winmostar チュートリアル

Gromacs
溶媒和自由エネルギー
（エネルギー表示法）

V10.4.3

2021年4月1日　　株式会社クロスアビリティ

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

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。

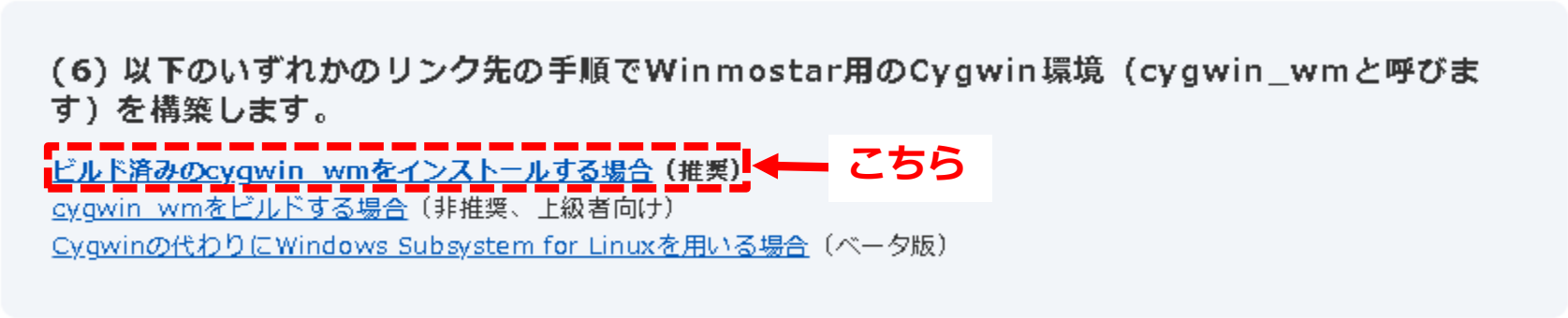
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方はビギナーズガイドを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方はユーザマニュアルを参照してください。

- 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。

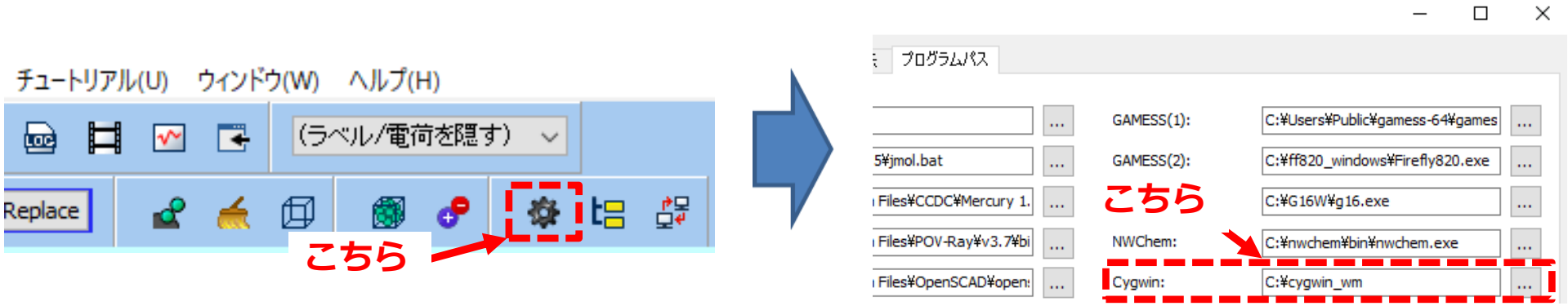
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾なく、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。

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。



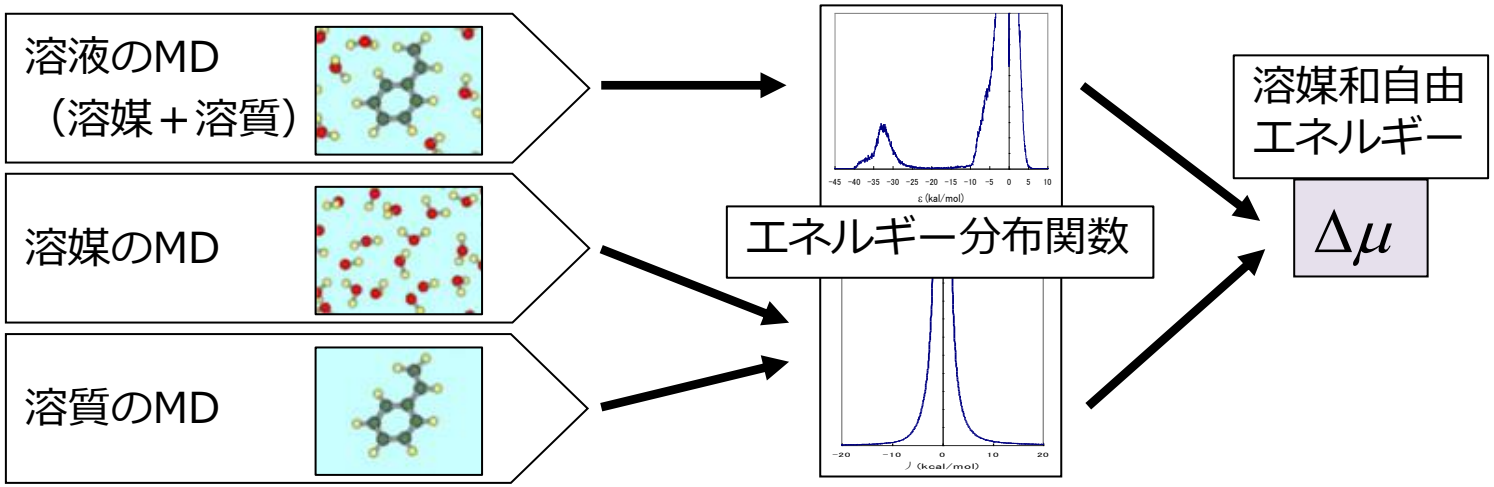
- デフォルトではC:¥直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」＞「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



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

概要

- エタノールの水への溶媒和自由エネルギーをエネルギー表示（ER）法を用いて計算します。溶質＋溶媒、溶媒のみ、溶質のみ、それぞれのMD計算を実施した後、エネルギー分布関数と自由エネルギーを計算します。



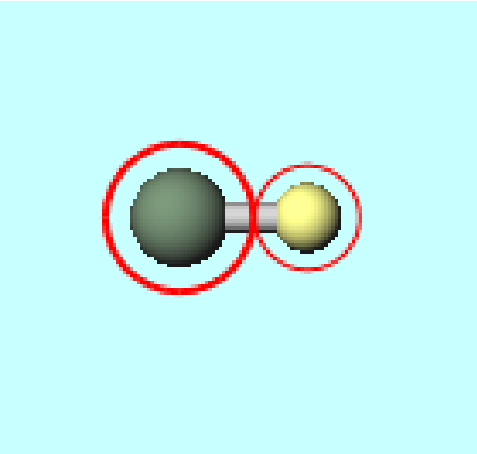
注意点：

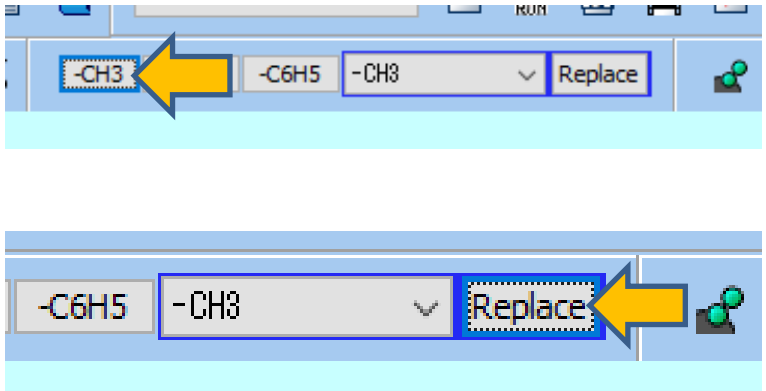
- 分子の種類、初期密度に応じて平衡化に必要なステップ数は変化します。
- “本計算”のステップ数が大きいほど、再現性が良く、信頼性の高い結果を取得することができます。座標の出力頻度、数も結果に影響します。
- 力場の種類、相互作用の計算条件、系のサイズも計算結果に大きく影響を与えます。
- ER法の計算では擬似乱数を使うため、その分だけ結果が都度変化します。

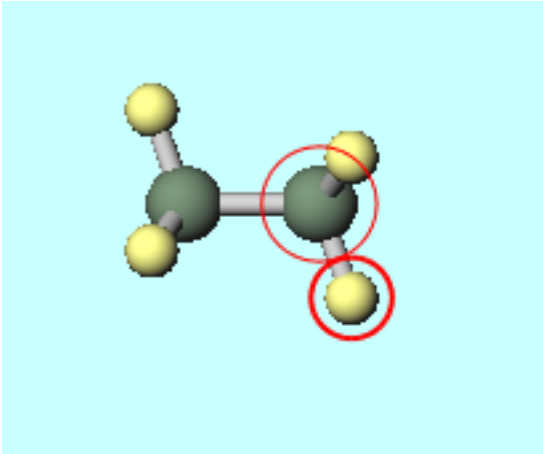
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I.　溶液の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。



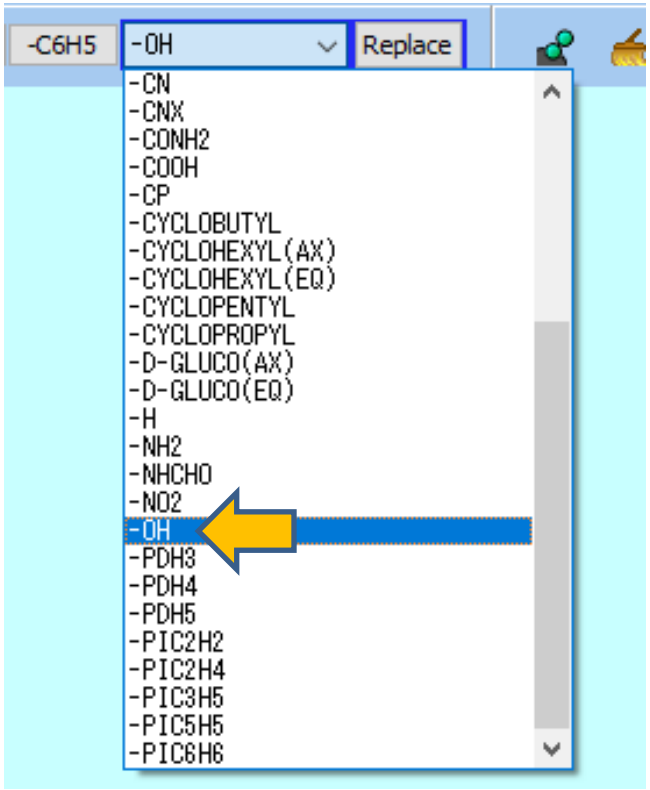


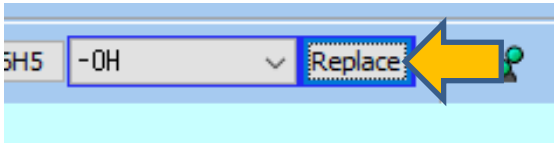


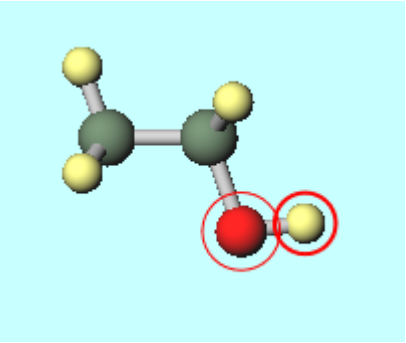
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 溶液の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。



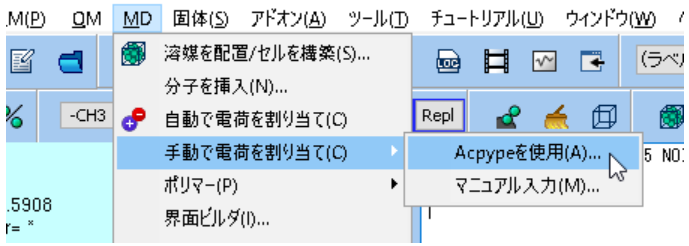


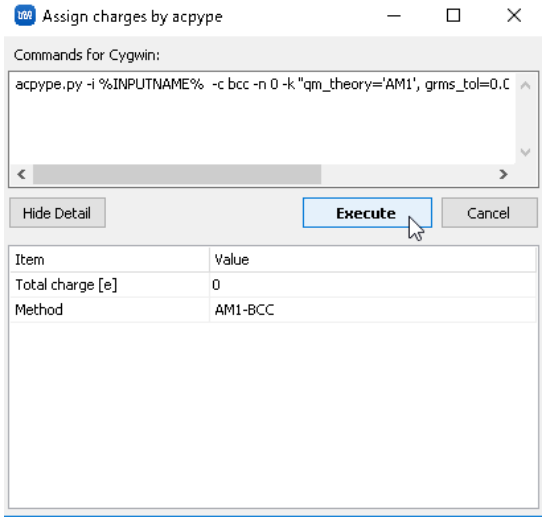


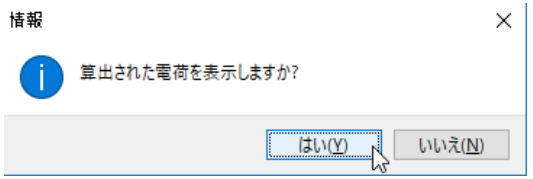
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

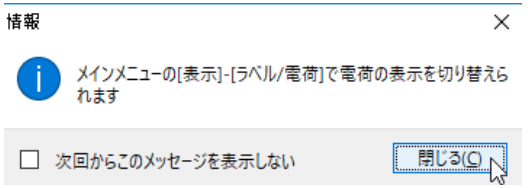
I. 溶液のMD計算

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。





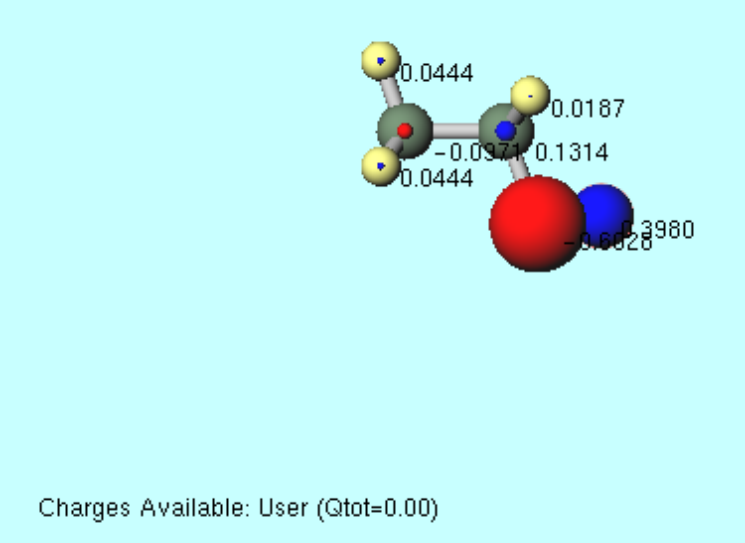


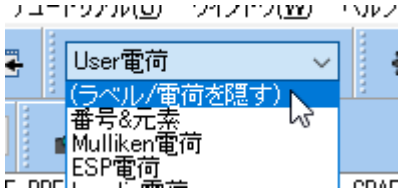


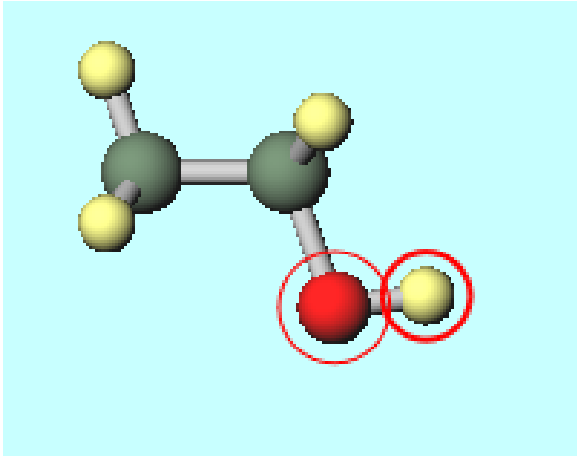
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 溶液の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。



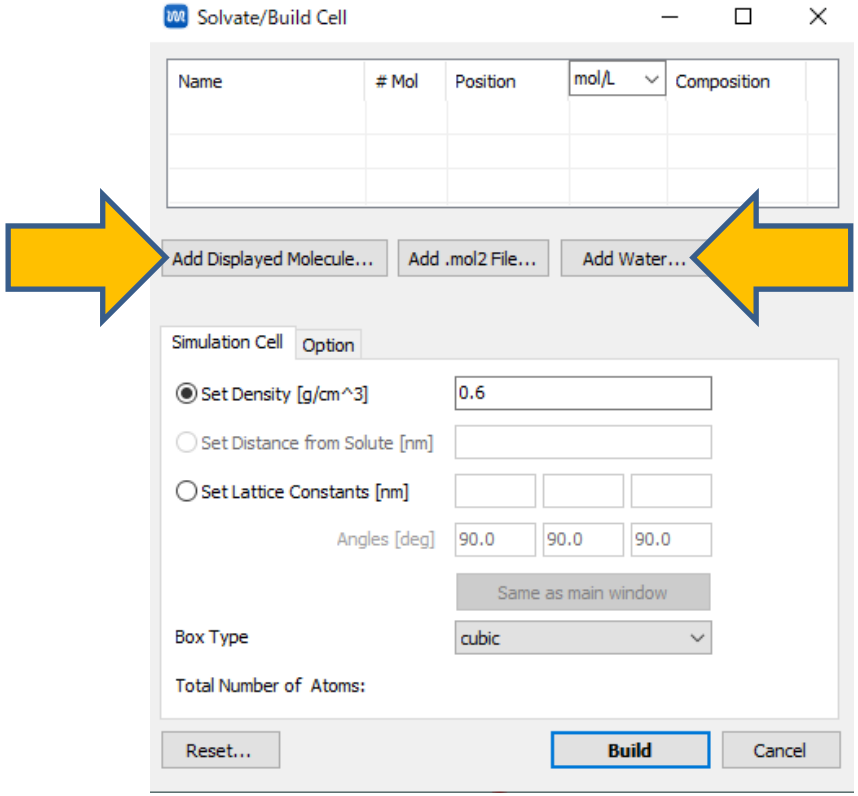


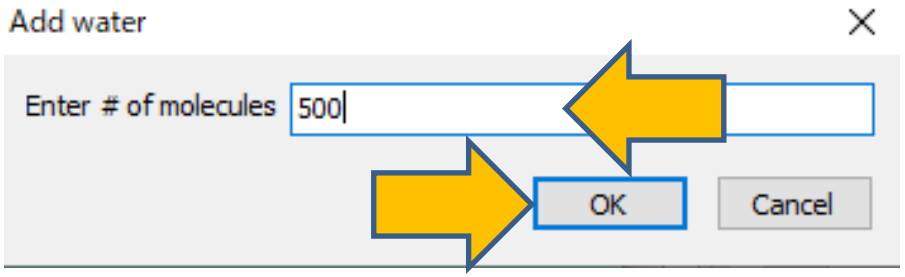


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 溶液のMD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。

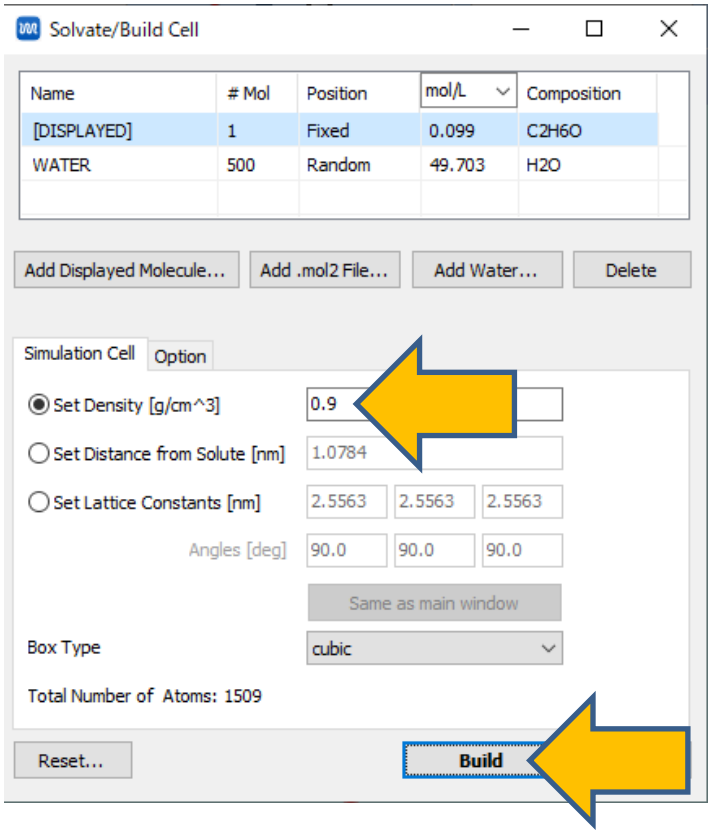


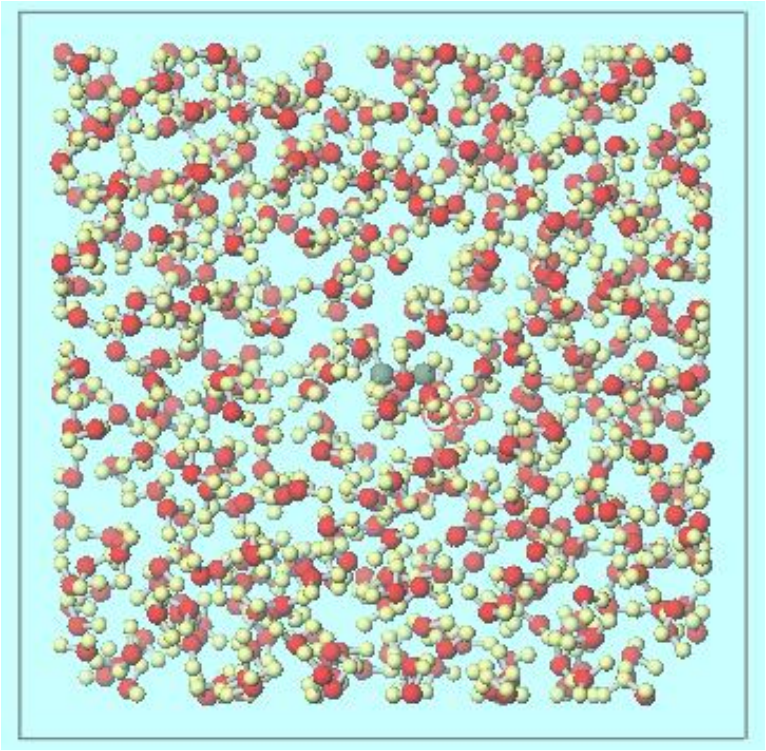


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 溶液のMD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。

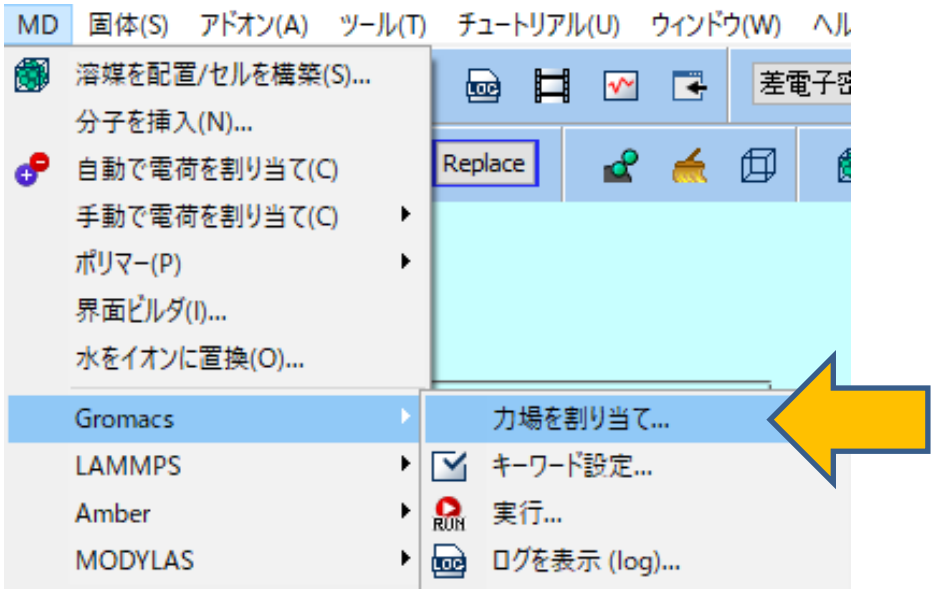


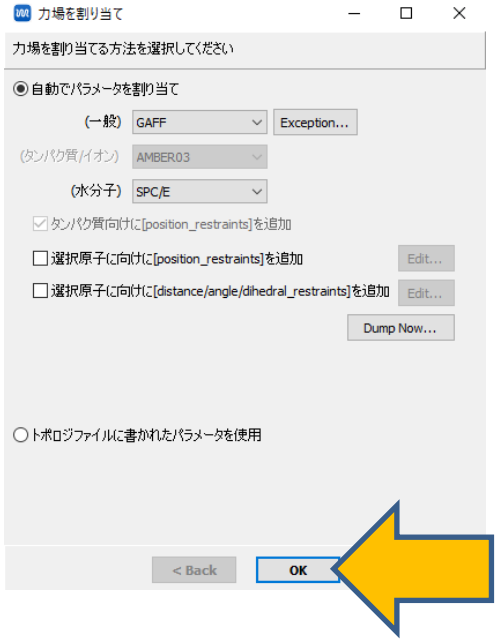


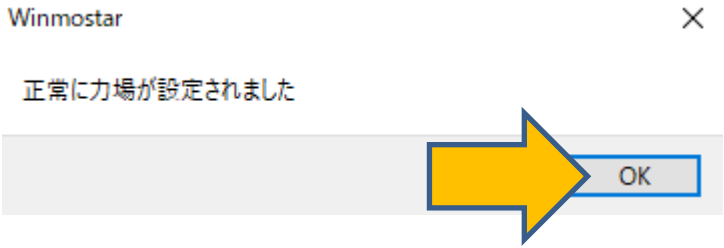
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 溶液のMD計算（平衡化）

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。



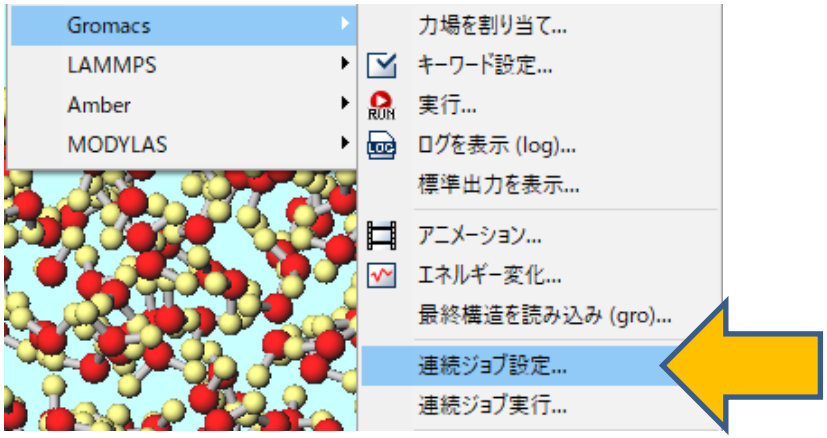


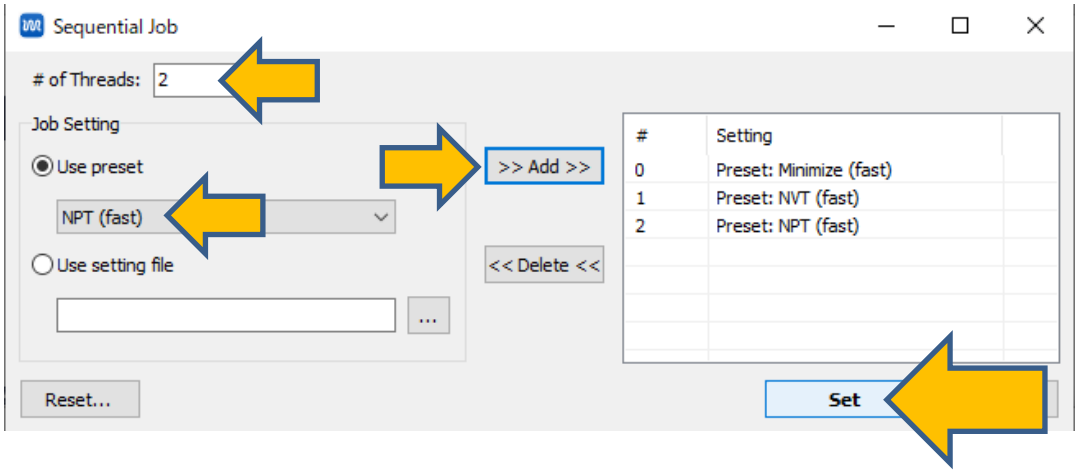


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 溶液のMD計算（平衡化）

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1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。

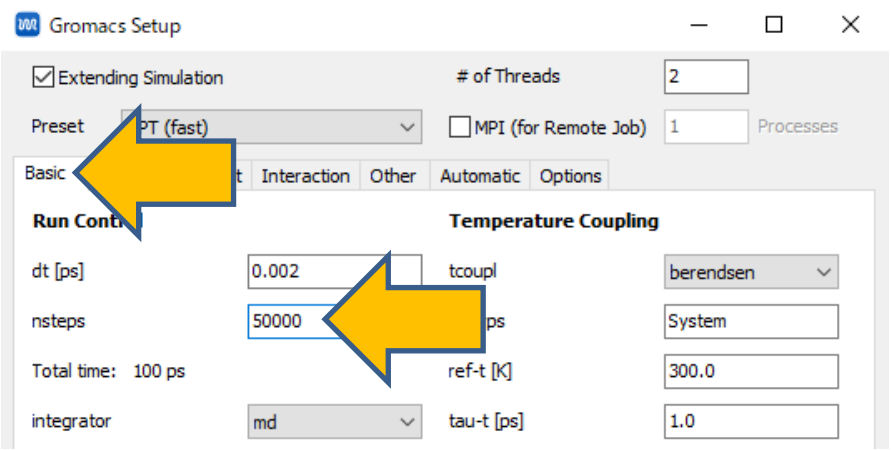


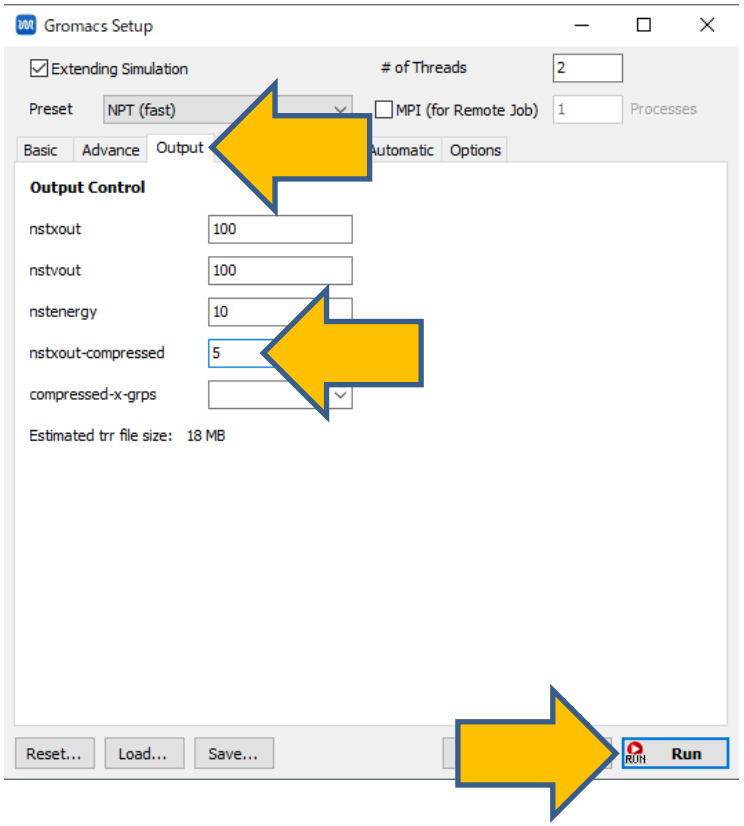


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 溶液のMD計算（本計算）

1. 計算終了後、ソルバー一覧から**Gromacs**を選択し、**キーワード設定**をクリックする。
2. **Basicタブ**にて**nsteps**を**50000**に変更する。
3. **Outputタブ**にて**nstxout-compressed**を**5**に変更する。
4. **Run**をクリックする。

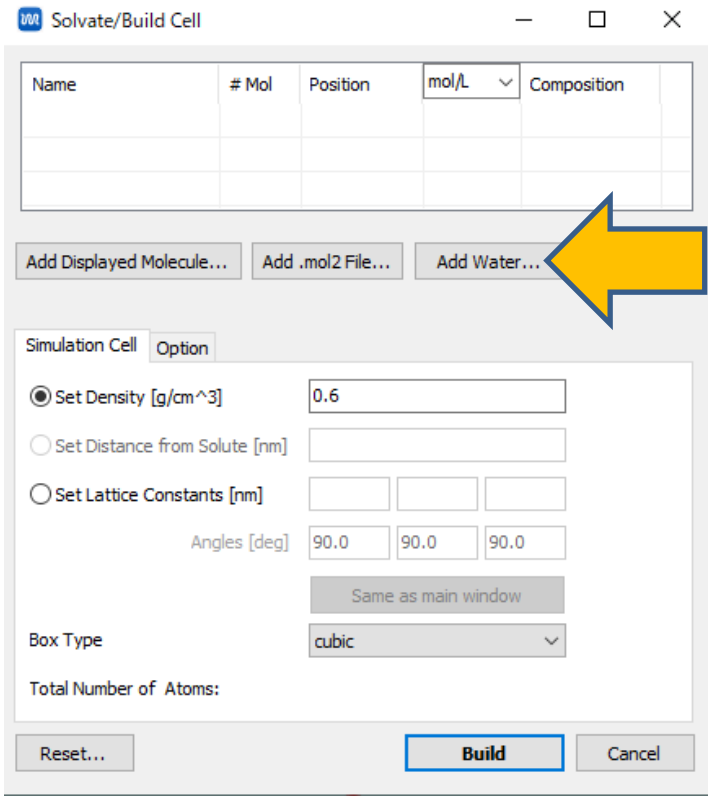


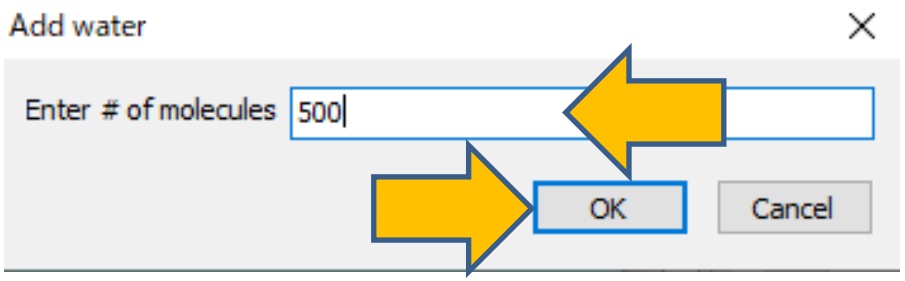


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 溶媒のMD計算

1. **溶媒を配置/セルを構築**をクリックする。
2. **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。

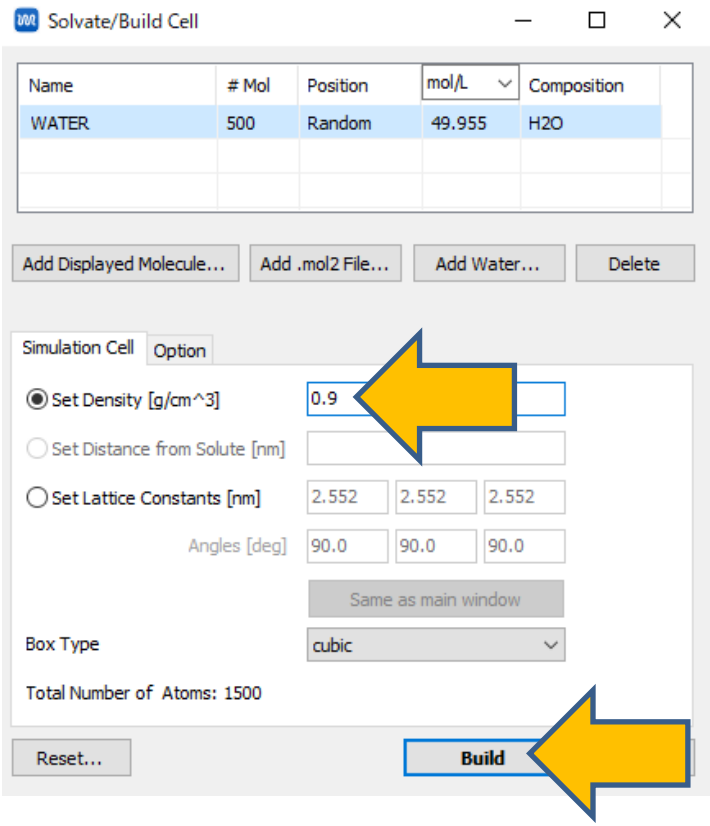


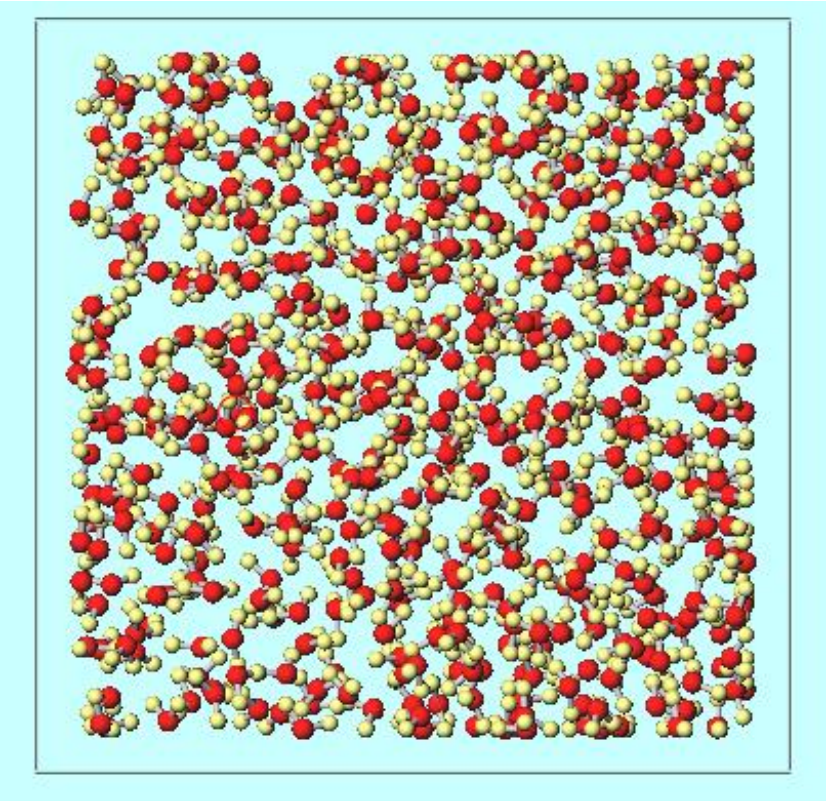


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 溶媒のMD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。

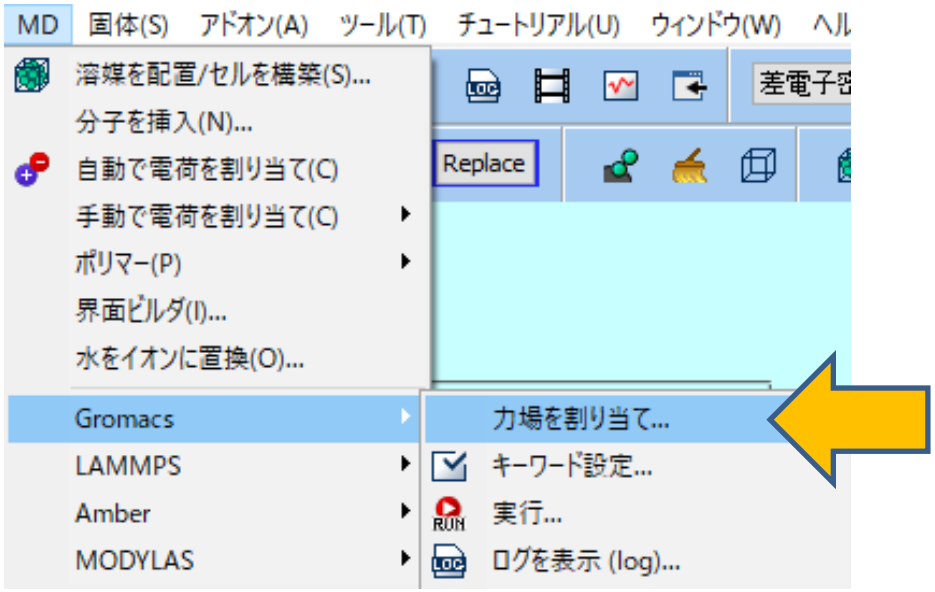


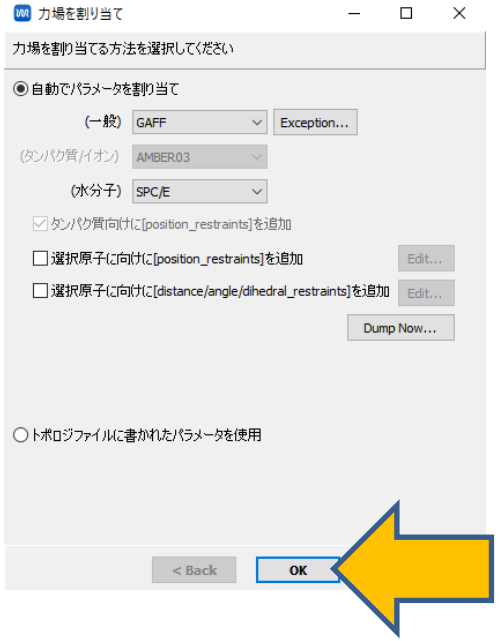


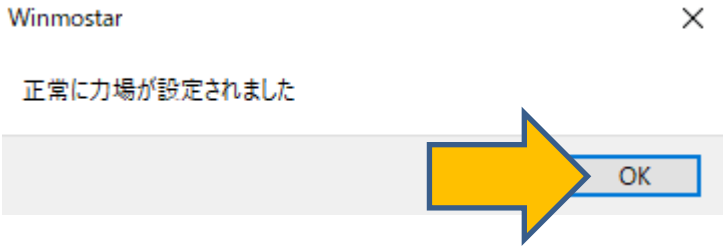
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 溶媒のMD計算

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。



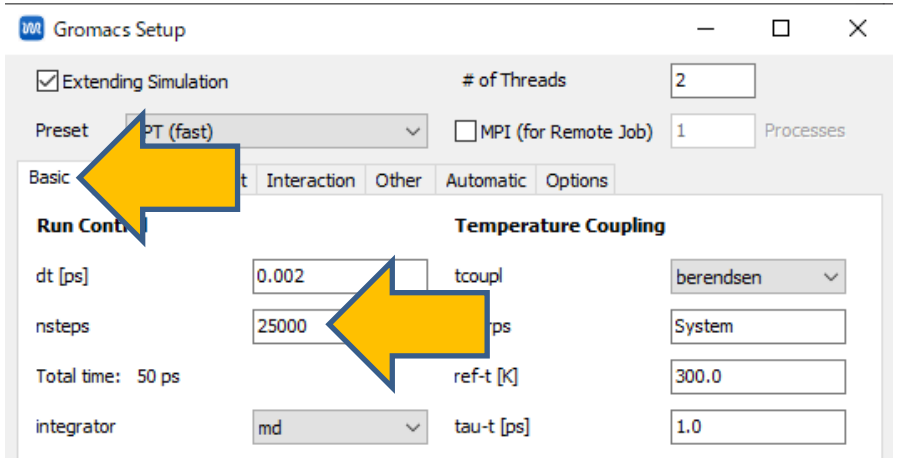


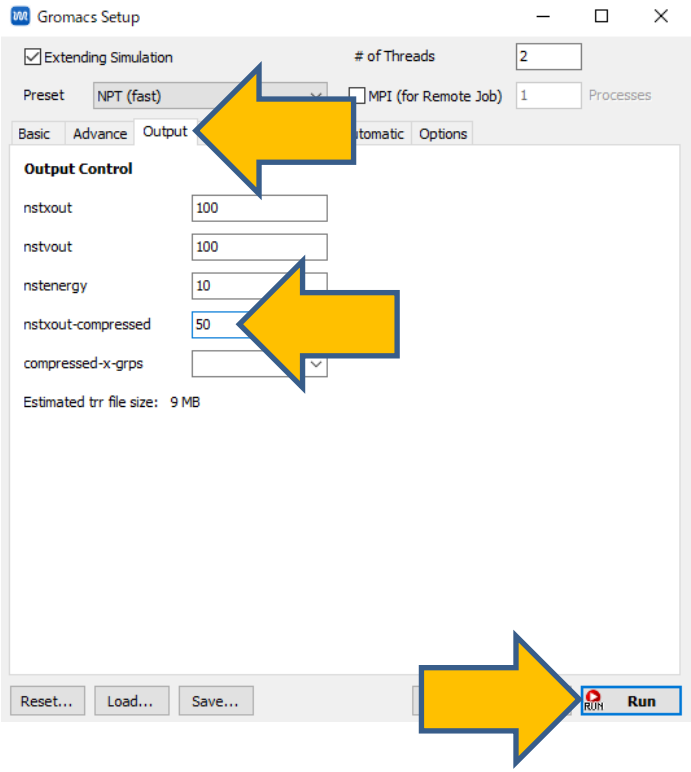


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 溶媒のMD計算（平衡化&本計算）

1. **MD | Gromacs | 連続ジョブ実行**をクリックする。
2. ファイル名を**h2o.gro, h2o.top**として保存する。
3. 計算終了後、 **キーワード設定**をクリックする。
4. **Basicタブ**にて**nsteps**を**25000**に変更する。
5. **Outputタブ**にて**nstxout-compressed**を**50**に変更する。
6. **Run**をクリックする。

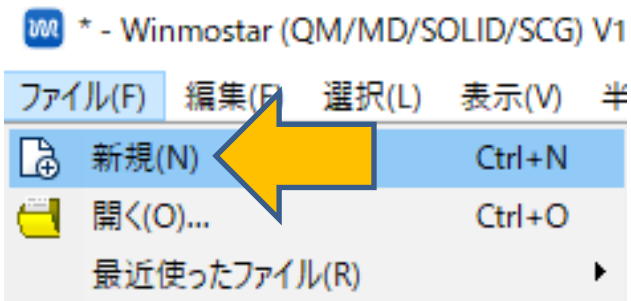


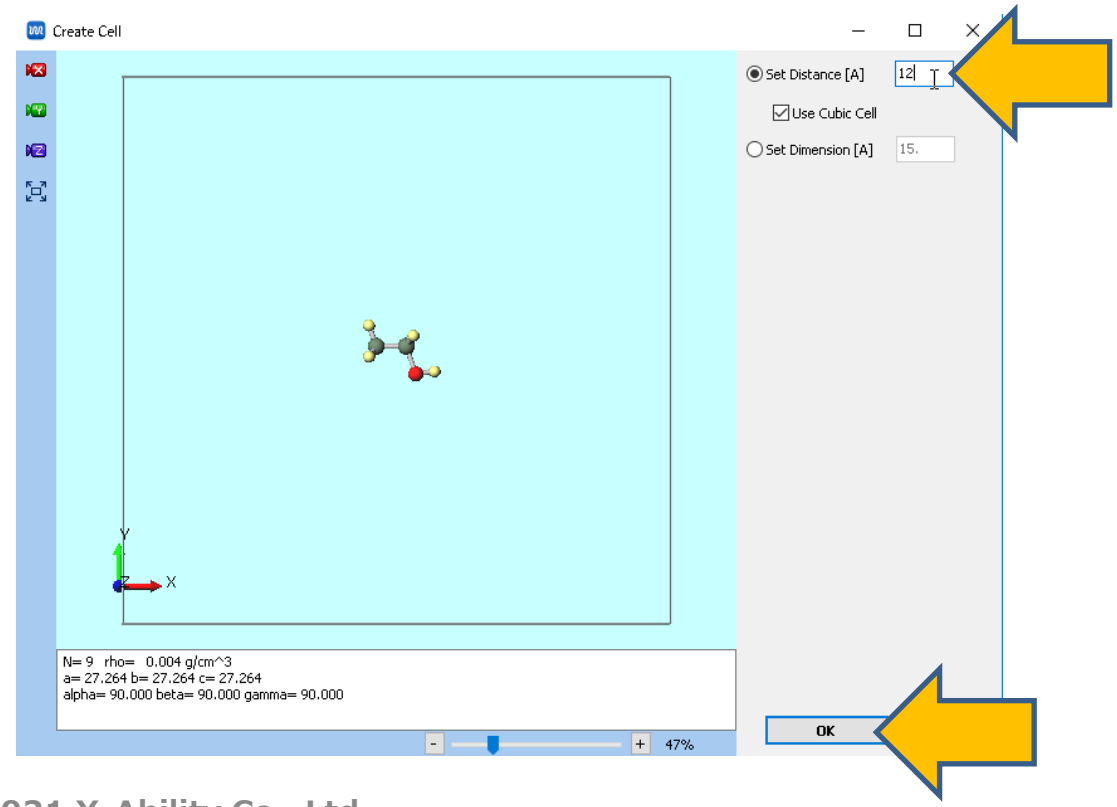


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.溶質のMD計算

1. **ファイルメニュー | 新規**をクリックする。
2. 溶液のMD計算の際と同様に、再度エタノール分子をモデリングする。
3. **セルを作成/編集 | セルを作成**をクリックする。
4. **Set Distance**の横の欄に**「12」**と入力し**OKボタン**をクリックする。

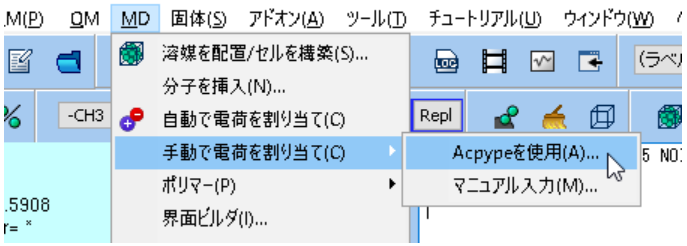


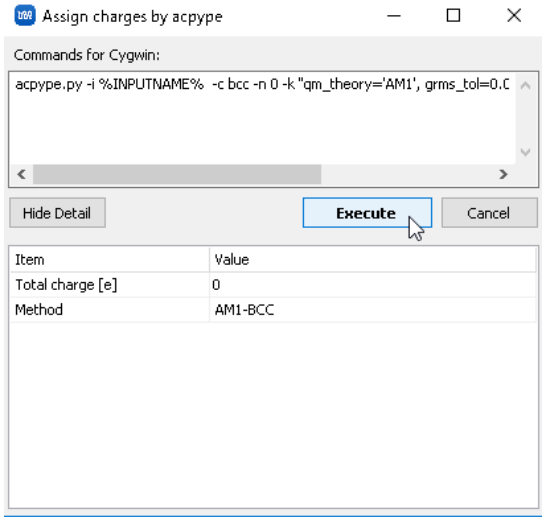


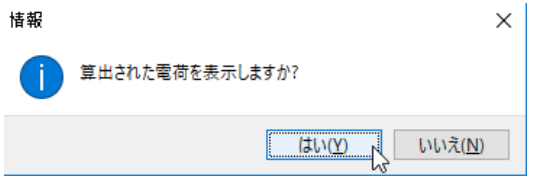
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

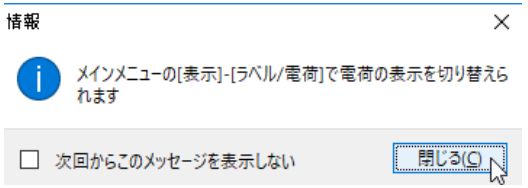
III.溶質のMD計算

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。





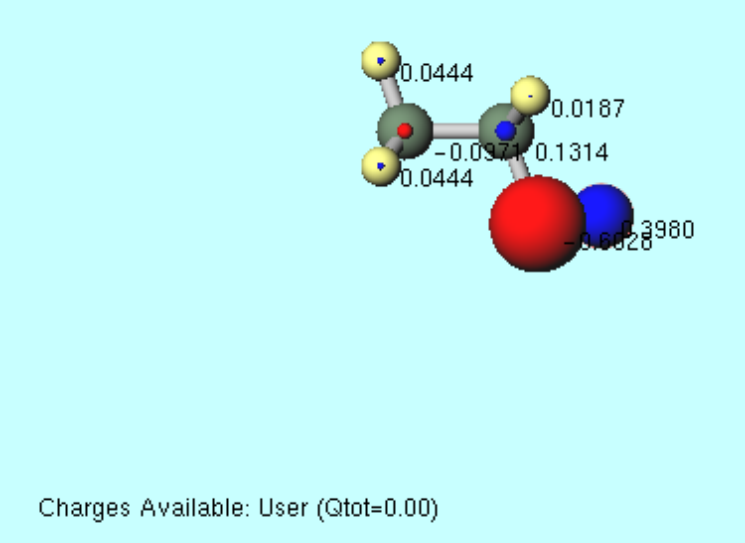


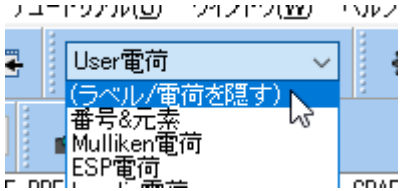


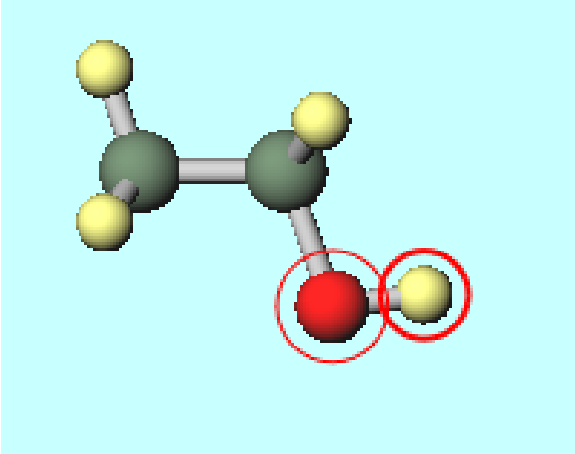
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.溶質の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。



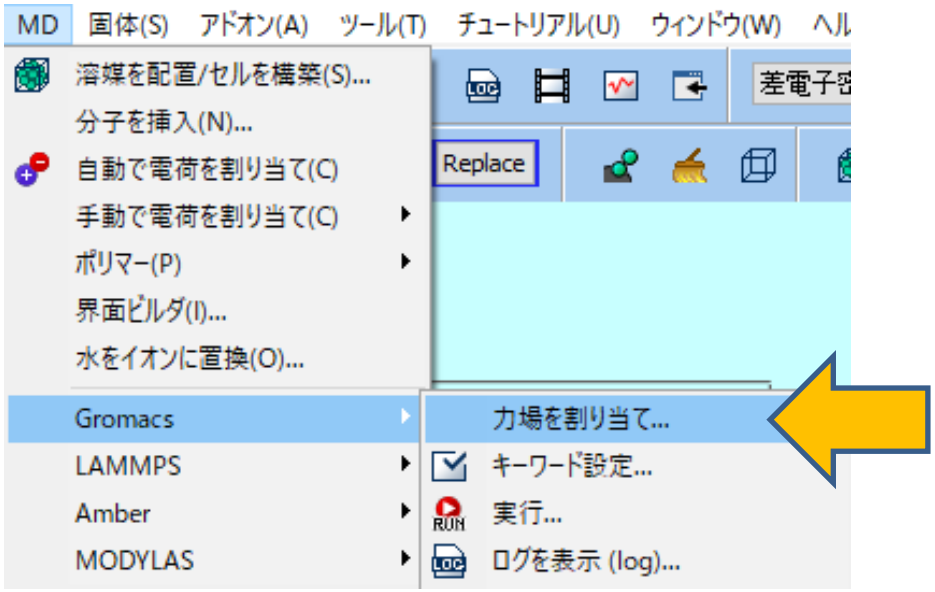


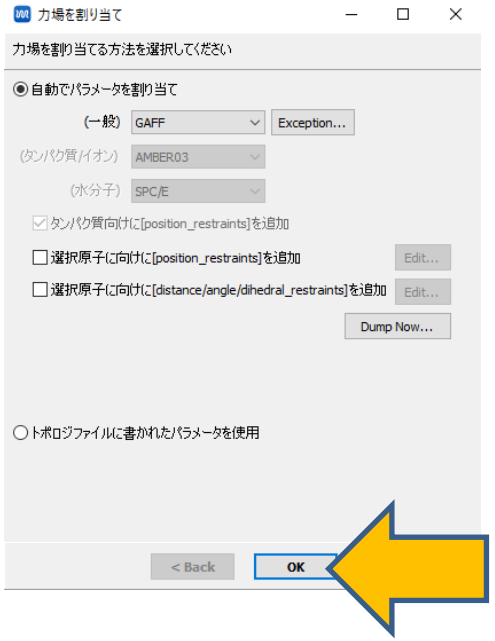


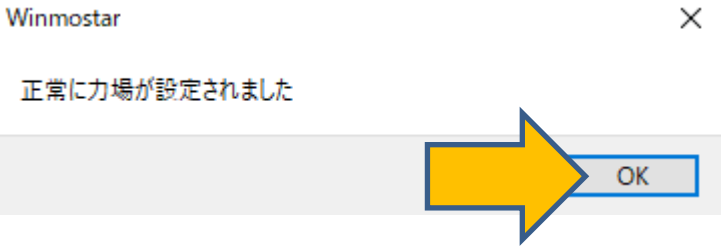
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.溶質のMD計算

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。



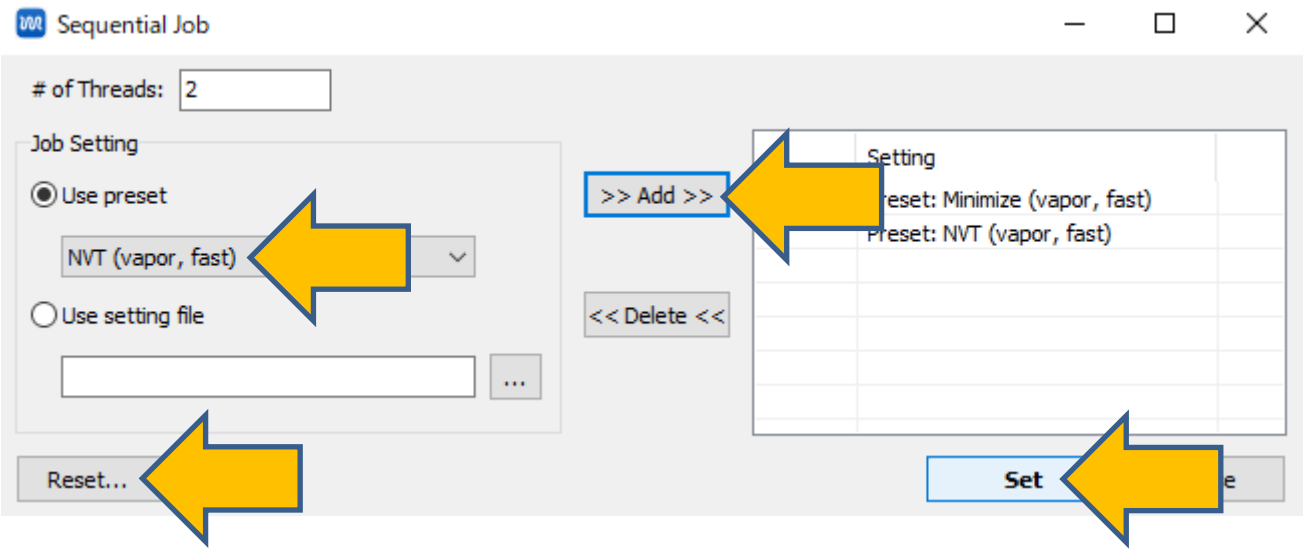




Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.溶質のMD計算（平衡化）

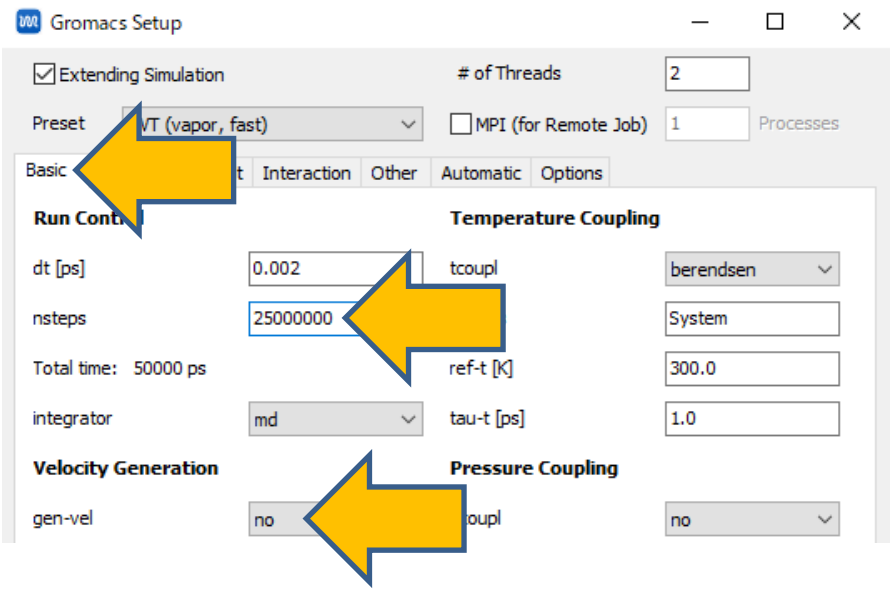
1. **MD | Gromacs | 連続ジョブ設定**をクリックする。
2. **Reset**をクリックする。
3. **Use presetでMinimize (vapor, fast)**を選び**>>> Add >>>**を1回クリックする。
4. **Use presetでNVT (vapor, fast)**を選び**>>> Add >>>**を1回クリックする。
5. **Set**をクリックする。
6. **MD | Gromacs | 連続ジョブ実行**をクリックする。
7. ファイル名を**etoh.gro**, **etoh.top**として保存する。

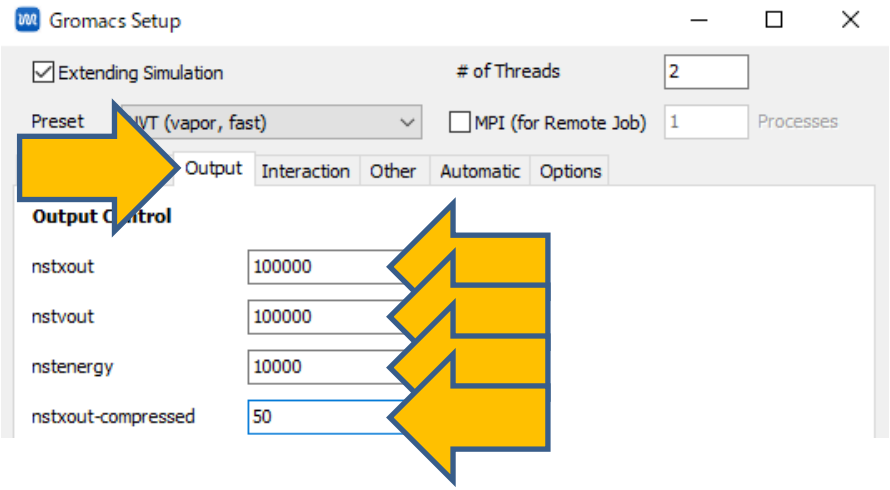


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.溶質のMD計算（本計算）

1. 計算終了後、**キーワード設定**をクリックする。
2. **Basicタブ**にて**nsteps**を**25000000**に、**gen-vel**を**no**に変更する。
3. **Outputタブ**にて**nstxout**と**nstvout**を**100000**に、**nstenergy**を**10000**に、**nstxout-compressed**を**50**に変更する。
4. **Run**をクリックする。

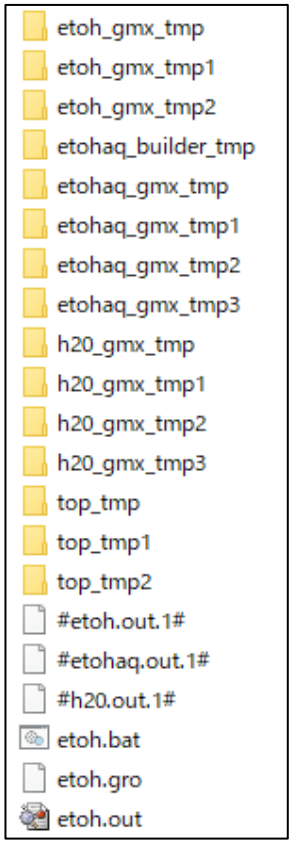


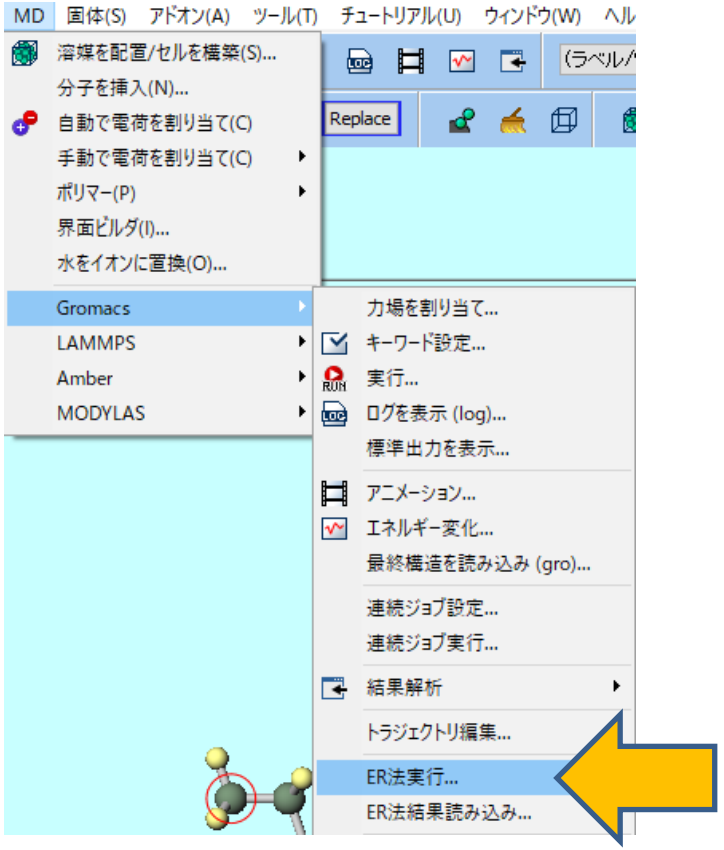


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

IV.ER法実行

1. **etohaq.gro**、**h2o.gro**および**etoh.gro**を保存したディレクトリをエクスプローラで開く。
   同じ場所に置いている場合は、 **エクスプローラで表示**で開くことができる。
2. **MD | Gromacs | ER法実行**をクリックする。

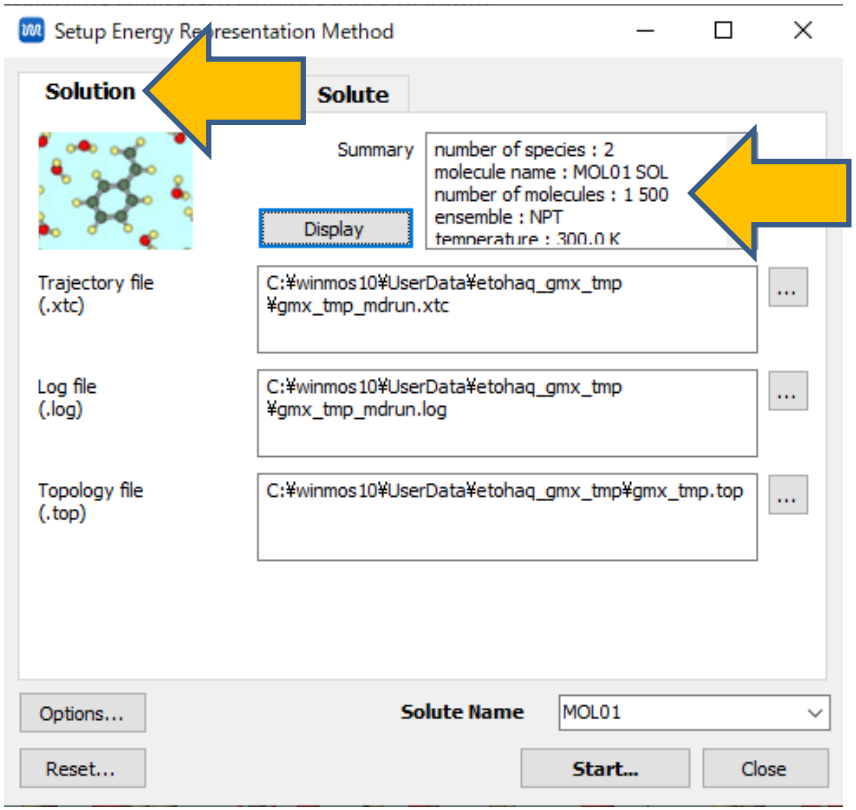


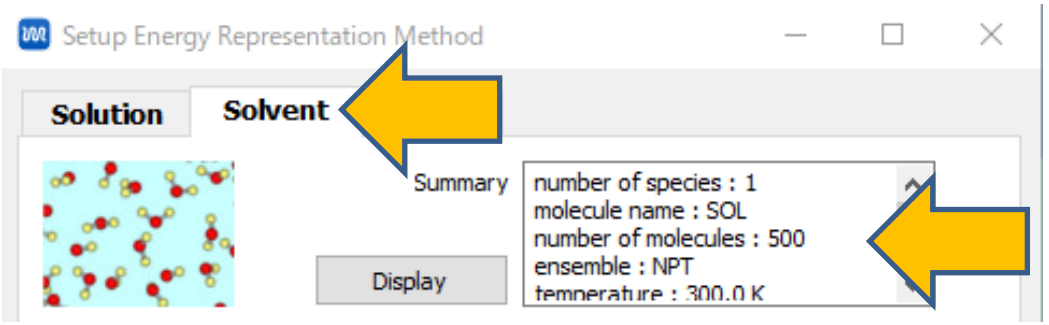


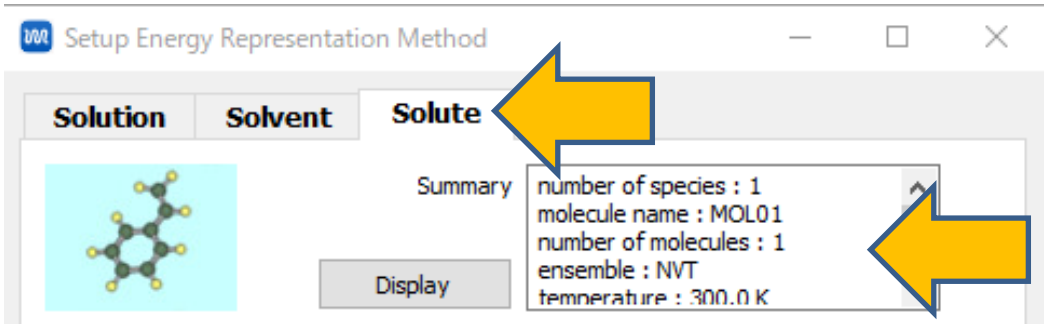
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

IV.ER法実行

1. **Solutionタブ**において、**テキストボックス**に溶液系の本計算のデータが入ったフォルダ**etohaq_gmx_tmp**をドラッグアンドドロップする。
2. 同様に**Solventタブ**には**h2o_gmx_tmp**、**Soluteタブ**には**etoh_gmx_tmp**をドラッグアンドドロップする。



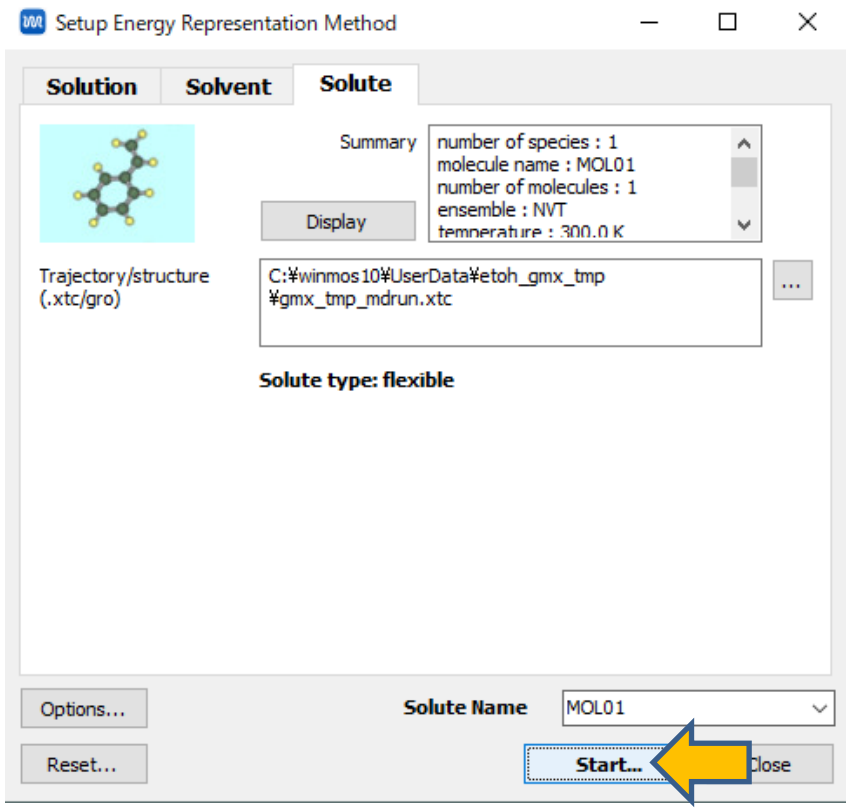


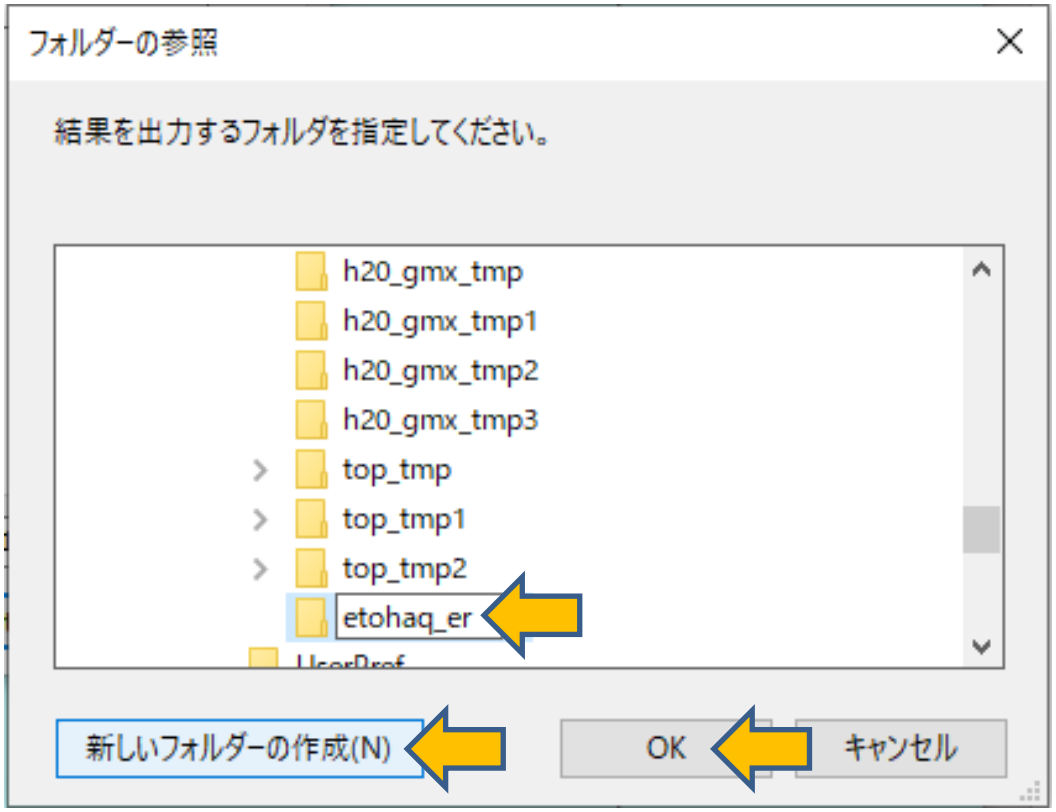


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

IV.ER法実行

1. **Start**をクリックし、エネルギー分布関数と溶媒和自由エネルギーの計算を実行する。
2. フォルダを指定すると計算が開始される。
   ここでは仮に**etohaq_er**というフォルダを新規に作成し指定する。

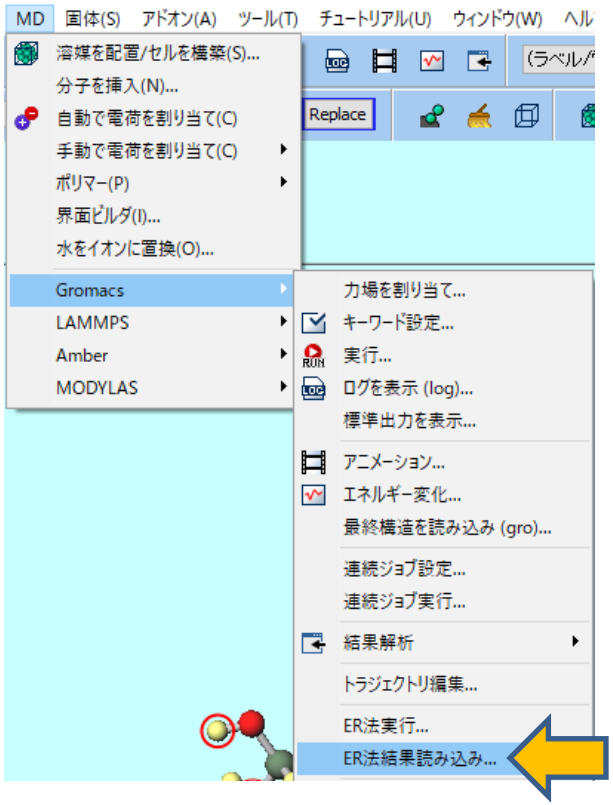


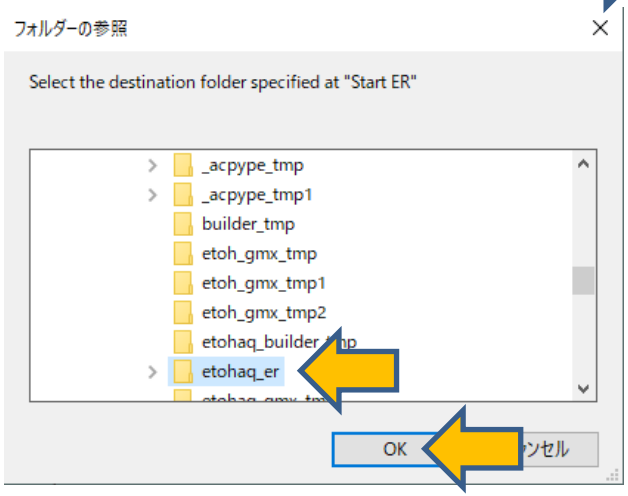


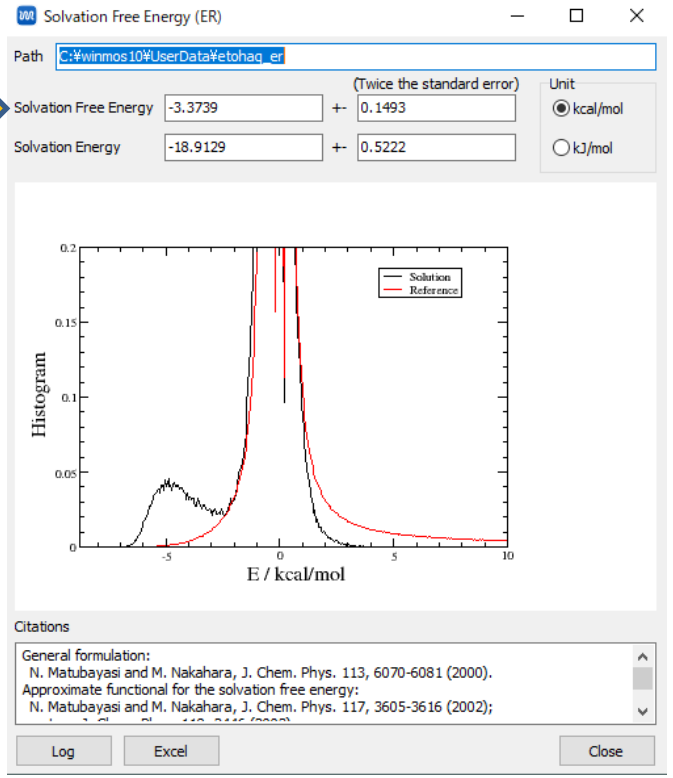
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

V. 結果の表示

1. 計算終了後、**MD | Gromacs | ER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、**ER法実行**のところで指定したフォルダ（ここでは**etohaq_er**）を選択する。溶媒和自由エネルギーが表示される。







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

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

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