

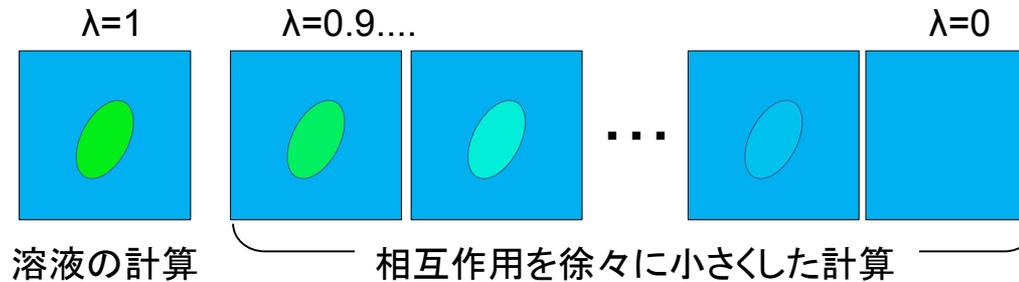
Winmostar チュートリアル
Gromacs
溶媒和自由エネルギー (BAR法)
V8.000

株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2017/10/01

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。



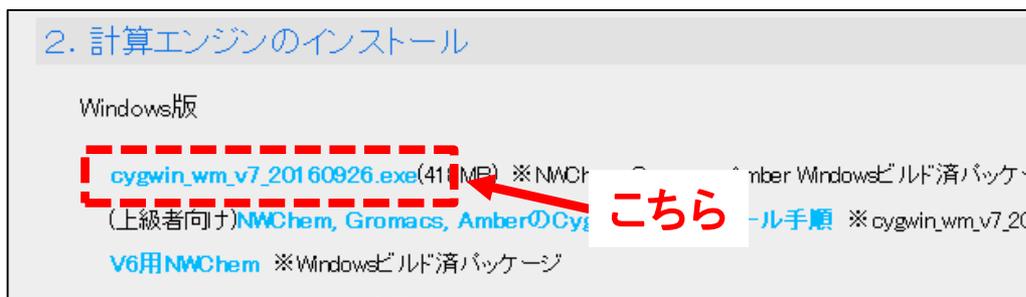
注意点:

- 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。
- λ の取り方も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。

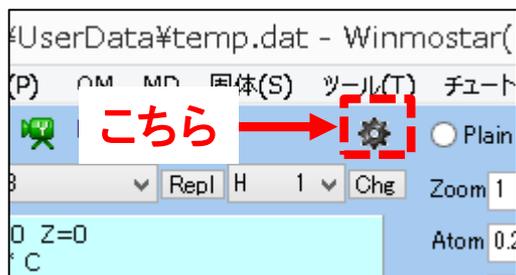
動作環境設定

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。



I. 溶液 ($\lambda=0$) のMD計算

まず溶質をモデリングする。下図の様にエタノール分子をモデリングする。

Winmostar 9 C2H6O MASS=46.07 X=2.9062 Y=-1.2584 Z=-0.1632
9-8-2-5 Leng=0.960 Ang=101.703 Dihed=-164.871 Lper=0.554 H

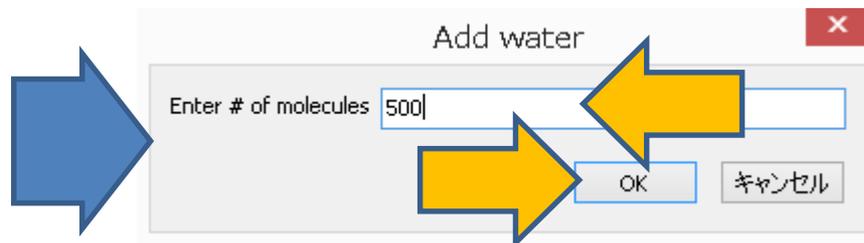
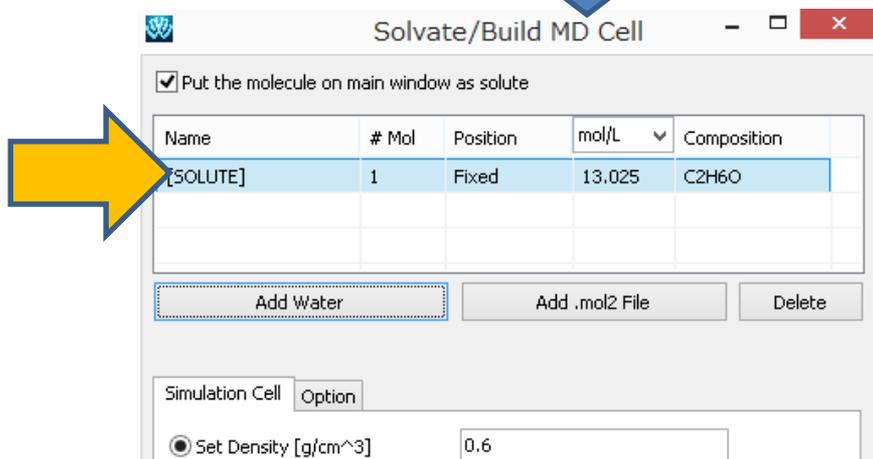
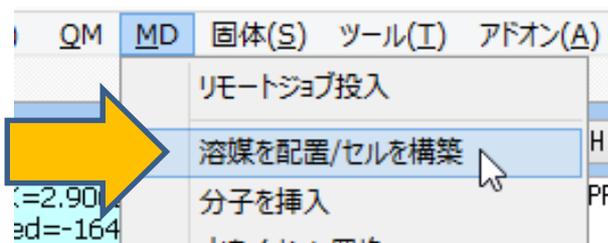
AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF MMOK
Winmostar

1	C	0.00000	1	0.0000	1	0.0000	1	0	0	0
2	C	1.49380	1	0.0000	1	0.0000	1	1	0	0
3	H	1.10000	1	109.0000	1	0.0000	1	1	2	0
4	H	1.10000	1	109.0000	1	120.0000	1	1	2	3
5	H	1.10000	1	109.0000	1	-120.0000	1	1	2	3
6	H	1.10000	1	109.0000	1	-60.0000	1	2	1	3
7	H	1.10000	1	109.0000	1	120.0000	1	2	1	6
8	O	1.45500	1	109.0000	1	-120.0000	1	2	1	6
9	H	0.96000	1	101.7031	1	170.0000	1	8	2	1

9 H 0.96 101.7031 170 8 2 1
 XYZ 1 1 1

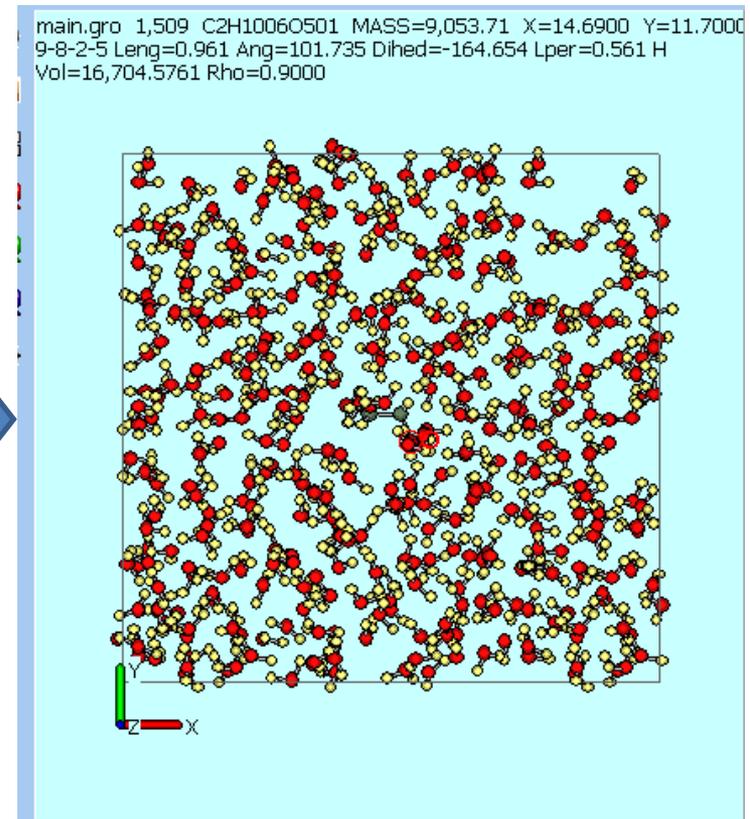
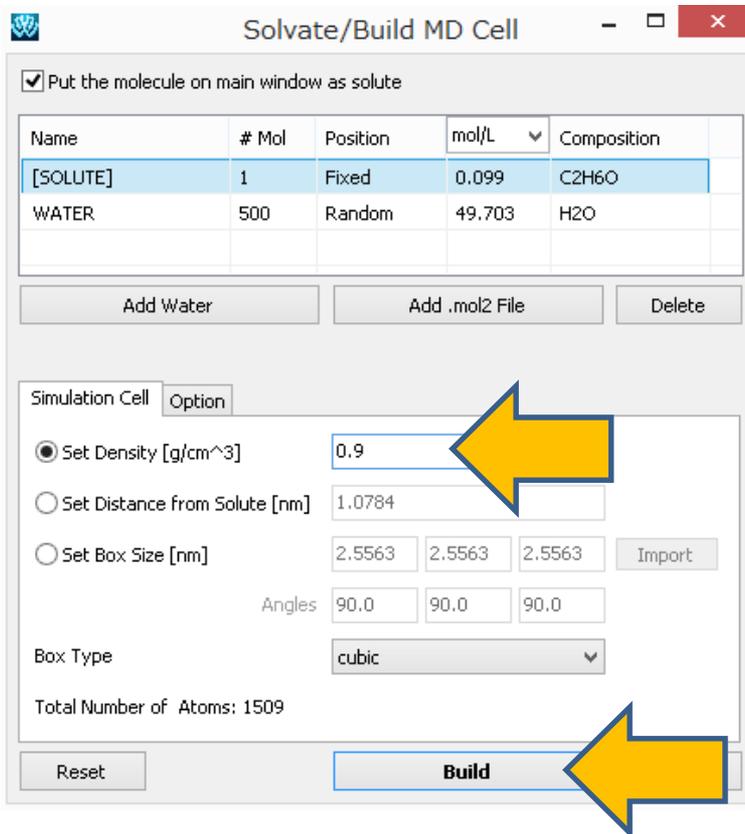
I. 溶液 ($\lambda=0$) のMD計算

[MD]>[溶媒を配置/セルを作成]をクリックする。[Add water]ボタンをクリックする。
[Enter # of molecules]に「500」と入力し[OK]をクリックする。



I. 溶液 ($\lambda=0$) のMD計算

「Set Density」に「0.9」と入力し、「Build」をクリックすると左図のような系が作成される。



I. 溶液 ($\lambda=0$) のMD計算

「MD > Gromacs > 連続ジョブ設定」を選択する。

「User preset」で「Minimize (fast)」を選び「>>> Add >>>」を1回、

「User preset」で「NVT (fast)」を選び「>>> Add >>>」を1回、

「User preset」で「NPT (fast)」を選び「>>> Add >>>」を2回、順番にクリックし、最後に「Set」ボタンを押す。

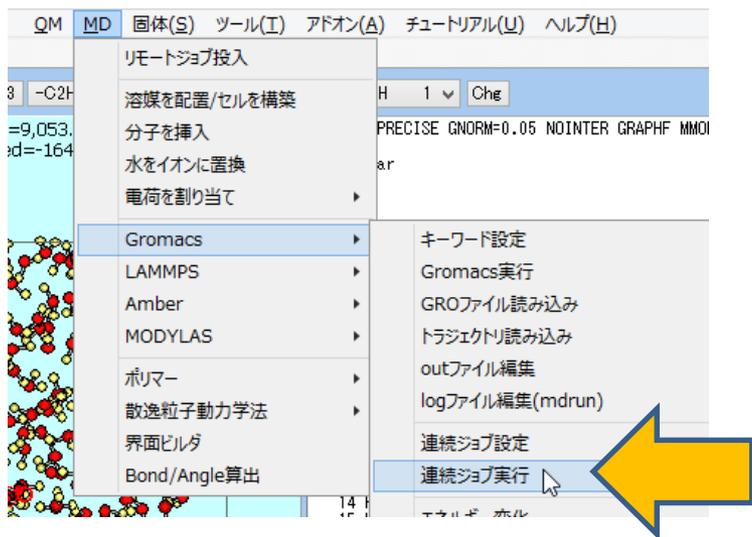
The screenshot shows the 'Sequential Job' configuration window. The 'Job setting' section has 'Use preset' selected and 'NPT (fast)' in the dropdown menu. The 'Add' button is highlighted with a yellow arrow. The settings table is as follows:

#	Setting
0	Preset: Minimize (fast)
1	Preset: NVT (fast)
2	Preset: NPT (fast)
3	Preset: NPT (fast)

The 'Set' button at the bottom right is also highlighted with a yellow arrow.

I. 溶液 ($\lambda=0$) のMD計算

「MD > Gromacs > 連続ジョブ実行」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。ここでは仮に「etohaq.gro」、「etohaq.top」とする。
その後、Winmostar Job Managerが立ち上がり、Cygwin上でGromacsが実行される。

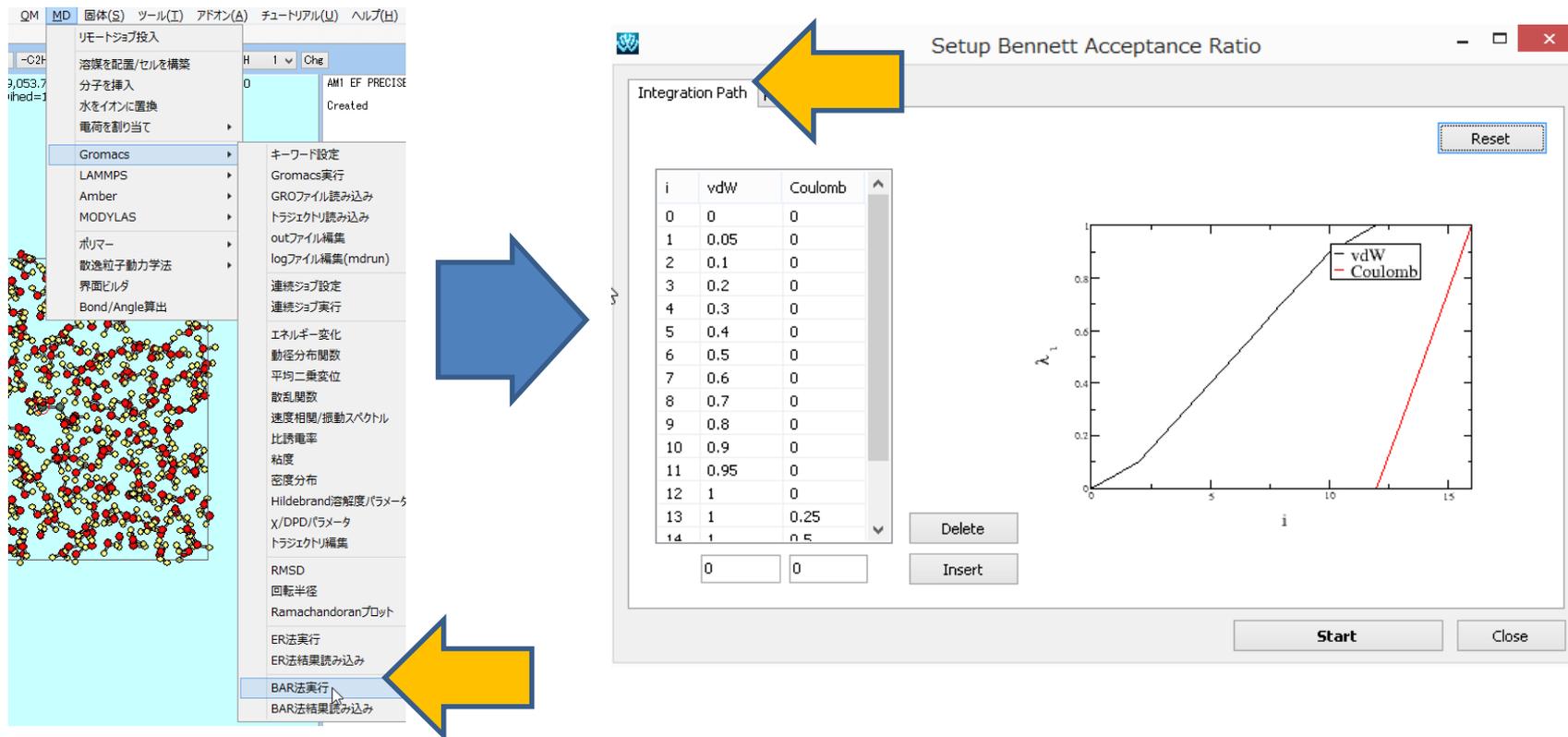


```

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
  
```

II. λ を変化させたMD計算

「MD > Gromacs > BAR法実行」を選択する。
 「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)



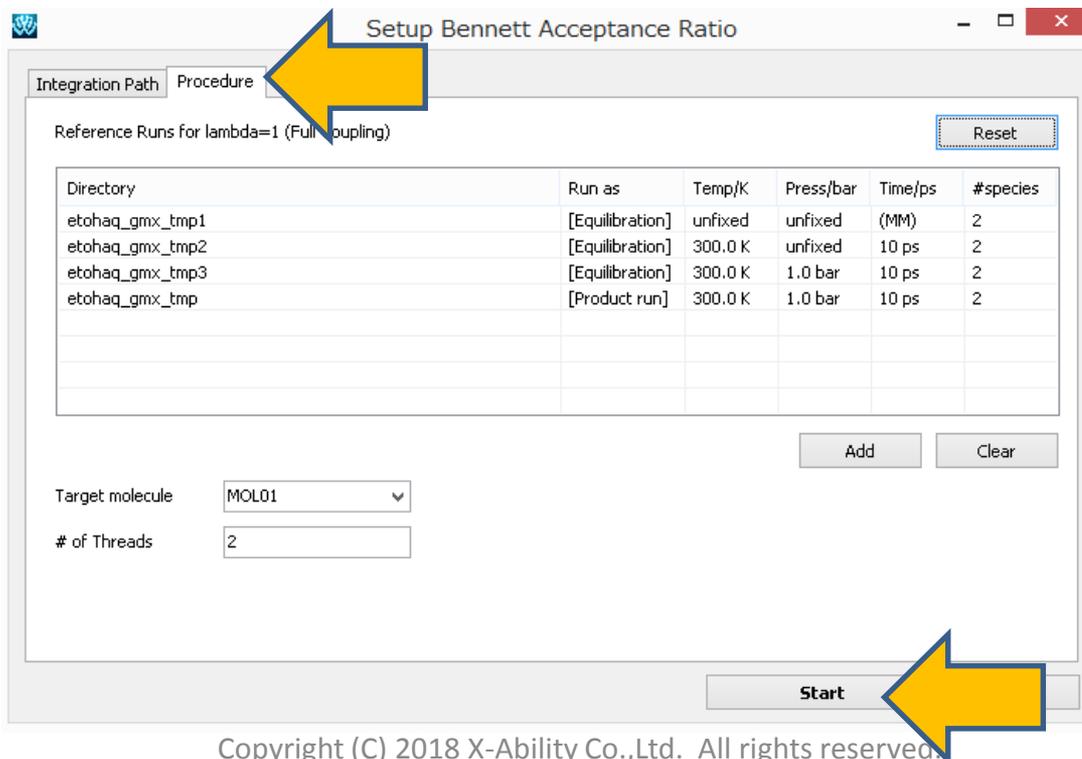
The screenshot shows the X-Ability software interface. On the left, the 'MD' menu is open, and the path 'MD > Gromacs > BAR法実行' is highlighted. A blue arrow points from this menu to the 'Setup Bennett Acceptance Ratio' dialog box on the right. The dialog box has the 'Integration Path' tab selected, which contains a table of parameters for the BAR method. A yellow arrow points to the 'Integration Path' tab, and another yellow arrow points to the 'BAR法実行' option in the menu.

i	vdW	Coulomb
0	0	0
1	0.05	0
2	0.1	0
3	0.2	0
4	0.3	0
5	0.4	0
6	0.5	0
7	0.6	0
8	0.7	0
9	0.8	0
10	0.9	0
11	0.95	0
12	1	0
13	1	0.25
14	1	0.5

The dialog box also features a graph of λ_1 vs i with two curves: a black curve for 'vdW' and a red curve for 'Coulomb'. The 'vdW' curve starts at (0,0) and increases to 1.0 at $i=12$. The 'Coulomb' curve starts at $i=12$ and increases to 0.5 at $i=14$. Buttons for 'Delete', 'Insert', 'Start', 'Close', and 'Reset' are visible.

II. λ を変化させたMD計算

「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、このチュートリアルではそのまま使用する。そして「Start」ボタンを押し、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。
 ここでは仮に「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

全ての λ での計算の終了後、「MD>Gromacs>BAR法結果読み込み」を選択する。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。すると、結果表示画面が出現し、溶媒和自由エネルギーが表示される。

The image shows a software interface with a menu on the left and a plot window on the right. The menu path is: MD > Gromacs > BAR法結果読み込み. The plot window, titled "Solvation Free Energy (BAR)", displays the following data:

Path	Solvation Free Energy	Unit
	-2.96 ± 0.43	kcal/mol

The plot shows $\Delta G / \text{kJ/mol}$ on the y-axis (ranging from -15 to 10) versus i on the x-axis (ranging from 0 to 15). The curve starts at 0, dips to a minimum of approximately -7 at $i \approx 4$, rises to a peak of approximately 8 at $i \approx 11$, and then drops sharply to approximately -12 at $i = 15$.

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!