

#### Winmostar™ チュートリアル Gromacs 基礎編 <sub>V9.0.0</sub>

株式会社クロスアビリティ 2019月01月22日



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、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。

 <u>https://winmostar.com/jp/download\_jp.html</u>のインストール方法のビルド済みの cygwin\_wmをインストールする場合をクリックし、そこに書かれた手順に従いセッ トアップを行います。

Winmostar(TM) V8用 Gromacs, Amber のイ

#### 1. 簡易インストール方法(Windows)



<mark>『 予記サ*ラリ*赤 与客<del>だッサ <sup>---</sup> ジボ コンプ</del>イル済のCygwinのインストーラをダウンロードし、実行します。</mark>

cygwin\_wm\_v8\_20180727.exe(087MB)

<mark>- こねによぬ、GROMACS、Amber(ea</mark>nder)の実行に必要な環境(Cygwin,Acpypeなど)が全て整います。



分子を作成 Ι.

- 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. Repl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 - 2 Marked Atom: X= 1.1 Y= 0 Z= 0 Length= 4.1707 Angle= 10.069 Dihedral= 0 Lper= 0





I. 分子を作成

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





分子を作成

- 1. 水素を削除した炭素を左クリックする。
- 2. 編集操作で適用される元素を選択プルダウンメニューからO 8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 | 電荷を割り当て | Acpypeを使用をクリックする。
- 2. Assign charges by acpypeウインドウでExecuteボタンを押す。
- 3. 情報ダイアログが2回出現したらいずれもはいボタンを押す。







#### Ⅱ. 電荷を割り当て

- 分子表示エリア下部にCharges Avail: Userと表示され、割り当てられた電荷が 表示されることを確認する。
- 2. ラベル/電荷プルダウンメニューで(ラベル/電荷を隠す)を選択し、電荷を非表示にする。





#### 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。

ባ ረጉ ረጉ ሥ	297 Y	
Ð		
0.0	5 NOINTER G	R

Solvate/Build Ce	211	
Name	# Mol	Positio
Add Displayed Molect	ule	d .mol2 Fil
	20	

Add molecules				×
Enter # of molecules	100	Ι		
			ОК	Cancel



#### 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インドウが数秒間出現し、処理に成功するとTHF分子が0.6 g/cm<sup>3</sup>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。

Solvate/Build Ce				-		×
Name	# Mol	Position	mol/L ~	Com	position	
[DISPLAYED]	100	Random	8.321	C4H8	30	
Add Displayed Molecu	ule Add	.mol2 File	Add Wati	er	Dele	ete
Simulation Cell Opti	on					
• Set Density [g/cm	n^3]	0.6				
O Set Distance from	n Solute [nm]					
O Set Lattice Const	ants [nm]	2.7124	2.7124 2.3	7124	Impo	rt
	Angles [deg]	90.0	90.0 90	.0		
Box Type		cubic		~		
Total Number of Ato	oms: 1300					
Reset			Build	Ν	Can	ıcel
				6		



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. ウインドウ左下の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。
- 4. Basicタブのconstraintsをall-bondsに変更する。

$\mathcal{D}^{-1}$	〒#建額QIVI( <u>P</u> )	<u>U</u> IVI	<u>IM</u> D	녣
1	MOPAC		~	
م	CNDO/S GAMESS		]	-0
3000	NWChem Gromacs			
5.19	LAMMPS Quantum ESP	RESSO	1	

טי	<b>国</b> 14[	১
~	¥,	R
3	-C6H5	

Extending Simulation				# of Thre	ads		1			
Preset Minimize (fast) $\checkmark$				MPI (for Remote Job) 1 Processe				ses		
asic	Advance	Output	Interaction	n Other	Automatic	Options	Force	e Field		
Run Co	ntrol				Tempera	iture Cou	pling			
it [ps]			0.002		tcoupl			berendsei	n	$\sim$
nsteps			5000		tc-grps			System		
Fotal tim	ne: N/A				ref-t [K]			300.0		
integrator v		tau-t [ps]		1.0						
/elocit	y Genera	ation			Pressure	Coupling	3			
gen-vel			yes	$\sim$	pcoupl			no		$\sim$
🗸 Fix ra	andom see	ed			pcoupltype	е		isotropic		$\sim$
jen-see	:d		12345		ref-p [bar]			1.0		
Expli	icitly set g	en-temp	[K] 300.		tau-p [ps]			1.0		
					compressil	oility [/bar]	]	4.5e-5		
					Constrai	nts				
					constraint	s		all-bonds		Ň



Ⅳ. 平衡化(エネルギー極小化)

- 1. Force Fieldタブを開き、Generate parameters | Charge | Use user-defined chargesをクリックする。
- 2. ウインドウ右下の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。

🥨 Gromacs Setup — 🗆 🗙	
Extending Simulation     # of Threads     1       Preset     Minimize (fast)      Image: MPI (for Remote Job)     1	OK Cancel Run
Basic Advance Output Interaction Other Automatic Options Force Field	
Generate parameters	← → 、 ↑ ● « winmos9 > UserData > 、 、 ♂ ⑦     UserDataの検索     ク
Force field     (General)     GAFF     Exception       (Protein/ion)     AMBER03        (Water)     SPC/E	ファイル名(N):       thf_liquid I          ファイルの種類(D):       Gromacs Coordinate File(*.gro)          > フォルダーの参照(B)       保存(S)       キャンセル
Charge Assign charges Method: AM1-BCC ~	新規ジョブを開始する前にトポロジファイルを保存してください (2 of 2)
Use user-defined charges     Add [position_restraints] for protein	ファイル名(N): thf_liquid ファイルの種類(T): Gromacs Topology File(*.top)
	✓ フォルダーの参照(B) 保存(S) キャンセル



Ⅳ. 平衡化(エネルギー極小化)

- 1. ターミナルウインドウが消えた後、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。
- 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。





Ⅳ. 平衡化(エネルギー極小化)

1. エネルギー変化ボタンを押す。

ノールロリ

Οī

- 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。





- 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をチェック
  - Preset/*t*NVT (fast)
  - Basicタブのconstraintsはall-bonds
- 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)。

🥺 Gromacs Setup		情報 ×
Preset NVT (fast)	# of Threads	() 継続ジョブを開始しますか?
Basic Advance Output Interaction Other	Automatic Optic	はい(Y) キャンセル
Constraints		
constraints all-bonds	$\sim$	



- 1. 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。





- 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ウインドウが開く。Animationウインドウが背面に隠れた場合はウインドウメニュー | Animationを選択する。





- Animationウインドウ右中断の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。

Manimation —		Generated by trjconv N= 1,300 C400H800O100 M= 7,210.69 Marked Order: 1300 - 1 - 1300 - 1
<u>F</u> ile <u>C</u> ontrol <u>T</u> ools		Marked Atom: X= 17.9167 Y= 11.0225 Z= 1.574
ata¥thf_liquid_gmx_tmp¥gmx_tmp_mdrun.trr	Gromacs	Length= 19.4927 Angle= 0 Dihedral= 0 Lper= 0
Interme       gottoon       gottoon         frame       29       time =       5.8000002         frame       30       time =       6.0000000         frame       31       time =       6.1999998         frame       31       time =       6.8000002         frame       31       time =       6.8000001         frame       32       time =       6.8000002         frame       35       time =       7.1999998         frame       35       time =       7.1999998         frame       36       time =       7.5999999         frame       39       time =       7.8000002         frame       39       time =       7.8000002         frame       39       time =       7.8000000         frame       39       time =       7.8000000         frame       40       time =       8.1000002         frame       41       time =       8.8000002         frame       43       time =       9.1999998         frame       43       time =       9.1999998         frame       43       time =       9.8000002         frame       45       <	Gromacs Reload	Marked Atom: X= 17.9167 Y= 11.0225 Z= 1.574 Length= 19.4927 Angle= 0 Dihedral= 0 Lper= 0
		a= 27.124 b= 27.124 c= 27.124
		aipina= 50.000 beta= 30.000 galilina= 50.000



#### 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/*t*NPT (fast)
  - nstepsは25000
  - constraints(tall-bonds)
- 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。





## 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OKボタンを押す。
- 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。



Enter first frame to read



||| energy\_ave.log.dos - メモ帳 ファイル(F) 編集(E) 君式(O) 表示(V) ヘルプ(H) please use the g\_dos program.

WARNING: Please verify that your simulations are converged and performa block-averaging error analysis (not implemented in g\_energy yet)Volume=  $7.88691e-05 \text{ m}^3/\text{mol}$ Enthalpy= 73.491 kJ/molCoefficient of Thermal Expansion Alpha\_P = 0.000267847 (1/K)Isothermal Compressibility Kappa=  $4.80534e-10 (\text{J/m}^3)$ Adiabatic bulk modulus=  $2.08102e+09 (\text{m}^3/\text{J})$ Heat capacity at constant pressure Cp= 139.826 J/mol KCp-Cv= 3.67653 J/mol K



## IV.本計算+結果解析(動径分布関数)

- 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 1. 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。
- 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 2. ファイルを開く。

ル(① チュートリ		_	$\Box$	Х
	Reference Group	0 : System		~
Dani 🕴 🧔	Target Group	0 : System		$\sim$
マロークユーアンバロ・マレイロー     マレノロー     マレノロー       マロークユーアンバロー     マレノ電荷を隠す)     マロークユーアンバロー       Re     最終構造を読み込み (gro)(G)	First Frame [ps]	Create	Group	6
[Gr]         動径分布関数(S)           平均二乗変位(T)	RDF			



## IV.本計算+結果解析(動径分布関数)

- 開いたCreate Groupウインドウにおいて、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。
- 2. ターミナルウインドウが出現し処理が終了したらCloseボタンを押す。

😻 Cri	eat	_			×
Curre	nt Group	5			
2 : M	IOL01				$\sim$
Extr	acted A	tom Na	mes		^
	2				
	H				
	С				
	21				
	22				
	23				
🗆 H	-11				
🗆 H	H2				
	43				×
<pre></pre>				2	
New (	Group Na	ame			
oxyg	en				
	Create	• •	(	Ilose	
		h			



## 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(自己拡散係数)

- 1. 結果解析ボタンから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。

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

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



#### https://www.facebook.com/X-Ability-CoLtd-168949106498088/

