

# Winmostar - Gromacs Tutorial 1

小分子系 (acpypeを使用)

V5.014

株式会社クロスアビリティ

[question@winmostar.com](mailto:question@winmostar.com)

2015/7/23

## 修正履歴

2015/7/23版

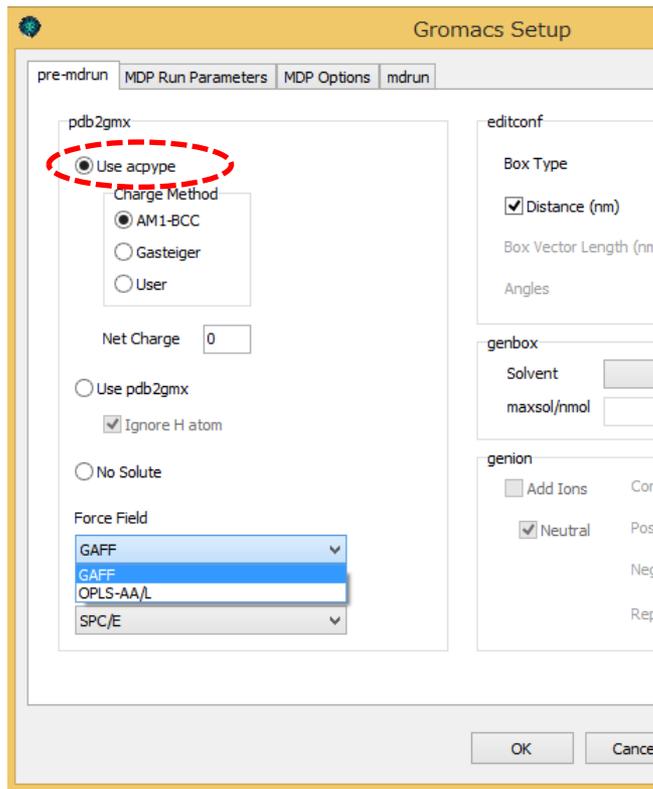
- (スライド2) 修正履歴を追加
- (スライド7、12、22) MDP Run parameters画面の差し替え
- (スライド26)「①[Cumulative Number RDF ]を選択する。」に修正

# Contents

- I. はじめに  
小分子系における力場について
- II. 水中のエタノール1分子系(温度一定)  
Gromacs実行の基礎を学ぶ
- III. 水中に複数の $\text{Na}^+$ と $\text{Cl}^-$ を含む系  
食塩水のシミュレーションを実行し、計算結果から溶液構造(動径分布関数)の解析と自己拡散定数を求める

# 1. はじめに

## 小分子系における力場について



Winmostarでは[Use acpype]を選択した場合、力場のアサインに内部でacpype<sup>1)</sup>を使用しており、力場としてGAFF<sup>2)</sup>とOPLS-AA/L<sup>\*3)</sup>のいずれか選択できる。ただし、OPLS-AA/Lを選択した場合、非結合ポテンシャル (non-bonded potential) はOPLS-AA/Lとなるが、結合ポテンシャル (bonded potential) にはGAFFを採用している。なお、OPLS-AA/L選択の際は、分子によってアサインが不完全となることがあるため、アサイン結果をログファイル<sup>\*4)</sup>で確認する必要がある。

1) acpype

<https://code.google.com/p/acpype/>

2) GAFF

J. Wang, W. Wang, P.A. Kollman and D.A. Case. Journal of Molecular Graphics and Modelling, 25, 247-260 (2006). ; [J. Wang, R.M. Wolf, J.W. Caldwell, P.A. Kollman and D.A. Case. J. Comp. Chem., 25, 1157-1174 \(2004\).](#)

3) OPLS-AA/L

W. L. Jorgensen, D. S. Maxwell, and J. Tirado-Rives, J. Am. Chem. Soc. 118, 11225-11236 (1996).; W. L. Jorgensen and N. A. McDonald, Theochem 424, 145-155 (1998).; W. L. Jorgensen and N. A. McDonald, J. Phys. Chem. B 102, 8049-8059 (1998).; R. C. Rizzo and W. L. Jorgensen, J. Am. Chem. Soc. 121, 4827-4836 (1999).; M. L. Price, D. Ostrovsky, and W. L. Jorgensen, J. Comp. Chem. (2001).; E. K. Watkins and W. L. Jorgensen, J. Phys. Chem. A 105, 4118-4125 (2001).; G. A. Kaminski, R.A. Friesner, J.Tirado-Rives and W.L. Jorgensen, J. Phys. Chem. B 105, 6474 (2001).

4) ログファイル

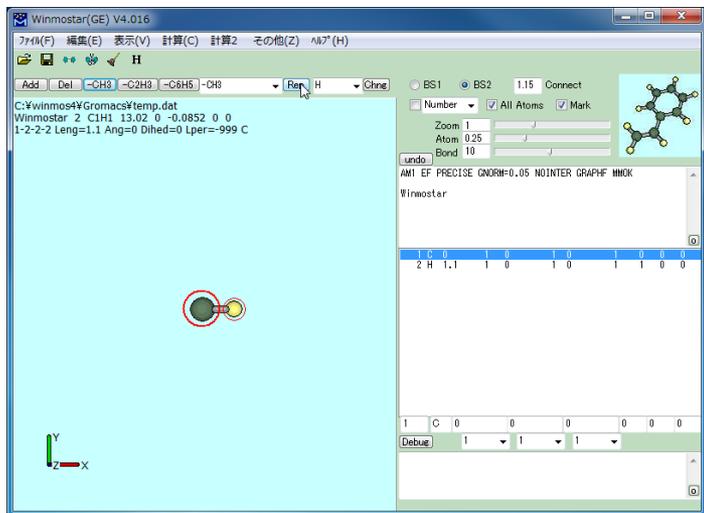
入力ファイル名がaaa.datの場合、同一フォルダ内のaaa.out

## II. 水中のエタノール1分子 Gromacs実行の基礎を学ぶ

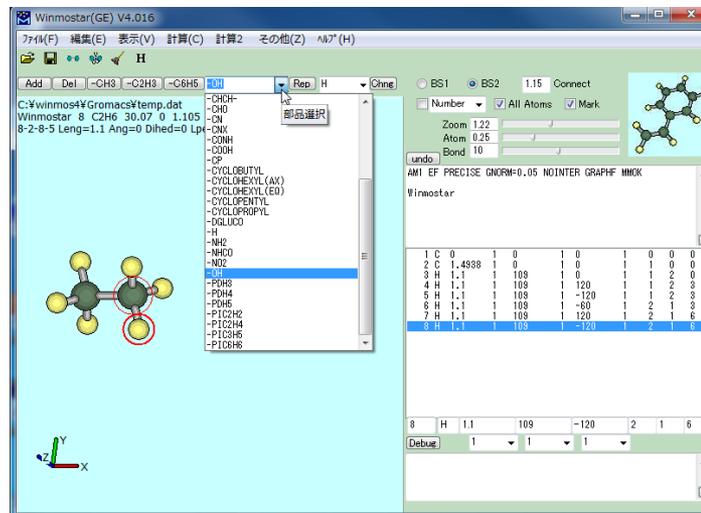
### 手順

- ① Winmostarを使って、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ を作成する
- ② Gromacs Setupで**エネルギー極小化**(最急降下法)の計算条件を設定する
- ③ WinmostarからGromacsを起動する
- ④ 系のポテンシャルエネルギー変化を確認する。
- ⑤ ③で得られた構造を用いて**温度一定**(nvt)の分子動力学計算を実行する。
- ⑥ 系の温度、エネルギー変化を確認する。
- ⑦ トラジェクトリーを確認する。

# Winmostarを使って、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ を作成する

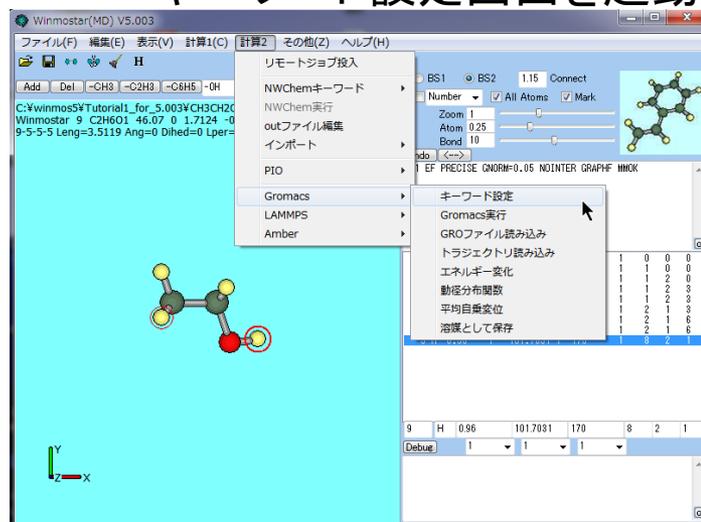
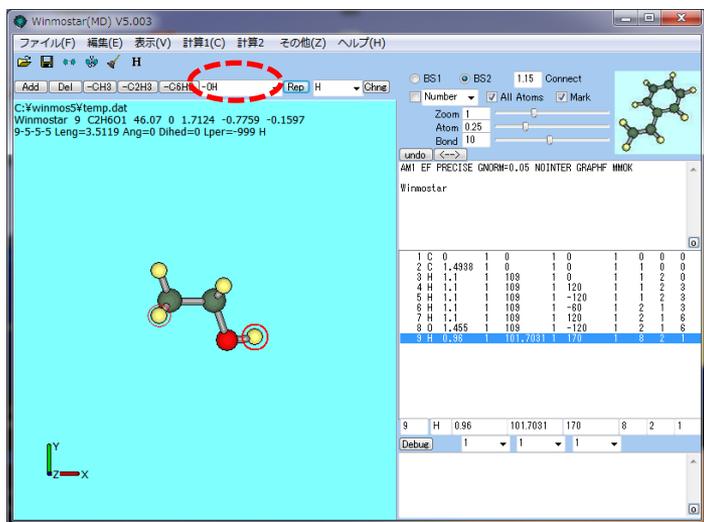


- CH3を2回追加する



-OHへ変更

キーワード設定画面を起動



# Gromacs Setupでエネルギー極小化の計算条件を設定する

pre-mdrun | MDP Run Parameters | MDP Options | mdrun

pdb2gmx

Use acpype

Charge Method

AM1-BCC

Gasteiger

User

Net Charge

Use pdb2gmx

Ignore H atom

No Solute

Force Field

GAFF

Use user's itp

Water Model

SPC/E

editconf

Box Type

Distance (nm)

Box Vector Length (nm)

Angles

genbox

Solvent

maxsol/nmol

genion

Add Ions Concentration (mol/liter)

Neutral Positive Ion

Negative Ion

Replaced Solvent

OK Cancel Load Setting Save Setting Save as Default

① 1.2 nmに変更

② SolventにWATERを選択し、  
maxsol/nmolに800分子を入力

③ [MDP Run Parameters]タブをクリック

pre-mdrun | MDP Run Parameters | MDP Options | mdrun

MDP Run Parameters

Extending Simulation

**Velocity Generation**

gen-vel

**Run Control**

integrator

**Start Time and Timestep in ps**

dt [ps]

nsteps

**Energy Minimization**

emtol [kJ/mol/nm]

emstep [nm]

**Periodic Boundary Condition**

pbw

**Electrostatics**

coulombtype

rcoulomb [nm]

**VdW**

vdwtype

rvdw-switch [nm]

rvdw [nm]

**Temperature Coupling**

tcoupl

tc-grps

tau-t [ps]

ref-t [K]

**Pressure Coupling**

pcoupl

tau-p [ps]

compressibility [bar]

ref-p [bar]

refcoord-scaling

**Bonds**

constraints

constraint-algorithm

**Output Control**

nstxout

nstvout

nstenergy

nstxout-compressed

OK Cancel Load Save Reset

④ steep (最急降下法) を選択 (デフォルト)

⑤ 3000ステップに変更

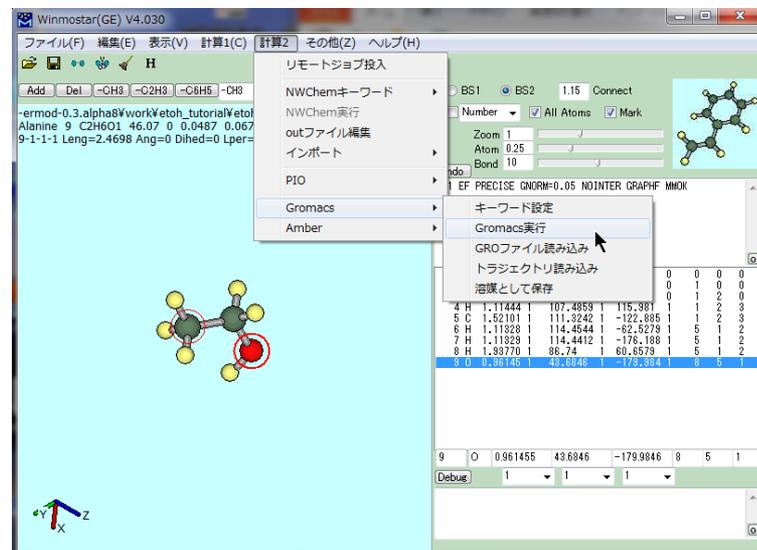
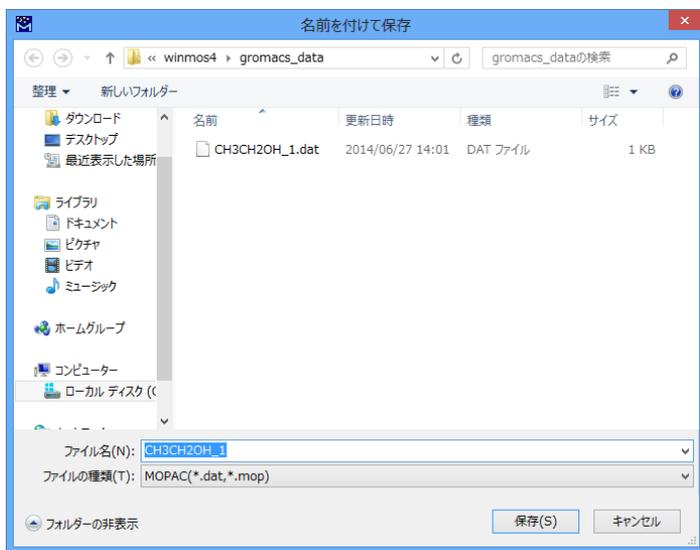
⑥ 最後に[OK]をクリック

# WinmostarからGromacsを起動する

ファイルを保存



Gromacsを起動



ここではファイル名を「CH3CH2OH\_1」としている。\*)

\* **注意！！** ファイル保存先には日本語や全角文字スペースが含まれてはいけない。

○ C:\¥Winmostar¥Seminar¥CH3CH2OH\_1.dat

× C:\¥MD Data¥CH3CH2OH\_1.dat

← スペースが含まれている

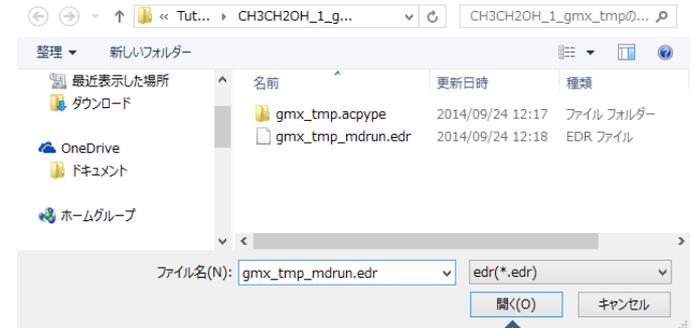
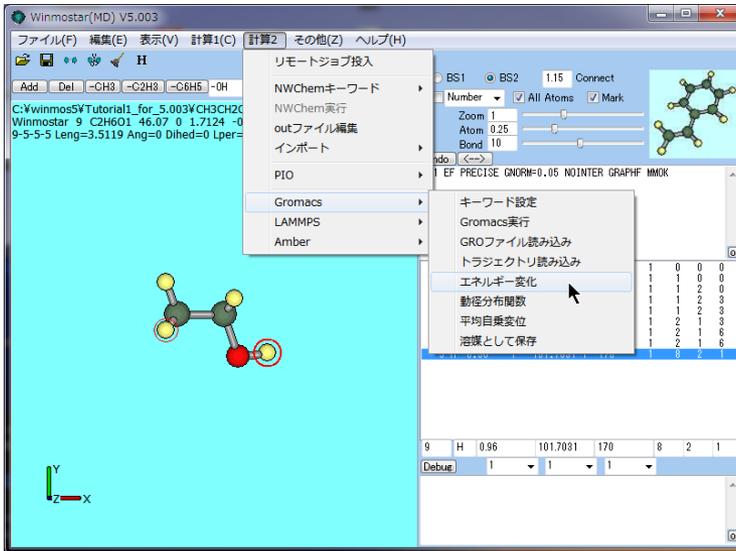
× C:\¥分子動力学ソフト¥アルコール¥CH3CH2OH\_1.dat

← 日本語が含まれている

エネルギー極小化計算終了

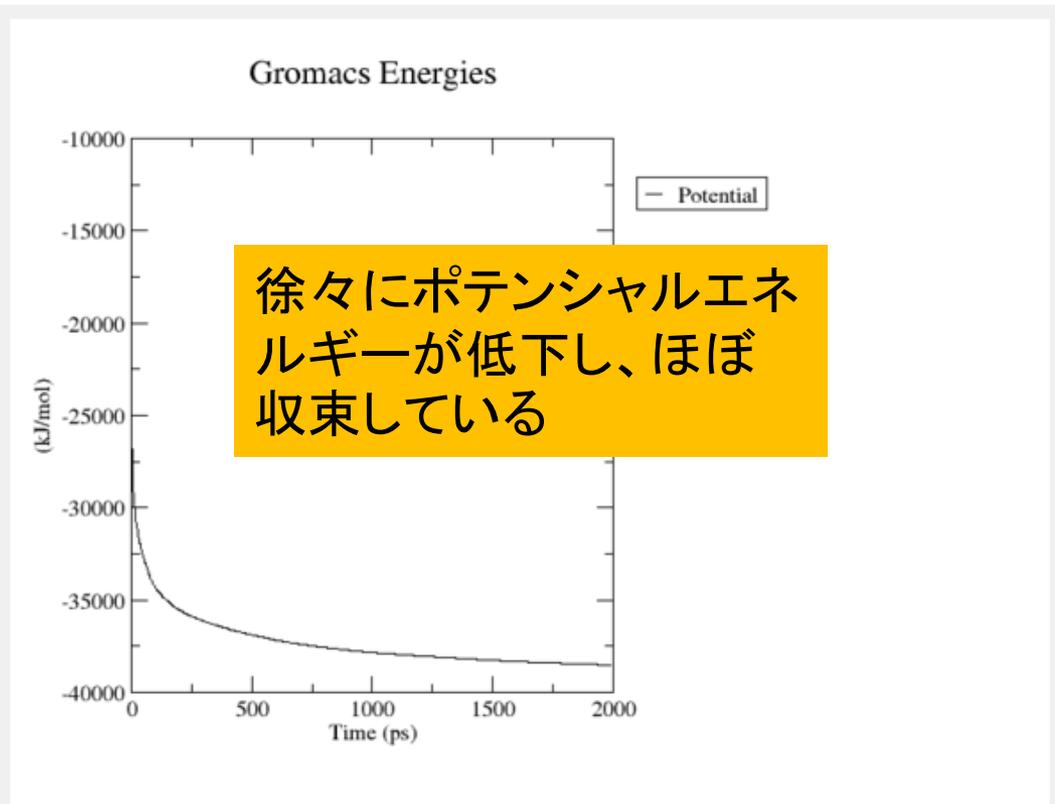
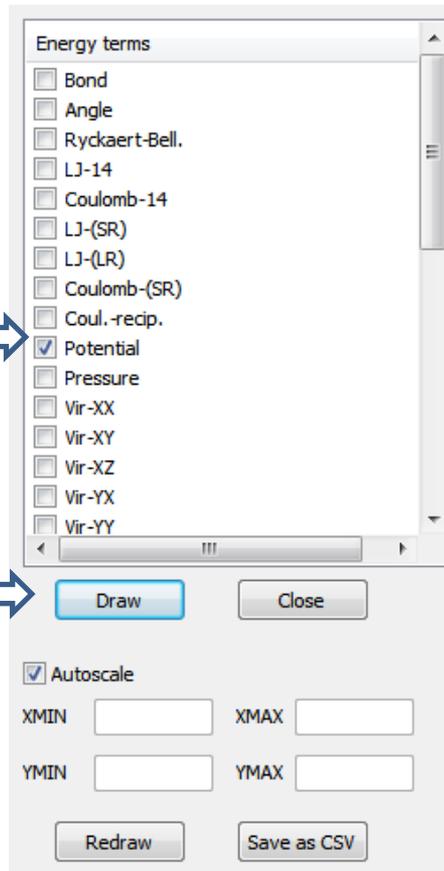
# エネルギー極小化の結果を確認する 1

計算2→Gromacs→[エネルギー変化]を起動

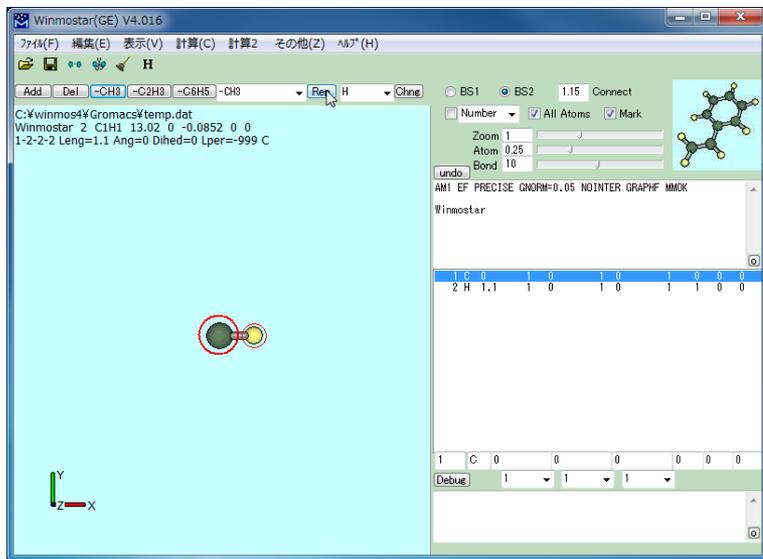


[開く]をクリック

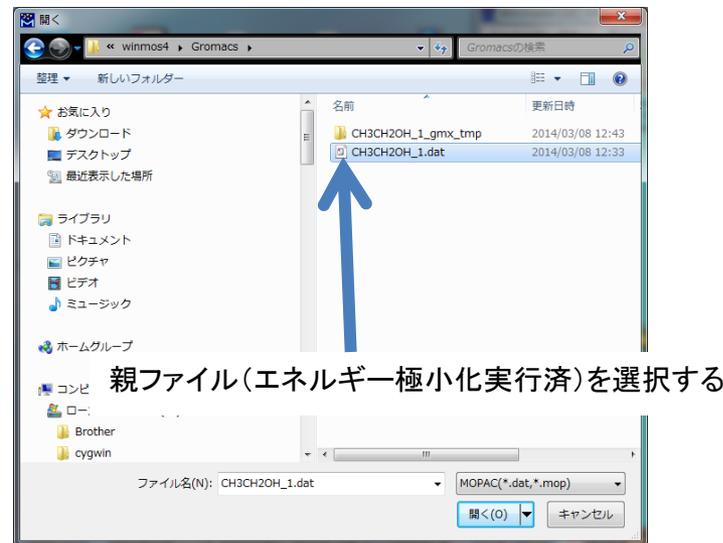
# エネルギー極小化の結果を確認する 2



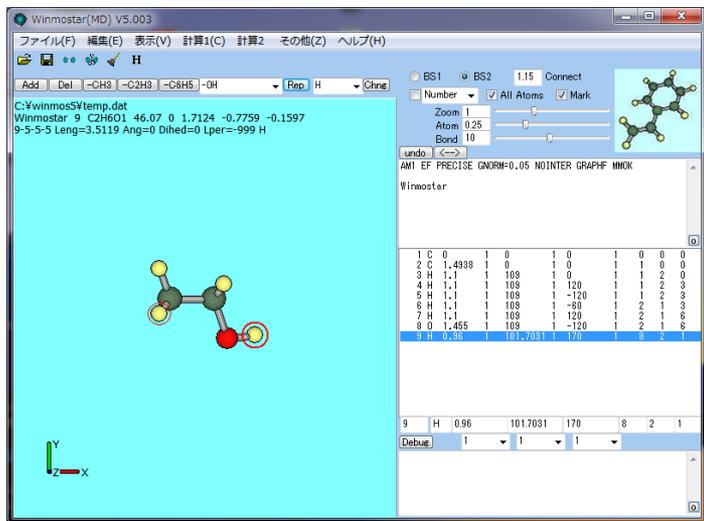
# エネルギー極小化で得られた構造を用いて温度一定の分子動力学計算を実行する 1



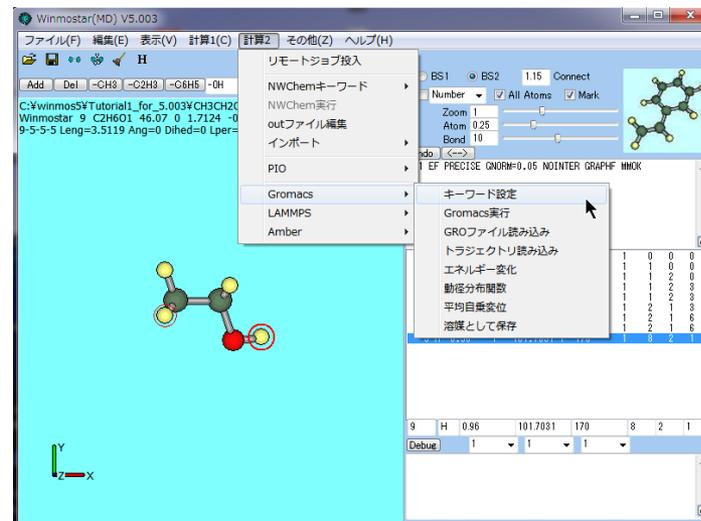
[File] → [開く]



親ファイル(エネルギー極小化実行済)を選択する



「キーワード設定」  
画面起動



## エネルギー極小化で得られた構造を用いて温度一定の分子動力学計算を実行する 2

①最初に[MDP Run Parameters]タブをクリック

②Extending Simulationに  
チェックを入れる

③integratorをmdに変更

④50 ピコ秒 (2 fs \*  
25000 step) のMD計算  
を行う。

⑦all bondsに変更  
(すべての結合を  
拘束する。)

⑧トラジェクトリファ  
イルの出力間隔を  
100ステップ毎に設  
定する。

⑤Nose-Hoover。法  
で温度制御を行う  
⑥300 K (約25°C)  
に設定する。

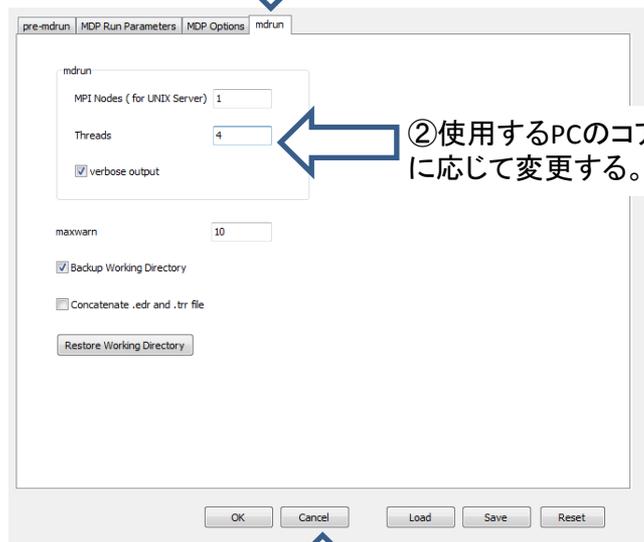
# エネルギー極小化で得られた構造を用いて温度一定の分子動力学計算を実行する 3

計算実行環境を設定

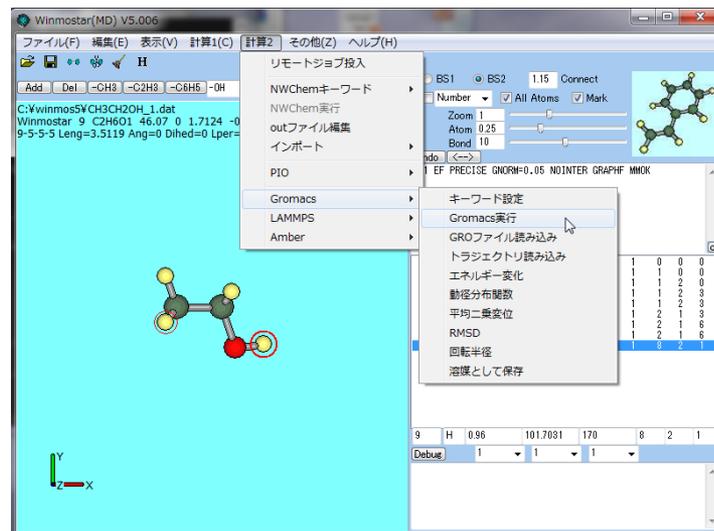


Gromacsを起動

①[mdrun]タブをクリック



③[OK]をクリック



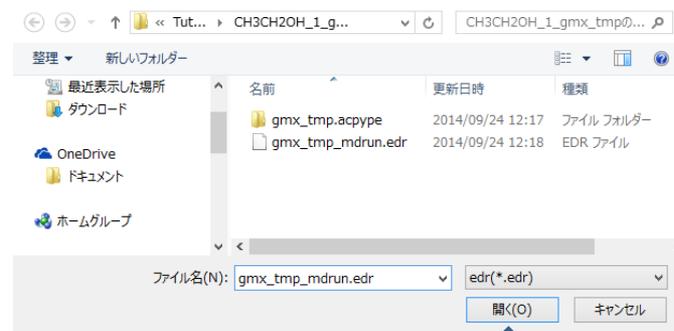
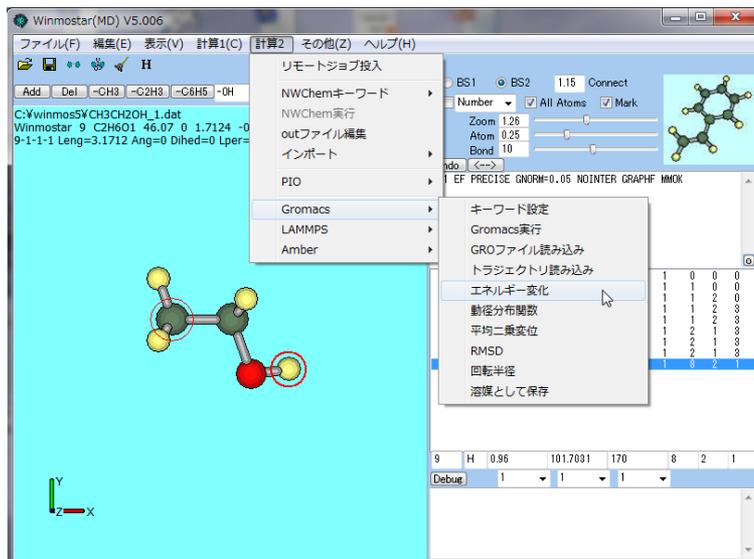
温度一定計算が始まる

計算終了



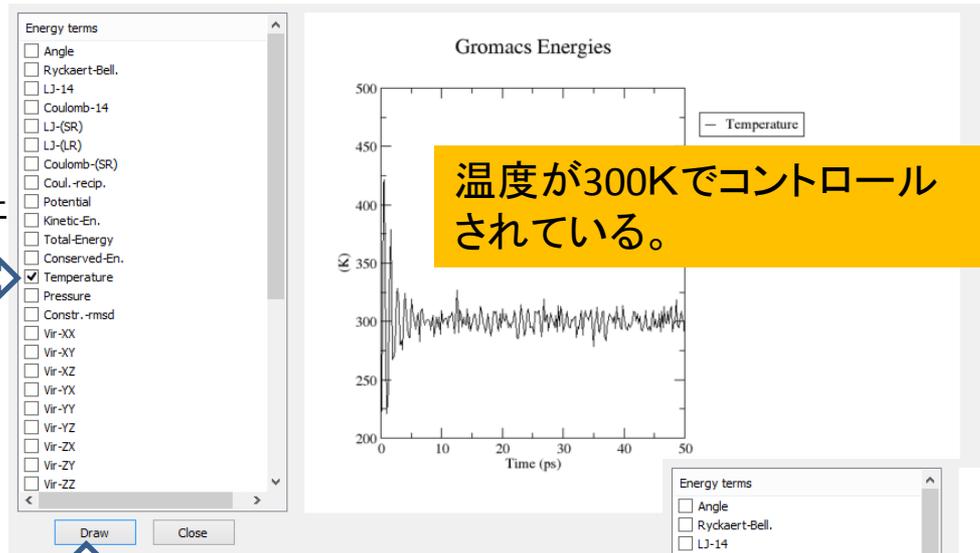
# 系の温度、エネルギー変化を確認する 1

エネルギー変化を選択



[開く]をクリック

# 系の温度、エネルギー変化を確認する 2

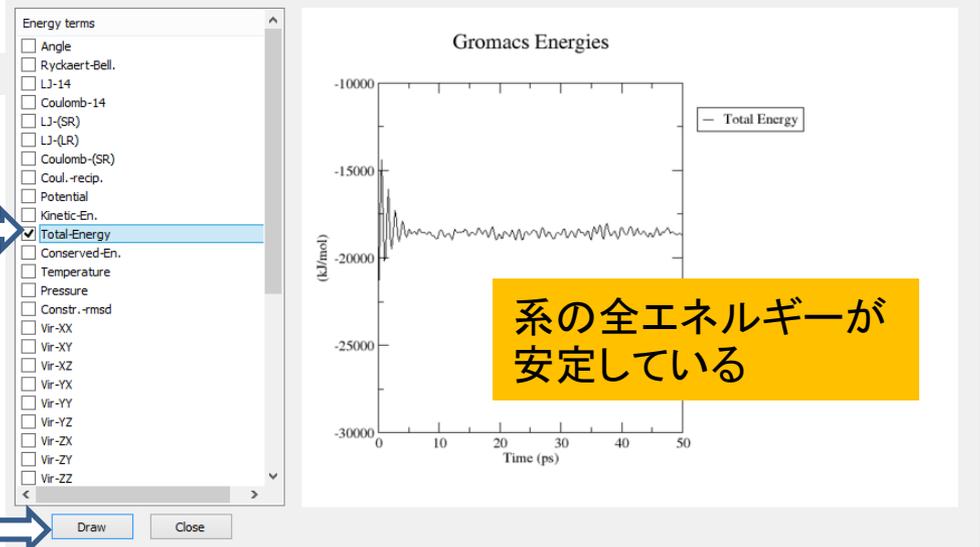


温度が300Kでコントロールされている。

①Temperatureにトグルを立てる

②Drawをクリック

③Total-Energyにトグルを立てる

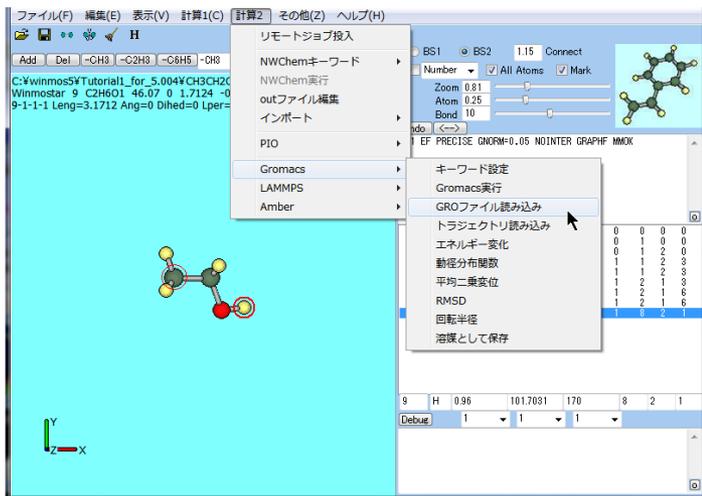


系の全エネルギーが安定している

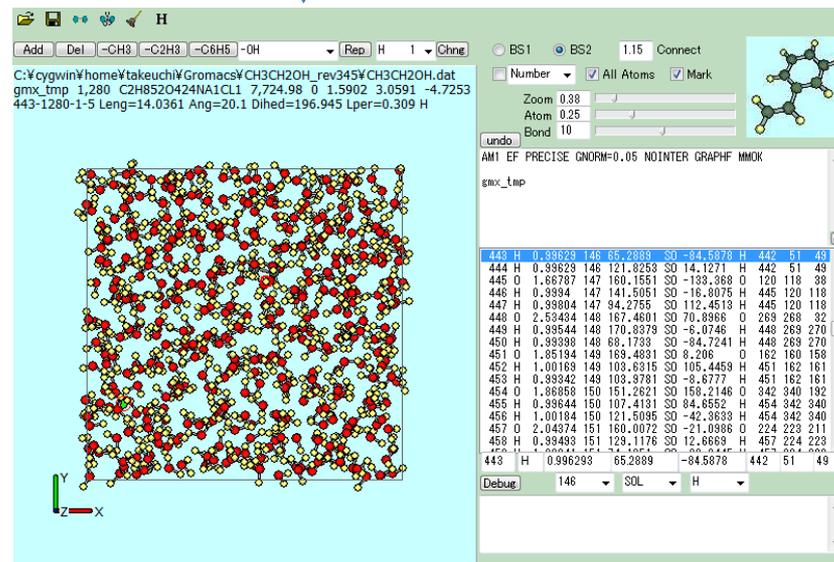
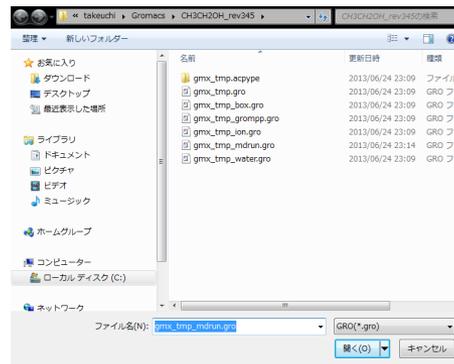
④Drawをクリック

# トラジェクトリーを確認する 1

計算2→Gromacs→ GROファイル読み込み を起動



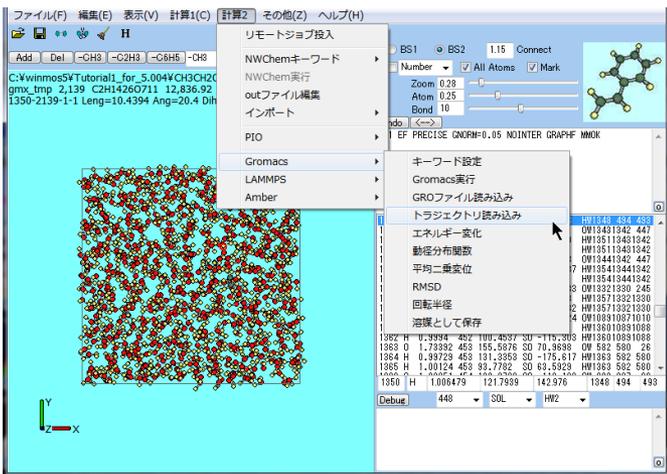
gmx\_tmp\_mdrun.groを指定



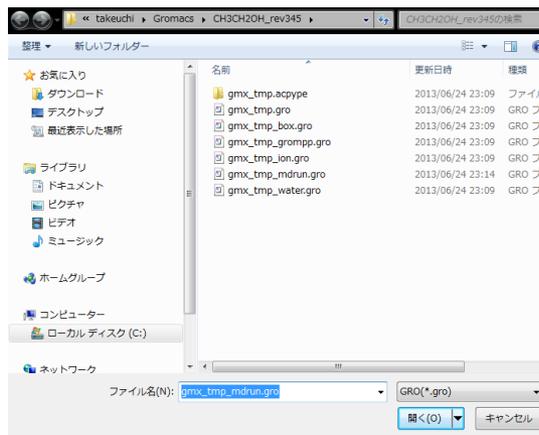
MDの最終ステップ (25000ステップ = 50 ps) の3D構造が表示される

# トラジェクトリーを確認する 2

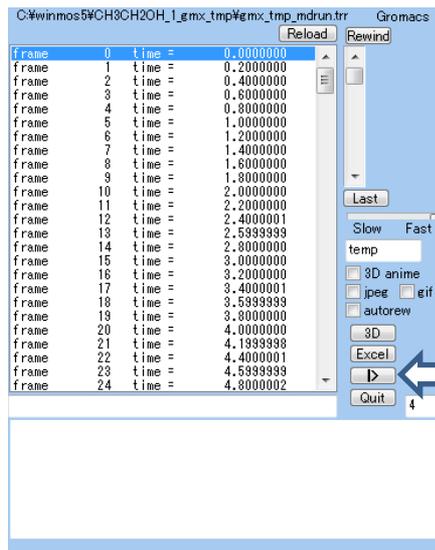
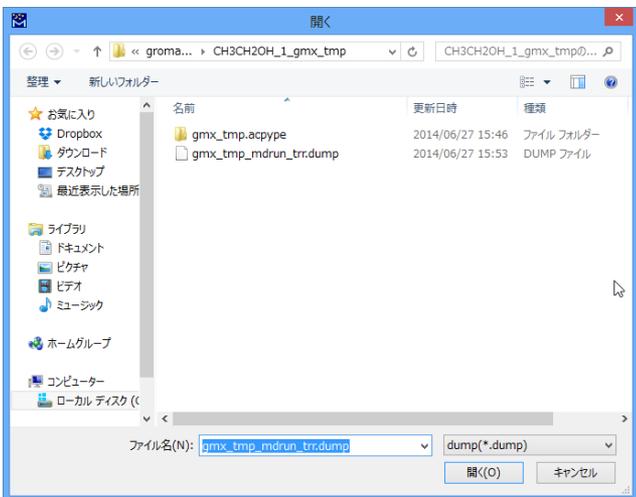
計算2→Gromacs→トラジェクトリ読み込みを起動



gmx\_tmp\_mdrun.groを指定



gmx\_tmp\_mdrun\_trrを指定



再生ボタンをクリック

# トラジェクトリーを確認する 3

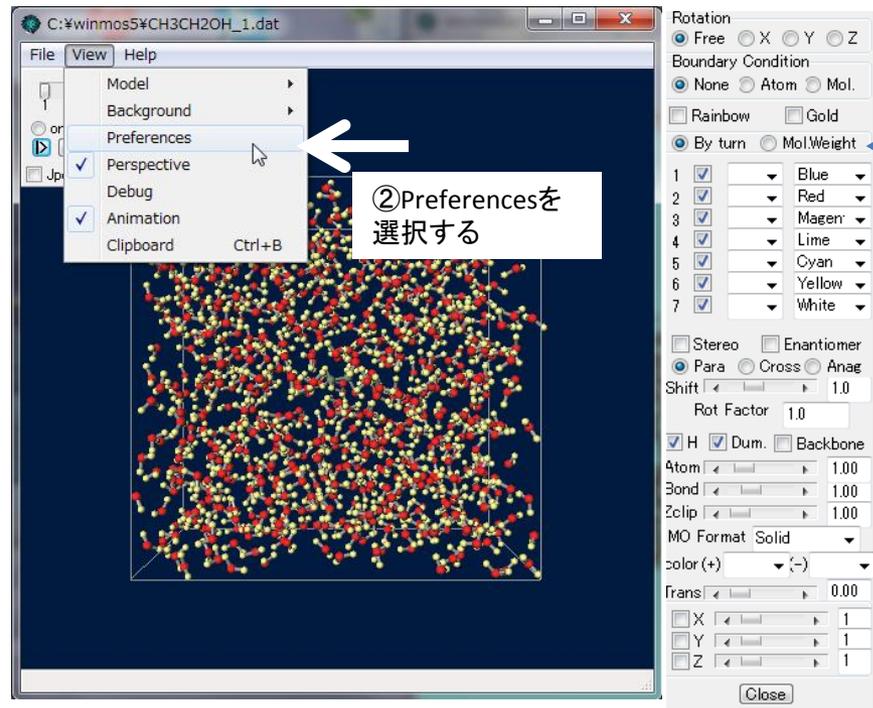
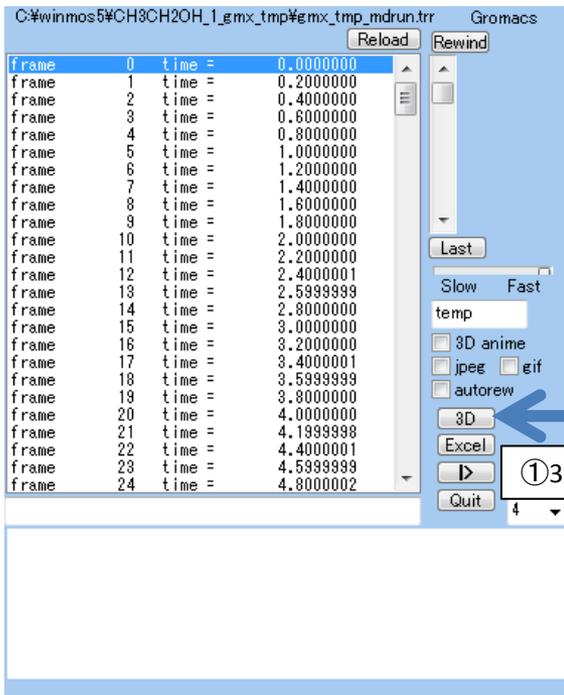
BS1に変更すると“動き”が速くなる

The screenshot shows the Winmostar(GE) V4.1.14 interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a protein in a simulation box. The right panel shows a frame-by-frame log of the simulation. A blue arrow points to the 'BS1' radio button in the control panel.

frame	time =
0	0.0000000
1	0.2000000
2	0.4000000
3	0.6000000
4	0.8000000
5	1.0000000
6	1.2000000
7	1.4000000
8	1.6000000
9	1.8000000
10	2.0000000
11	2.2000000
12	2.4000001
13	2.5999999
14	2.8000000
15	3.0000000
16	3.2000000
17	3.4000001
18	3.5999999
19	3.8000000
20	4.0000000
21	4.1999998
22	4.4000001
23	4.5999999
24	4.8000002

アニメーションが始まる。

# トラジェクトリーを確認する 4



# トラジェクトリーを確認する 5

②再生ボタン  
をクリックする

The screenshot shows a software window titled "C:\winmos5\CH3CH2OH\_1.dat". The main view displays a 3D molecular trajectory of ethanol (CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OH) in a dark blue environment, with the molecule's path shown as a series of white lines. A central ethanol molecule is highlighted in yellow and red. The interface includes a menu bar (File, View, Help) and a toolbar with playback controls (once, rew., round, play, stop, back, forward) and export options (Jpeg, gif, Close). On the right, a "Preferences" dialog box is open, showing settings for rotation (Free, X, Y, Z), boundary condition (None, Atom, Mol.), and color mapping (By turn, Mol.Weight). The "Mol.Weight" option is selected, and a list of 7 items is shown with color dropdowns: 1 (Blue), 2 (WI), 3 (Magen), 4 (Lime), 5 (Cyan), 6 (Yellow), and 7 (White). A blue arrow points to the "WI" dropdown in the list, labeled "① WIを選択する". Another blue arrow points to the play button in the toolbar, labeled "②再生ボタンをクリックする".

エタノール分子が強調されたアニメーションが始まる。

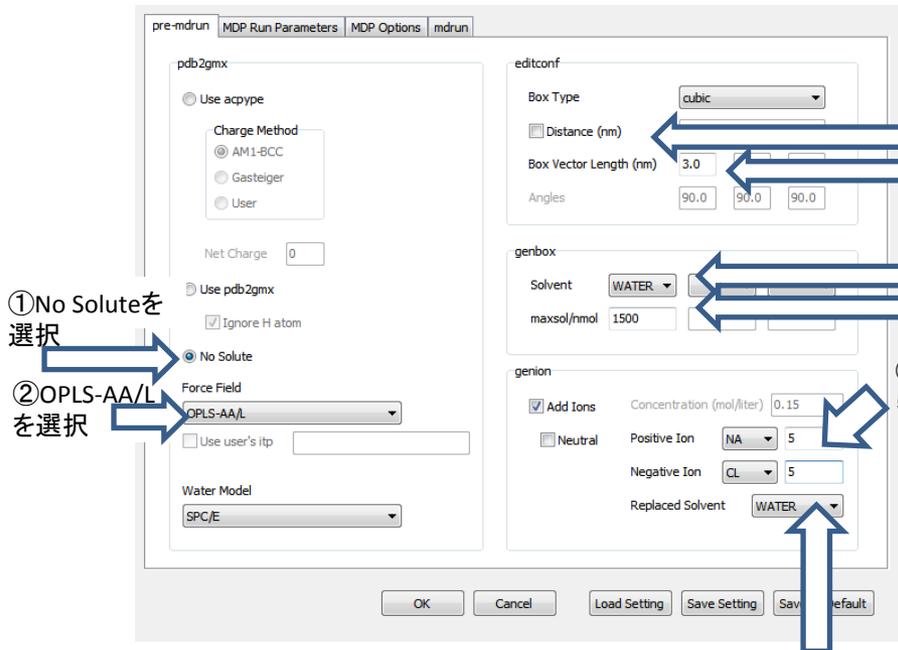
### III. 水中に複数の $\text{Na}^+$ と $\text{Cl}^-$ を含む系

#### 手順

- ① Gromacs SetupでGromacsの計算条件を設定し実行する。
- ② 系の温度、エネルギー変化を確認する。
- ③ トラジェクトリーを確認する。
- ④ 動径分布関数を計算する。
- ⑤ 平均二乗変位を計算し自己拡散係数を求める。

# Gromacs SetupでGromacsの計算条件を設定し実行する。 Na<sup>+</sup> × 5 + Cl<sup>-</sup> × 5 を含む系

本例題では、最初から温度・圧力制御MD(npt) の計算条件を設定しているが、本来は、「エネルギー極小化」⇒「温度制御MD(nvt)」⇒「温度・圧力制御MD(npt)」と順を追ってExtending Simulationを繰り返すことが望ましい。



① No Soluteを選択  
② OPLS-AA/Lを選択

③ チェックを外す  
④ 3.0 nmに設定

⑤ Waterを選択  
⑥ 1500を入力

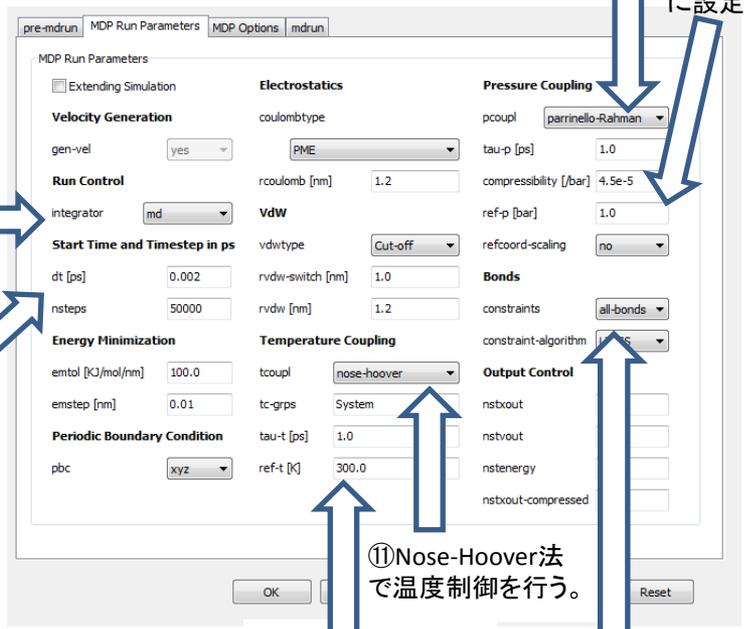
⑦ NA, CL 各々に5を入力

⑧ integratorをmdに変更。

⑨ 水の一部をNaとClに置き換える。

⑩ ファイル名を「H2O\_Na5Cl5」として保存する。(\*)

⑩ 100 ピコ秒 (2 fs \* 50000 step) のMD計算を行う。



⑫ 300 K (約25°C)に設定。

⑪ Nose-Hoover法で温度制御を行う。

⑬ Parrinello-Rahman法で圧力制御を行う。

⑭ 1 気圧に設定。

⑮ 全ての結合を拘束する。

\* 注意！！ ファイル保存先には日本語や全角文字スペースが含まれてはいけません。

- C:¥Winmostar¥Seminar¥H2O\_Na5Cl5.dat
- × C:¥MD Data¥H2O\_Na5Cl5.dat ← スペースが含まれている
- × C:¥分子動力学ソフト¥アルコール¥H2O\_Na5Cl5.dat ← 日本語が含まれている

# 系の体積、密度変化を確認する

① Volumeにトグルを立てる

② Drawをクリック

③ Autoscaleのチェックを外す

④ XMIN, XMAX, YMIN, YMAXに値を設定する。

⑤ Redrawをクリック

約10 ps以降で体積が安定している。

⑥ Densityにトグルを立てる

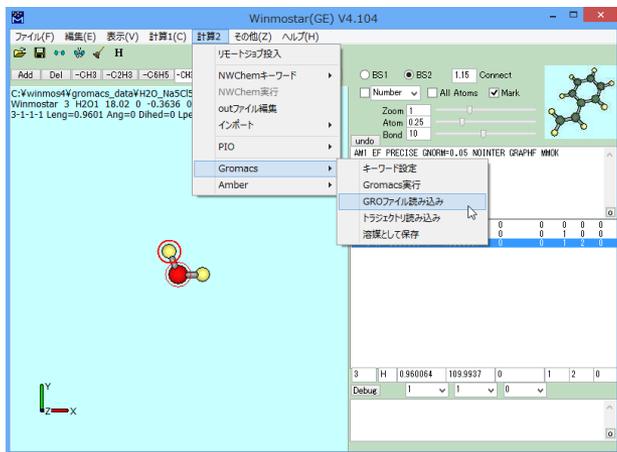
⑦ Drawをクリック

密度も1.0 g/cm<sup>3</sup>で安定している。

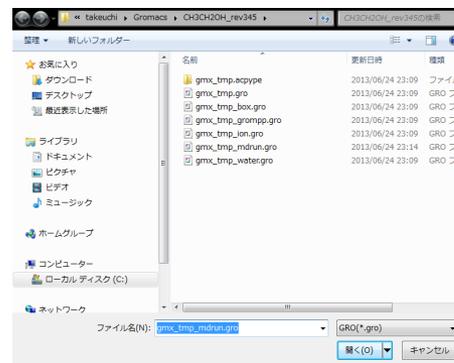
# トラジェクトリーを確認する。

計算が終了したら、

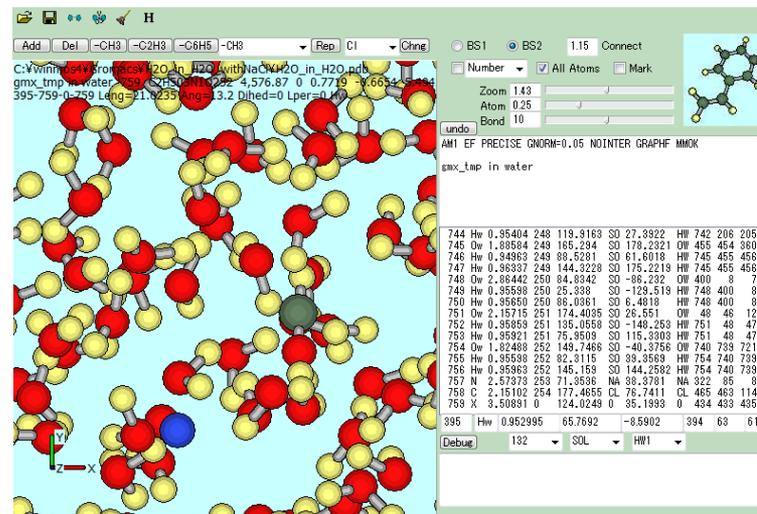
計算2→Gromacs→GROファイル読み込み を選択する。



gm\_x\_tmp\_mdrun.groを指定



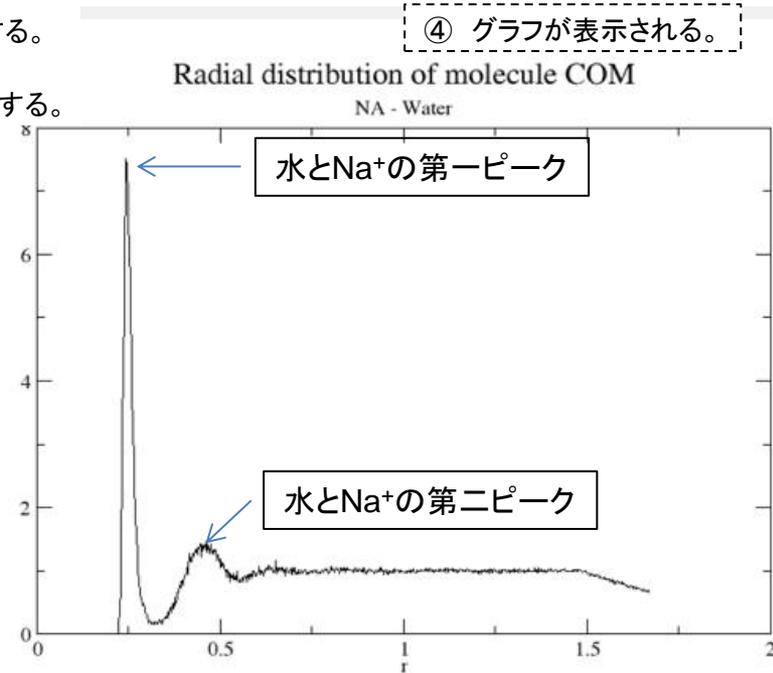
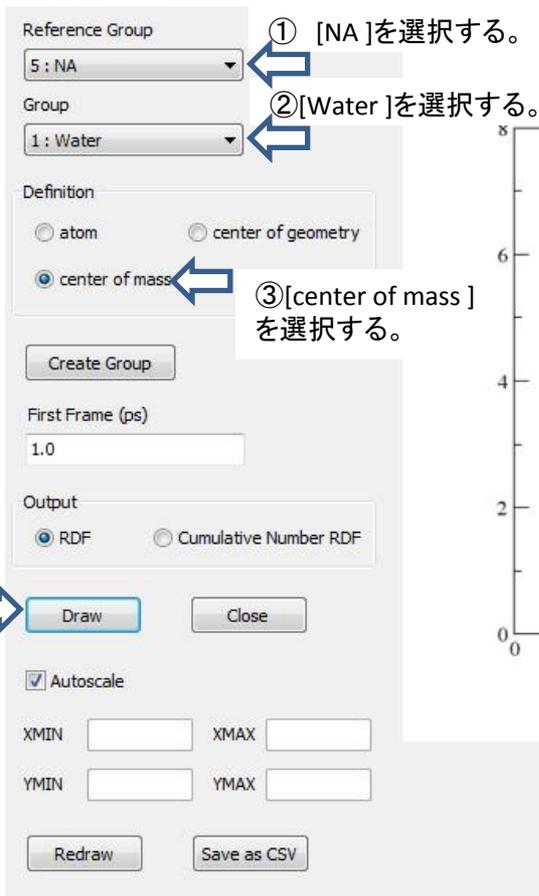
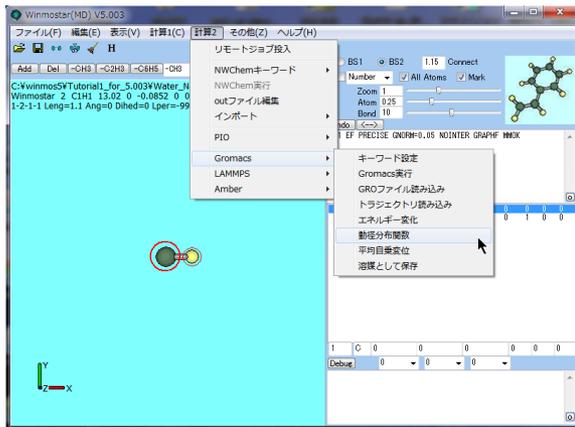
MDの最終ステップ(50000ステップ  
= 100 ps)の3D構造が表示される



# 動径分布関数を計算する 1

水とNa<sup>+</sup>の動径分布関数を表示させる

計算2→Gromacs→動径分布関数 を選択する。



# 動径分布関数を計算する 2

## Na<sup>+</sup>の周りの水の配位数を求める

③ グラフが表示される。

Cumulative Number RDF  
NA-Water

number

100

0

0 0.5

r

水の第一水和圏の水和数(約6分子)

① [Cumulative Number RDF] を選択する。

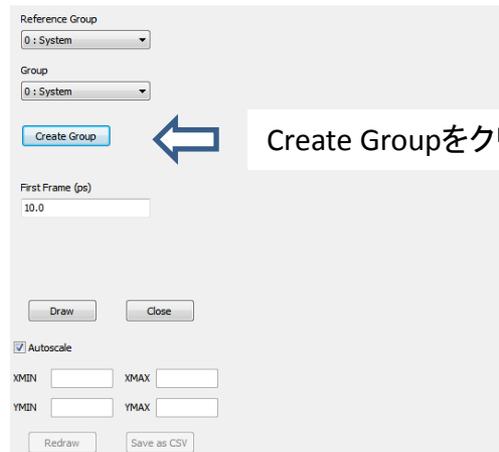
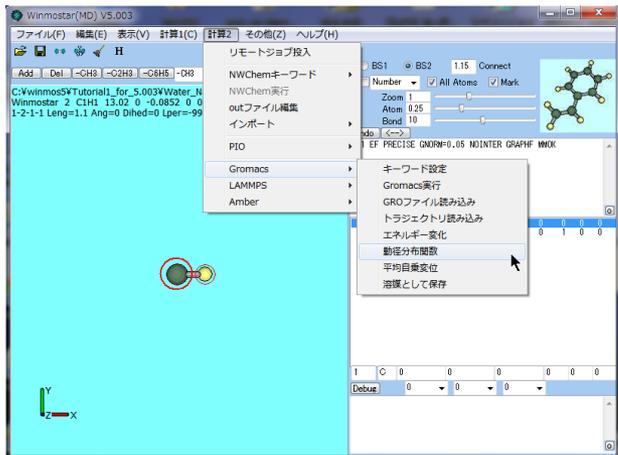
② Drawをクリックする。

詳しい解析を行うには、CSV出力させExcelなどを活用する

# 動径分布関数を計算する 3

## 水のO(酸素)を新グループとして登録する

計算2→Gromacs→ 動径分布関数 を選択する。



- ① [1 : Water] を選択する。
- ② OW (水分子の酸素) にチェックを入れる\*。
- ③ 新グループ名をタイプインする。
- ④ Createをクリックする。

\* Atom Nameを知る方法

トラジェクトリー確認 (前スライドページ) の際、画面左の座標欄に表示されている原子名を参考にする。

# 動径分布関数を計算する 4

## 水のO(酸素)とNa<sup>+</sup>の動径分布関数を表示させる

Reference Group  
5 : NA ← ① [NA]を選択する。

Group  
9 : OW ← ② [OW]を選択する。

Create Group

First Frame (ps)  
10.0

③ Drawをクリックする。

Draw Close

Autoscale

XMIN XMAX  
YMIN YMAX

Redraw Save as CSV

Radial distribution  
NA - OW

④ グラフが表示される。

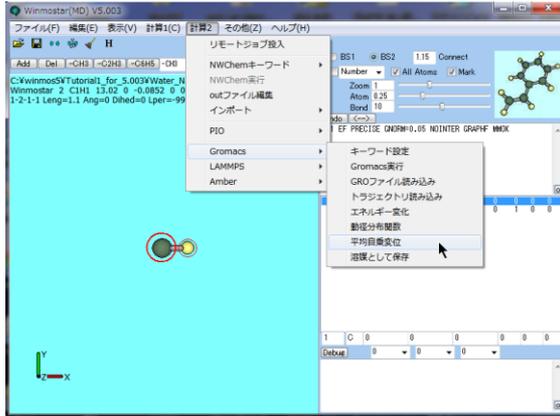
水のOとNa<sup>+</sup>の第一ピーク

水のOとNa<sup>+</sup>の第二ピーク

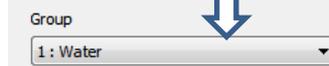
# 平均二乗変位を計算する

## 水の自己拡散定数を求める

計算2→Gromacs→平均二乗変位を選択する。



① [Water]を選択する。



Create Group

First Frame (ps)

10.0

② Drawをクリックする。



Autoscale

XMIN

XMAX

YMIN

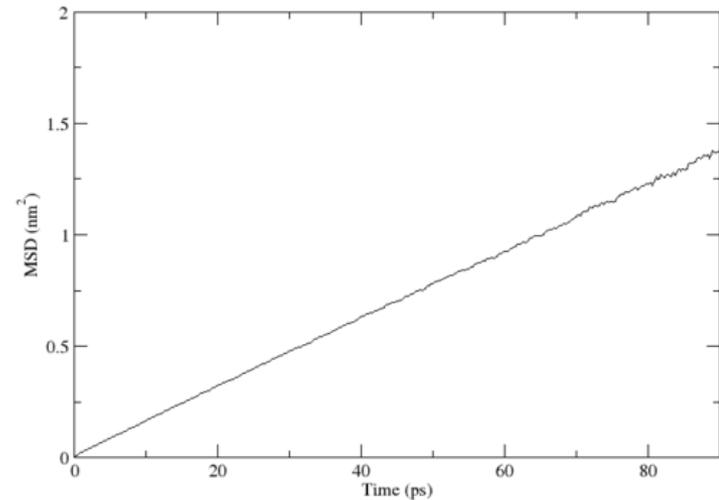
YMAX

Redraw

Save as CSV

Mean Square Displacement

③ グラフが表示される。



Diffusion Constants 2.5255 (+/- 0.0440) (1e-5 cm<sup>2</sup>/s)

④水の自己拡散係数(2.5255 × 10<sup>-5</sup> cm<sup>2</sup>/s)が表示される。

※実験値(neat) : 2.3 × 10<sup>-5</sup> cm<sup>2</sup>/s

