

Winmostar チュートリアル

Gromacs

基礎編

V7.016

株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2017/3/27

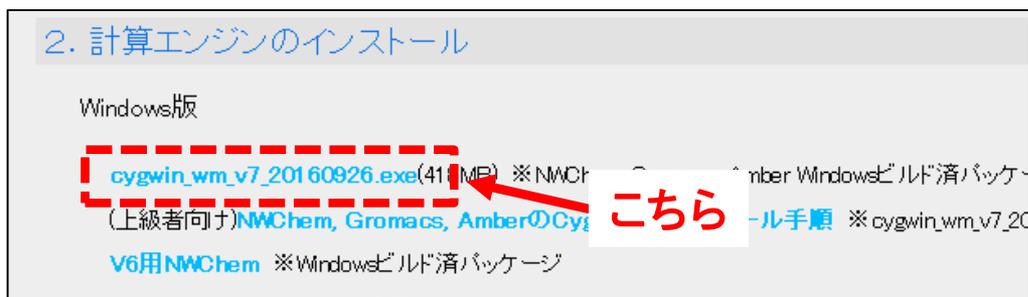
Contents

- I. 分子の作成
- II. シミュレーションセルの作成
- III. シミュレーションの実行
- IV. 結果の解析
 - ① アニメーションの表示
 - ② 各種統計量の表示
 - ③ 自己拡散係数の表示

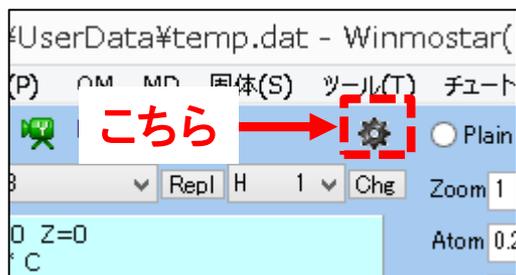
動作環境設定

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/manual_jp.htmlの「2. 計算エンジンのインストール」から、Cygwinの自己解凍書庫(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。



注意点

- 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本例と異なる場合があります。
- “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も計算結果に大きく影響します。

1. 分子の作成

ここでは例題としてエタノール水溶液系の計算を行う。水分子は予めGromacsに登録されているものを用いるため、ここではエタノール分子のみ作成する。

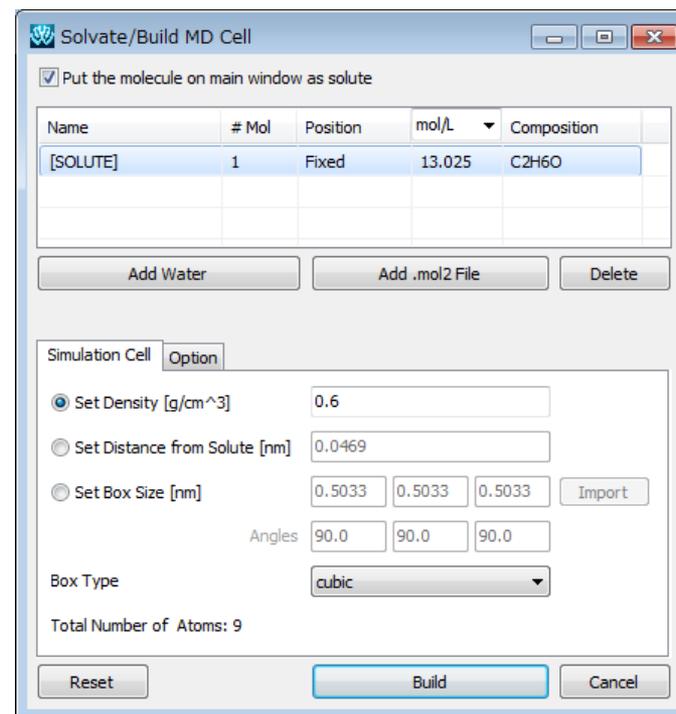
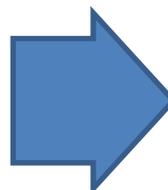
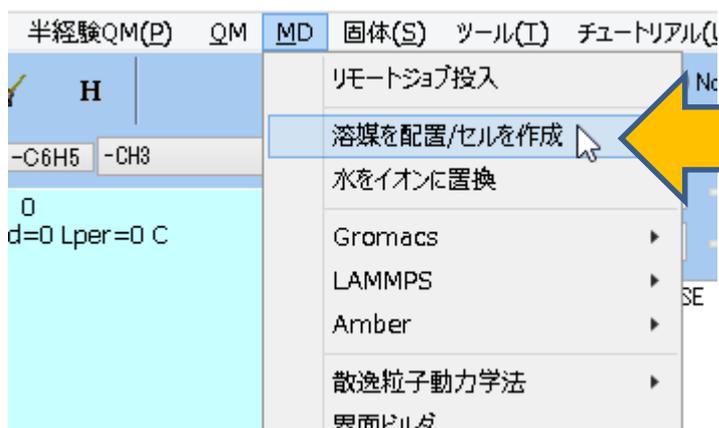
部品が[-CH3]の状態ですべて[Repl]を2回押し、部品を[-OH]に変更した後[Repl]を1回押す。

The figure illustrates the construction of an ethanol molecule in three stages within the X-Ability software interface:

- Stage 1:** A single carbon atom (black) and three hydrogen atoms (yellow) are added to form a methyl group (-CH₃). The software interface shows the 'Add' button and the 'Repl' button.
- Stage 2:** A second carbon atom and five hydrogen atoms are added to form an ethyl group (-C₂H₅). The software interface shows the 'Add' button and the 'Repl' button.
- Stage 3:** An oxygen atom (red) and a hydrogen atom (yellow) are added to form a hydroxyl group (-OH), completing the ethanol molecule (-C₂H₅OH). The software interface shows the 'Add' button and the 'Repl' button.

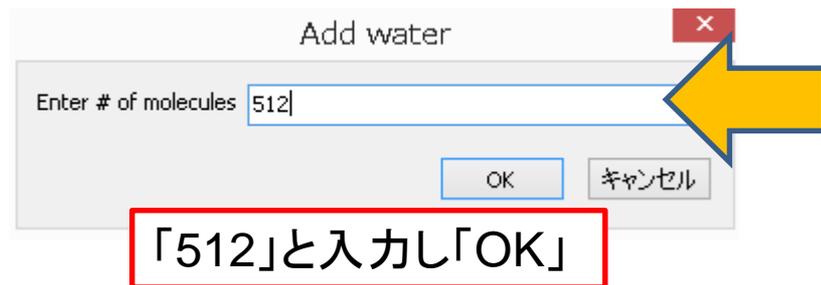
II. シミュレーションセルの作成

「MD>溶媒を配置/セルを作成」を選択する。



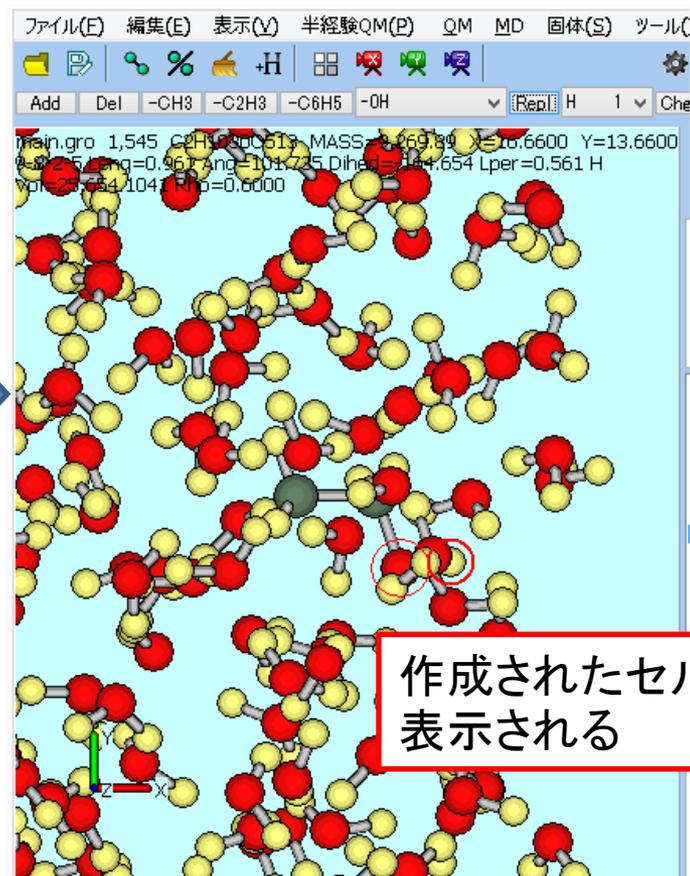
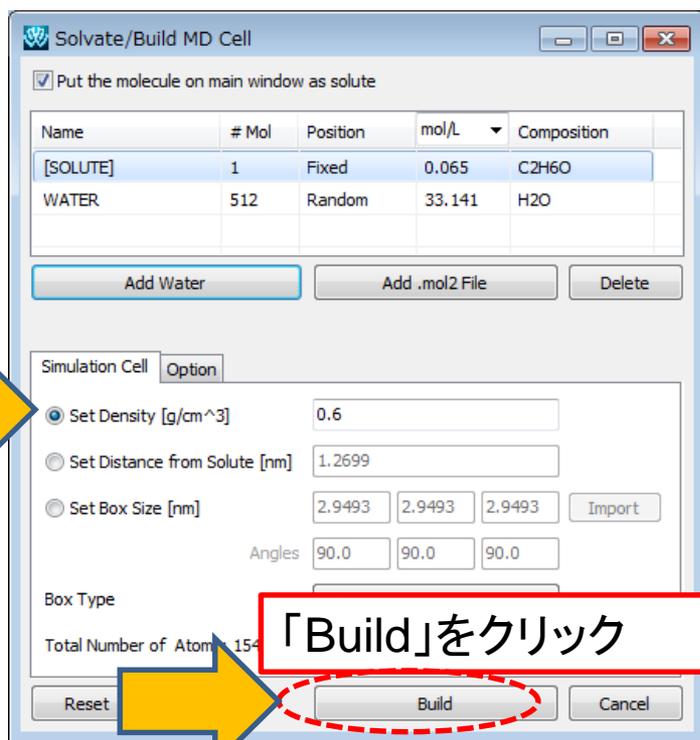
II. シミュレーションセルの作成

「Add Water」をクリックし、次に配置する分子数を聞かれるので512と入力して「OK」を押す。



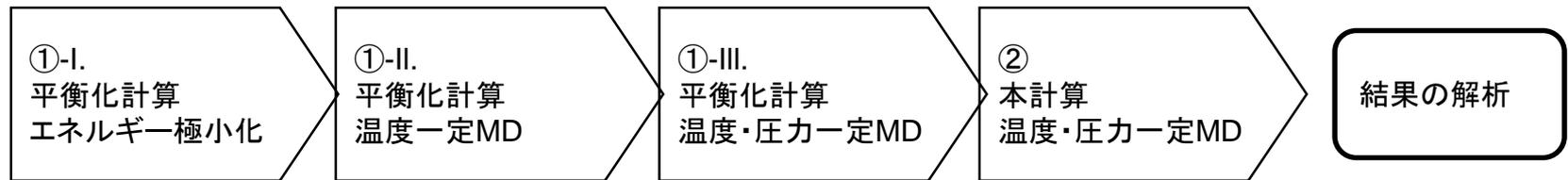
II. シミュレーションセルの作成

シミュレーションセルの密度あるいはセルサイズを設定する。デフォルトでは0.6 g/ccが設定されている。「Build」をクリックすると、シミュレーションセルが作成される。



III. シミュレーションの実行

ここでは、以下の典型的なMD計算の手順に従いシミュレーションを実行する。

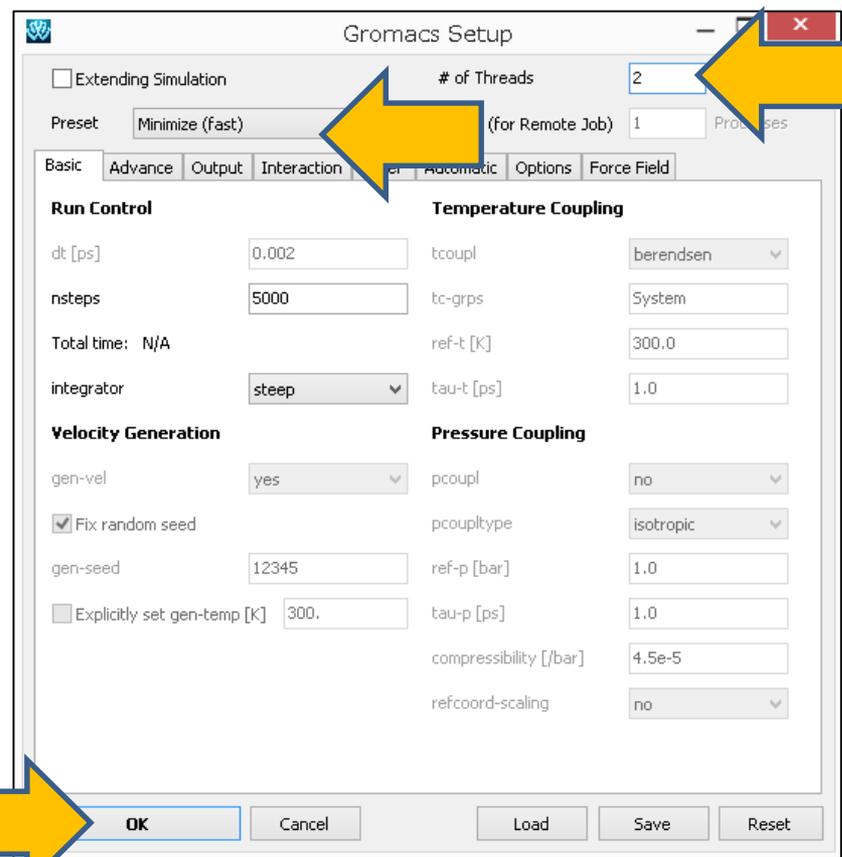
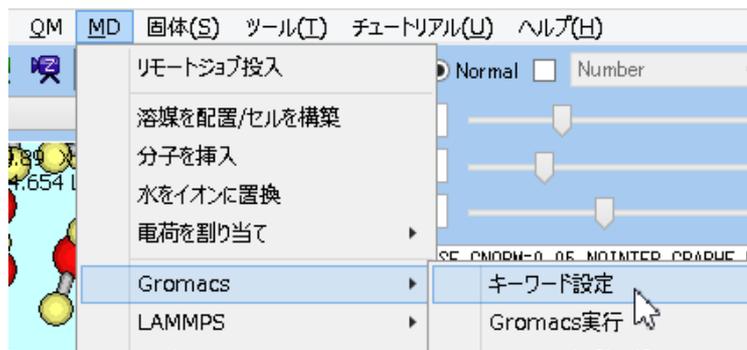


- ① 平衡化計算
 - I. エネルギー極小化計算
 - II. 温度一定 (NVT 一定) MD計算
 - III. 温度圧力一定 (NPT 一定) MD計算
- ② 本計算
温度圧力一定 (NPT 一定) MD計算

III. シミュレーションの実行

① 平衡化計算 1. エネルギー極小化計算

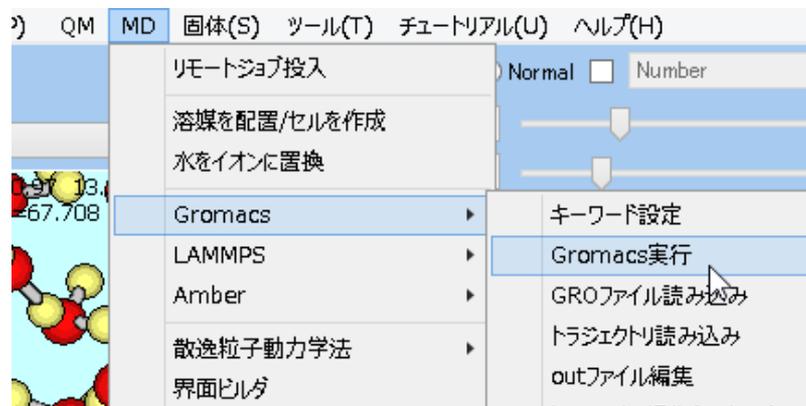
「MD>Gromacs>キーワード設定」を選択する。「Preset」に「Minimize (Fast)」を選んで「# of Threads」に並列数を入力する。最後に「OK」を押す。



III. シミュレーションの実行

① 平衡化計算 1. エネルギー極小化計算

「MD>Gromacs>Gromacs実行」を選択する。座標ファイル(拡張子: gro)とトポロジーファイル(拡張子: top)の保存場所を聞かれるので、ファイル名を入力して保存する。その後、前処理のためにCygwinが数回立ち上がったのち、Winmostar Job Managerが立ち上がり、Cygwin上でGromacsが実行される。



```

Winmostar/JM 20160909_161601 C:\Users\sakamaki\Desktop\work%...
Step= 130, Dmax= 8.9e-03 nm, Epot= -2.38953e+04 Fmax= 3.46873e+03, atom= 2
Step= 131, Dmax= 1.1e-02 nm, Epot= -2.39007e+04 Fmax= 4.15431e+03, atom= 2
Step= 132, Dmax= 1.3e-02 nm, Epot= -2.39035e+04 Fmax= 5.06342e+03, atom= 2
Step= 133, Dmax= 1.5e-02 nm, Epot= -2.39040e+04 Fmax= 5.87751e+03, atom= 2
Step= 135, Dmax= 9.2e-03 nm, Epot= -2.39461e+04 Fmax= 6.80578e+02, atom= 2
Step= 136, Dmax= 1.1e-02 nm, Epot= -2.39480e+04 Fmax= 7.18043e+03, atom= 2
Step= 137, Dmax= 1.3e-02 nm, Epot= -2.40044e+04 Fmax= 2.40536e+03, atom= 2
Step= 139, Dmax= 8.0e-03 nm, Epot= -2.40103e+04 Fmax= 3.28001e+03, atom= 2
Step= 140, Dmax= 9.6e-03 nm, Epot= -2.40179e+04 Fmax= 3.63039e+03, atom= 2
Step= 141, Dmax= 1.1e-02 nm, Epot= -2.40200e+04 Fmax= 4.58777e+03, atom= 2
Step= 142, Dmax= 1.4e-02 nm, Epot= -2.40224e+04 Fmax= 5.35575e+03, atom= 2
Step= 144, Dmax= 8.3e-03 nm, Epot= -2.40569e+04 Fmax= 5.75942e+02, atom= 2
Step= 145, Dmax= 9.9e-03 nm, Epot= -2.40689e+04 Fmax= 6.59339e+03, atom= 2
Step= 146, Dmax= 1.2e-02 nm, Epot= -2.41153e+04 Fmax= 1.96634e+03, atom= 2
Step= 148, Dmax= 7.1e-03 nm, Epot= -2.41202e+04 Fmax= 3.23036e+03, atom= 2
Step= 149, Dmax= 8.6e-03 nm, Epot= -2.41303e+04 Fmax= 2.91164e+03, atom= 2
Step= 151, Dmax= 5.1e-03 nm, Epot= -2.41441e+04 Fmax= 7.94787e+02, atom= 2
Step= 152, Dmax= 6.2e-03 nm, Epot= -2.41553e+04 Fmax= 3.58335e+03, atom= 2
Step= 153, Dmax= 7.4e-03 nm, Epot= -2.41719e+04 Fmax= 1.76375e+03, atom= 2
Step= 155, Dmax= 4.4e-03 nm, Epot= -2.41806e+04 Fmax= 1.42301e+03, atom= 2
Step= 156, Dmax= 5.3e-03 nm, Epot= -2.41880e+04 Fmax= 2.44535e+03, atom= 2
Step= 157, Dmax= 6.4e-03 nm, Epot= -2.41971e+04 Fmax= 2.14480e+03, atom= 2
Step= 158, Dmax= 7.7e-03 nm, Epot= -2.42006e+04 Fmax= 3.41770e+03, atom= 2
Step= 159, Dmax= 9.2e-03 nm, Epot= -2.42099e+04 Fmax= 3.18951e+03, atom= 2
Step= 161, Dmax= 5.5e-03 nm, Epot= -2.42250e+04 Fmax= 7.92476e+02, atom= 2
  
```

III. シミュレーションの実行

① 平衡化計算 1. エネルギー極小化計算

計算終了後、「MD>Gromacs>エネルギー変化」を選択する。デフォルトのエネルギーファイルをそのまま開く。「Energy terms」から「Potential」を選択し「Draw」をクリックすると、ポテンシャルエネルギーのグラフが得られる。確認後ウィンドウを閉じる。

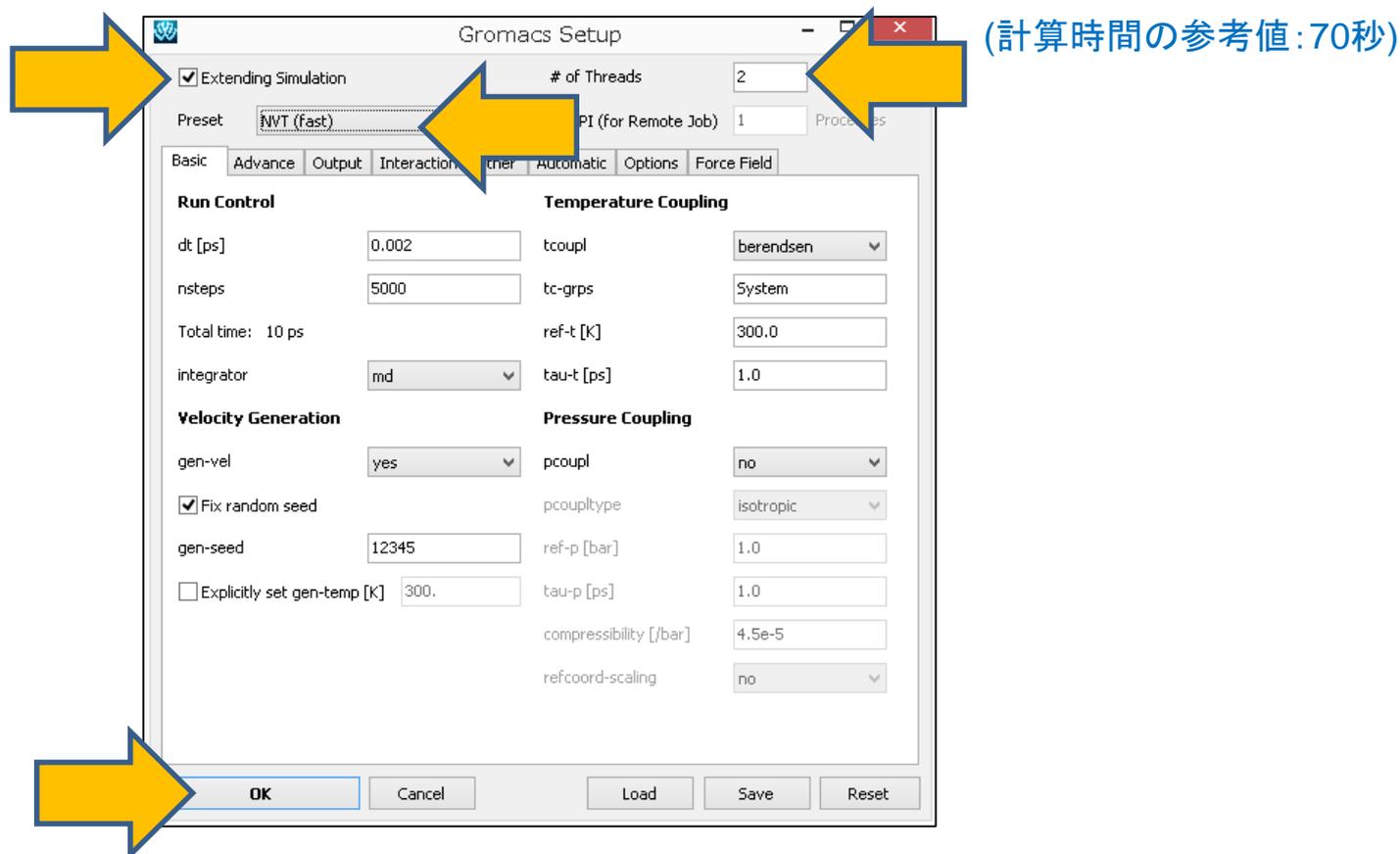
The image shows a sequence of steps in the X-Ability software interface:

- The main menu is open, showing 'MD(M) 固体(S) その他 ヘルプ(H)'. The 'Gromacs' option is selected, leading to a sub-menu where 'エネルギー変化' (Energy Change) is highlighted.
- A dialog box titled 'Energy terms' is shown. The 'Potential' checkbox is checked, and the 'Draw' button is highlighted with a yellow arrow.
- The resulting 'Energy Plot' window is displayed, titled 'Gromacs Energies'. The y-axis is labeled '(kJ/mol)' and ranges from 0 to -30000. The x-axis is labeled 'Time (ps)' and ranges from 0 to 2000. A single data series labeled 'Potential' is plotted, showing a sharp initial drop from 0 to about -25000 kJ/mol within the first 500 ps, followed by a gradual decrease to approximately -26000 kJ/mol by 2000 ps.

III. シミュレーションの実行

① 平衡化計算 II. 温度一定MD計算

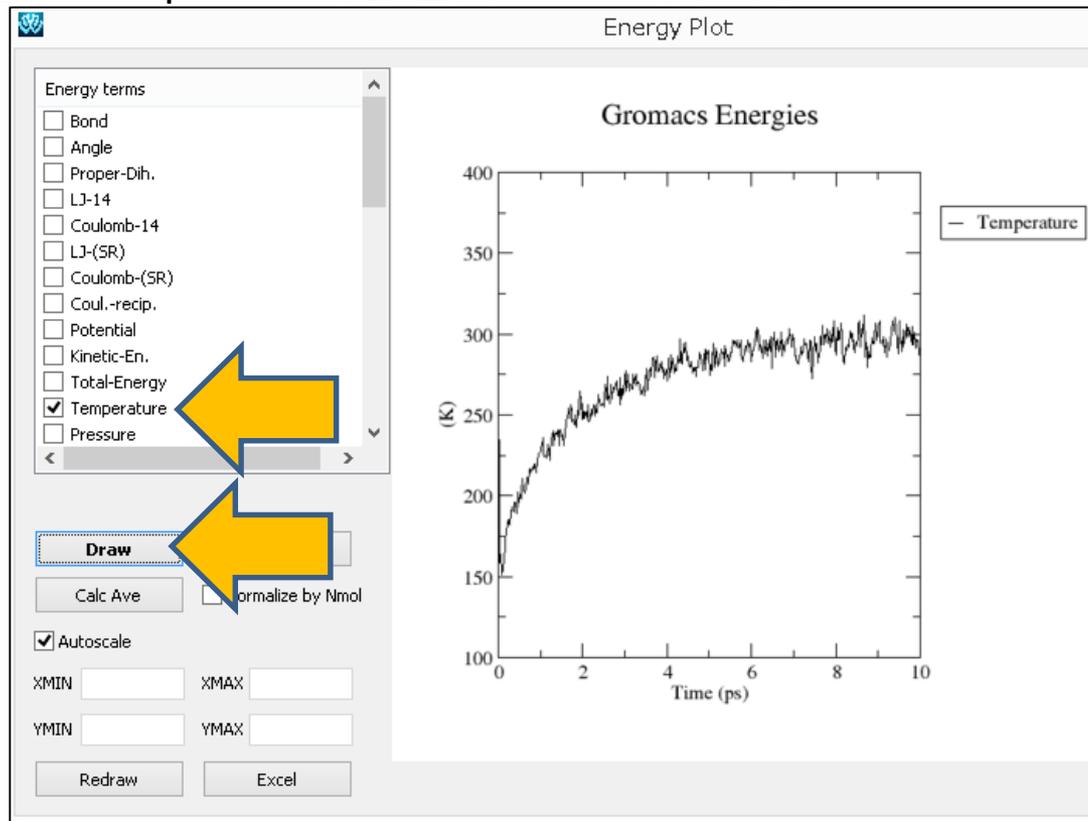
「MD>Gromacs>キーワード設定」を選択し、「Extending simulation」にチェックをいれ
「Preset」に「NVT (fast)」を選び「OK」する。「MD>Gromacs>Gromacs実行」を選択する。



III. シミュレーションの実行

①平衡化計算 II.温度一定MD計算

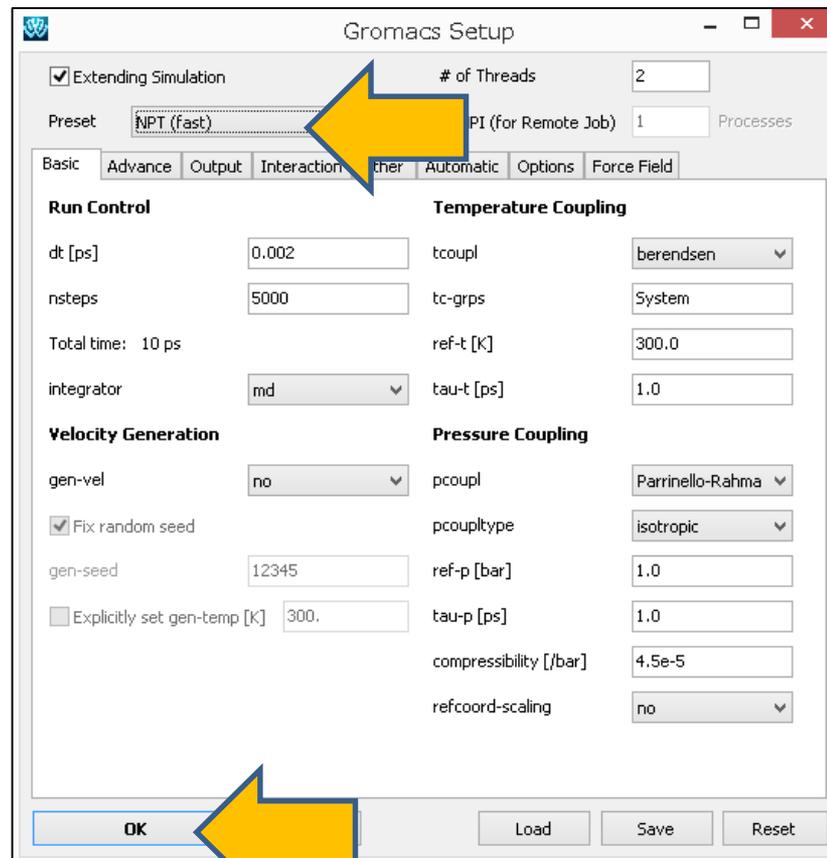
ここでは、温度一定計算により与えられた原子の速度が適切にコントロールされ、目標温度に収束していることを確認する。「MD>Gromacs>エネルギー変化」から、「Energy terms」で「Temperature」を選択し「Draw」する。



III. シミュレーションの実行

① 平衡化計算 III. 温度圧力一定MD計算

「MD>Gromacs>キーワード設定」を選択し、「Preset」に「NPT (fast)」を選び「OK」する。
「MD>Gromacs>Gromacs実行」を選択する。その後、必要に応じてエネルギー変化を確認する。



(計算時間の参考値: 82秒)

III. シミュレーションの実行

②本計算 温度圧力一定MD計算

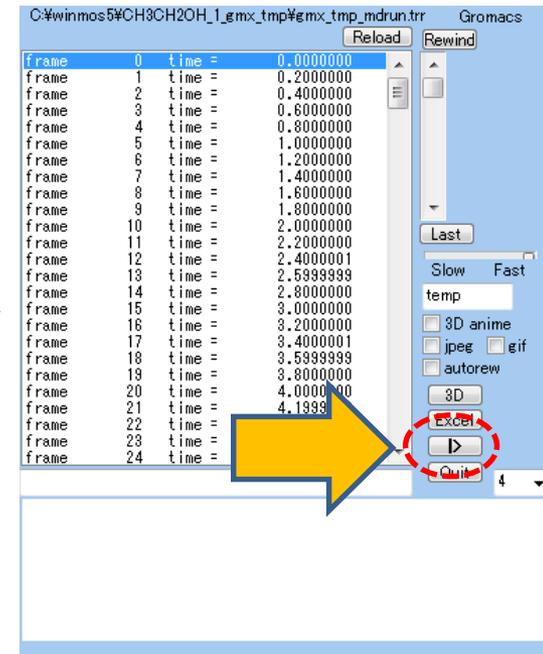
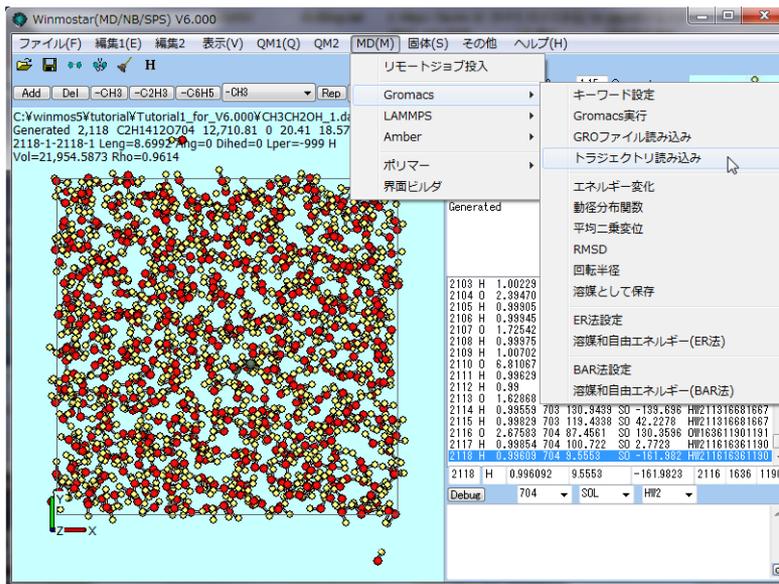
「MD>Gromacs>キーワード設定」を選択し、「nsteps」に「25000」を入力し「OK」する。
「MD>Gromacs>Gromacs実行」を選択する。

(計算時間の参考値:141秒)

IV. 結果の解析

①アニメーションの表示

- 「MD>Gromacs>トラジェクトリ読み込み」を選択する。対象となる座標ファイル（拡張子: gro）とトラジェクトリファイル（拡張子: trr）をそれぞれ聞かれるので、デフォルトで表示されたファイルをそのまま開く。
- アニメーション操作ウィンドウ（右図）が開く。再生ボタンを押すとアニメーションが表示される。



IV. 結果の解析

①アニメーションの表示

次に、Winmostar 3Dを用いたアニメーションの表示方法を示す。

- ① 先ほどのアニメーション表示ウィンドウにて「3D」ボタンをクリックする。
- ② 起動したWinmostar 3Dの「View > Preferences」を選択する。
- ③ Preferences ウィンドウで「Mol. Weight」を選択する。

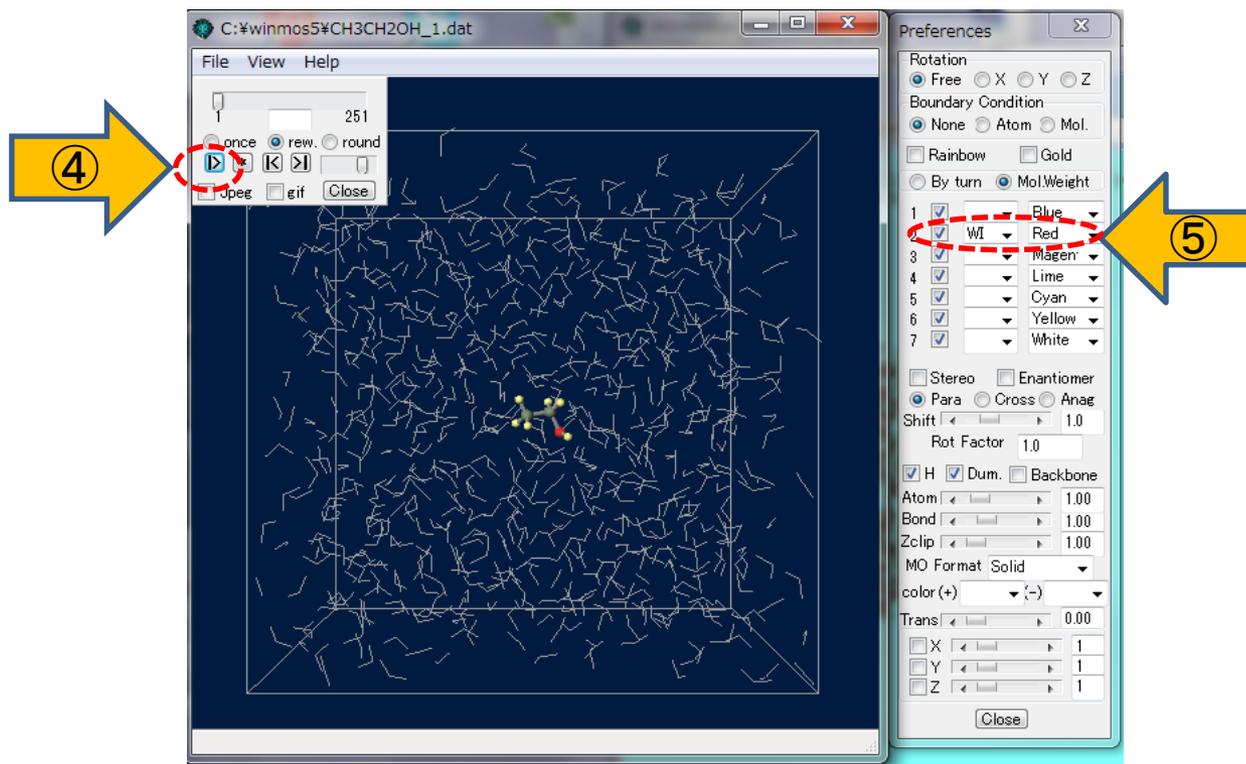
The figure consists of three sequential screenshots from the Winmostar 3D software interface, connected by blue arrows indicating the flow of the process.

- Step 1:** The 'Animation' window is shown. A yellow arrow labeled '①' points to the '3D' button in the bottom right corner of the window.
- Step 2:** The 'View' menu is open, and a yellow arrow labeled '②' points to the 'Preferences' option.
- Step 3:** The 'Preferences' dialog box is open. A yellow arrow labeled '③' points to the 'Mol. Weight' radio button in the 'Rainbow' section, which is circled in red.

IV. 結果の解析

①アニメーションの表示

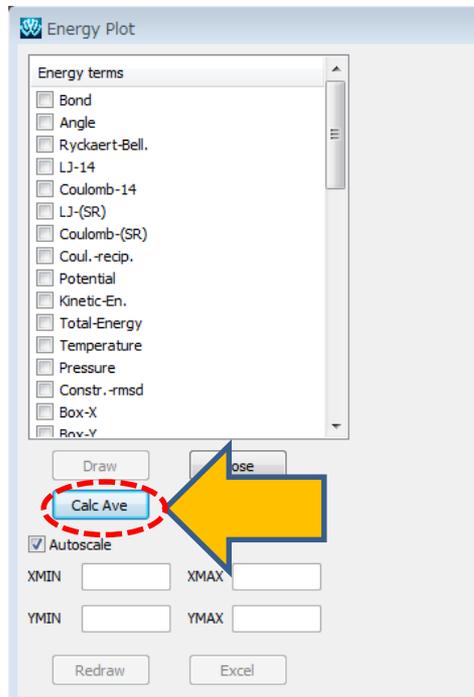
- ④ 「Preferences」パネルの2番目のプルダウンにて「WI」(ワイヤー表示)を選択する。
(系内の分子が分子量順にソートされている)
- ⑤ Winmostar 3Dウインドウ左上の再生ボタンを押すと、アニメーションが表示される。



IV. 結果の解析

②各種統計量の表示

- 「MD>Gromacs>エネルギー変化」ウィンドウにおいて、「Calc Ave」を押す。座標ファイルの場所を聞かれるので、デフォルトで選ばれるファイルを開く。
- テキストエディタが立ち上がり、密度・エンタルピー・比熱・等温圧縮率などの統計量が表示される。



energy_ave.log.dos - メモ帳

ファイル(E) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

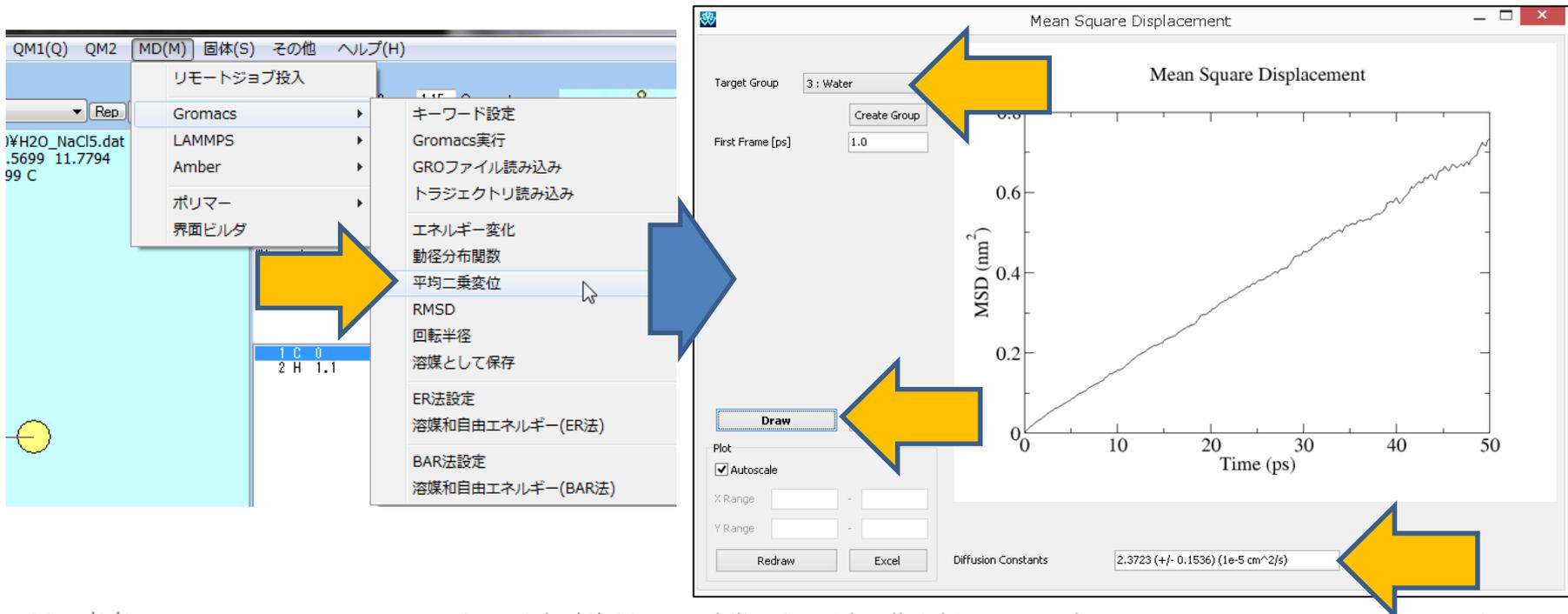
Statistics over 25001 steps [10.0000 through 60.0000 ps], 45 data sets
All statistics are over 2501 points

Energy	Average	Err.Est.	RMSD	Tot-Drift	
Bond	0.00551545	0.0006	0.00536622	0.000221711	(kJ/mol)
Angle	0.0272785	0.0023	0.0105787	-0.00014163	(kJ/mol)
Proper Dih.	0.0127279	0.00026	0.00416163	0.00053524	(kJ/mol)
LJ-14	0.0022082	4e-05	0.00185213	-3.03403e-05	(kJ/mol)
Coulomb-14	-0.0755454	0.00096	0.00478958	-0.000339902	(kJ/mol)
LJ (SR)	9.08763	0.01	0.31616	-0.0579286	(kJ/mol)
Coulomb (SR)	-55.5543	0.026	0.3987	0.0610958	(kJ/mol)
Coul. recip.	0.239198	0.00076	0.019252	-0.00155659	(kJ/mol)
Potential	-46.2553	0.024	0.184407	0.00185575	(kJ/mol)
Kinetic En.	7.52638	0.0089	0.161975	-0.0349106	(kJ/mol)
Total Energy	-38.7289	0.029	0.0937769	-0.033055	(kJ/mol)
Temperature	300.565	0.35	6.46844	-1.39415	(K)
Pressure	0.858068	2.8	589.921	-5.75558	(bar)
Constr. rmsd	2.41314e-06	2.3e-07	1.60645e-06	-6.07153e-08	()
Box-X	2.49602	0.0014	0.00820445	-0.0085848	(nm)
Box-Y	2.49602	0.0014	0.00820445	-0.0085848	(nm)
Box-Z	2.49602	0.0014	0.00820445	-0.0085848	(nm)
Volume	15.5509	0.027	0.153305	-0.160645	(nm ³)
Density	989.948	1.7	9.76797	10.1904	(kg/m ³)
pV	0.936499	0.0016	0.00923226	-0.00967426	(kJ/mol)
Enthalpy	-19867	15	48.1116	-16.9669	(kJ/mol)
Vir-XX	1283.74	11	392.512	46.7655	(kJ/mol)

IV. 結果の解析

③自己拡散係数の表示

- 「MD>Gromacs>平均二乗変位」を選び、デフォルトで選ばれるトラジェクトリファイル(拡張子: trr)、インプットファイル(拡張子: tpr)、インデックスファイル(拡張子: ndx)をそのまま開く。
- 「Target Group」に「Water」を選び「Draw」を押す。ウインドウ下部に平均二乗変位から求まる自己拡散係数が表示される。



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...

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!