M winmostar チュートリアル

Gromacs 溶媒和自由エネルギー(BAR法)

V10.0.0

2020年3月2日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.



- 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<u>ユーザマニュアル</u>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。
 - <u>Winmostar基礎講習会</u>: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<u>よくある質問</u>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。

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/installation/</u>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。 <u>ビルド済みのcygwin wmをインストールする場合 (推奨)</u> ← こちら

<u>cygwin wmをビルドする場合</u>(非推奨、上級者向け) <u>Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合</u>(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。

| チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H) | | プログラムパス | | | |
|----------------------------|-----|-----------------------|--------------------------|--|---|
| 🞰 🛱 🕶 💽 (ラベル/電荷を隠す) ∨ | | ··· i¥jmol.bat ··· | GAMESS(1): GAMESS(2): | C:¥Users¥Public¥gamess-64¥games C:¥ff820_windows¥Firefly820.exe | |
| Replace 🔮 🍝 🗊 🚳 😍 🍪 😂 🛱 | | Files¥CCDC¥Mercury 1 | こちら NWChem: | C:¥G16W¥g16.exe C:¥nwchem¥bin¥nwchem.exe | |
| 200 - | i l | Files¥OpenSCAD¥open: | Cygwin: | C:¥cygwin_wm | Ì |



 エタノールの水への溶媒和自由エネルギーをBAR法を用いて計算します。まず、本来の溶液の 状態の計算を流した後、溶質-溶媒間の相互作用を徐々に小さくした計算を流します。反応座標 をλとし、ここでは最初の溶液の計算をλ=1、溶質-溶媒間相互作用がない状態の計算をλ=0と します。



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変化します。
- "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。
- 力場の種類、相互作用の計算条件、λの取り方などが計算結果に影響を与えます。
- 本格的な運用時はリモートジョブ投入機能のご利用をお勧めします。

- I. 溶液 (λ=0)のMD計算
- 1. ファイルメニュー | 新規をクリックする。-CH3ボタンをクリックしてからReplaceボタンを 2回クリックする。



- I. 溶液 (λ=0)のMD計算
- 1. フラグメントを選択メニューで-OHを選択し、Replaceボタンを1回クリックする。 そうするとエタノール分子が完成する。



- 1. MDメニュー | 手動で電荷を割り当て | 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。

| MUD | 04 | MD | 国体の | マドナンバムン | 91_117T | × ± | เมือบ | 9 IN 1 | പപപ്പ | 046 / |
|------------------|------|----|---------|----------|---------|------|--------|----------|-------------------|-------------------|
| ,IVI(<u>P</u>) | | MD | 四(2) | TTA Z(A) | 7-741 | | royou | 9 | 91719 | (\underline{m}) |
| ľ | | | 溶媒を配置 | 置/セルを構築 | (S) | | Ħ | √~ | — | (ラベ) |
| | | | 分子を挿え | ν(N) | | | | | | |
| 6 | -CH3 | ð | 自動で電荷 | 苛を割り当て(の |) | Repl | | <u> </u> | Ø | |
| | | | 手動で電荷 | 苛を割り当て(C | D) 🕨 | A | сруреを | 使用(| (A) N | 5 NO: |
| | _ | | ポリマ−(P) | | • | 7 | ニュアル | 入力(| M) ¹ 3 | |
| .590 r= * | 8 | | 界面ビルダ | (I) | | 1 | | | | |

| | | | | ~ |
|------------------|---------|---------|--------|---|
| < | | | > | |
| Hide Detail | [| Execute | Cancel | |
| Item | Value | | | |
| Total charge [e] | 0 | | | |
| Method | AM1-BCC | | | |



- 1. 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。



- 1.
 御 溶媒を配置/セルを構築をクリックする。
- 2. Add Displayed Moleculeをクリックし、Enter # of moleculesに1と入力しOKをクリッ クする。
- 3. Add Waterをクリックし、Enter # of moleculesに500と入力しOKをクリックする。

| Name # Mol | Position n | nol/L ~ Composition | | |
|----------------------------|------------------------|---------------------|--------------------------|-------|
| Add Displayed Molecule Add | .mol2 File | Add Water | Add water | _ |
| Set Density [g/cm^3] | 0.6 | | Enter # of molecules 500 | |
| Set Lattice Constants [nm] | | | ОК | Cance |
| Angles [deg] | 90.0 90.0 Same as m | 90.0 ain window | | |
| Box Type | cubic | ~ | | |
| Total Number of Atoms: | | | | |
| Reset | | Build Ca | | |

- 1. Set Densityに0.9と入力する。
- 2. Buildをクリックすると右図のような系が作成される。

| 🚾 Solvate/Build Cell | | | | - | | × | |
|--|------------|----------|-------------|-----------|--------|---|--|
| Name | # Mol | Position | mol/L ~ | Compo | sition | | |
| [DISPLAYED] | 1 | Fixed | 0.099 | C2H60 |) | | |
| WATER | 500 | Random | 49.703 | H2O | | | |
| | | | | | | | |
| Add Displayed Molecule Add .mol2 File Add Water Delete | | | | | | | |
| Set Density [g/cm^3] | | | | | | | |
| O Set Distance from Solute [nm] 1.0784 | | | | | | | |
| O Set Lattice Constants [nm] 2.5563 2.5563 2.5563 | | | | | | | |
| Ang | jles [deg] | 90.0 90 | .0 90. | D | | | |
| | | Same as | main window | 1 | | | |
| Box Type | | cubic | | \sim | | | |
| Total Number of Atoms: | 1509 | | | | | | |
| Reset | | | Build | \langle | | | |
| | | | | | | | |



- 1. MD | Gromacs | 力場を割り当てをクリックする。
- 2. 力場を割り当てウインドウでOKをクリックすると、設定した力場が割り当てられる。



| | 🚾 力場を割り当て | | | - | | × |
|----------|------------------|-------------------------|--------------------------------|-------|------|---|
| | 力場を割り当てる方法 | まを選択してください | | | | |
| | ◎自動でパラメータを | 書り当て | | | | |
| | (一般) | GAFF | Exception. | | | |
| | (タンパク質/イオン) | AMBER03 | \sim | | | |
| | (水分子) | SPC/E | \sim | | | |
| | ☑ タンパク質向け | [[position_restraints |]を追加 | | | |
| | □選択原子に向 | l(†(2[position_restrain | ts]を追加 | | Edit | |
| | □選択原子に向 |)け(こ[distance/angle/d | lihedral_restraint | s]を追加 | Edit | |
| | | | | Dump | Now | |
| | | | | | | |
| | | | | | | |
| | ○ トポロジファイルにき | 書かれたパラメータを使 | 用 | | | |
| | | | | | | |
| | | | | | 1 | |
| | | | | | - | |
| | | < Back | ок | | | |
| | | | | | | |
| Winmosta | r | | | | | |
| | | | | | | |
| 正常に力 | 提が設定され | ±1 +- | | | | |
| 正吊阳力 | MD 187. AE C 1 1 | au/c | | | | |
| | | | | | | |
| | | | | | | |
| | | | | | ٦/ | |
| | | | | | | |
| | | | | | | |

Winmostar Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

 \times

- 1. MD | Gromacs | 連続ジョブ設定をクリックする。
- 2. # of Threadsに並列数を指定する。
- 3. Use presetでMinimize (fast)を選び>>> Add >>>を1回クリックする。
- 4. Use presetでNVT (fast)を選び>>> Add >>>を1回クリックする。
- 5. Use presetでNPT (fast)を選び>>> Add >>>を2回クリックする。
- 6. Setをクリックする。
- 7. MD | Gromacs | 連続ジョブ実行をクリックする。
- 8. ファイル名をetohaq.gro, etohaq.topとして保存する。



II. λを変化させたMD計算

- 1. 計算終了後、MD | Gromacs | BAR法実行をクリックする。
- 2. 表示されたウインドウのIntegration Pathタブでは、λの変え方を指定する。 (このチュートリアルではデフォルトのままにしておく)



II. λを変化させたMD計算

- **1. Procedureタブ**では、各λにおける計算の手順を指定する。 デフォルトでは直前の計算の手順が読み込まれる。 このチュートリアルではそのまま使用する。
- 2. Startをクリックし、各λの計算を実行するフォルダを指定すると計算が開始される。
- 3. etohaq_barというフォルダを新規に作成し指定する。

| Reference Runs for lambda=1 (Fur oupling) | | | | | Reset | フォルターの参照 |
|---|-----------------|----------|-------------|-----------|----------|--|
| Directory | Run As | Temp [K] | Press [bar] | Time [ps] | #Species | Select folder for input files of BAR. |
| etohaq_gmx_tmp1 | [Equilibration] | unfixed | unfixed | (MM) | 2 | |
| etohaq_gmx_tmp2 | [Equilibration] | 300.0 K | unfixed | 10 ps | 2 | |
| etohaq_gmx_tmp3 | [Equilibration] | 300.0 K | 1.0 bar | 10 ps | 2 | V UserData |
| etohaq_gmx_tmp | [Product run] | 300.0 K | 1.0 bar | 10 ps | 2 | builder_tmp etohaq_gmx_ |
| | | | | | | etohaq_gmx_ |
| | | | | | | etohaq_gmx_ |
| Target Molecule MOL01 V | | | | Add | Clear | etohaq_gmx_ top_tmp etohaq_bar |
| # of Threads 2 | | | | | | 新しいフォルダーの作成(N) |

Winmostar Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

×

Δ

ャンセル

OK

III.結果の表示

- 全てのλでの計算の終了後、
 MD | Gromacs | BAR法結果読み込みをクリックする。
- 2. 計算を実行した場所を聞かれるので、BAR法実行のところで指定したフォルダ (ここではetohaq_bar)を選択する。溶媒和自由エネルギーが表示される。





• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、基礎編チュートリアルについては<u>Winmostar基礎講習会</u> へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては<u>個別講習会</u>のご依頼をご検討ください。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず<u>よくある質問</u>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