms**で**Potential**にチェックを入れ**Draw**ボタンを押す。
4. グラフを確認した後右下の**Close**ボタンを押す。



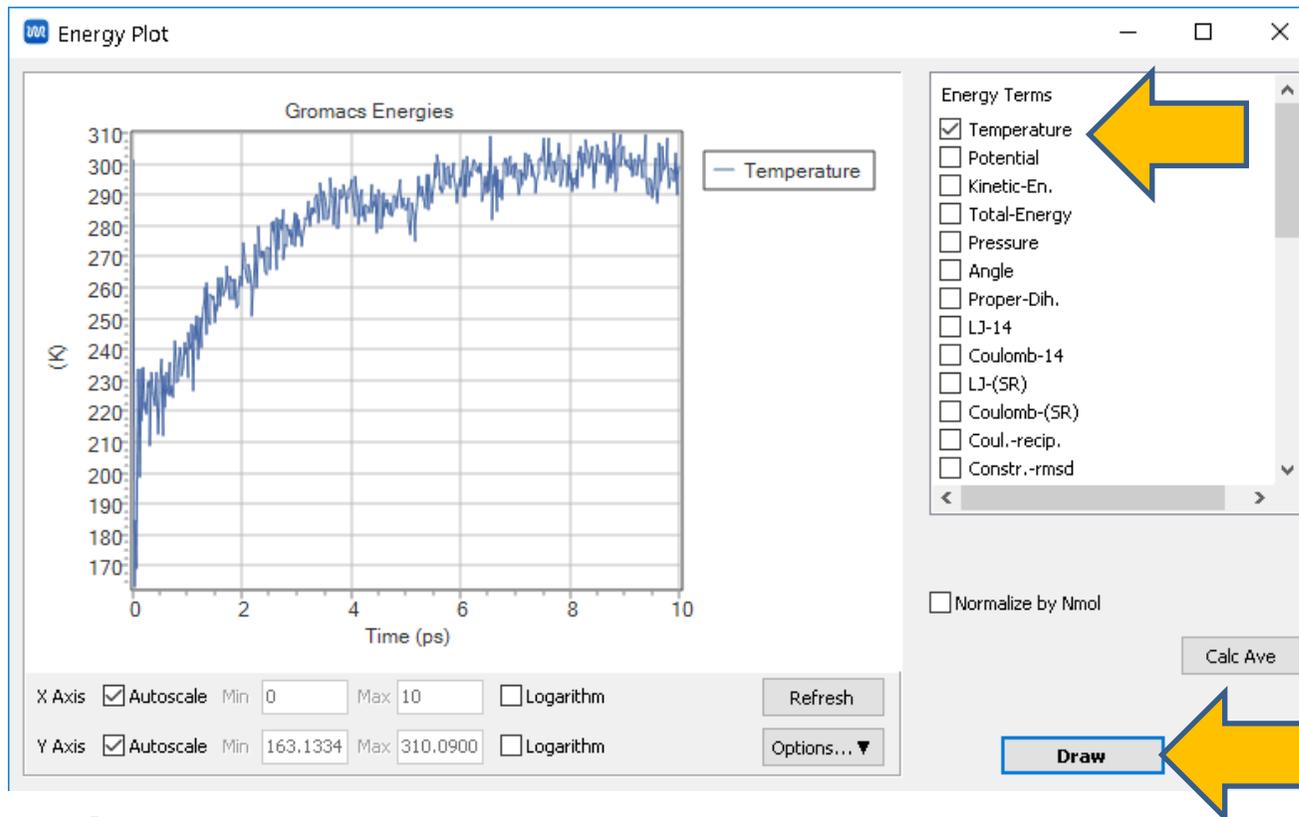
IV. 平衡化（温度一定）

1. 再び**キーワード設定ボタン**をクリックする。
2. 以下のように変更し、**Run**ボタンを押す。
 - **Extending Simulation**にチェックを入れる
 - **Preset**は**NVT (fast)**
3. 出現したダイアログで**はい**ボタンを押すと計算が実行される。
4. 計算終了後、エネルギー極小化の際と同様にログを確認する（以降も同じ）。



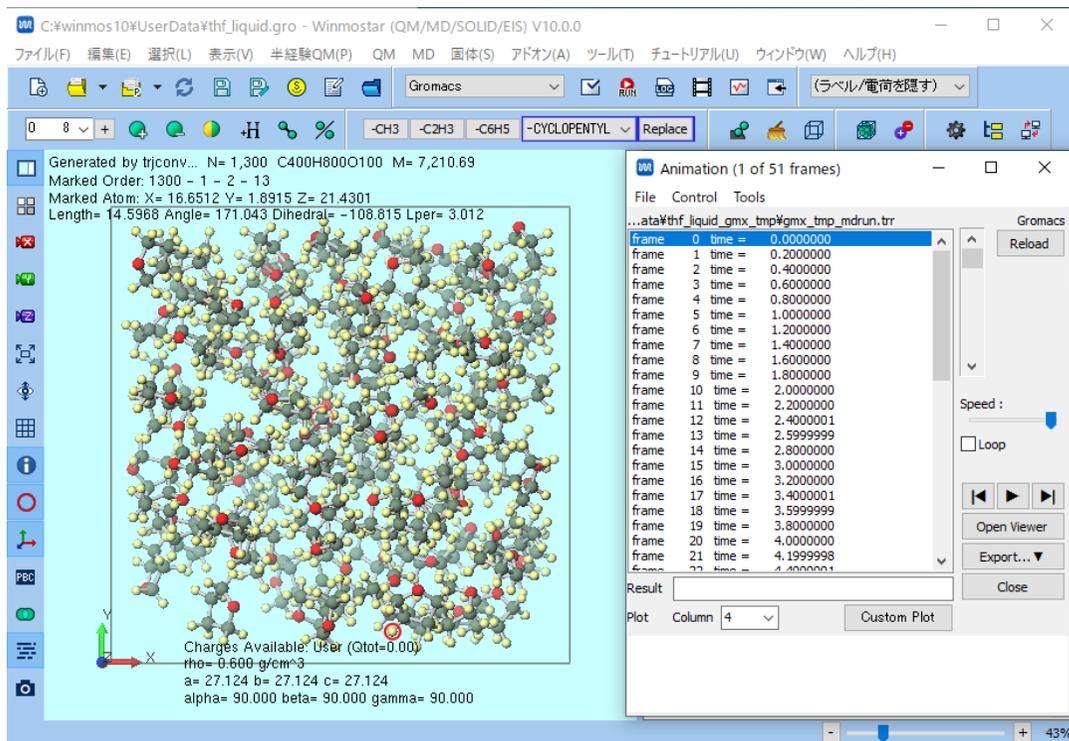
IV. 平衡化（温度一定）

1. 温度が設定値（300 K）に到達したか確認するために**エネルギー変化**ボタンを押す。
2. 出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。
3. **Energy Terms**で**Temperature**にチェックを入れ**Draw**ボタンを押す。
4. グラフを確認した後右下の**Close**ボタンを押す。



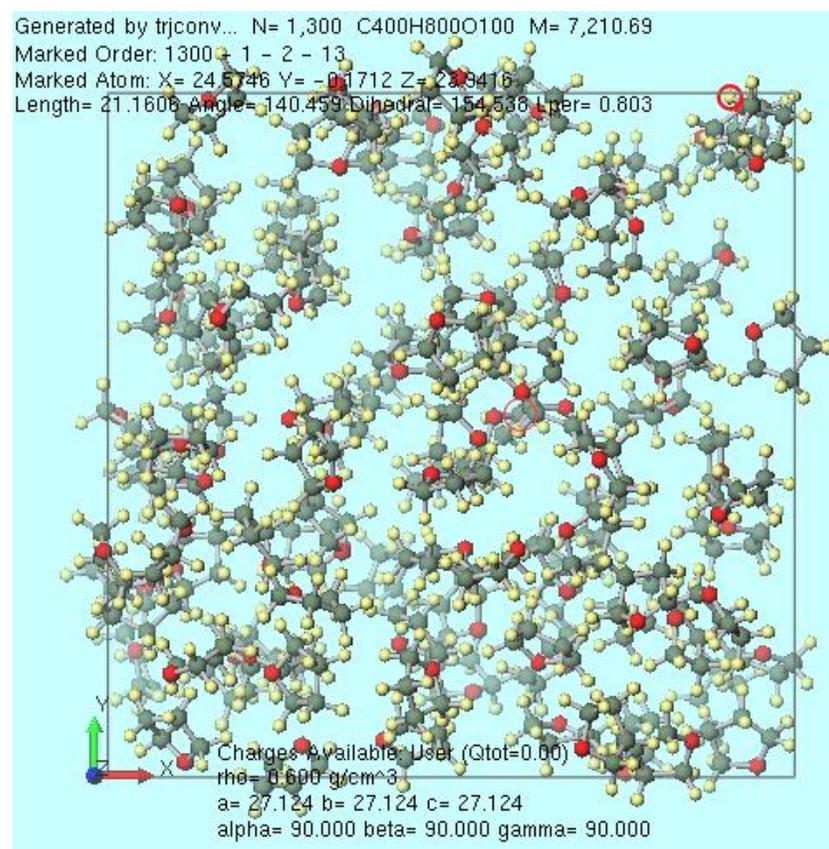
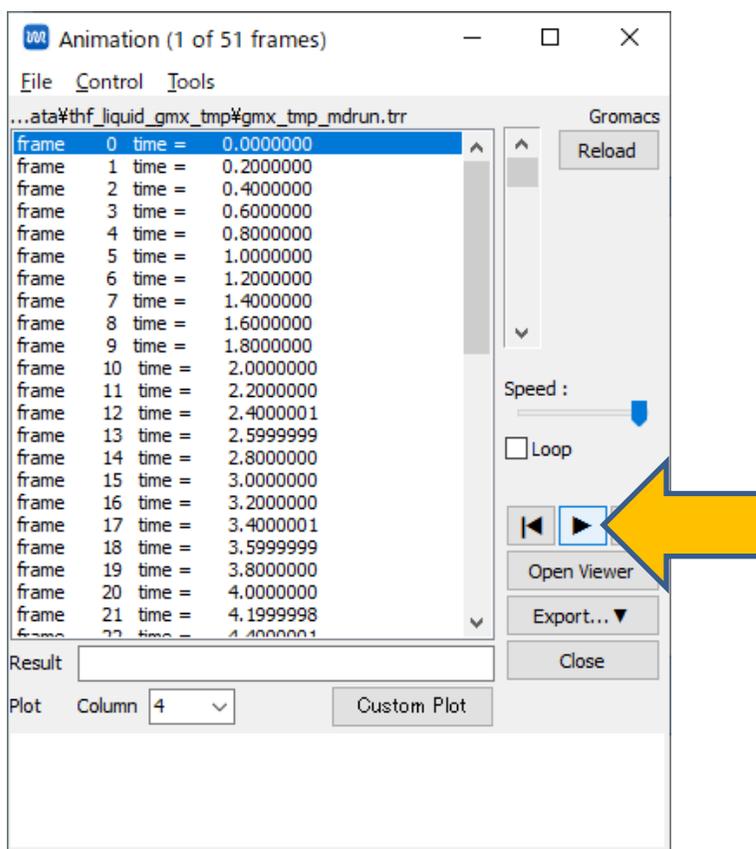
IV. 平衡化 (温度一定)

1. アニメーションボタンを押す。
2. 変更を保存しますか? と聞かれた場合はいいえボタンを押す。
3. 出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。座標ファイルとトラジェクトリファイルそれぞれについてダイアログが開く。
4. Animationウィンドウが開く。Animationウィンドウが背面に隠れた場合は**ウィンドウメニュー | Animation**を選択する。



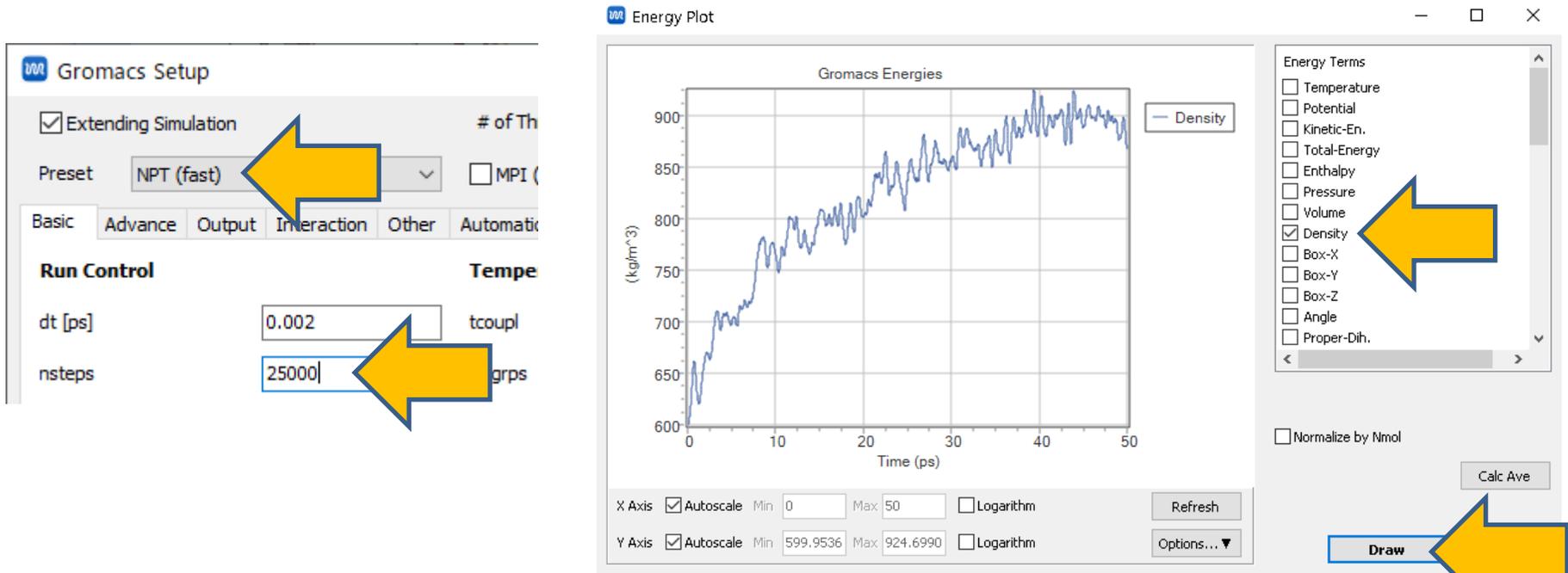
IV. 平衡化 (温度一定)

1. **Animation** ウィンドウ右中段の**Play/Pause** (右向き三角) ボタンを押すとトラジェクトリ
のアニメーションが再生される。
2. アニメーションを確認した後**Close**ボタンを押す。



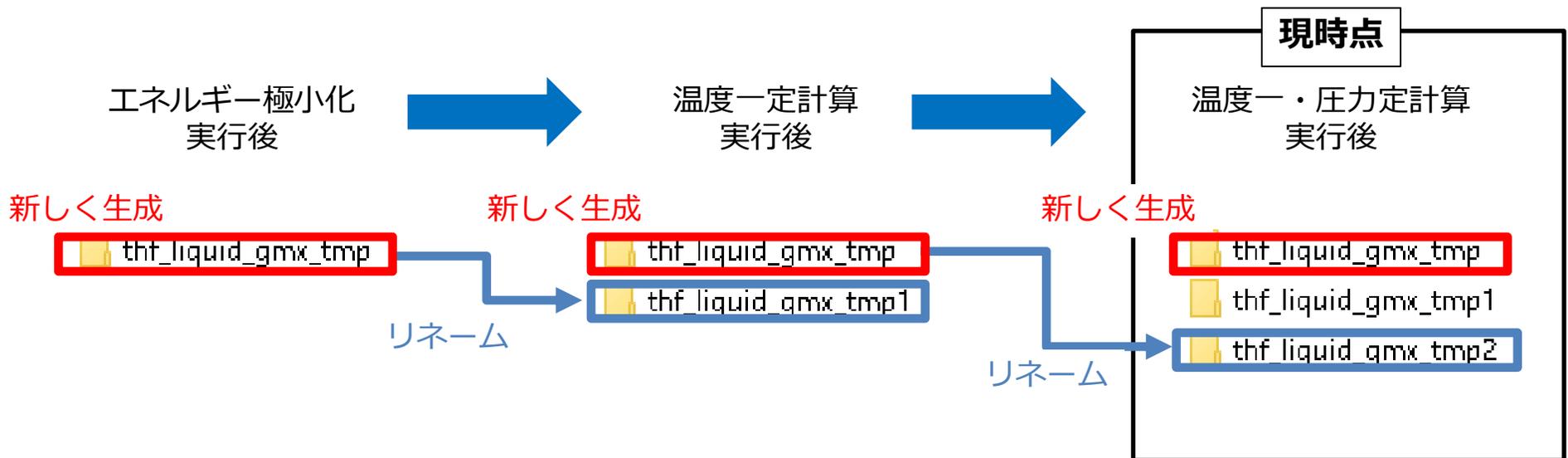
IV. 平衡化 (温度・圧力一定)

1. キーワード設定ボタンをクリックする。
2. 以下のように変更し、**Run**ボタンを押し先ほどと同様に計算を実行する。
 - **Preset**は**NPT (fast)**
 - **nsteps**は**25000**
3. 計算終了後、必要に応じてアニメーションを確認する (以降も同じ)。
4. エネルギー変化ボタンをクリックし、**Density**のグラフを確認する。



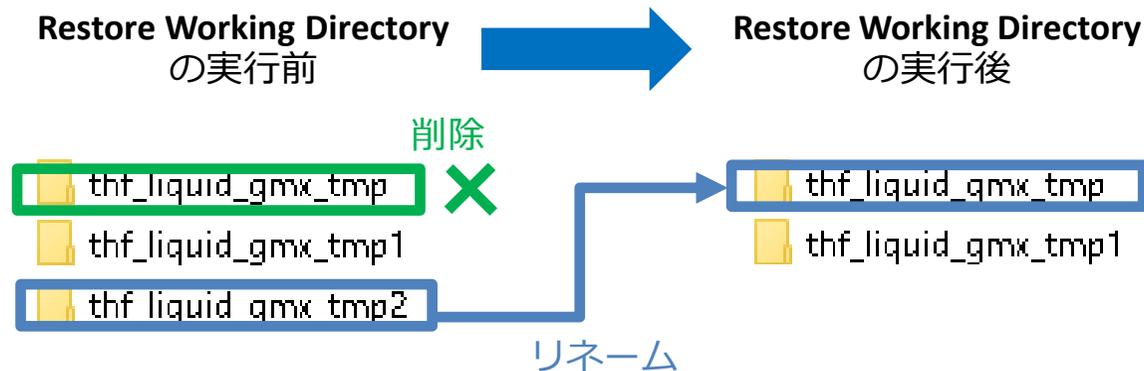
補足 Gromacs計算のworking directory

1. ファイルを確認するため、**エクスプローラで表示ボタン**を押す。メインウィンドウで開かれているthf_liquid.groが置かれたフォルダが開く。
2. working directoryが合計3つ生成されていることを確認する。working directoryは以下のように生成されている。
 - thf_liquid_gmx_tmp（末尾に番号がないフォルダ）が常に直近に実行した計算のworking directoryとなっている。
 - 計算の開始時にすでにworking directoryが存在する場合は、そのworking directoryは名前の末尾に重複しない最も小さい番号を追加してリネームされる。



補足 Gromacs計算の再開、やり直し

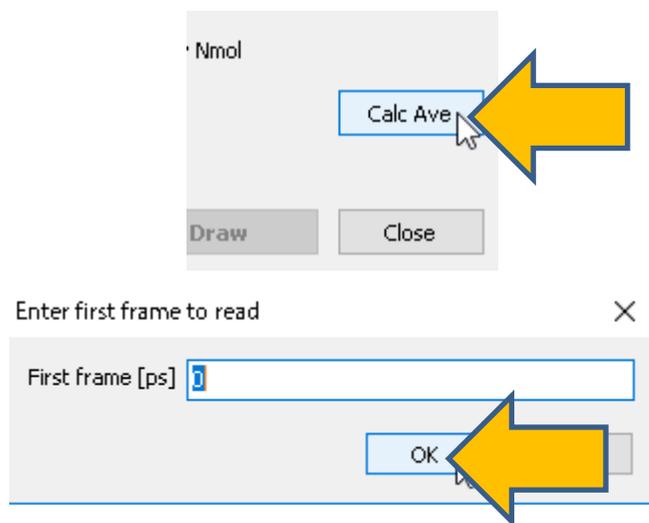
- 計算・作業途中でWinmostarを再起動した場合は、最初に保存した座標ファイル（今回は thf_liquid.gro）をメインウィンドウで開くと、続きから作業できる。
- **キーワード設定のOptionsタブのRestore Working Directory**ボタンをクリックすると、最新のworking directoryが削除され、最も大きい番号が末尾に付いたworking directoryが最新のworking directoryとしてリネームされる。これにより、直近の計算を実行する前の状態に戻る。



IV. 本計算 + 結果解析 (基礎物性)

1. **キーワード設定**ボタンをクリックし、各種設定は変更せず**Run**ボタンを押し先ほどと同様に計算を実行する。
2. 計算終了後、**エネルギー変化**ボタンをクリックする。
3. **Calc Ave**ボタンをクリックし、ファイルを選択するダイアログと時間範囲を入力するダイアログにてデフォルトの状態ですべてのボタンを押す。
4. テキストファイルが開き、そこには各種熱力学量の平均値が出力されている。ファイルの一番下には比熱、圧縮率などの揺らぎから求まる物性も出力されている。

(なお、Gromacs自体の不具合により圧縮率、弾性率の単位が逆になっている点に注意)



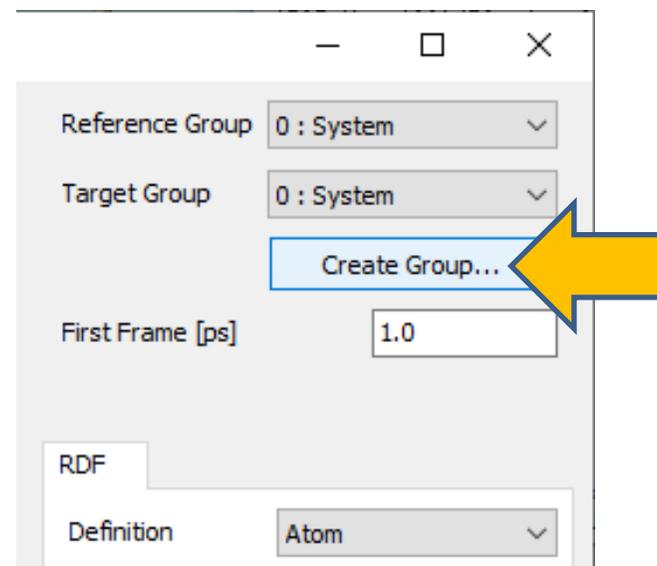
```
energy_ave.log.dos - Xモジュール
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
Temperature dependent fluctuation properties at T = 309.431.

Heat capacities obtained from fluctuations do *not* include
quantum corrections. If you want to get a more accurate estimate
please use the g_dos program.

WARNING: Please verify that your simulations are converged and perform
a block-averaging error analysis (not implemented in g_energy yet)
Volume = 7.93859e-05 m^3/mol
Enthalpy = 74.7995 kJ/mol
Coefficient of Thermal Expansion Alpha_P = 0.000360136 (1/K)
Isothermal Compressibility Kappa = 6.34808e-10 (J/m^3)
Adiabatic bulk modulus = 1.57528e+09 (m^3/J)
Heat capacity at constant pressure Cp = 49.2266 J/mol K
Cp-Cv = 5.01879 J/mol K
```

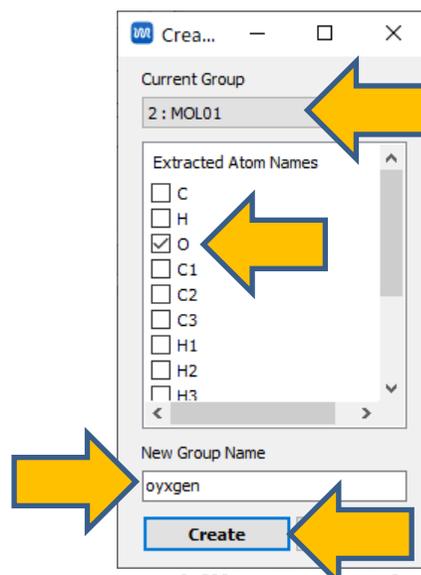
IV. 本計算 + 結果解析（動径分布関数）

1. **結果解析**ボタンから**動径分布関数**を選択し、出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。トラジェクトリファイルと座標ファイルとインデックスファイルそれぞれについてダイアログが開く。
2. **Create Group**ボタンをクリックし、出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。



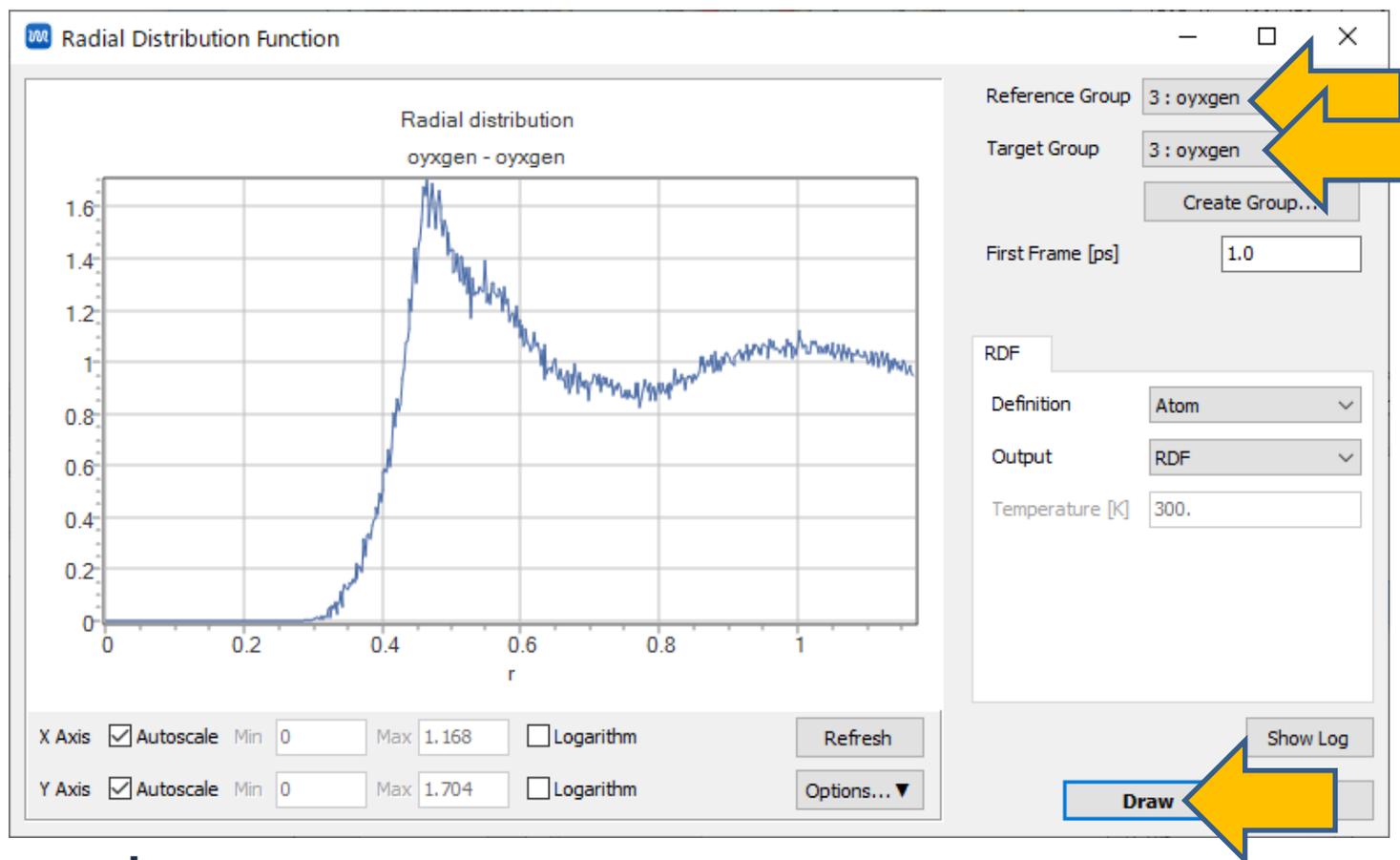
IV. 本計算 + 結果解析（動径分布関数）

- 開いた**Create Group**ウィンドウにおいて、**Current Group**に**MOL01**（今回はTHFを意味する）、**Extracted Atom Names**に**O**を選択し、**New Group Name**に**oxygen**と入力して**Create**ボタンをクリックする。
 - なお事前に、メインウィンドウで**表示 | ラベル/電荷 | 名前**をクリックしておくこと、分子表示エリアで各原子のAtom Nameを確認することができる。
 - また、予め作成したndxファイルを動径分布関数算出機能立ち上げ時に選べば、複雑なグループを解析に使うことができる。ndxファイルはメインウィンドウの**選択メニュー**以下の操作で作成できる。（詳細はユーザマニュアルを参照）
- ターミナルウィンドウが出現し処理が終了したら**Close**ボタンを押す。



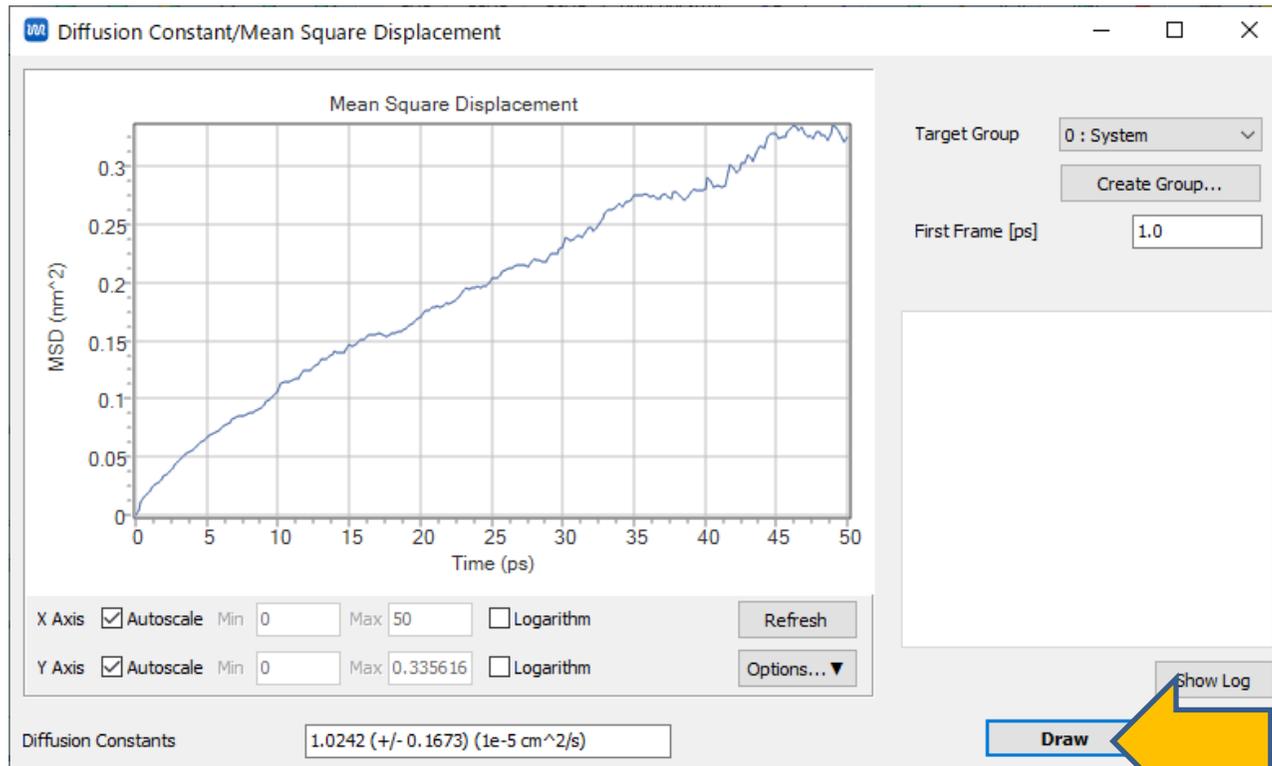
IV. 本計算 + 結果解析（動径分布関数）

1. **Reference Group**と**Target Group**に先ほど作成した**oxygen**を選択し、**Draw**ボタンを押すと酸素-酸素間の動径分布関数が出力される。
2. グラフを確認後**Close**ボタンを押す。



IV. 本計算 + 結果解析（動径分布関数）

1. **結果解析**ボタンから**自己拡散係数/平均二乗変位**を選択し、出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。トラジェクトリファイルと座標ファイルとインデックスファイルそれぞれについてダイアログが開く。
2. **Draw**ボタンをクリックすると平均二乗変位のグラフが表示される。このグラフから計算される自己拡散係数（**Diffusion Constants**）がウインドウ下に表示される。



補足 高精度での計算結果

本チュートリアルの手順から以下のように変更して高精度に計算した際の結果を示す。

- $\text{rvdw-switch}=1.45$, $\text{rvdw}=1.5$, $\text{rcoulomb-switch}=1.45$, $\text{rcoulomb}=1.5$,
 $\text{constraints}=\text{hbonds}$
- 平衡化（エネルギー極小化）
 - $\text{Preset}=\text{Minimize}$
- 平衡化（温度一定）
 - $\text{Preset}=\text{NVT}$, $\text{nsteps}=40000$
- 平衡化（温度圧力一定）、本計算
 - $\text{Preset}=\text{NPT}$, $\text{nsteps}=200000$

Density [kg/m ³]	878.6 +- 1.4
Diffusion constant [1e-5 cm ² /s]	1.8 +- 0.2

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、[Winmostar 導入講習会](#)、[Winmostar 基礎講習会](#)、または[個別講習会](#)の受講をご検討ください。（詳細はP.2）
- 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