

 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

本書について

- 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[ユーザマニュアル](#)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。
 - [Winmostar基礎講習会](#)：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[よくある質問](#)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。
- <https://winmostar.com/jp/installation/> 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。

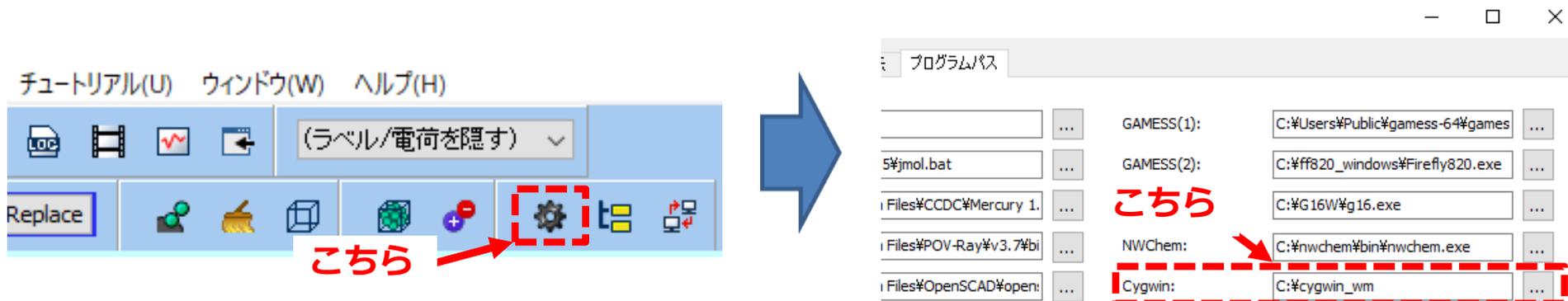
(6) 以下のいずれかのリンク先の手順でWinmostar用のCygwin環境 (cygwin_wmと呼びます) を構築します。

[ビルド済みのcygwin_wmをインストールする場合 \(推奨\)](#) ← **こちら**

[cygwin_wmをビルドする場合 \(非推奨、上級者向け\)](#)

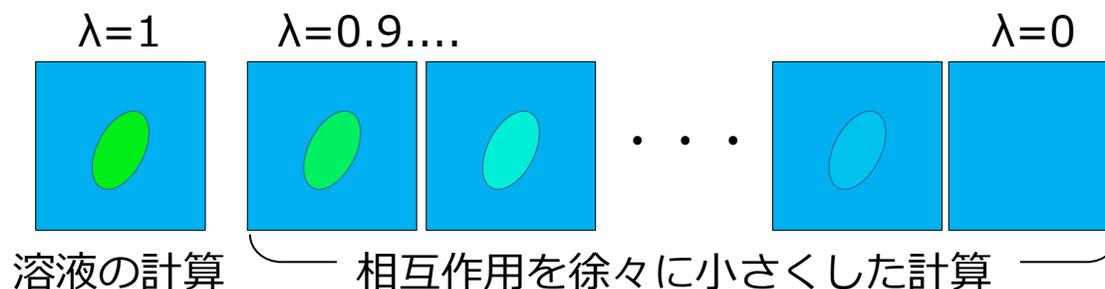
[Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合 \(ベータ版\)](#)

- 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。



概要

- 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 $\lambda=1$ 、溶質-溶媒間相互作用がない状態の計算を $\lambda=0$ とします。

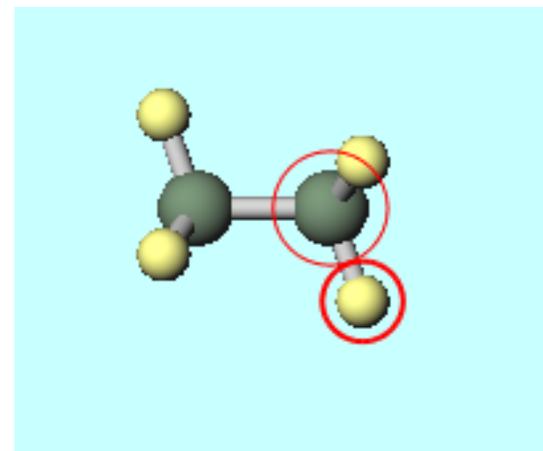
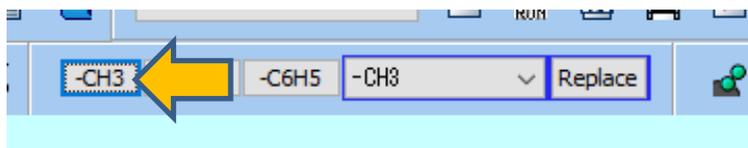
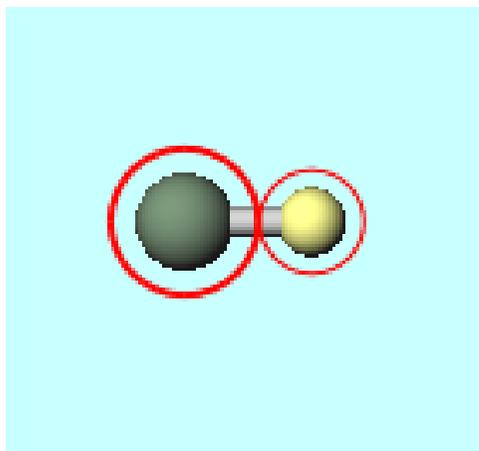


注意点：

- 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。

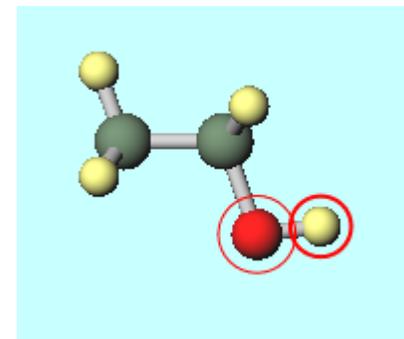
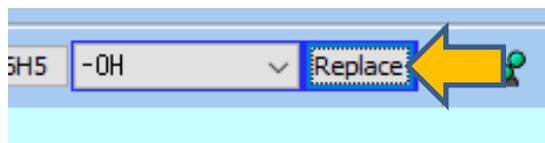
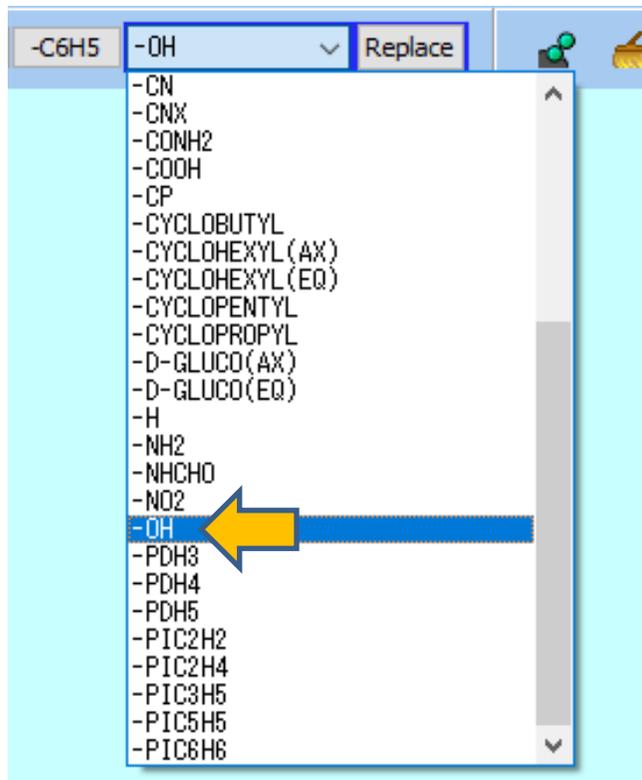
I. 溶液 ($\lambda=0$) のMD計算

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。



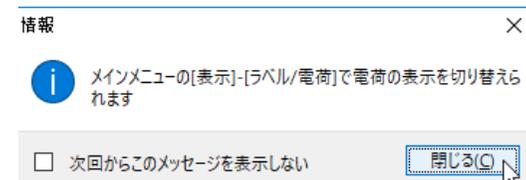
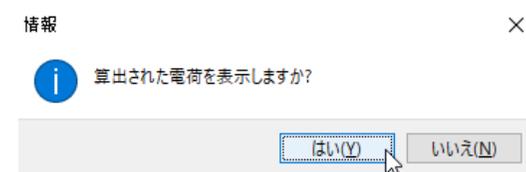
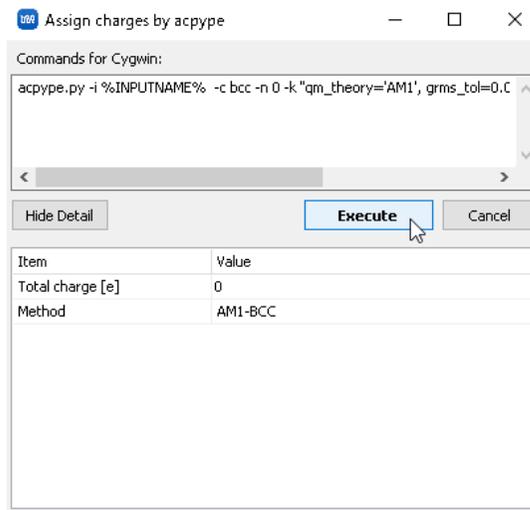
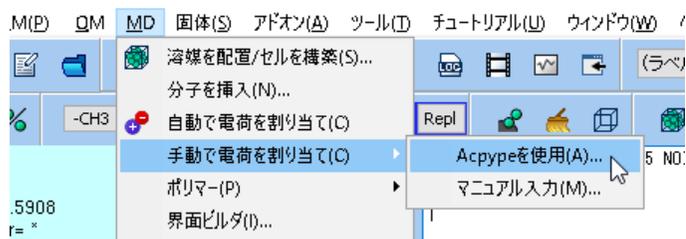
I. 溶液 ($\lambda=0$) のMD計算

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。



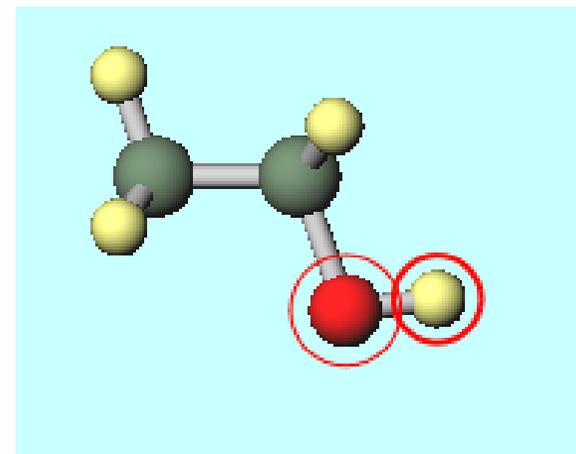
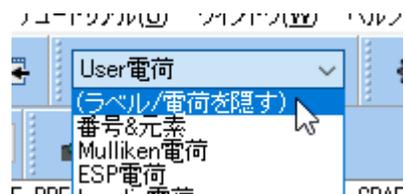
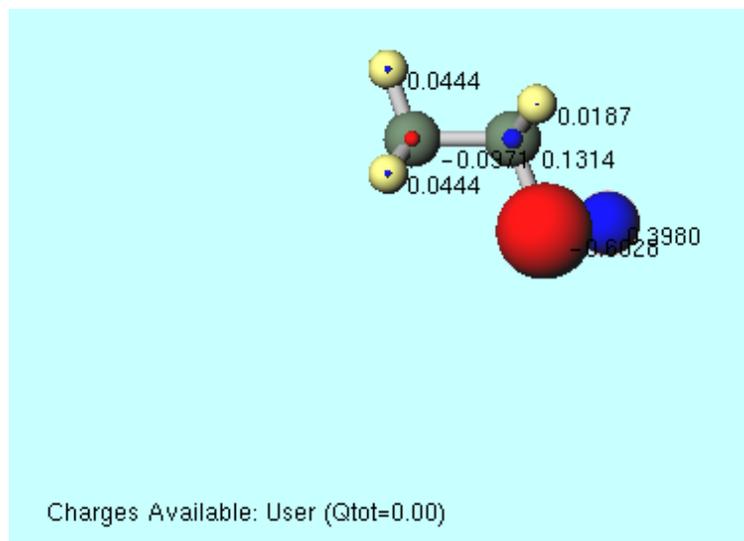
I. 溶液 ($\lambda=0$) のMD計算

1. MDメニュー | 手で電荷を割り当て | Acpypeを使用をクリックする。
2. Assign charges by acpypeウィンドウで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。



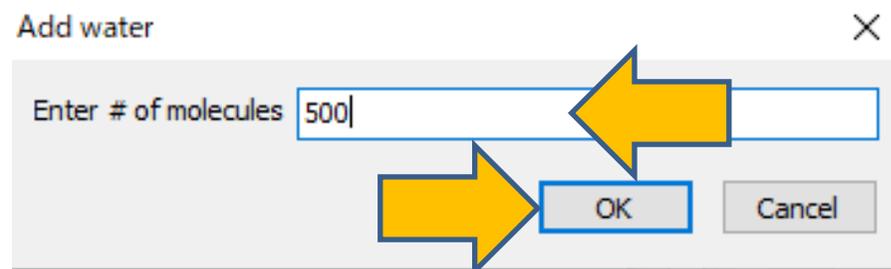
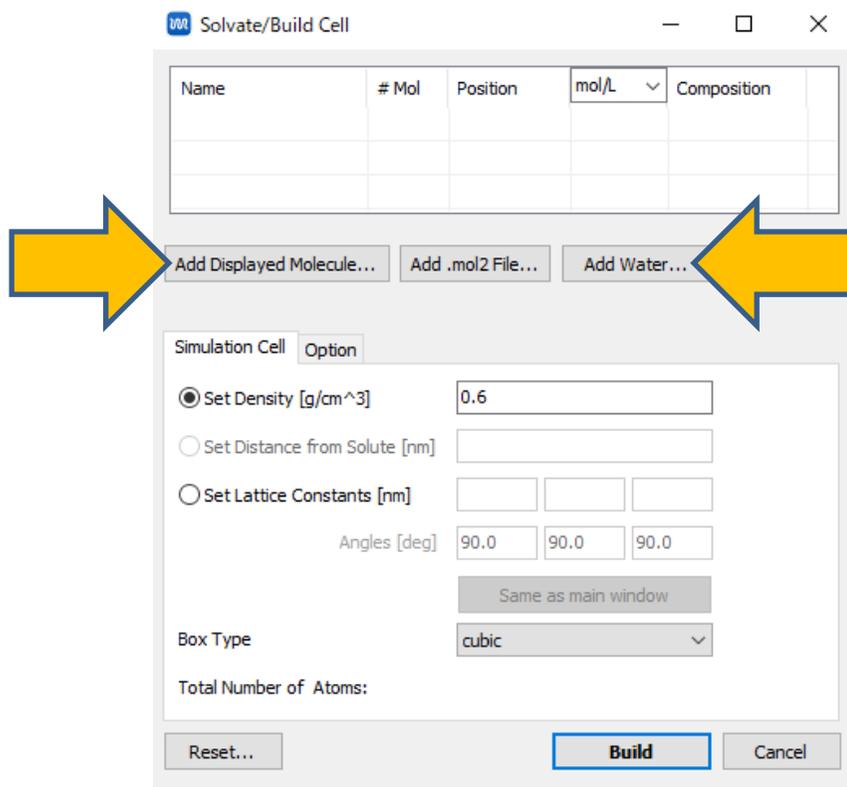
I. 溶液 ($\lambda=0$) のMD計算

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。



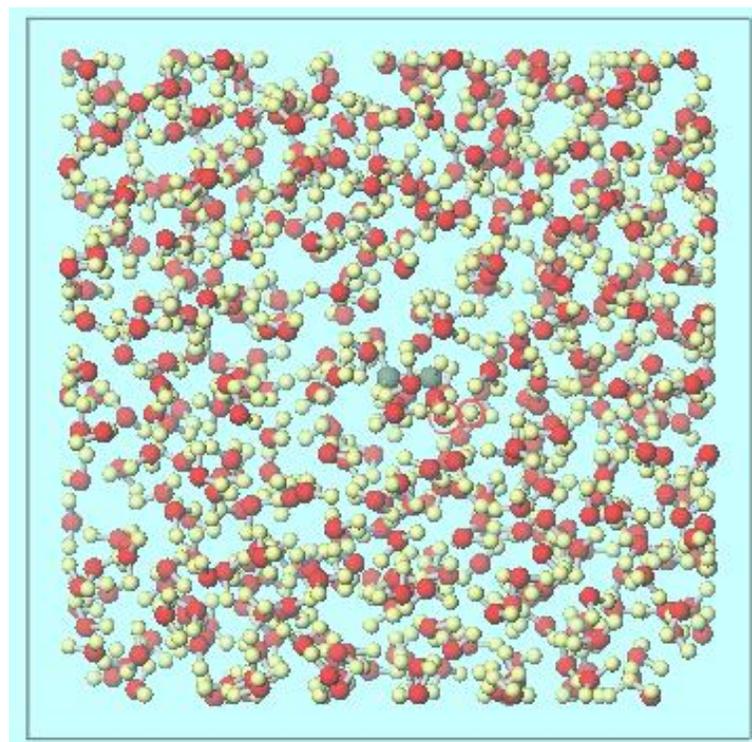
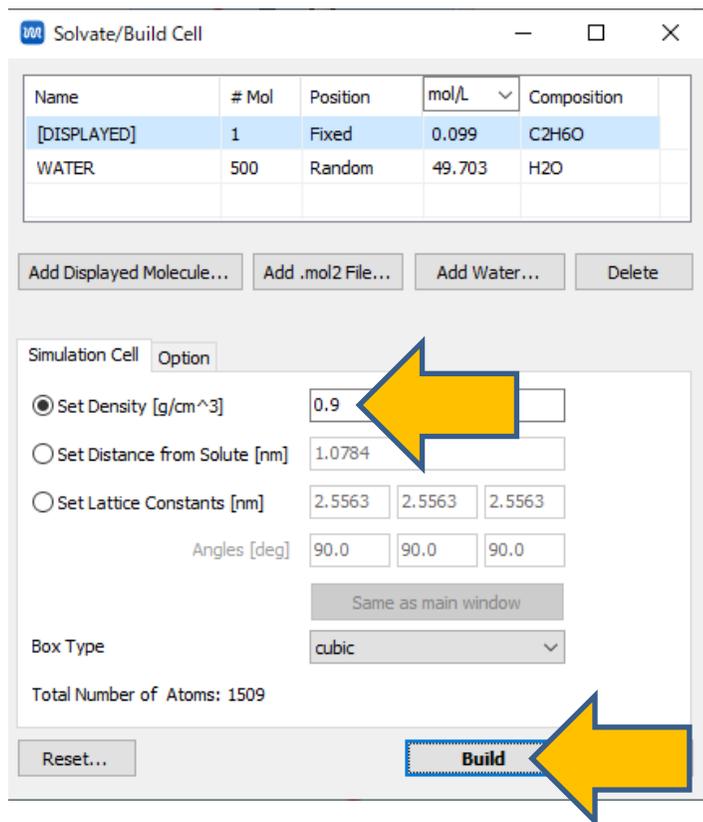
I. 溶液 ($\lambda=0$) のMMD計算

1.  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。



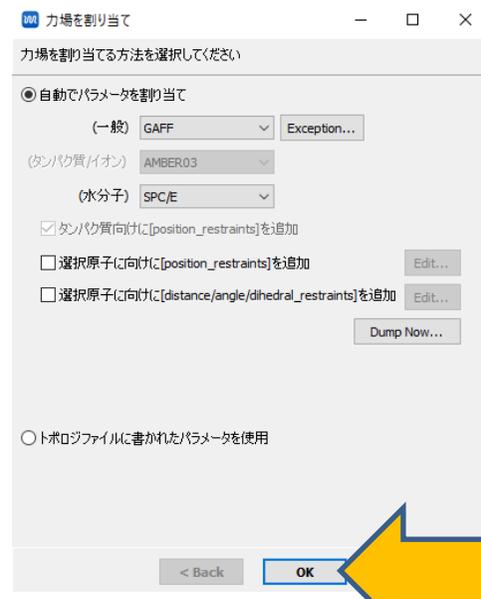
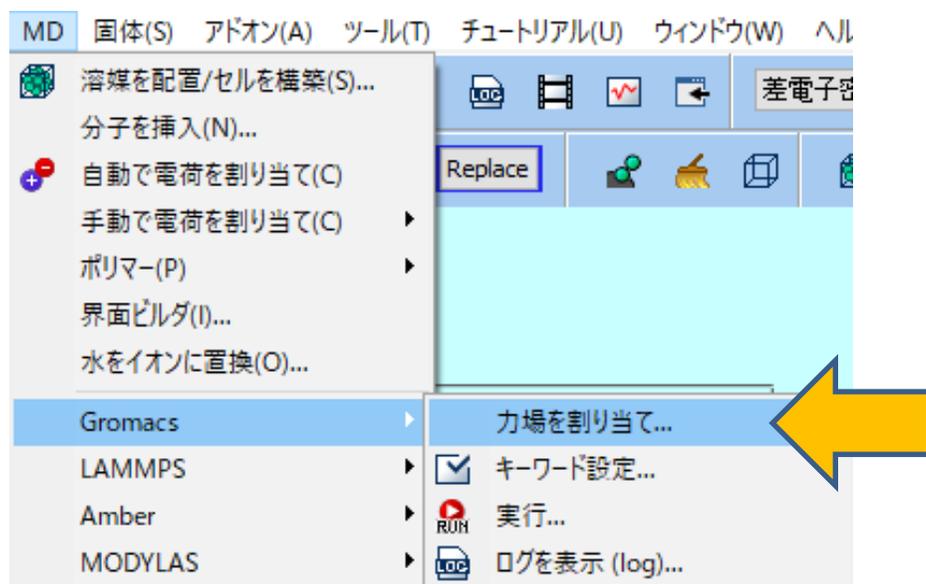
I. 溶液 ($\lambda=0$) のMMD計算

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。



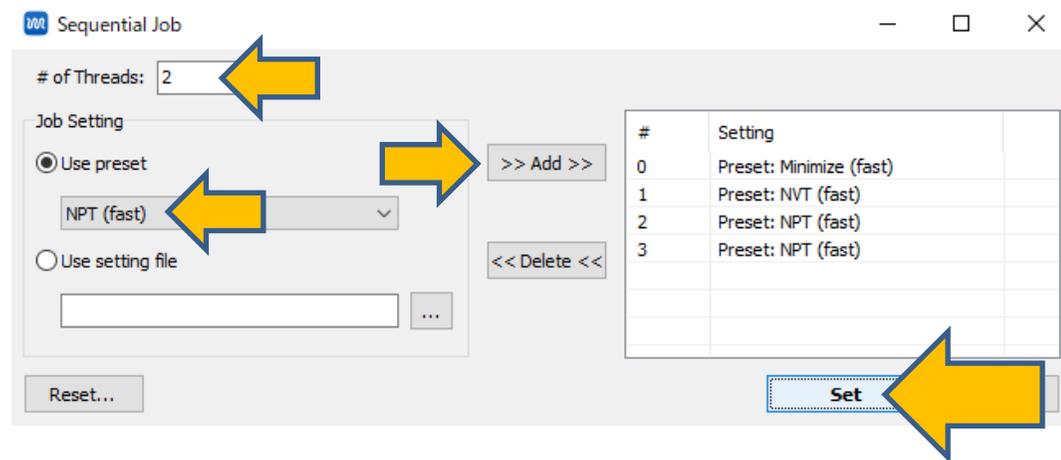
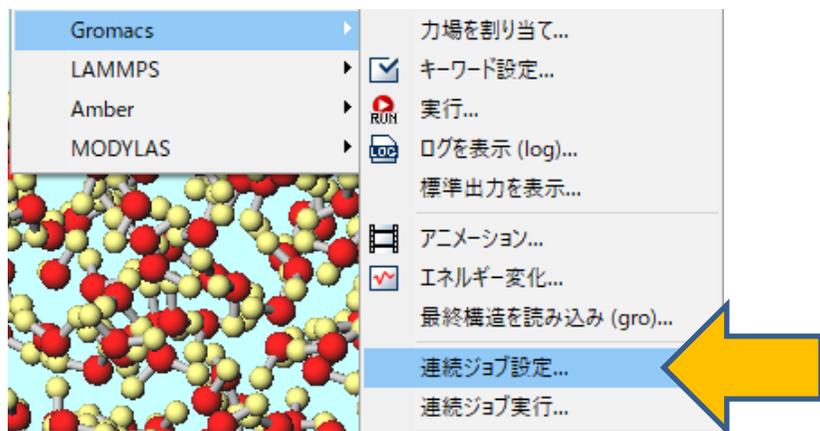
I. 溶液 ($\lambda=0$) のMD計算

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



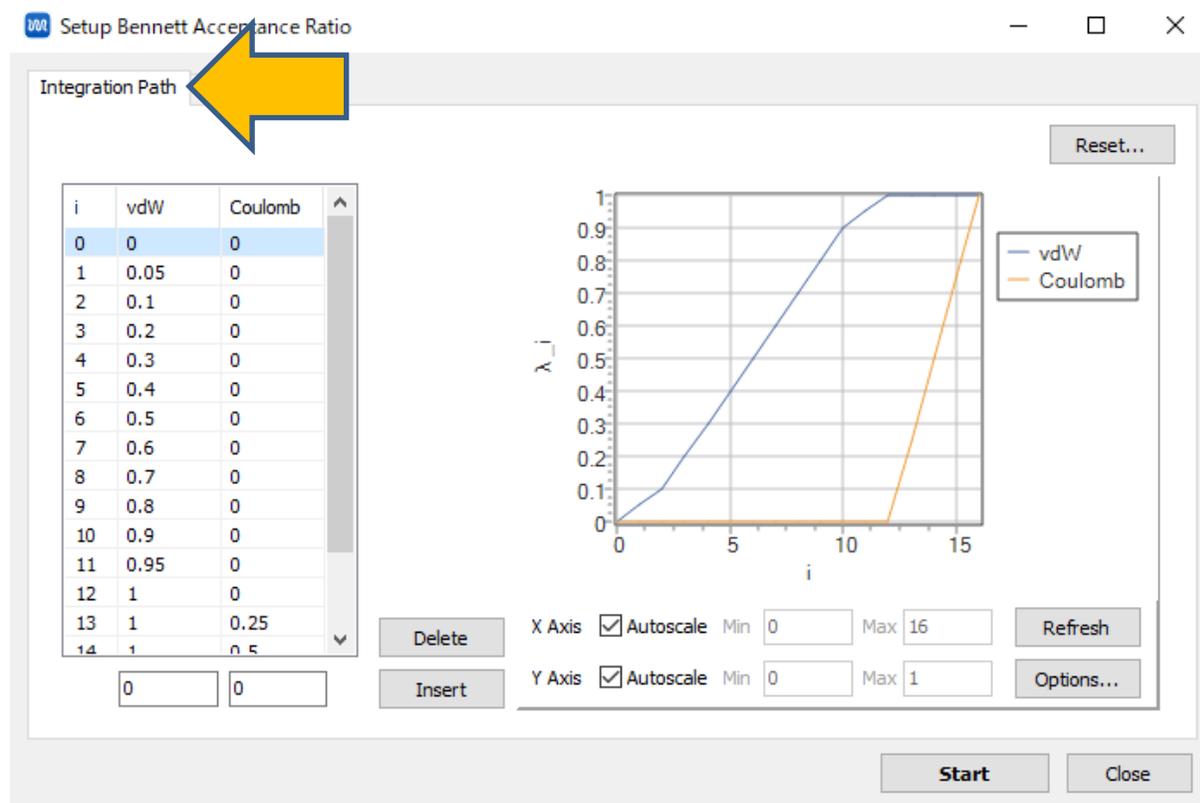
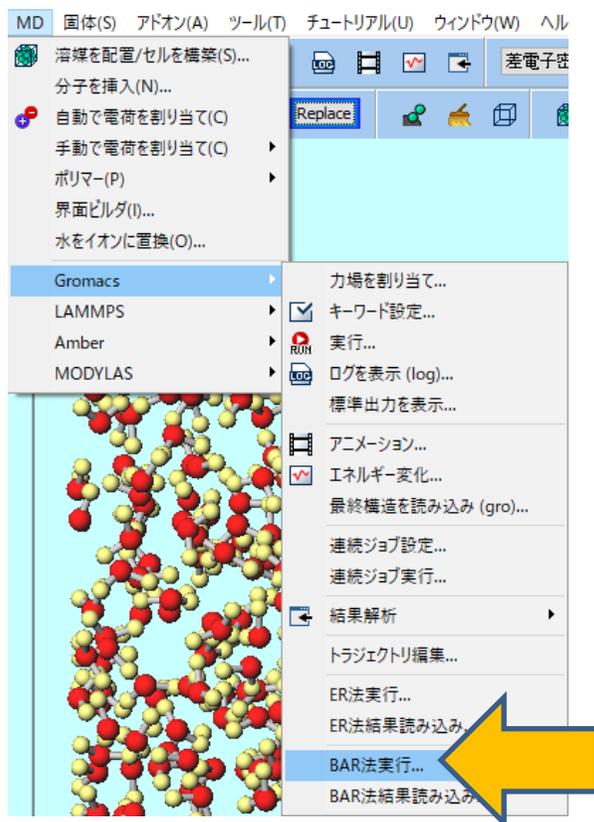
I. 溶液 ($\lambda=0$) のMD計算

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。



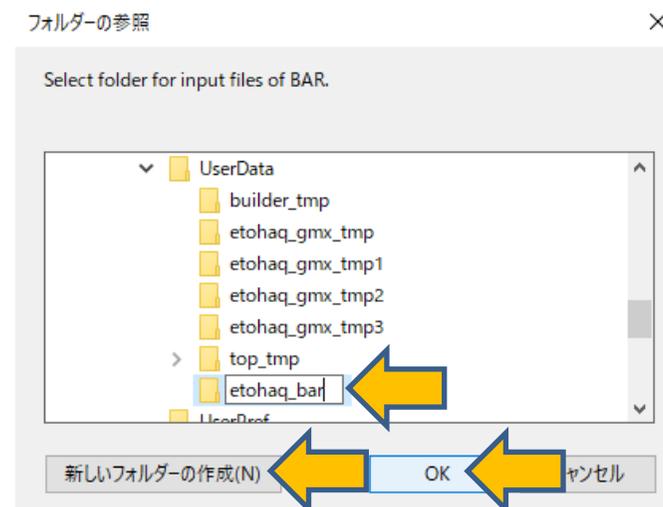
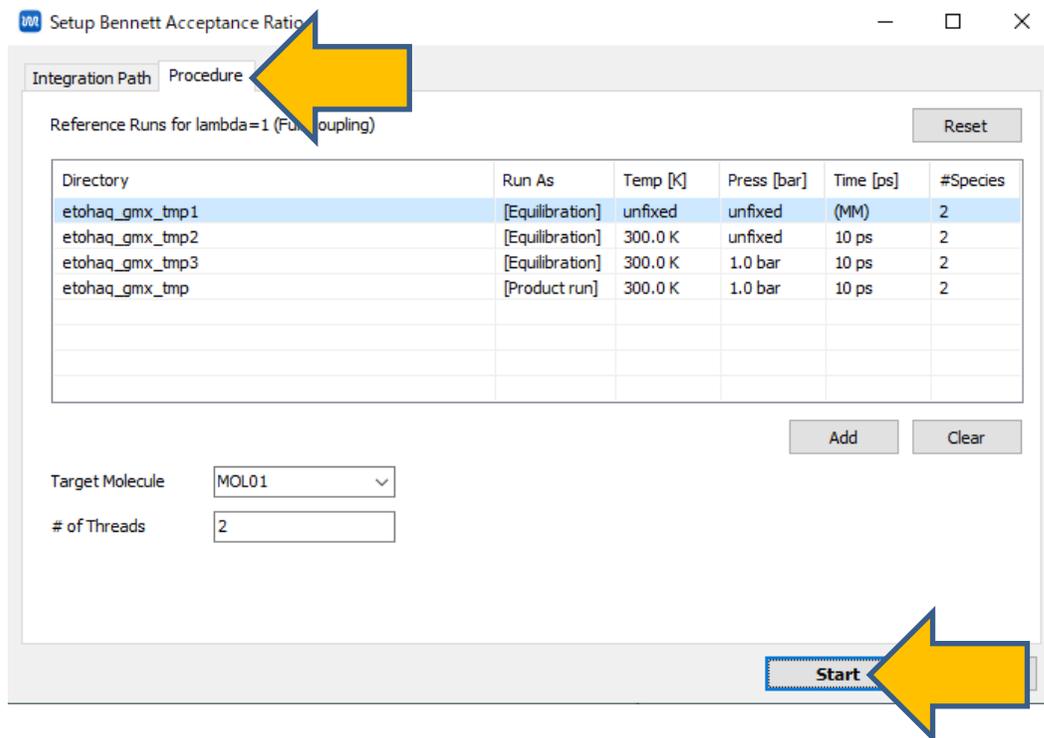
II. λ を変化させたMD計算

1. 計算終了後、**MD | Gromacs | BAR法実行**をクリックする。
2. 表示されたウィンドウの**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)



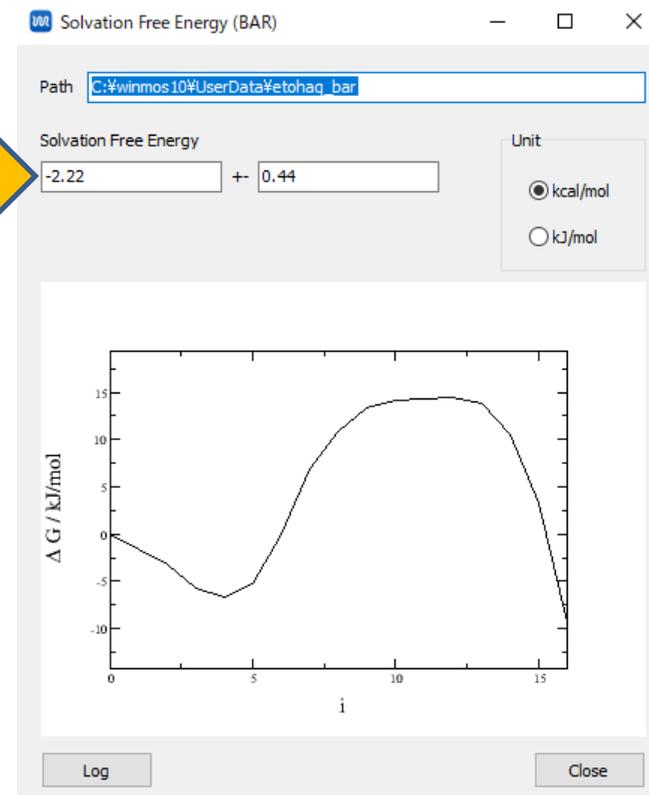
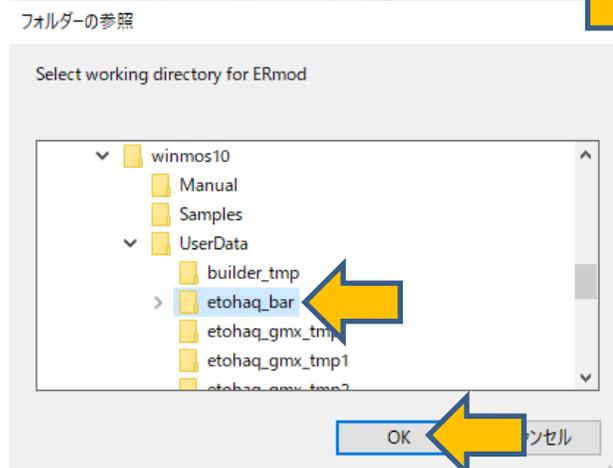
II. λ を変化させたMD計算

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。



III. 結果の表示

1. 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。



最後に

- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。



[ユーザマニュアル](#)



[Winmostar 講習会](#)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[Winmostar基礎講習会](#)へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては[個別講習会](#)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[よくある質問](#)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