

# Winmostar - Gromacs Tutorial 1

Gromacs基礎編

V6.005

株式会社クロスアビリティ

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

2016/07/28

## 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

2015/10/06版

- (スライド2) 修正履歴を追加
- (全体) V6画像に差し換え

2015/10/07版

- (スライド3) 環境設定のスライドを追加

2015/12/09版

- タイトルを変更

2016/01/12版

- V6.005対応に伴い大幅リニューアル

2016/01/20版

- (スライド22) 計算実行する旨の記述追加

2016/07/28版

- (スライド29) YMAXの設定を0.5 -> 20 に修正

# Contents

## 0 動作環境設定

### I. はじめに

低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

Gromacs実行の基礎を学ぶ

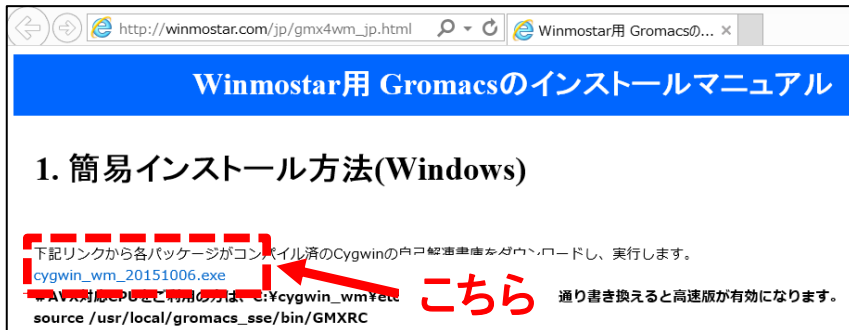
### III. 水中に複数の $\text{Na}^+$ と $\text{Cl}^-$ を含む系

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

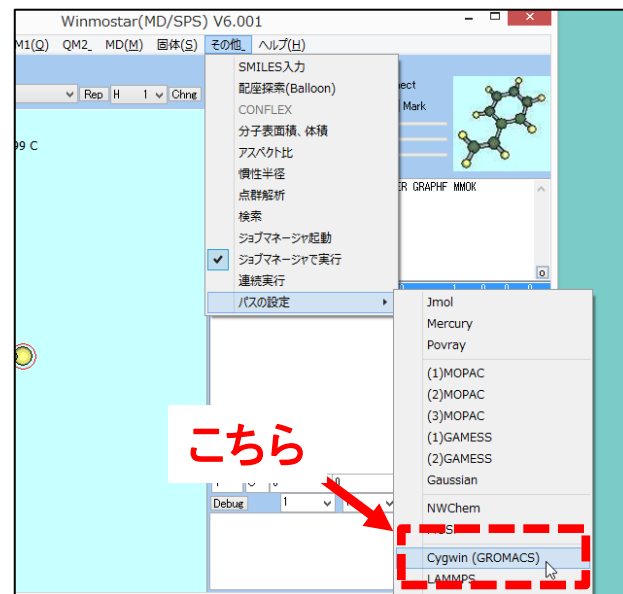
# 0 動作環境設定

Gromacsおよび関連ツールを使うためには、Cygwinのセットアップが必要です。

- [http://winmostar.com/jp/gmx4wm\\_jp.html](http://winmostar.com/jp/gmx4wm_jp.html)の「1. 簡易インストール方法 (Windows)」から、自己解凍書庫(exe)を入手し実行してください

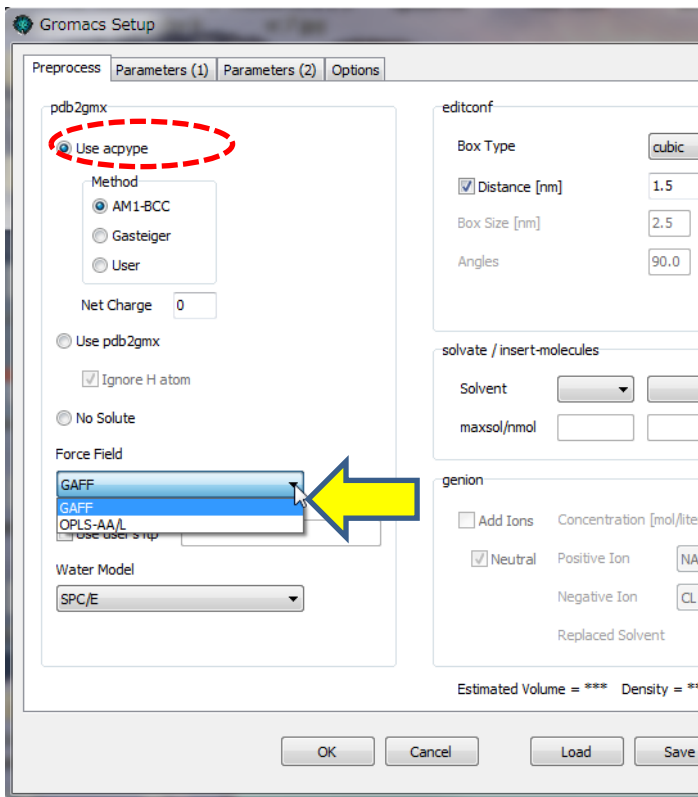


- デフォルトではC:¥直下にcygwin\_wmがインストールされますが、C:¥直下以外に置く場合はWinmostarの「その他」>「パスの設定」>「Cygwin (GROMACS)」にてcygwin\_wmの場所を指定して下さい



# 1. はじめに

## 低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).

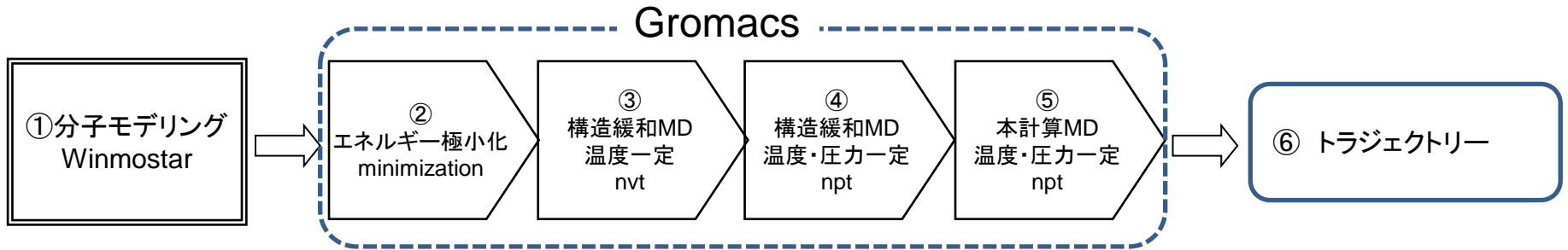
3) OPLS-AA/L

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

Gromacs計算終了後に[MD(M)]->[Gromacs]->[outファイル編集]で閲覧できる。

## II. 水中のエタノール1分子 全体のながれ

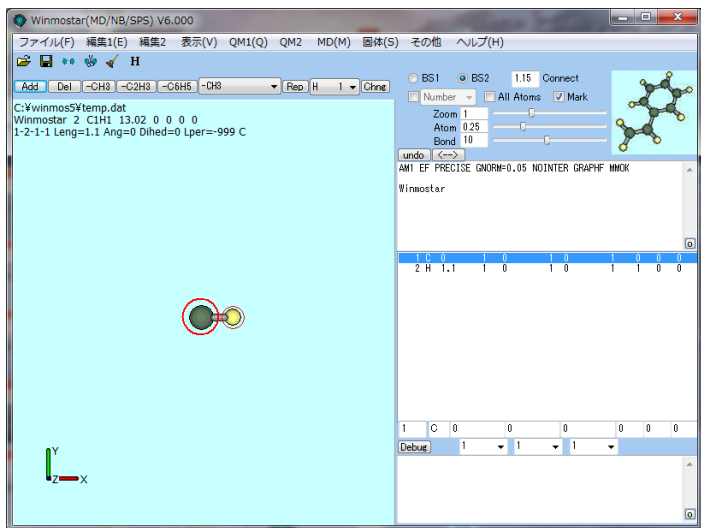


- ① 溶質分子のモデリング  
Winmostarを使って、 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ を作成する。
- ② エネルギー極小化(最急降下法)計算  
⇒ 系のポテンシャルエネルギー変化や計算系を確認する。
- ③ 構造緩和MD(温度一定: nvt)  
⇒ 系の温度、エネルギー変化を確認する。
- ④ 構造緩和MD(温度・圧力一定: npt)  
⇒ 系の温度、体積変化などを確認する。
- ⑤ 本計算MD(温度・圧力一定: npt)  
⇒ 系の温度、体積変化などを確認する。
- ⑥ トラジェクトリー(アニメーション)の起動

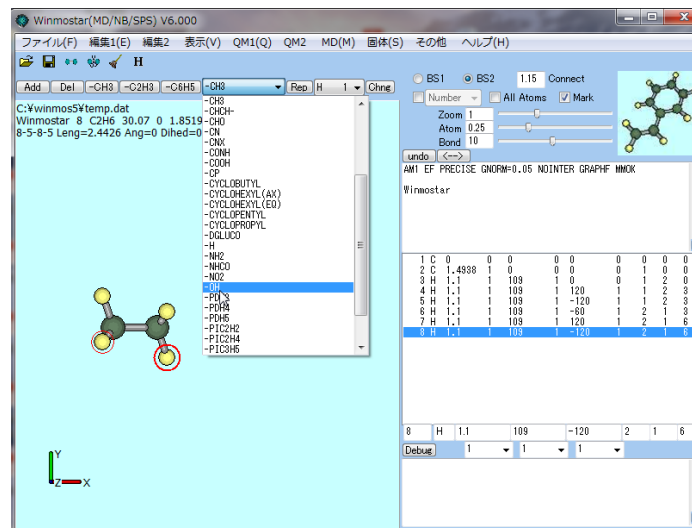
# II. 水中のエタノール1分子

## ①モデリング

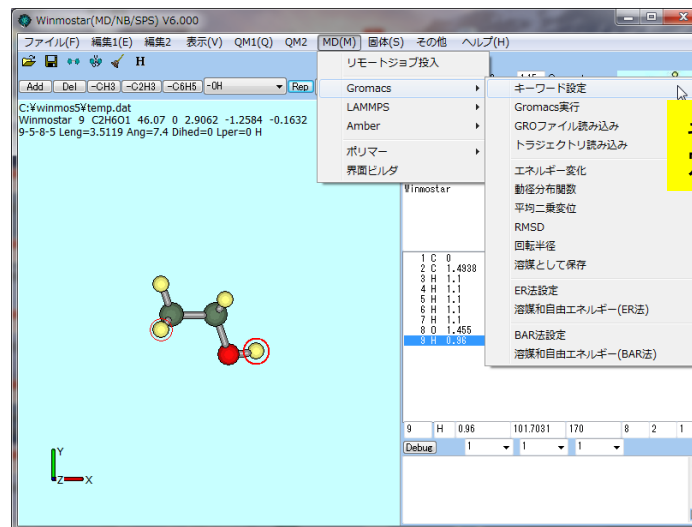
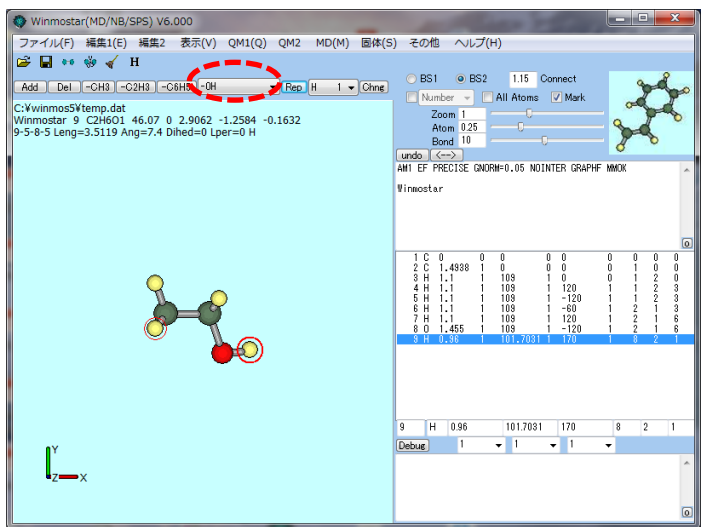
Winmostarを使って、CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>OHを作成する



- CH<sub>3</sub>を2回追加する



-OHへ変更



キーワード設定画面を起動

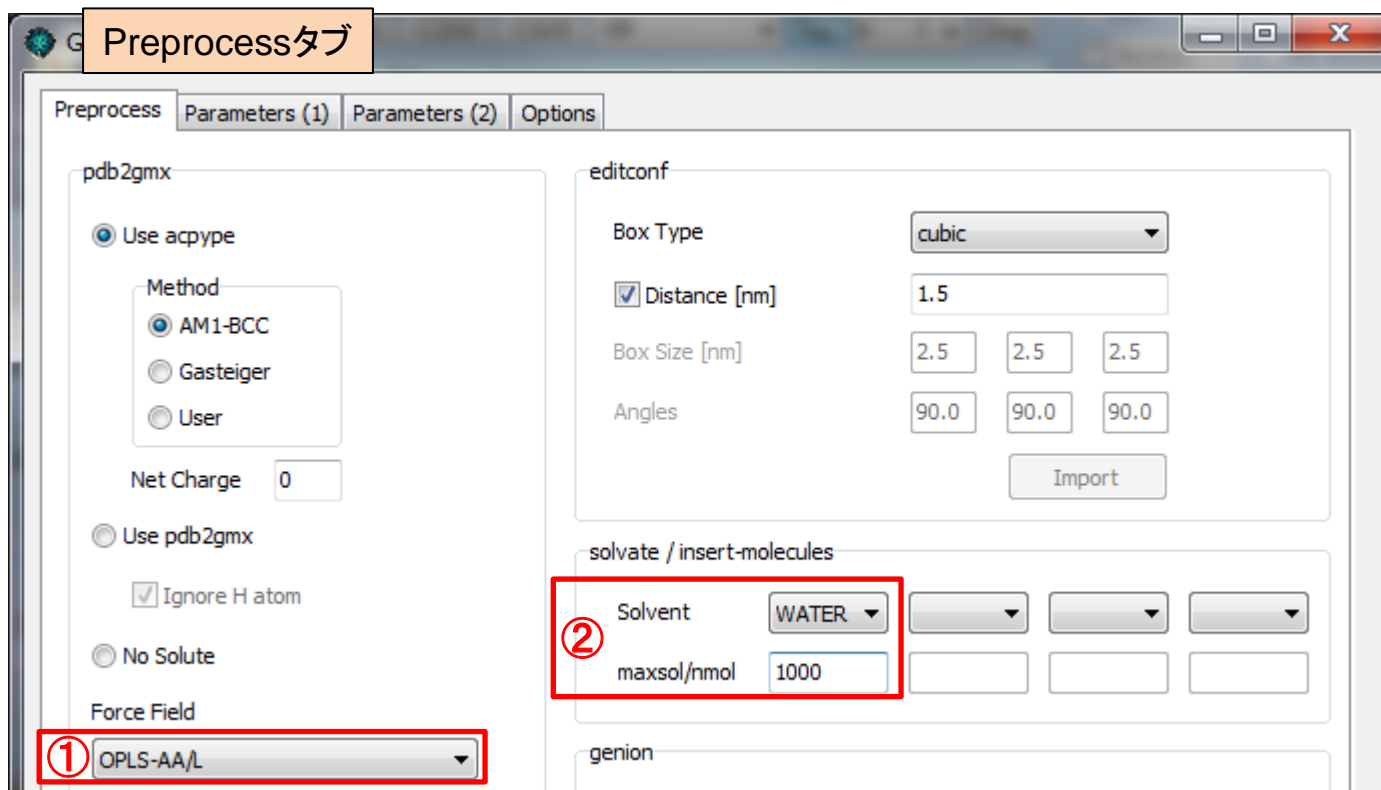
## II. 水中のエタノール1分子

### ②エネルギー最小化

以下の項目を設定し(他はデフォルト値)、[OK]ボタンを押す

ウインドウ右下の[Reset]ボタンを押しデフォルト値に戻す

- ① 力場は「OPLS-AA/L」
- ② 溶媒(solvent)に「WATER」を指定し、最大溶媒挿入数(maxsol/nmol)を1000に





## II. 水中のエタノール1分子

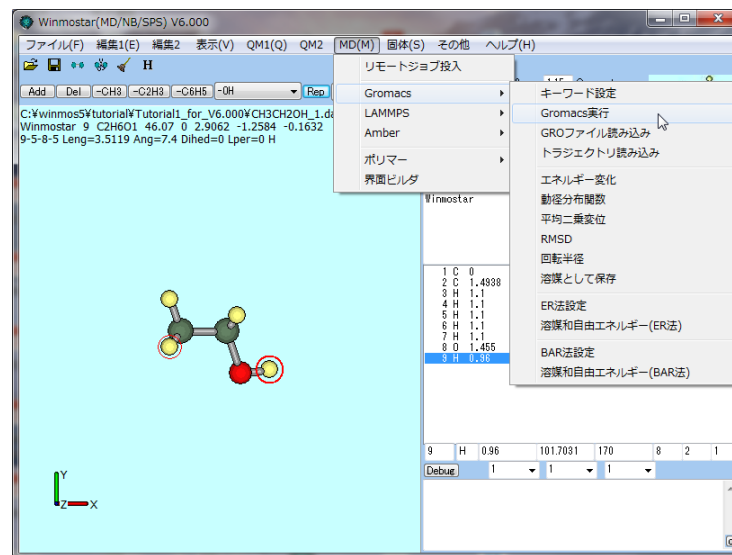
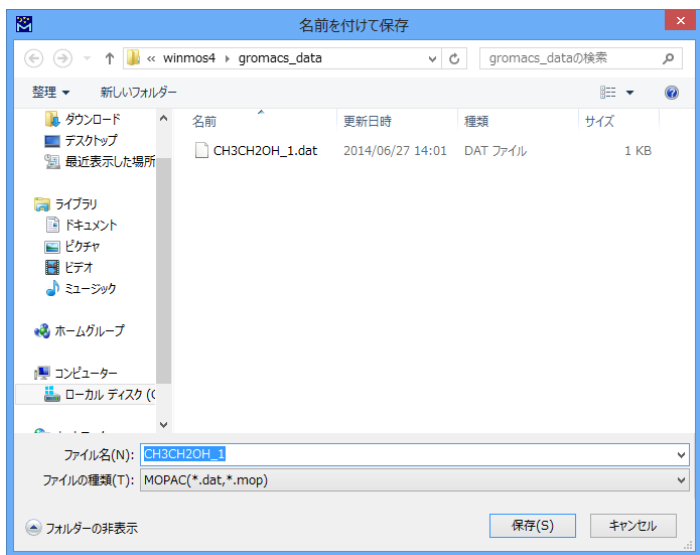
### ②エネルギー最小化

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。\*)

エネルギー極小化計算終了

\* 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¥CH3CH2OH\_1.dat

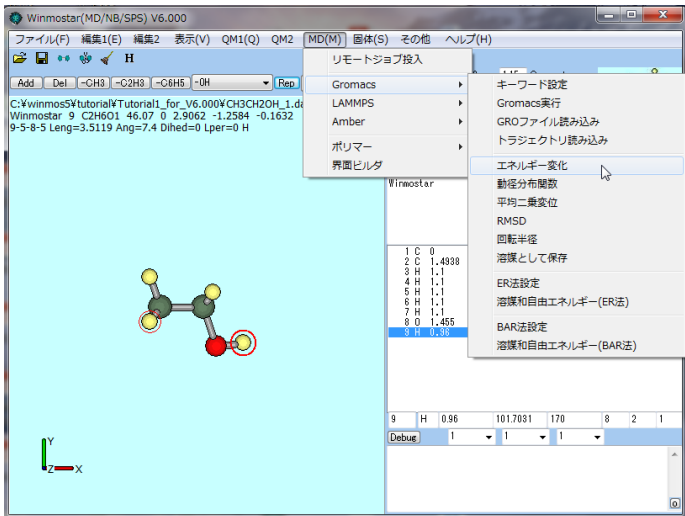
× C:¥MD Data¥CH3CH2OH\_1.dat ← スペースが含まれている

× 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

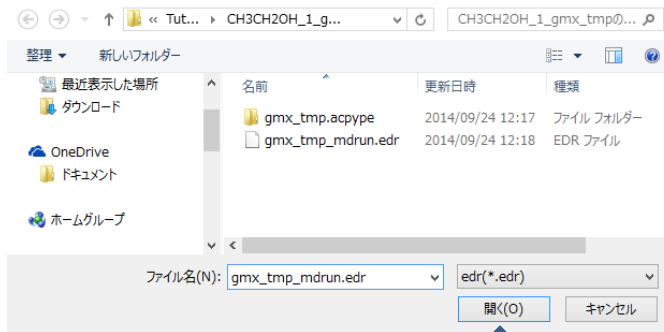
# II. 水中のエタノール1分子

## ②エネルギー最小化

系のポテンシャルエネルギー変化を確認する

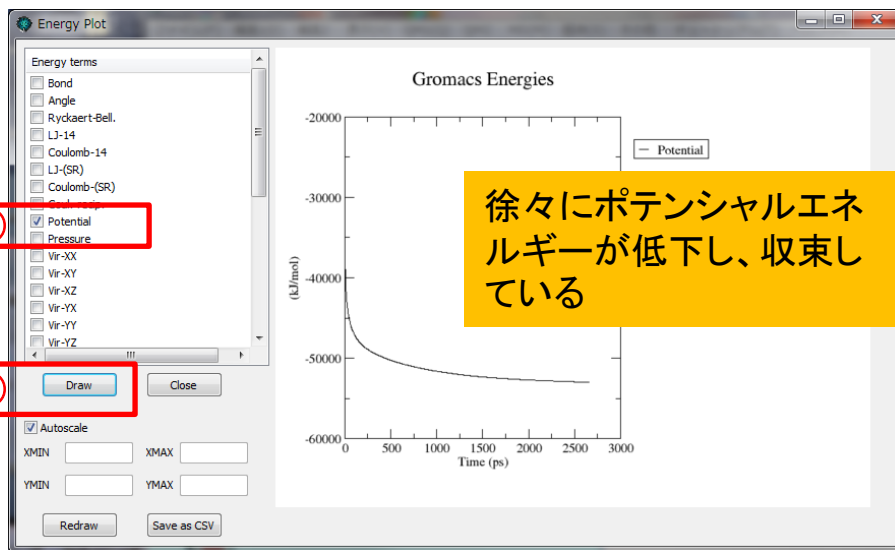
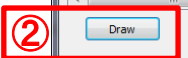


エネルギー変化を  
選択



[開く]をクリック

- ①Potential にチェック
- ②Drawをクリック



徐々にポテンシャルエネルギーが低下し、収束している

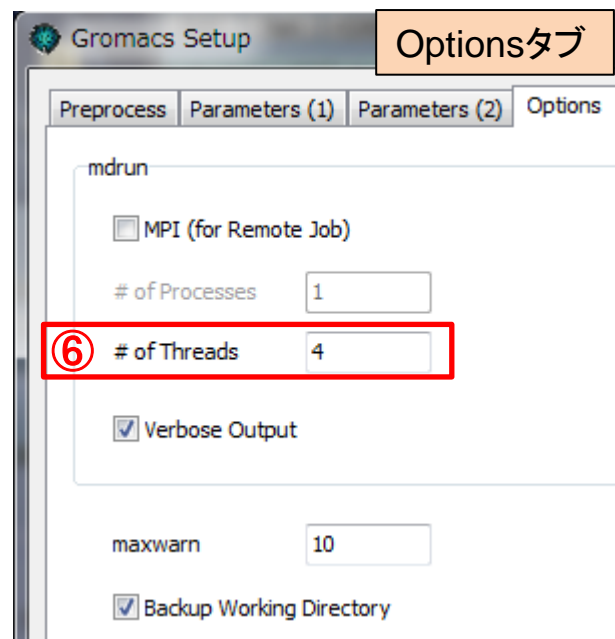
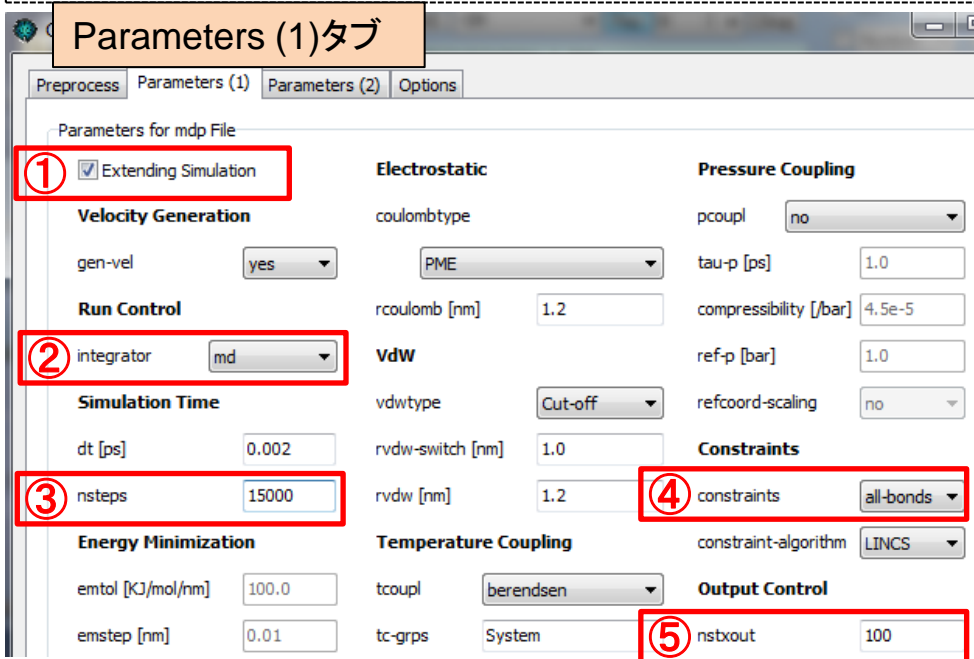
## II. 水中のエタノール1分子

### ③ 構造緩和MD(温度一定: nvt)

「キーワード設定」から以下のように設定し「Gromacs実行」する (計算時間: 約70 sec)

エネルギー最小化からの変更点:

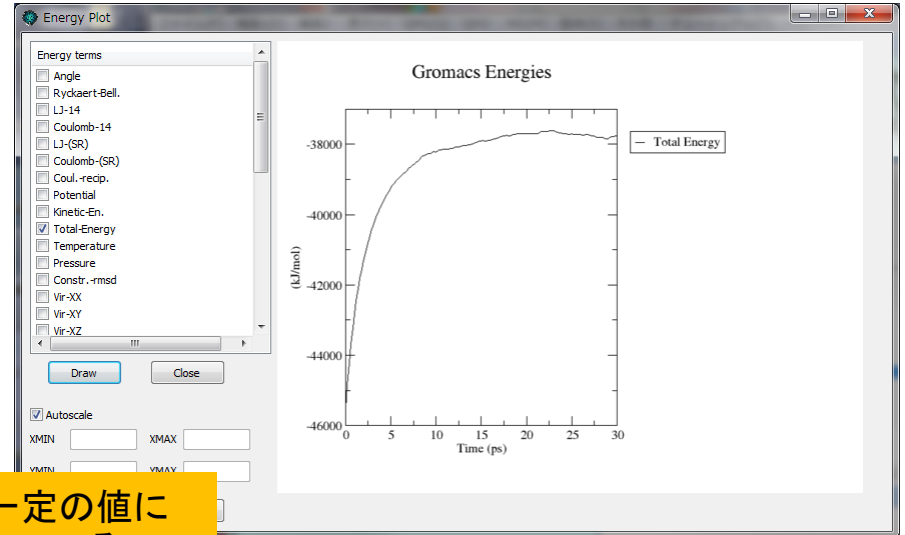
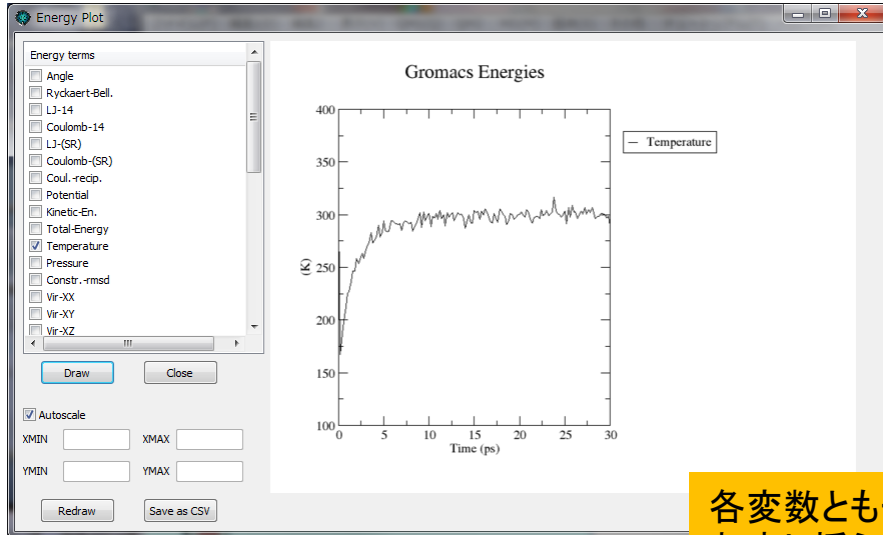
- ① Extending Simulationをチェック
- ② integratorはmd(分子動力学)
- ③ ステップ数(nstep)は 15000
- ④ 全ての結合長を拘束(constraint: all-bonds)
- ⑤ 座標出力間隔(nstxout)は100 steps
- ⑥ 必要に応じて、「Options」タブで並列数を指定



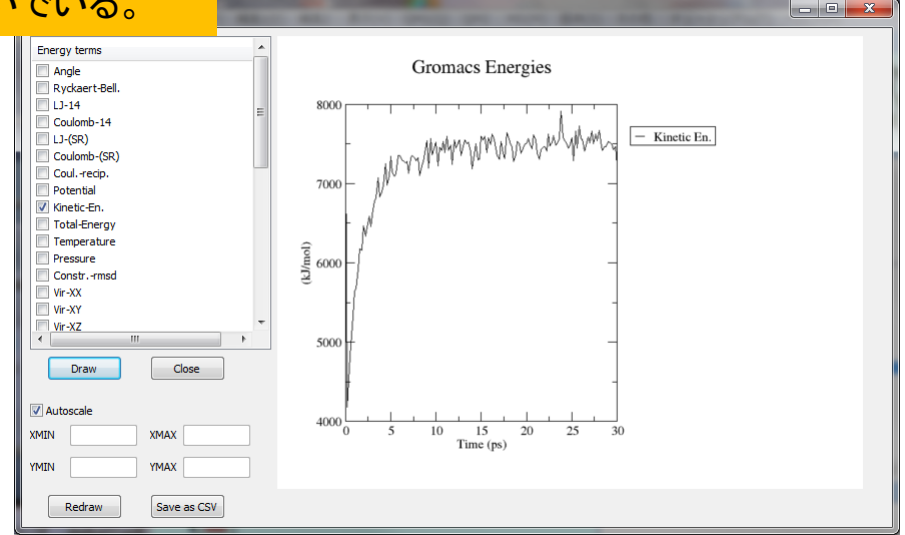
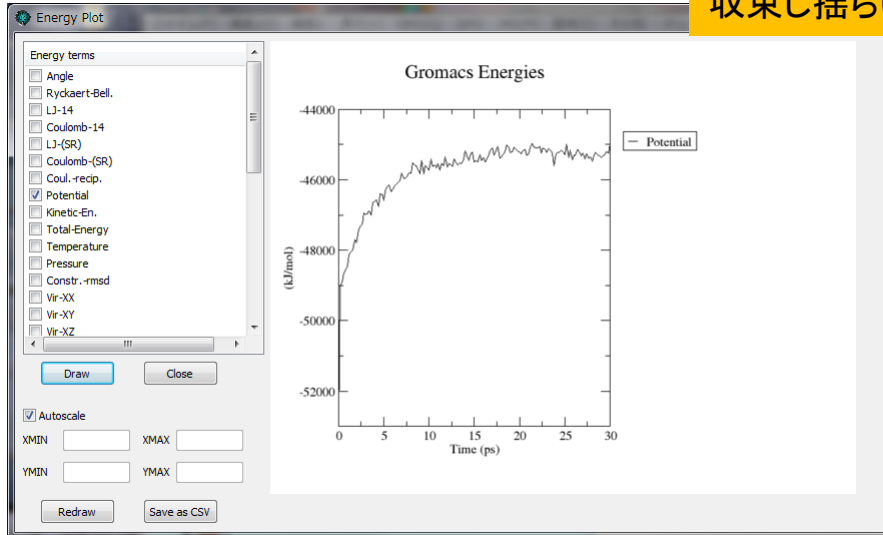
# II. 水中のエタノール1分子

## ③ 構造緩和MD(温度一定: nvt)

「MD」>「Gromacs」>「エネルギー変化」で結果を確認する



各変数とも一定の値に  
収束し揺らいでいる。



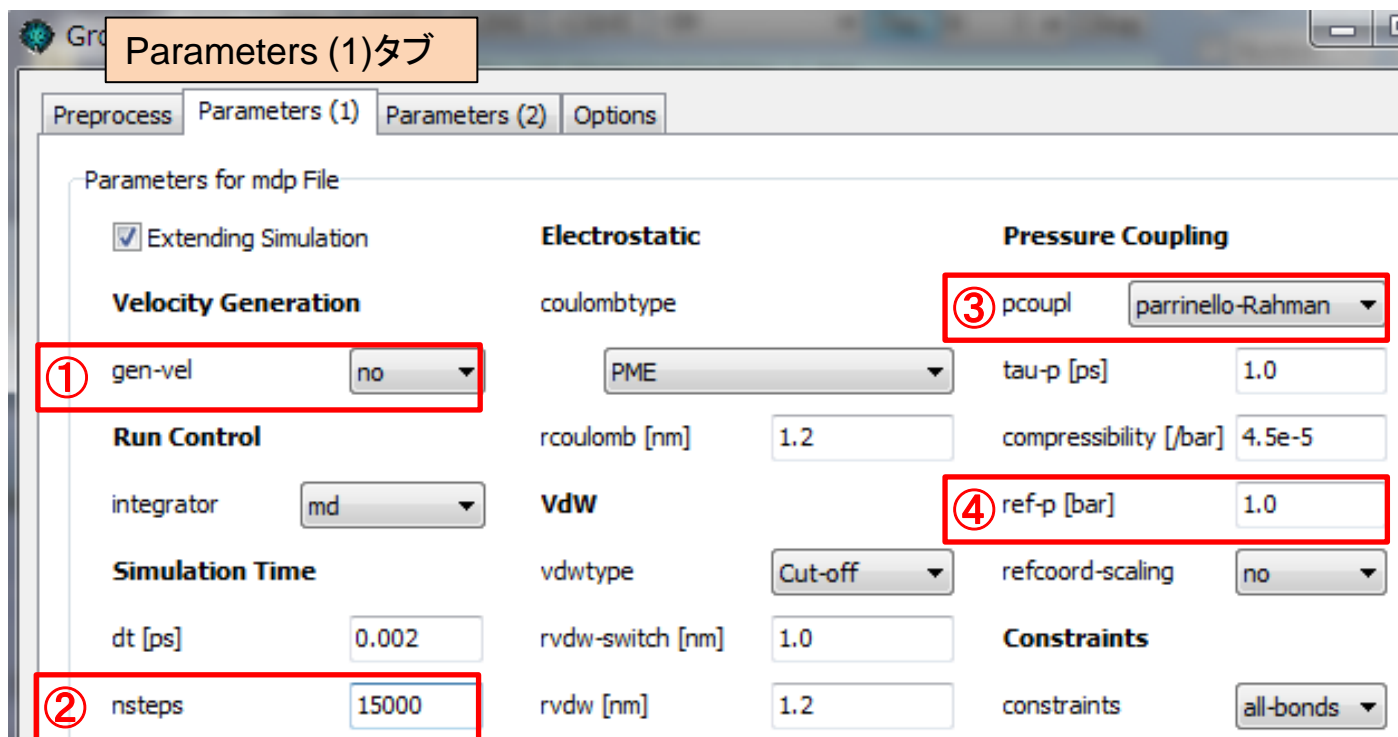
## II. 水中のエタノール1分子

### ④ 構造緩和MD (温度・圧力一定: npt)

「キーワード設定」から以下のように設定し、「Gromacs実行」する(82 sec)

構造緩和MD (温度一定: nvt) からの変更点:

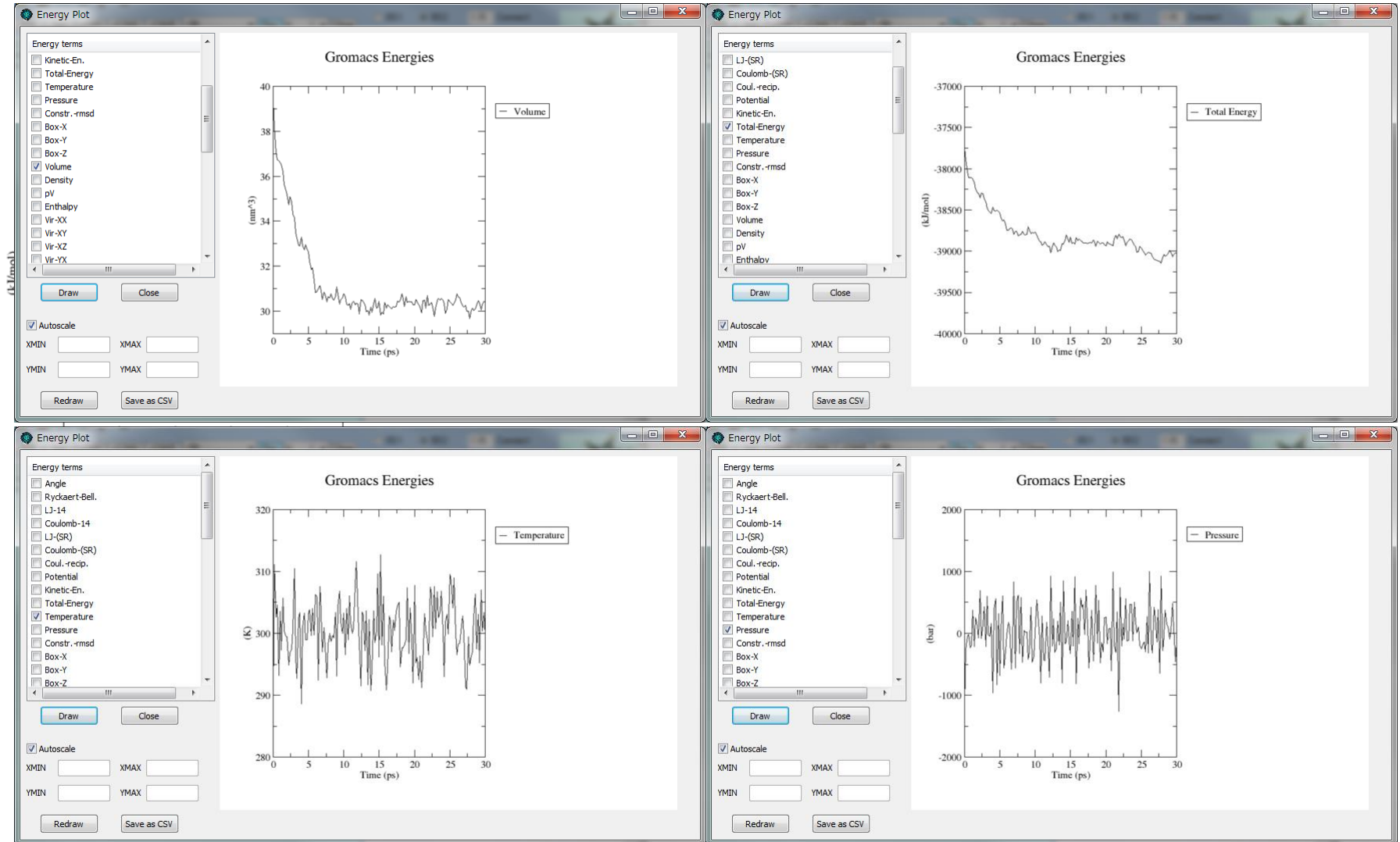
- ① 初速度を前の計算から引き継ぐ (gen-vel=no)
- ② ステップ数 (nstep) は 15000
- ③ 圧力制御 (pcoupl) には parrinello-Rahman を使用
- ④ 設定圧力 (ref-p) は 1 bar



## II. 水中のエタノール1分子

### ④ 構造緩和MD (温度・圧力一定: npt)

「MD」>「Gromacs」>「エネルギー変化」で結果を確認する



## II. 水中のエタノール1分子

### ⑤ 本計算MD(温度・圧力一定: npt)

「キーワード設定」から以下のように設定し、「Gromacs実行」する(141 sec)

構造緩和MD(温度・圧力一定: npt)の設定からの変更点:

- ① ステップ数(nstep)は 25000

Parameters (1)タブ

Preprocess Parameters (1) Parameters (2) Options

Parameters for mdp File

Extending Simulation

**Velocity Generation**

gen-vel

**Run Control**

integrator

**Simulation Time**

dt [ps]

**① nsteps**

**Energy Minimization**

emtol [KJ/mol/nm]

emstep [nm]

**Boundary Condition**

ptbc

**Electrostatic**

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

**Constraints**

constraints

constraint-algorithm

**Output Control**

nstxout

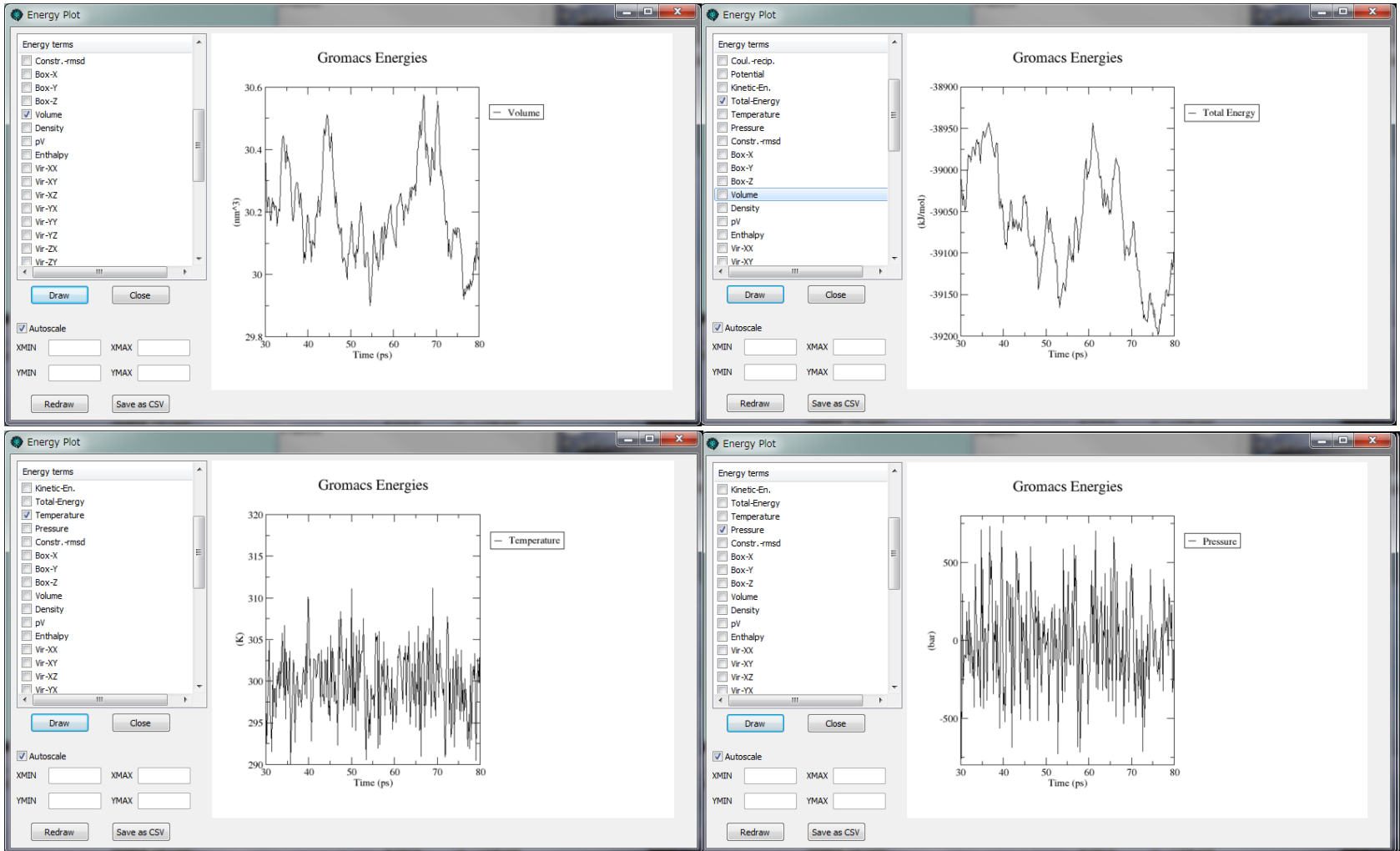
nstvout

nstenergy

## II. 水中のエタノール1分子

### ⑤ 本計算MD(温度・圧力一定: npt)

「MD」>「Gromacs」>「エネルギー変化」で結果を確認する

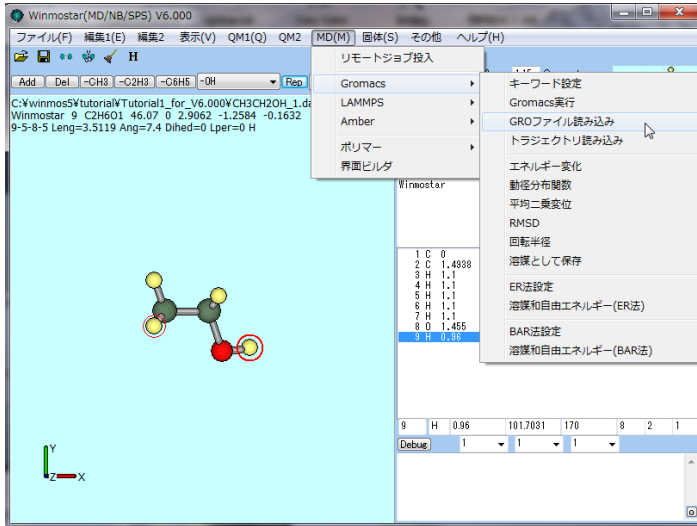




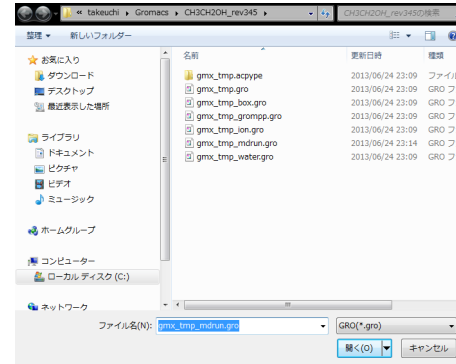
# II. 水中のエタノール1分子

## ⑤ 本計算MD(温度・圧力一定: npt) トrajectoryを確認する 1

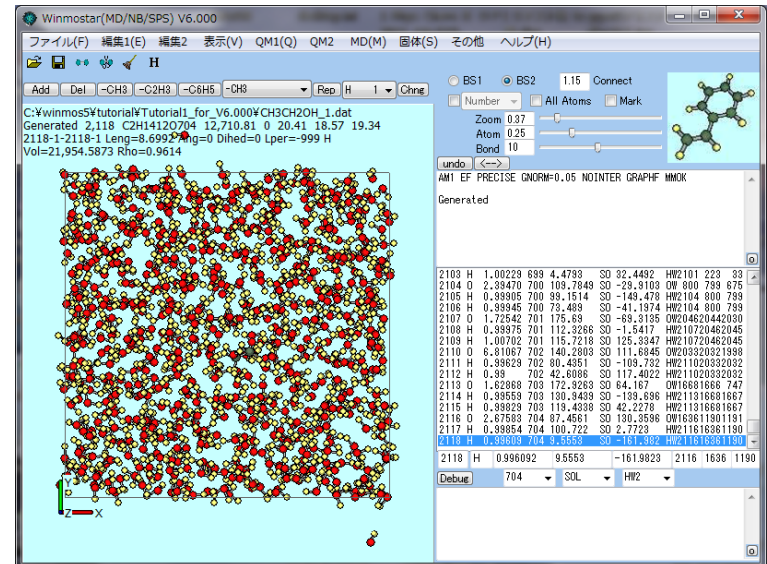
MD→Gromacs→ GROファイル読み込み を起動



gmx\_tmp\_mdrun.groを指定



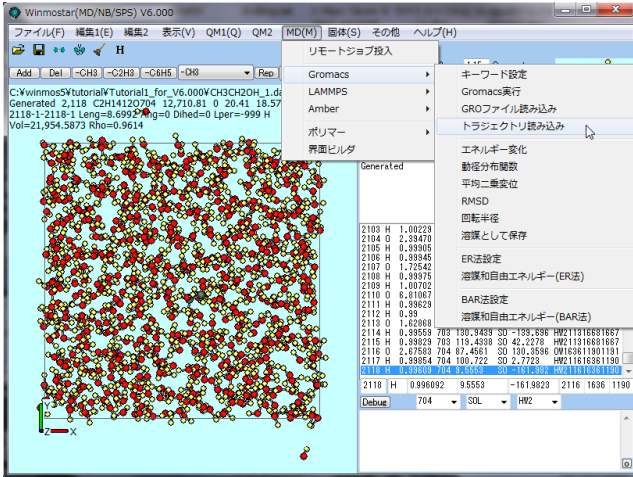
MDの最終ステップ(25000ステップ = 50 ps) の3D構造が表示される



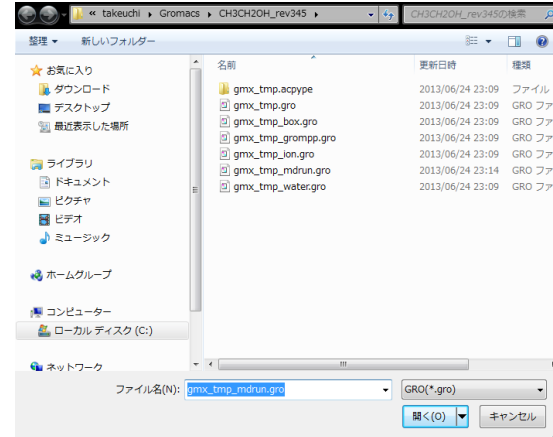
# II. 水中のエタノール1分子

## ⑤ 本計算MD(温度・圧力一定: npt) トrajectoryを確認する 2

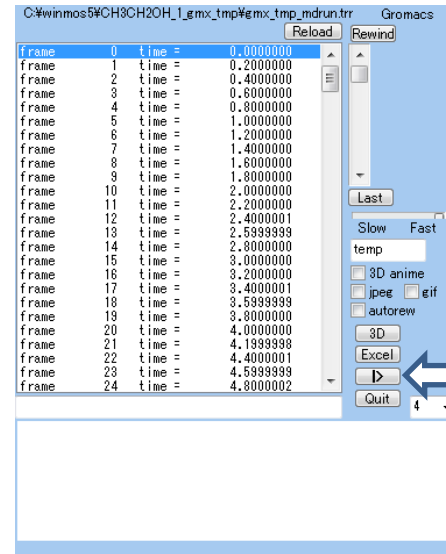
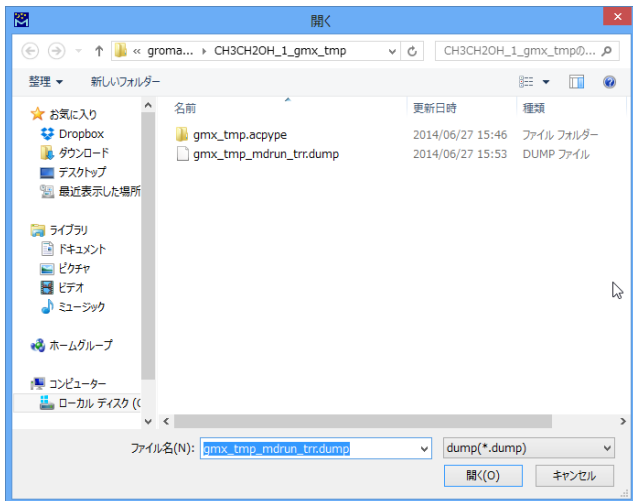
MD→Gromacs→トラジェクトリ読み込みを起動



gmx\_tmp\_mdrun.groを指定



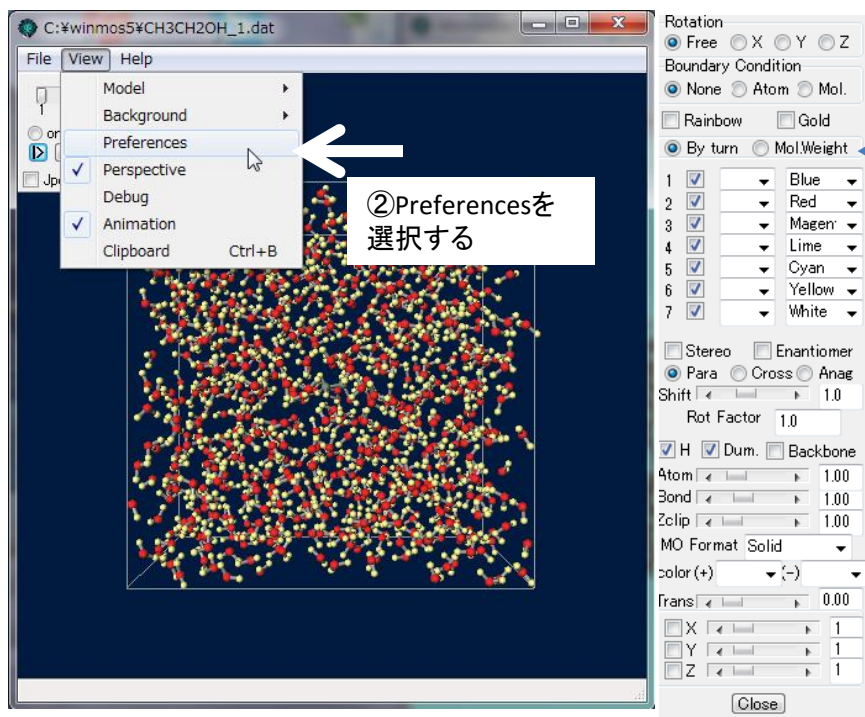
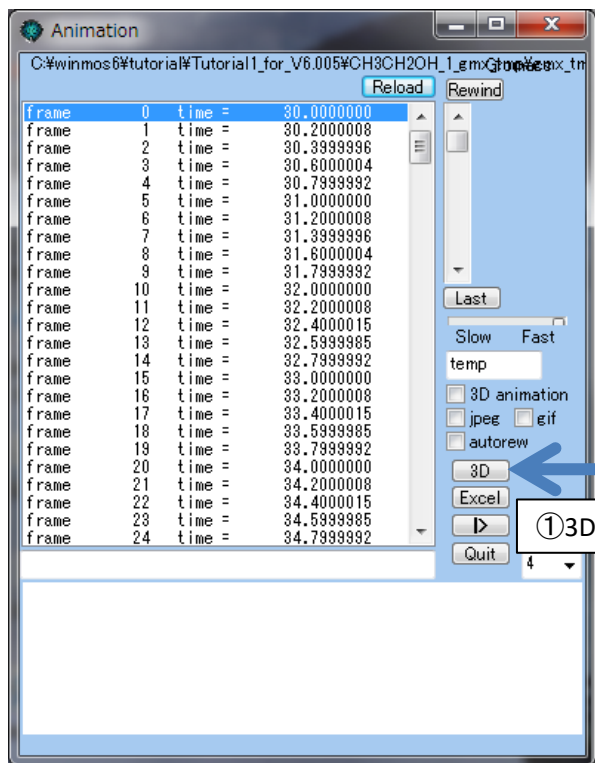
gmx\_tmp\_mdrun\_trrを指定



再生ボタンをクリック

## II. 水中のエタノール1分子

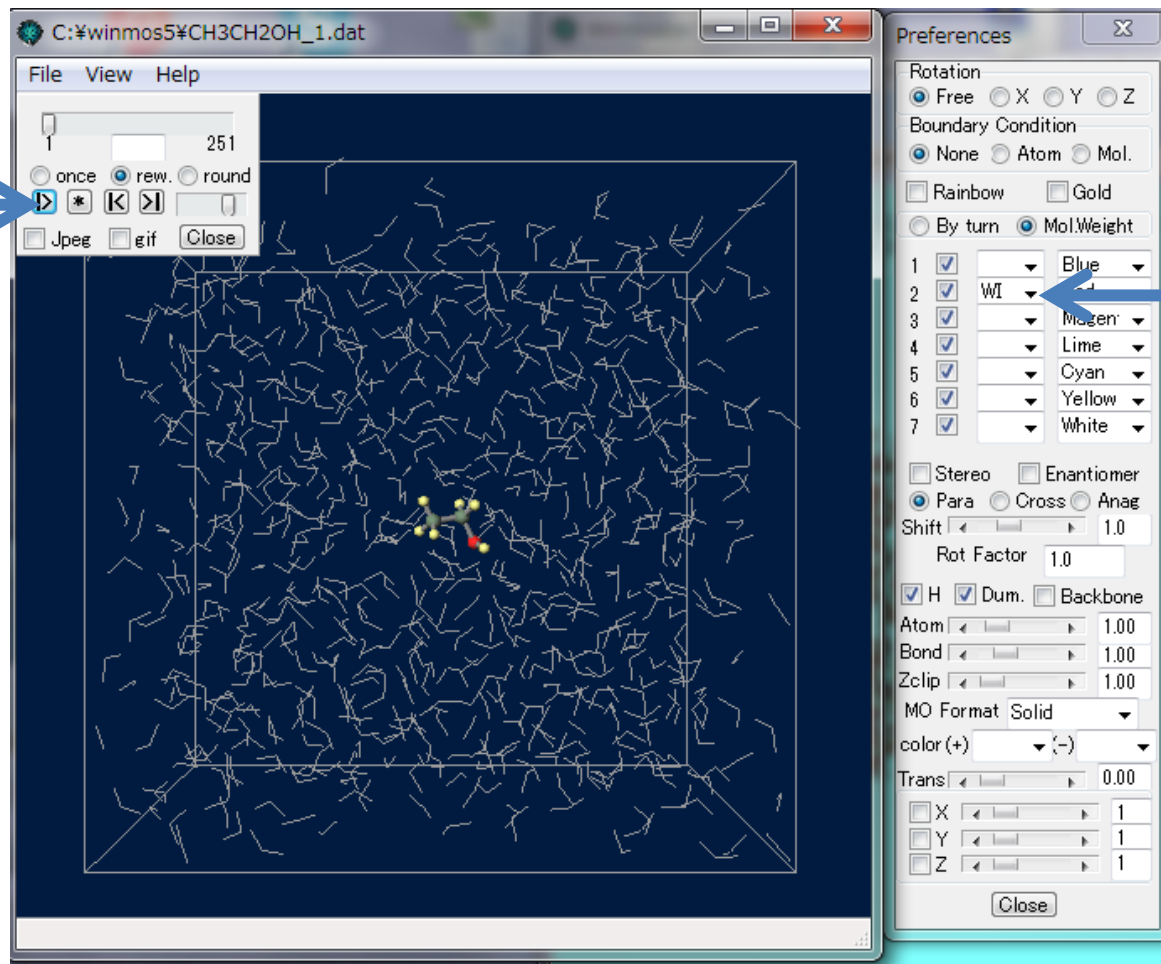
⑤ 本計算MD(温度・圧力一定: npt)  
トラジェクトリーを確認する 3



## II. 水中のエタノール1分子

⑤ 本計算MD(温度・圧力一定: npt)  
トラジェクトリーを確認する 4

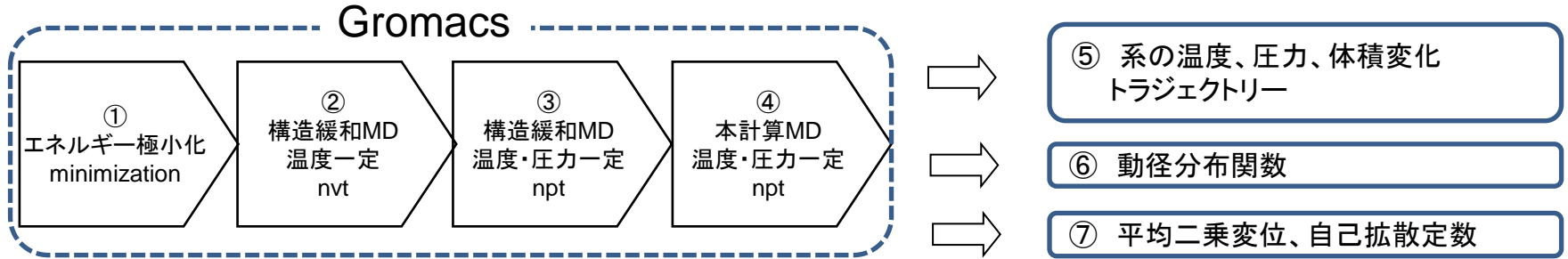
②再生ボタン  
をクリックする



① WIを選択する

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 全体のながれ



- ① エネルギー極小化(最急降下法)計算
- ② 構造緩和MD(温度一定: nvt)
- ③ 構造緩和MD(温度・圧力一定: npt)
- ④ 本計算MD(温度・圧力一定: npt)
- ⑤ 系の温度、圧力、エネルギー変化やトラジェクトリーを確認する。
- ⑥ 動径分布関数を計算する。
- ⑦ 平均二乗変位を計算し自己拡散係数を求める。

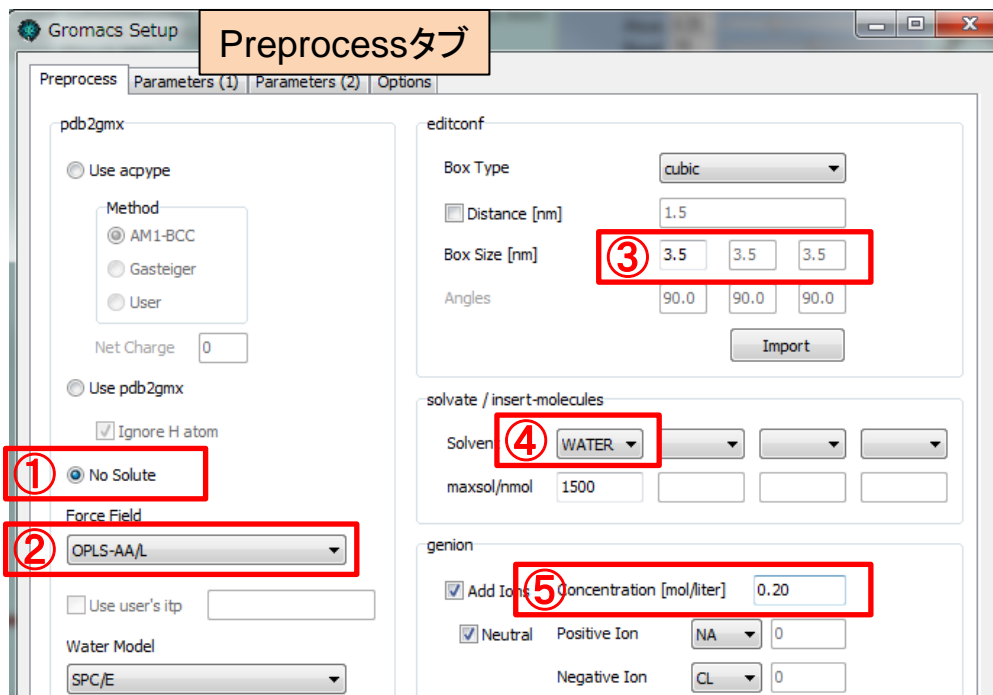
# Ⅲ. 水中に複数のNa<sup>+</sup>とCl<sup>-</sup>を含む系

## ①エネルギー極小化(最急降下法)計算

「キーワード設定」から以下の項目を設定し(他はデフォルト値)、「Gromacs実行」する。

ウインドウ右下の[Reset]ボタンを押しデフォルト値に戻す

- ① No Solute を選択
- ② 力場は「OPLS-AA/L」
- ③ 3.5 nmに設定
- ④ 溶媒(solvent)に「WATER」を指定し、最大溶媒挿入数(maxsol/nmol)を1500に
- ⑤ Concentrationを0.20に変更
- ⑥ ファイル名を「H2O\_Na5Cl5」として保存



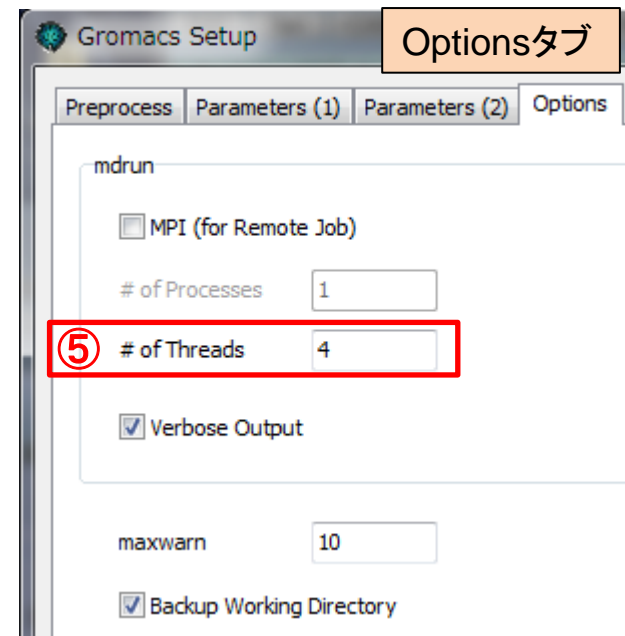
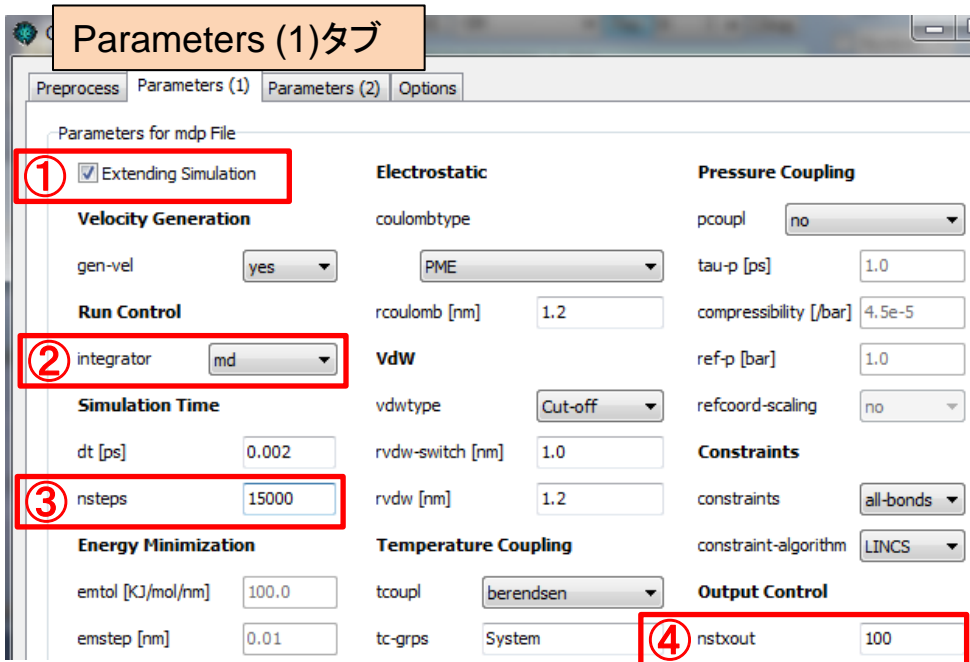
# III. 水中に複数のNa<sup>+</sup>とCl<sup>-</sup>を含む系

## ② 構造緩和MD(温度一定: nvt)

「キーワード設定」から以下のように設定し、「Gromacs実行」する (104 sec)

エネルギー最小化からの変更点:

- ① Extending Simulationをチェック
- ② integratorはmd(分子動力学)
- ③ ステップ数(nstep)は 15000
- ④ 座標出力間隔(nstxout)は100 steps
- ⑤ 必要に応じて、「Options」タブで並列数を指定



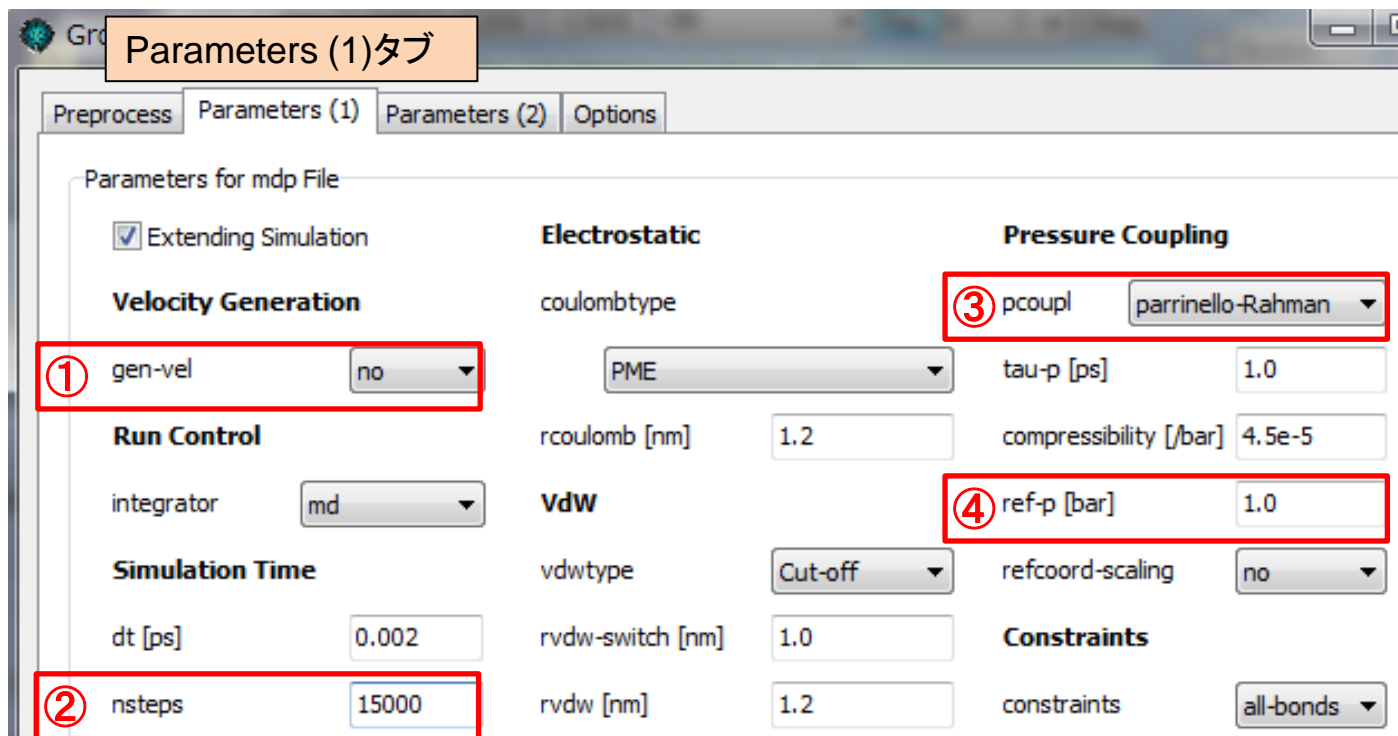
# III. 水中に複数のNa<sup>+</sup>とCl<sup>-</sup>を含む系

## ③ 構造緩和MD (温度・圧力一定: npt)

「キーワード設定」から以下のように設定し、「Gromacs実行」する(106 sec)

構造緩和MD (温度一定: nvt) からの変更点:

- ① 初速度を前の計算から引き継ぐ (gen-vel=no)
- ② ステップ数 (nstep) は 15000
- ③ 圧力制御 (pcoupl) には parrinello-rahman を使用
- ④ 設定圧力 (ref-p) は 1 bar





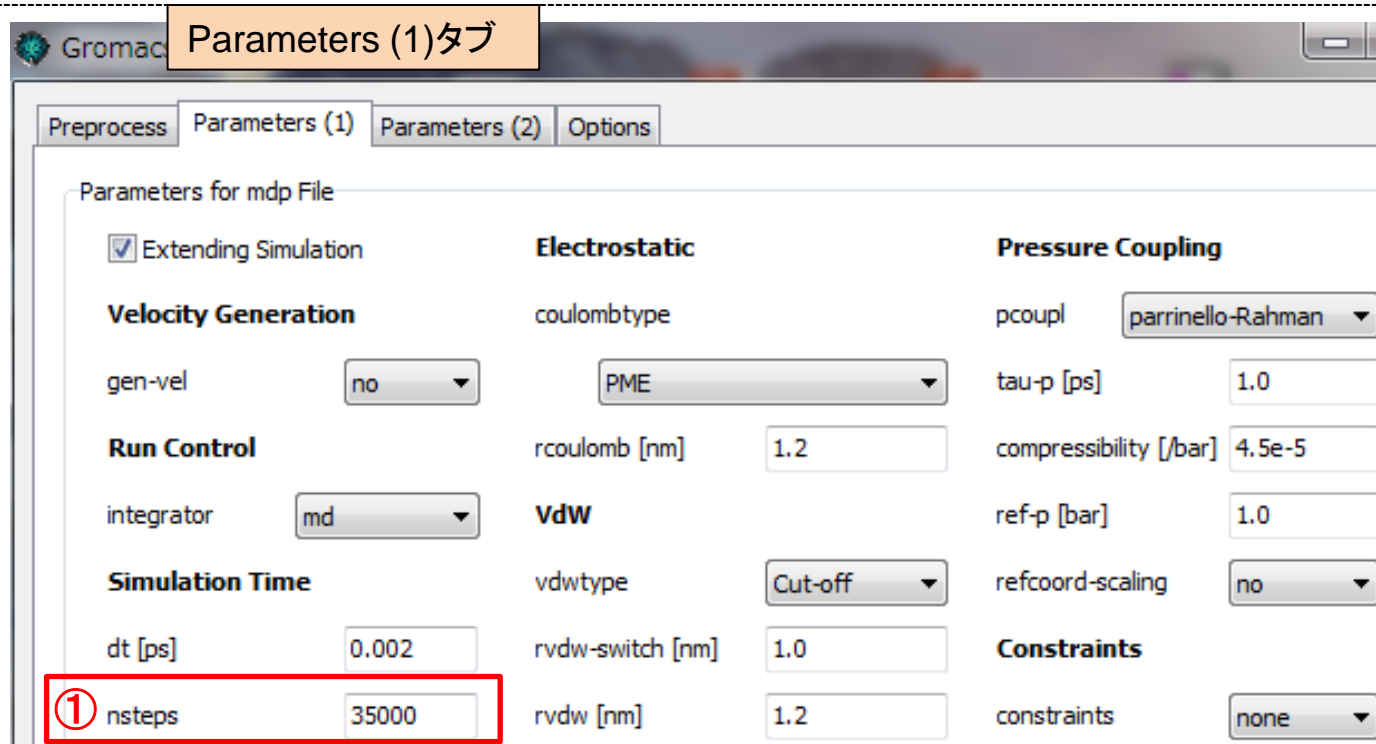
### III. 水中に複数のNa<sup>+</sup>とCl<sup>-</sup>を含む系

#### ④ 本計算MD(温度・圧力一定: npt)

「キーワード設定」から以下のように設定し、「Gromacs実行」する(254 sec)

構造緩和MD(温度・圧力一定: npt)の設定からの変更点:

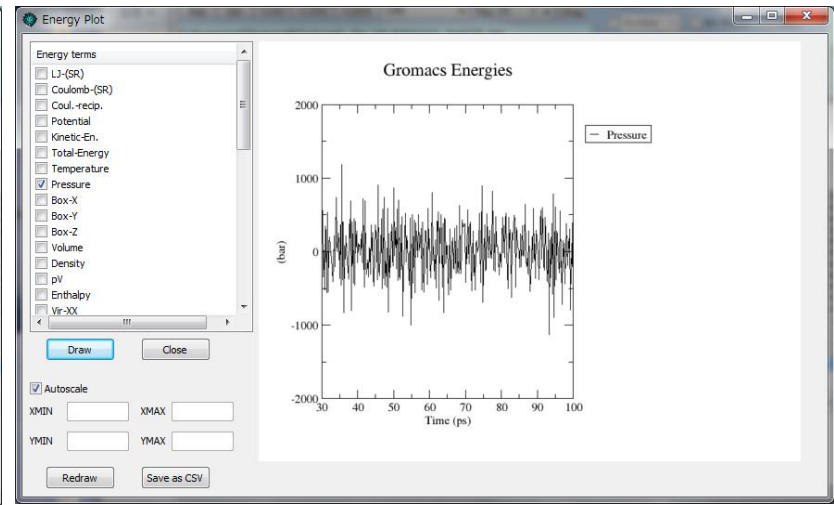
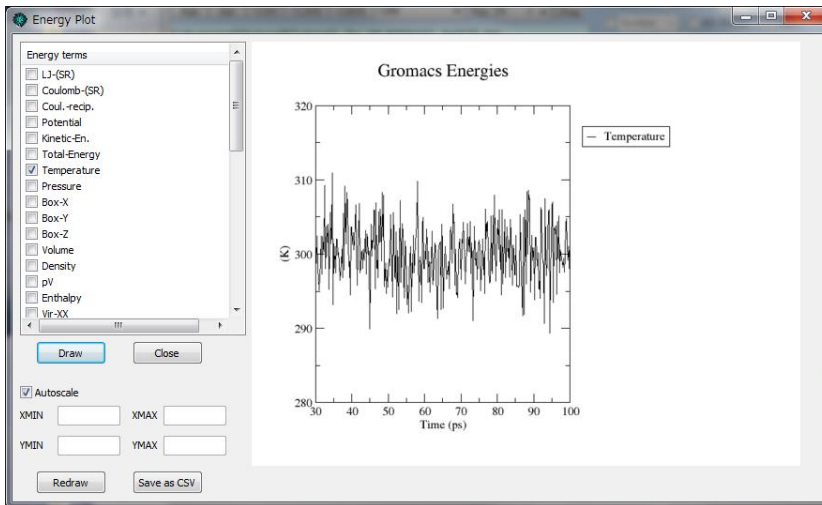
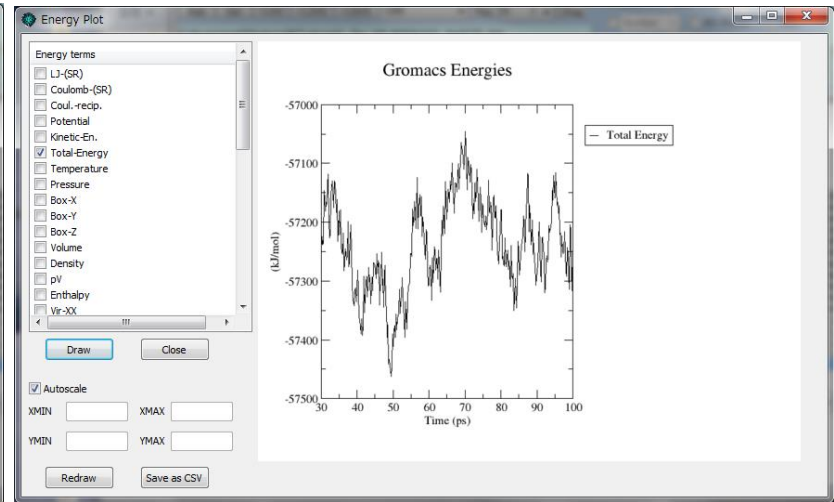
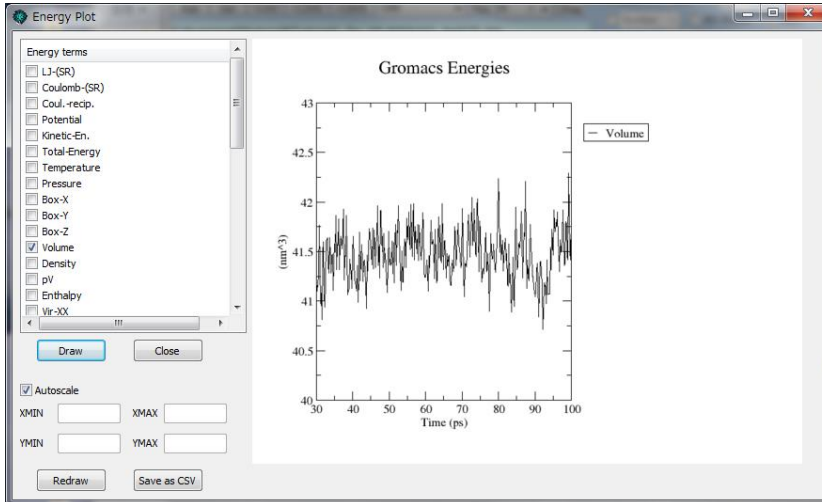
- ① ステップ数(nstep)は 35000





# III. 水中に複数のNa<sup>+</sup>とCl<sup>-</sup>を含む系

- ⑤ 系の温度、圧力、エネルギー変化やトラジェクトリーを確認する。  
「MD」>「Gromacs」>「エネルギー変化」で結果を確認する



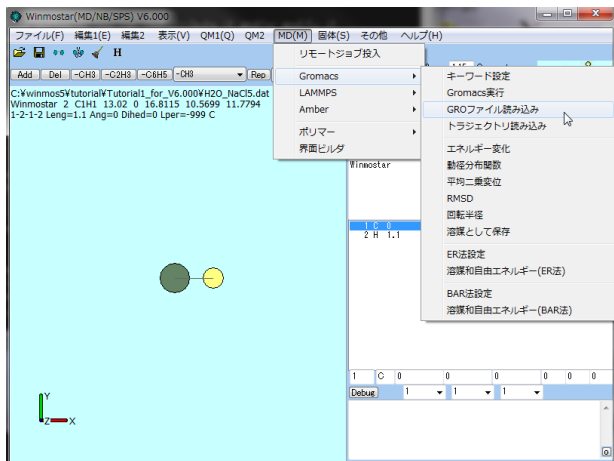
# X-Ability III. 水中に複数のNa<sup>+</sup>とCl<sup>-</sup>を含む系

クロスアビリティ

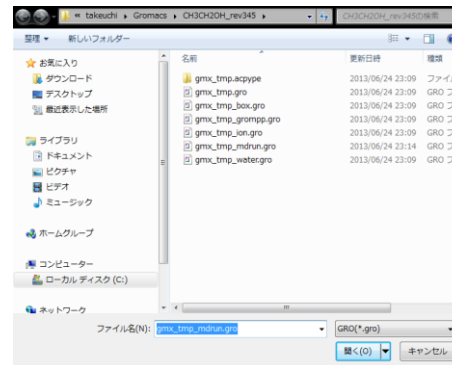
⑤ 系の温度、圧力、エネルギー変化やトラジェクトリーを確認する。

トラジェクトリーを確認する。

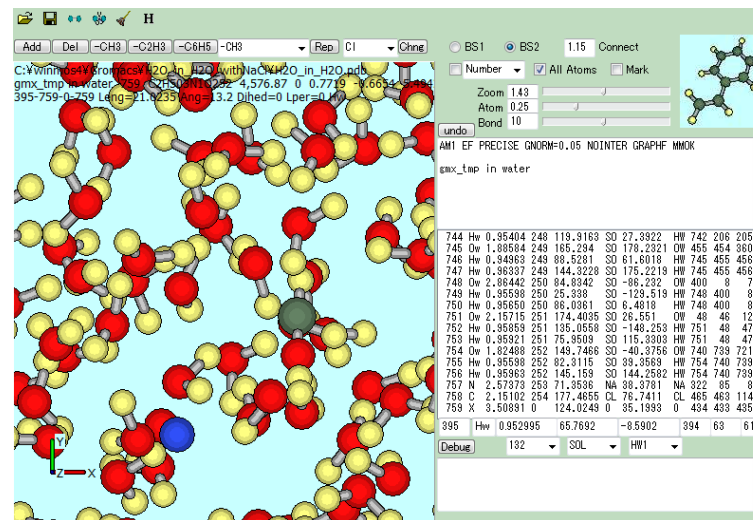
MD→Gromacs→ GROファイル読み込み を選択する。



gmx\_tmp\_mdrun.groを指定



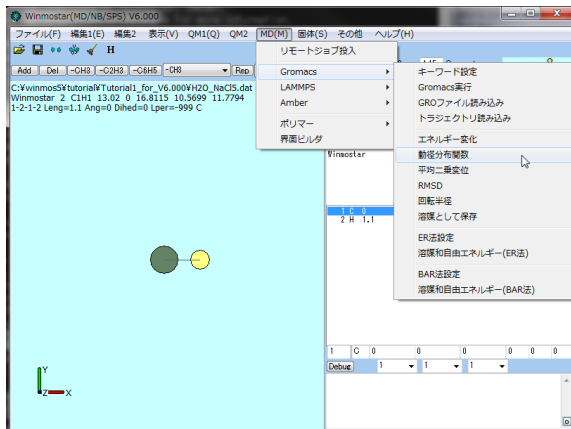
MDの最終ステップの3D構造が表示される



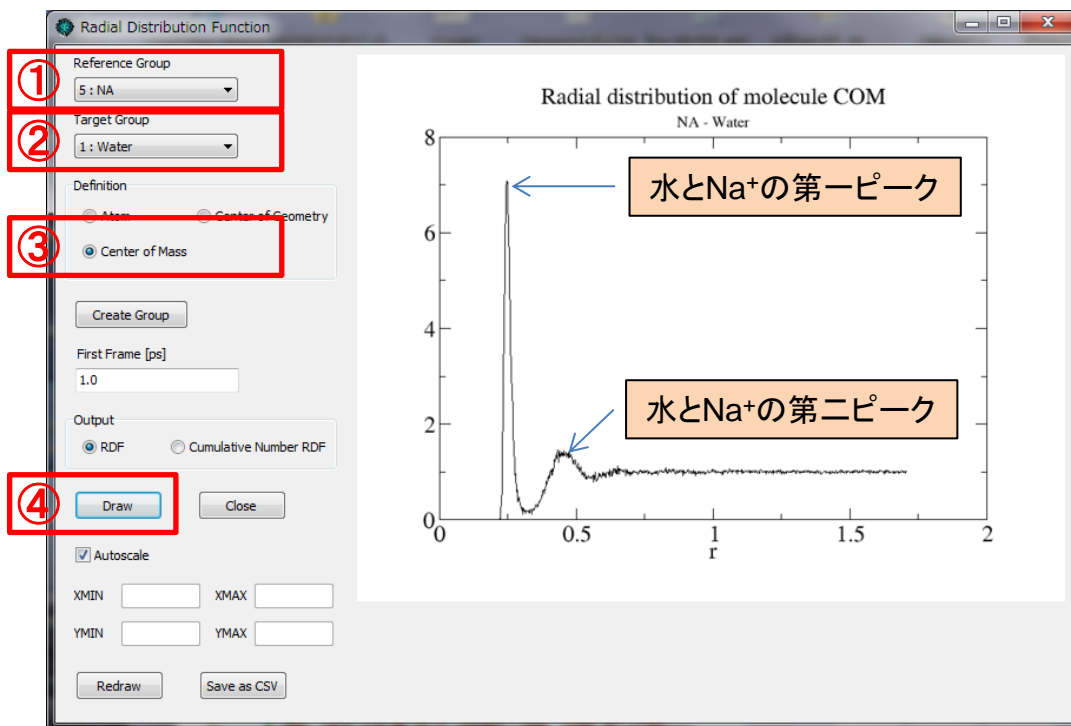
# III. 水中に複数のNa<sup>+</sup>とCl<sup>-</sup>を含む系

## ⑥ 動径分布関数を計算する 水とNa<sup>+</sup>の動径分布関数を表示させる

MD→Gromacs→ 動径分布関数 を選択する。



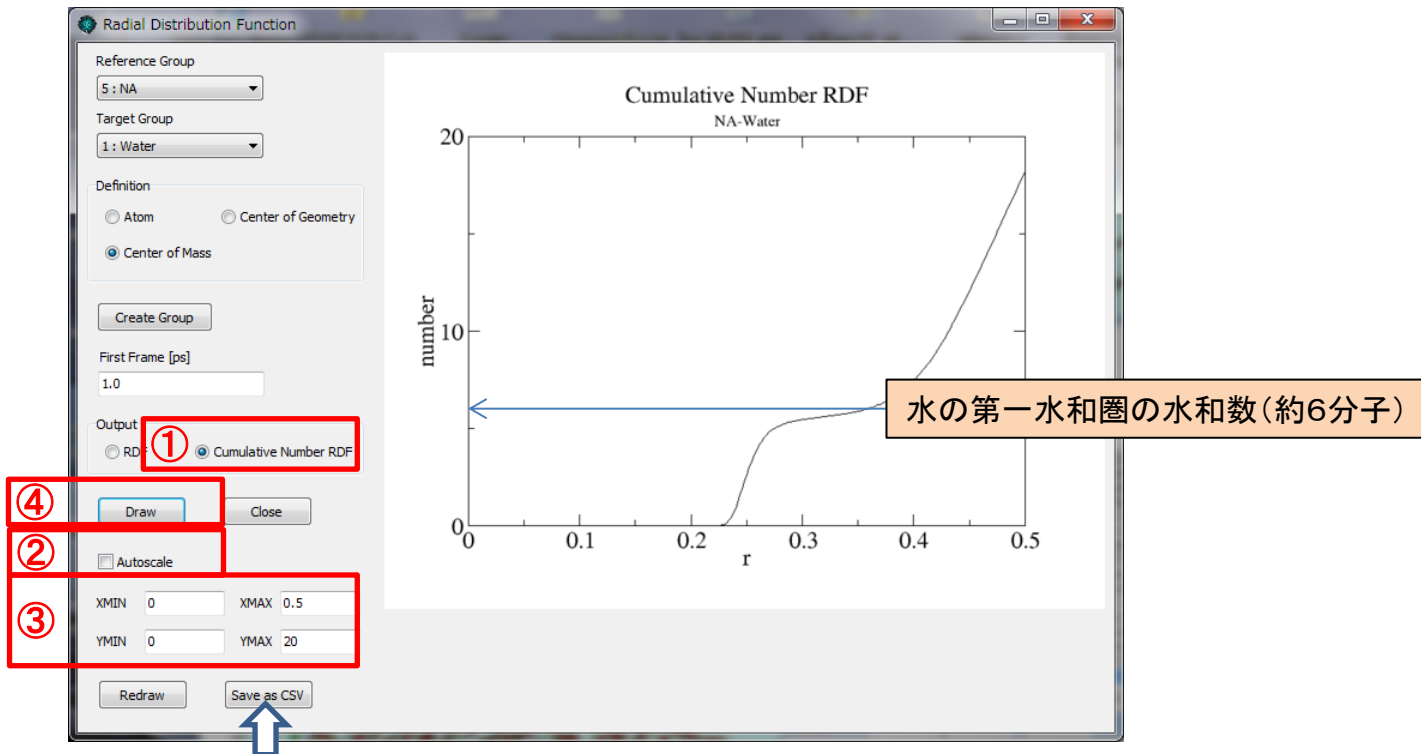
- ① Reference Groupに[NA ]を選択する。
- ② Target Groupに[Water ]を選択する。
- ③ [center of mass ]を選択する。
- ④ [Draw]をクリックする。



# III. 水中に複数のNa<sup>+</sup>とCl<sup>-</sup>を含む系

## ⑥ 動径分布関数を計算する Na<sup>+</sup>の周りの水の配位数を求める

- ① [Cumulative Number RDF ]を選択する。
- ② Autoscaleのチェックを外す
- ③ XMINに0をXMAXに0.5を、YMINに0をYMAXに20を設定する。
- ④ Drawをクリックする



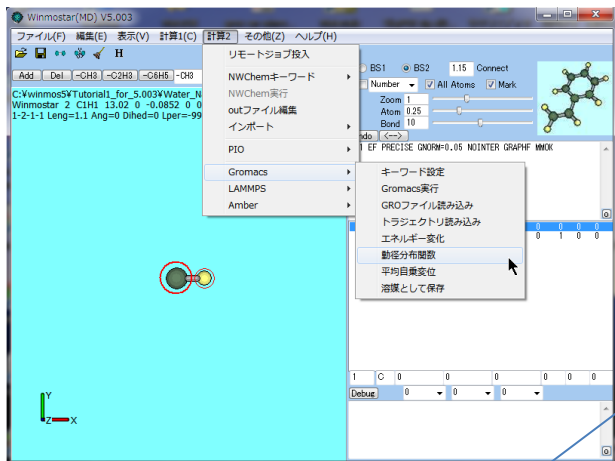
詳しい解析を行うには、CSV出力させExcelなどを活用する

# III. 水中に複数のNa<sup>+</sup>とCl<sup>-</sup>を含む系

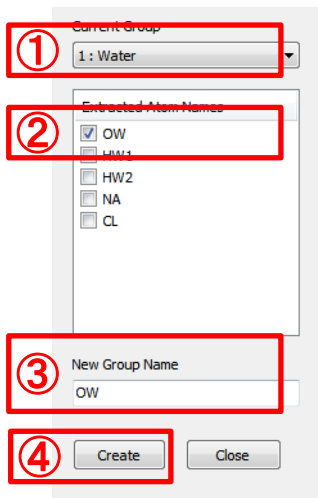
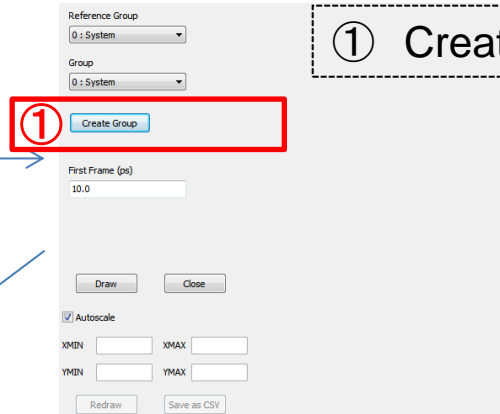
## ⑥ 動径分布関数を計算する

水のO(酸素)を新グループとして登録する

MD→Gromacs→ 動径分布関数 を選択する。



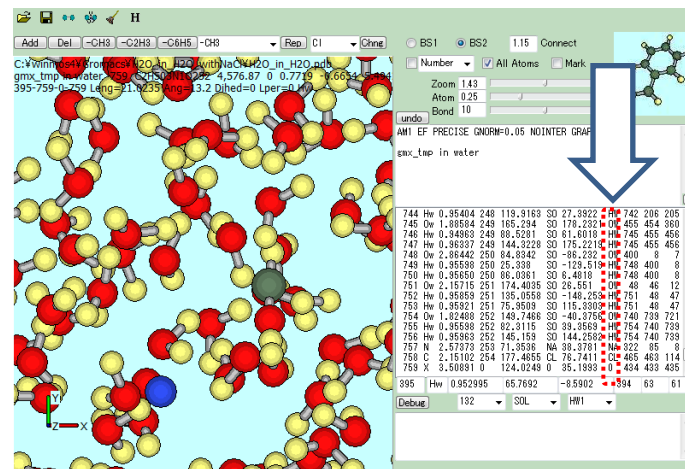
① Create Groupをクリックする。



- 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

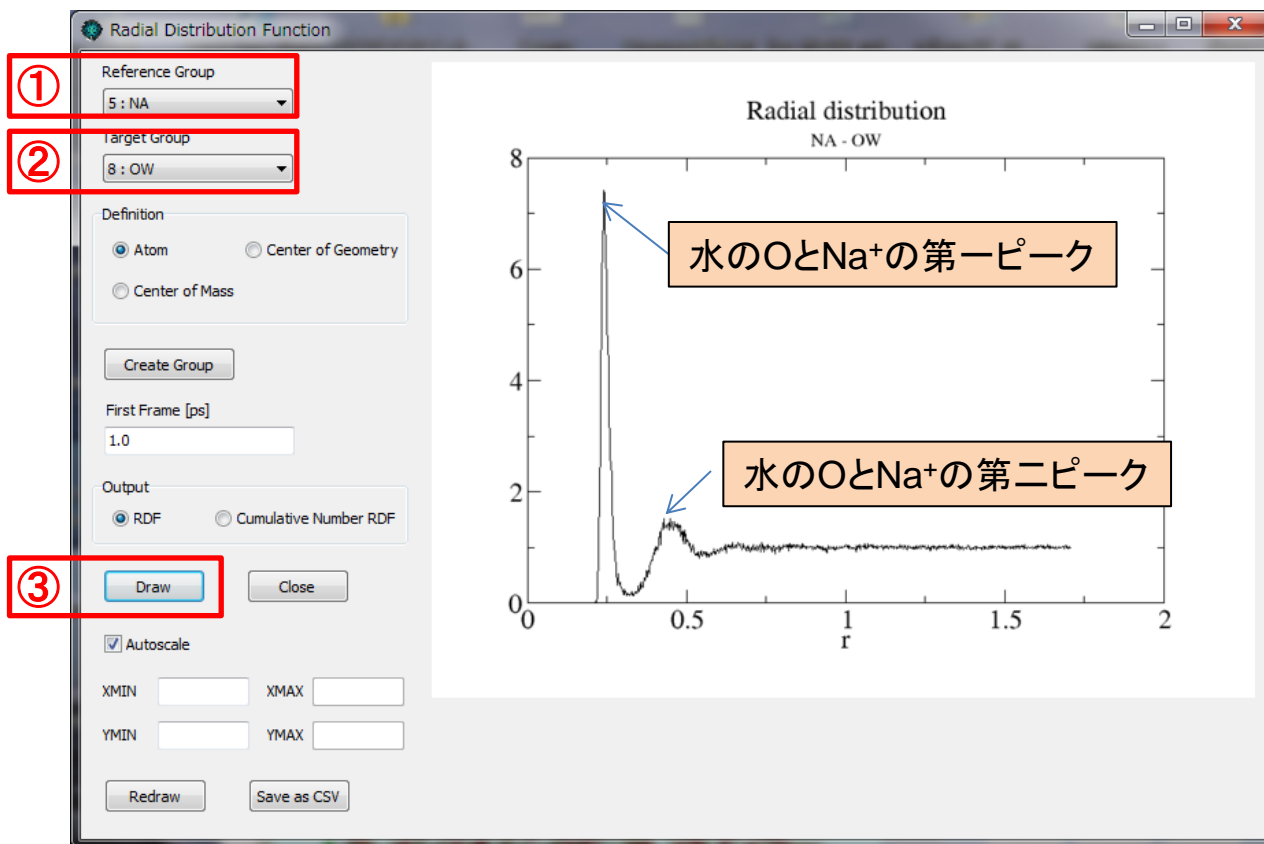
トラジェクトリー確認  
(前スライドページ)の際、  
画面左の座標欄に  
表示されている原子名を  
参考にする。



## ⑥ 動径分布関数を計算する

水のO(酸素)とNa<sup>+</sup>の動径分布関数を表示させる

- ① Reference Groupに[NA ]を選択する。
- ② Target Groupに[OW ]を選択する。
- ③ [Draw]をクリックする。

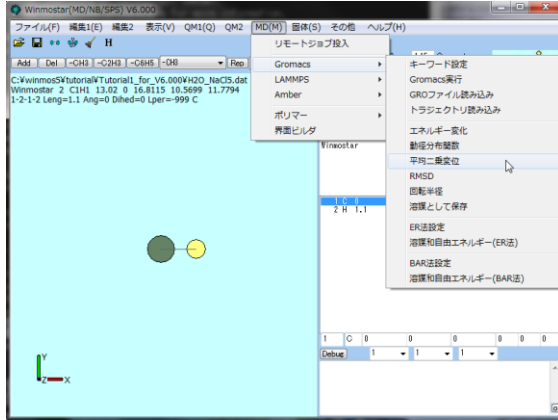




# III. 水中に複数のNa<sup>+</sup>とCl<sup>-</sup>を含む系

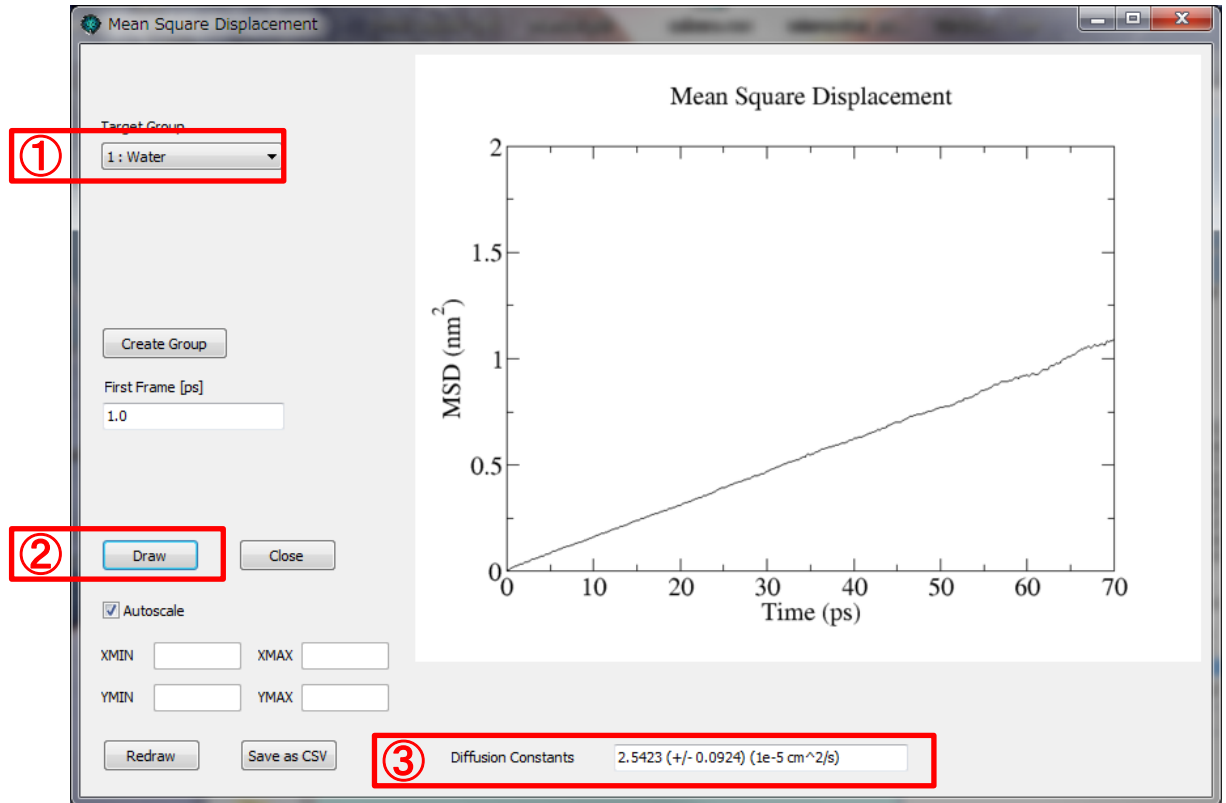
## ⑦ 自己拡散定数を求める

MD→Gromacs→ 平均二乗変位を選択する。



- ① [Water]を選択する。
- ② Drawをクリックする
- ③ 平均二乗変位グラフが表示され、自己拡散係数が表示される。  
※実験値 :  $2.3 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$

Target Groupで[NA]や[CL]を選択し、グラフや自己拡散定数を比較してみる。





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...](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!