

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)

V8.000

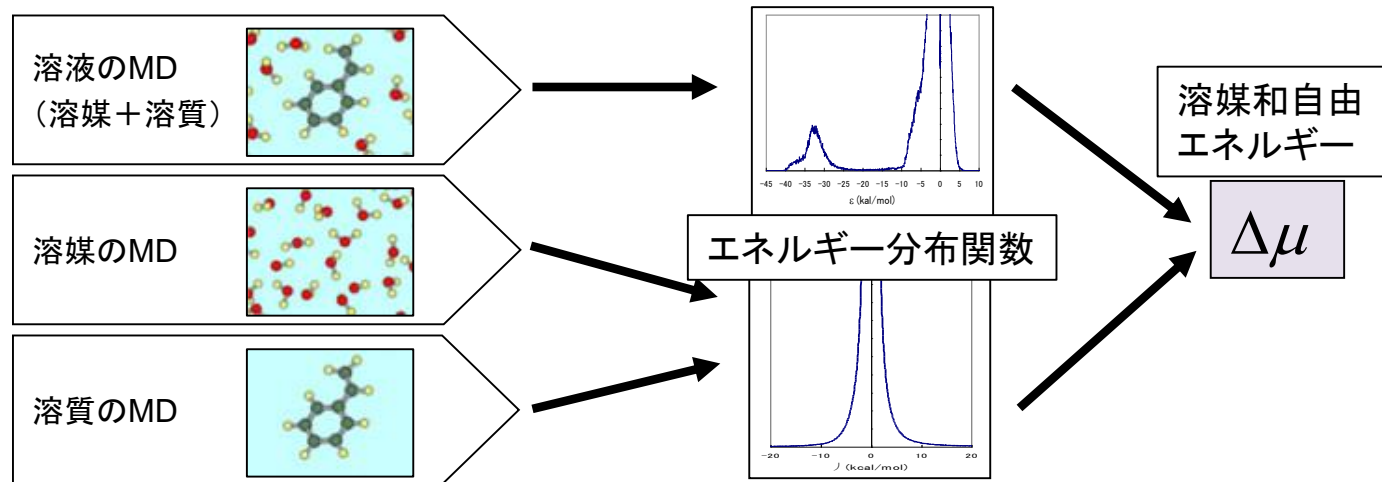
株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2017/10/18

概要

- 水中のエタノール分子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。



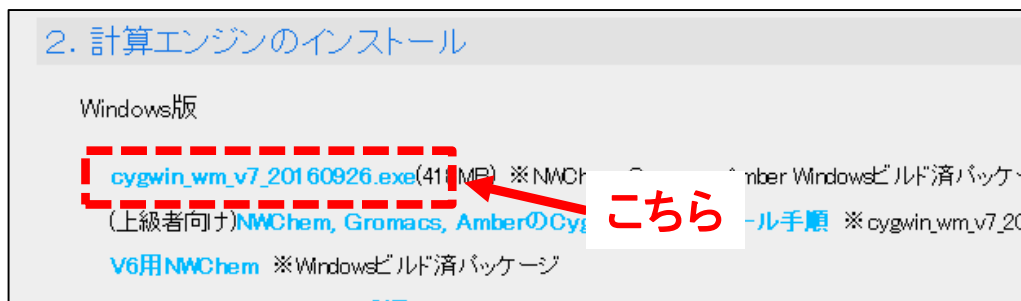
注意点:

- 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。座標の出力頻度、数も結果に影響します。
- 系のサイズ、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。
- 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。

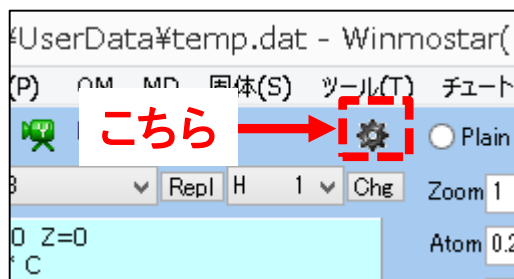
動作環境設定

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

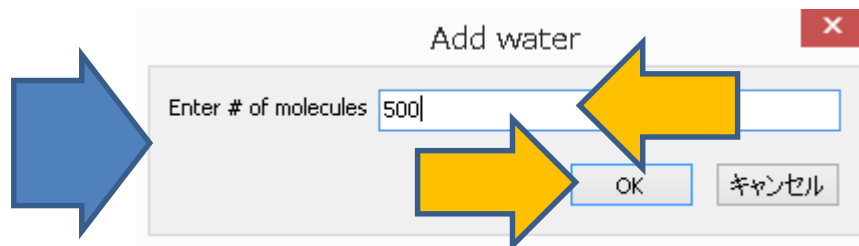
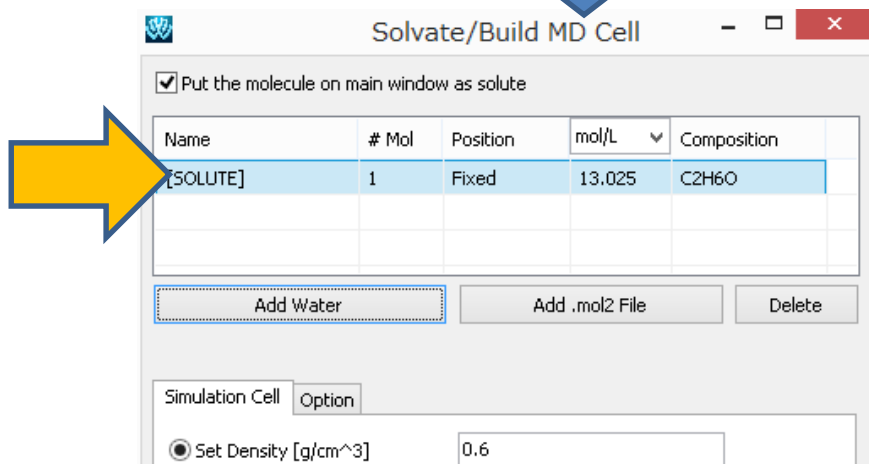
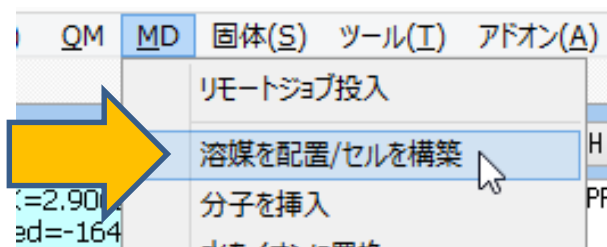
AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF MMOK
Winmostar

| | | | | | | | | | | |
|---|---|---------|---|----------|---|-----------|---|---|---|---|
| 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

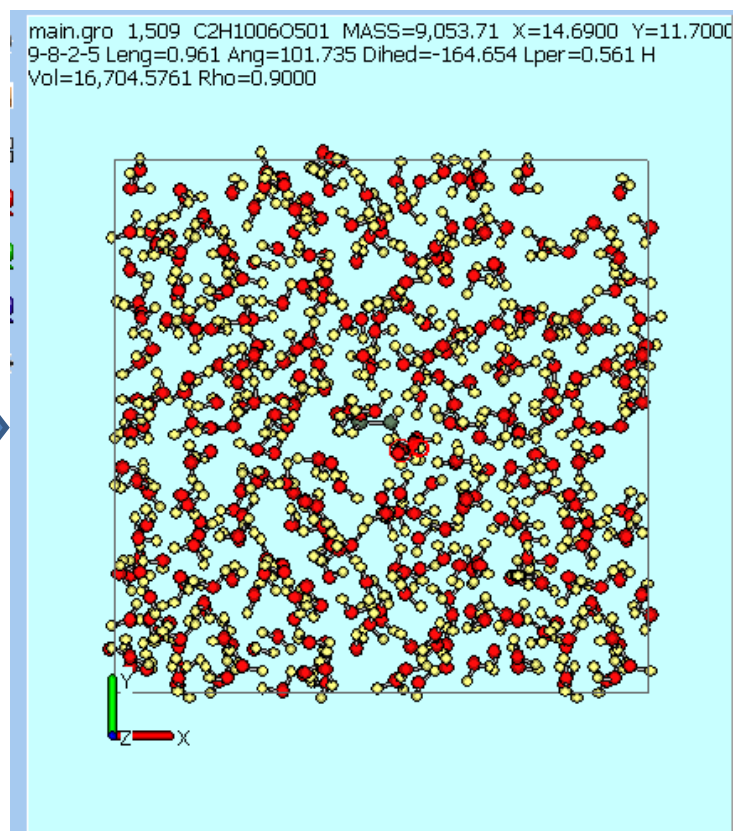
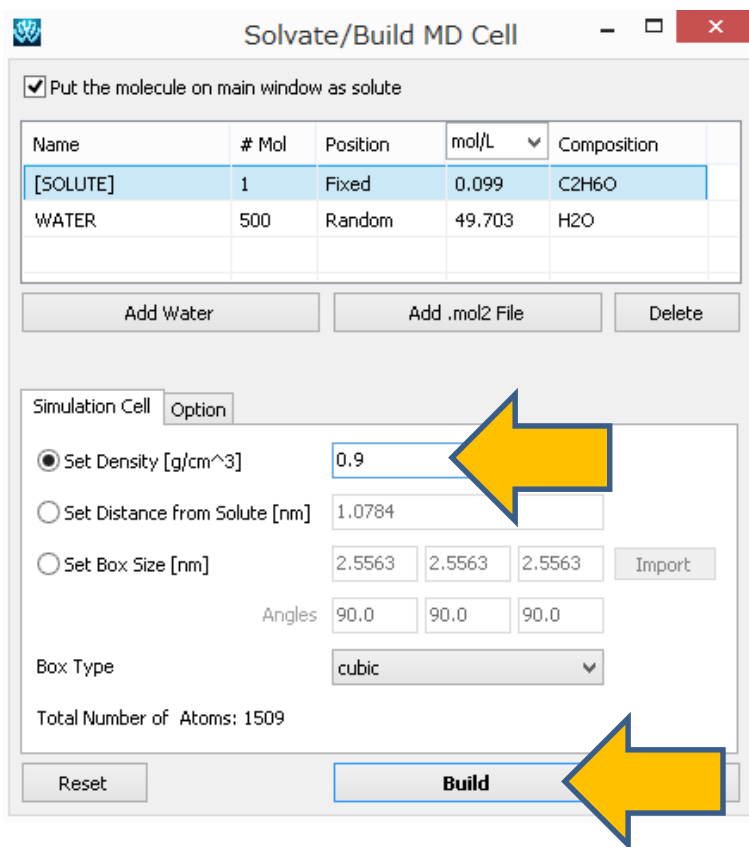
I. 溶液のMD計算

[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. 溶液のMD計算（平衡化）

「MD > Gromacs > 連続ジョブ設定」を選択する。

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

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

「Use preset」で「NPT (fast)」を選び「>>> Add >>>」を1回、順番にクリックし、最後に「Set」ボタンを押す。

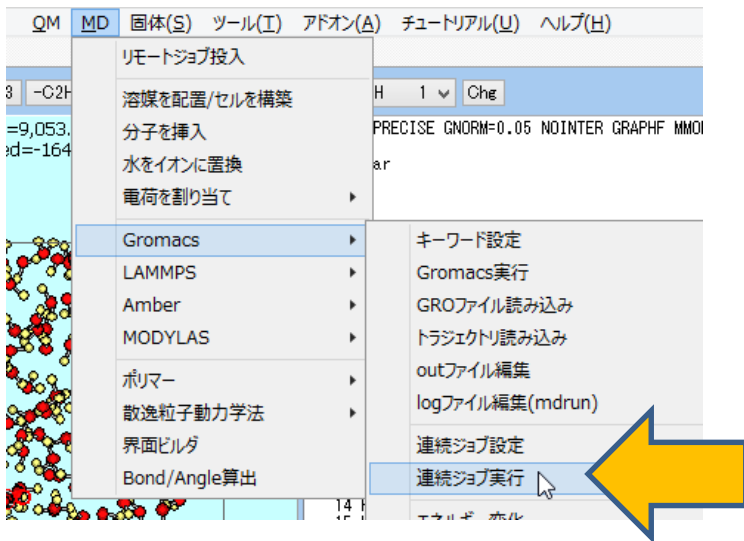
The screenshot shows the 'Sequential Job' configuration window. The 'Job setting' section has 'Use preset' selected and 'NPT (fast)' in the dropdown menu. The 'Add' button is highlighted with a yellow arrow. The table below shows the following settings:

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

The 'Set' button at the bottom right is also highlighted with a yellow arrow. A blue arrow points from the '連続ジョブ設定' menu item in the 'MD' menu to the 'Sequential Job' window.

I. 溶液のMD計算（平衡化）

「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。



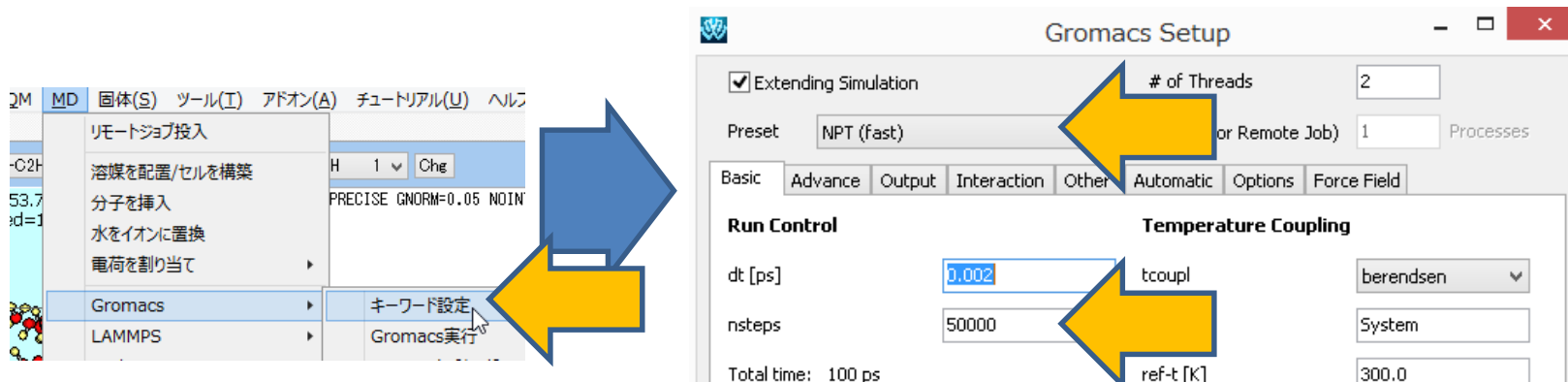
```

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
    
```


I. 溶液のMD計算（本計算）

「MD > Gromacs > キーワード設定」を選択する。

「Preset」に「NPT (fast)」を選択し、「Basic」タブの「nsteps」を「50000」に変更する。



I. 溶液のMD計算(本計算)

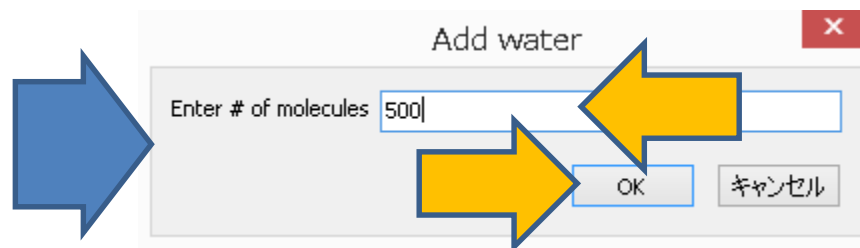
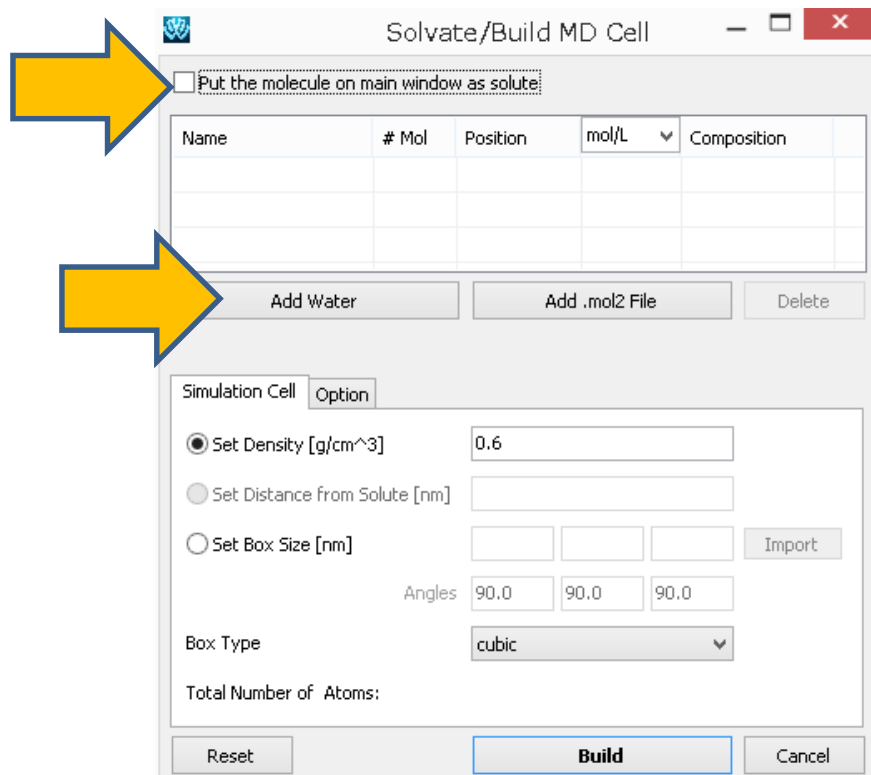
「Output」タブの「nstxout-compressed」を「5」に変更し、「OK」ボタンを押す。
次に、「MD>Gromacs>Gromacs実行」を選択する。

The image shows a software interface with two main parts. On the left is a dialog box titled 'Output Control' with tabs for 'Basic', 'Advance', and 'Output'. The 'Output' tab is selected. It contains several input fields: 'nstxout' (100), 'nstvout' (100), 'nstenergy' (10), 'nstxout-compressed' (5), and 'compressed-x-grps' (a dropdown menu). Below these fields is the text 'Estimated trr file size: 18 MB'. At the bottom of the dialog are buttons for 'Reset', 'Load', 'Save', and 'OK'. A yellow arrow points to the 'Output' tab, another yellow arrow points to the 'nstxout-compressed' field, and a third yellow arrow points to the 'OK' button. On the right is a menu with 'MD' selected. The menu items are: 'リモートジョブ投入', '溶媒を配置/セルを構築', '分子を挿入', '水をイオンに置換', '電荷を割り当て', 'Gromacs', 'LAMMPS', and 'Amber'. The 'Gromacs' item is expanded, showing sub-items: 'キーワード設定', 'Gromacs実行', and 'GROファイル読み込み'. A yellow arrow points to the 'Gromacs実行' sub-item. A blue arrow points from the 'Output Control' dialog to the 'MD' menu.

II. 溶媒のMD計算

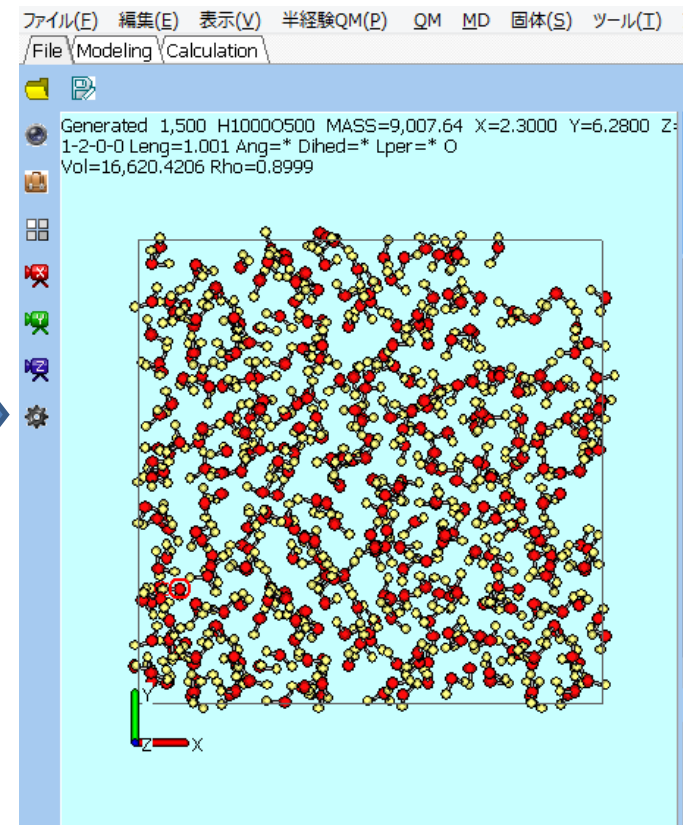
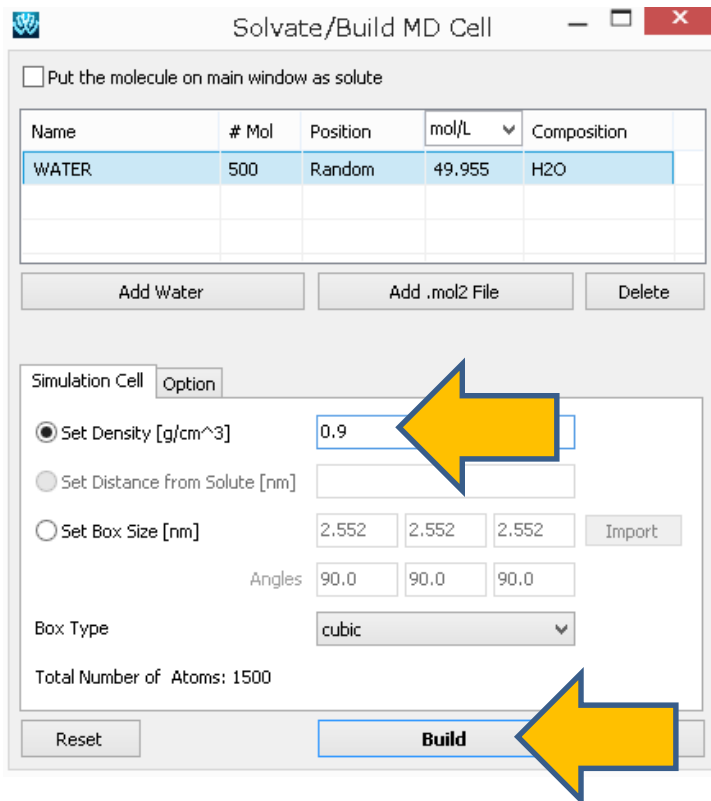
[MD]>[溶媒を配置/セルを作成]をクリックする。

[Put the molecule on main window as solute]のチェックを外し、[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。



II. 溶媒の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。



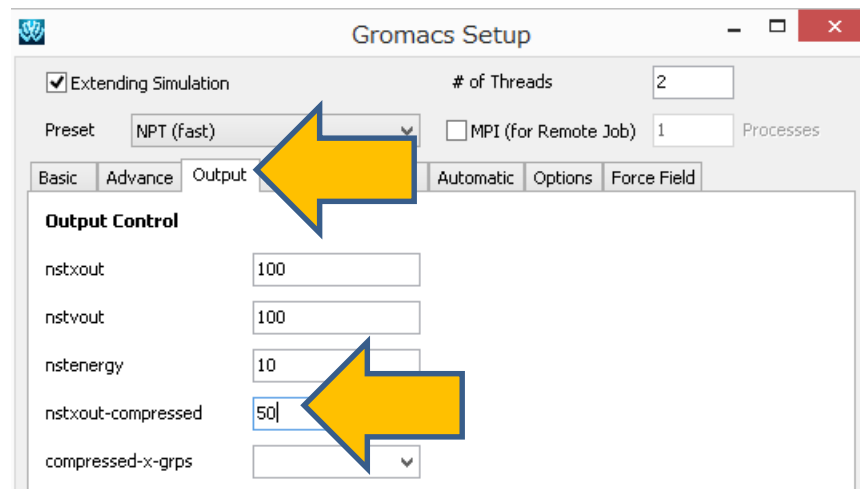
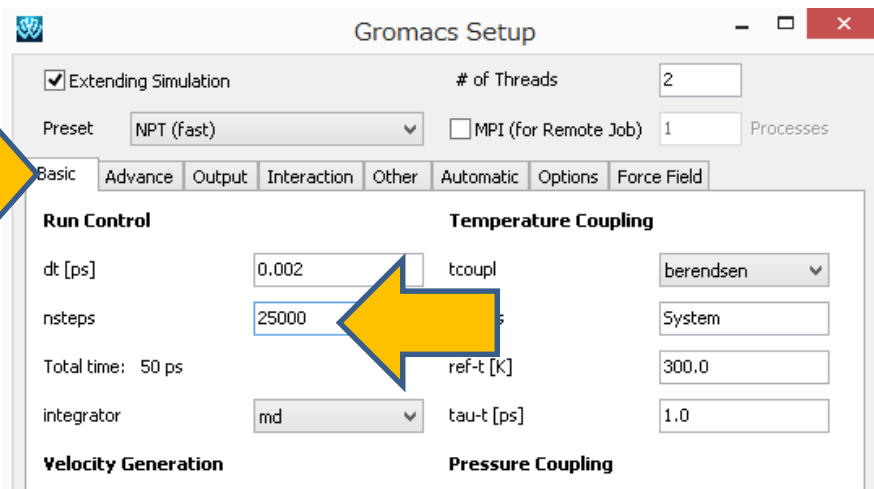
II. 溶媒のMD計算（平衡化&本計算）

「MD>Gromacs>連続ジョブ実行」を選択する。先ほどとは異なる名前で、座標ファイル（拡張子: gro）とトポロジーファイル（拡張子: top）を保存する。ここでは仮に「h2o.gro」、「h2o.top」とする。

計算終了後、「MD>Gromacs>キーワード設定」を選択する。

「Basic」タブの「nsteps」を「25000」に、「Output」タブの「nstxout-compressed」を「50」に変更して「OK」をクリックする。

最後に、「MD>Gromacs>Gromacs実行」を選択する。



III. 溶質のMD計算

「ファイル>新規」を選択し、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。

The screenshot shows the software interface with the 'File' menu open. The '新規(N)' (New) option is highlighted with a yellow arrow. A blue arrow points from the '新規(N)' option to the main window, which displays a 3D ball-and-stick model of an ethanol molecule. The molecule consists of two carbon atoms (green), six hydrogen atoms (yellow), and one oxygen atom (red). The oxygen atom is bonded to two hydrogen atoms, one of which is circled in red. The main window also shows a table of atom coordinates and a 3D coordinate system (X, Y, Z).

| Atom | Element | X | Y | Z | Occupancy | Charge | Mass |
|------|---------|---------|---|----------|-----------|-----------|--------|
| 1 | C | 0.00000 | 1 | 0.0000 | 1 | 0.0000 | 12.011 |
| 2 | C | 1.45380 | 1 | 0.0000 | 1 | 0.0000 | 12.011 |
| 3 | H | 1.10000 | 1 | 109.0000 | 1 | 0.0000 | 1.008 |
| 4 | H | 1.10000 | 1 | 109.0000 | 1 | -120.0000 | 1.008 |
| 5 | H | 1.10000 | 1 | 109.0000 | 1 | -120.0000 | 1.008 |
| 6 | H | 1.10000 | 1 | 109.0000 | 1 | -80.0000 | 1.008 |
| 7 | H | 1.10000 | 1 | 109.0000 | 1 | 120.0000 | 1.008 |
| 8 | O | 1.45500 | 1 | 109.0000 | 1 | -120.0000 | 15.999 |
| 9 | H | 0.95000 | 1 | 101.7031 | 1 | 170.0000 | 1.008 |

III. 溶質のMD計算（平衡化）

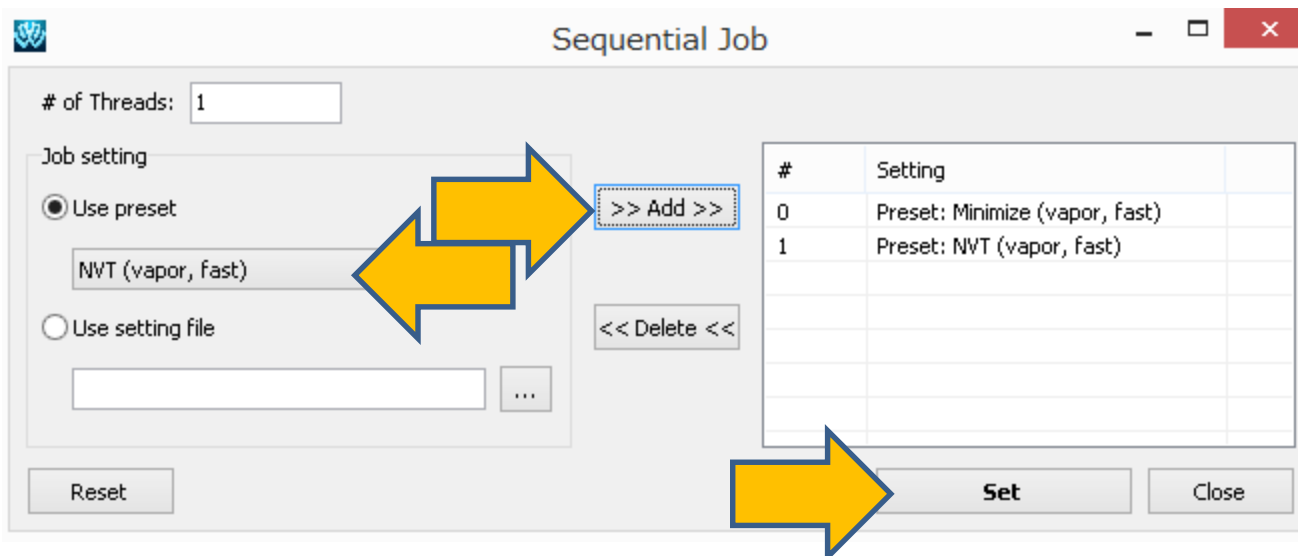
「MD > Gromacs > 連続ジョブ設定」を選択する。

「Reset」ボタンを押して設定をリセットし、

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

「Use preset」で「NVT (vapor, fast)」を選び「>>> Add >>>」を1回、順番にクリックし、最後に「Set」ボタンを押す。

「MD > Gromacs > 連続ジョブ実行」を選択する。先ほどとは異なる名前で、座標ファイル(拡張子: gro)とトポロジーファイル(拡張子: top)を保存する。ここでは仮に「etoh.gro」、「etoh.top」とする。



III. 溶質のMD計算（本計算）

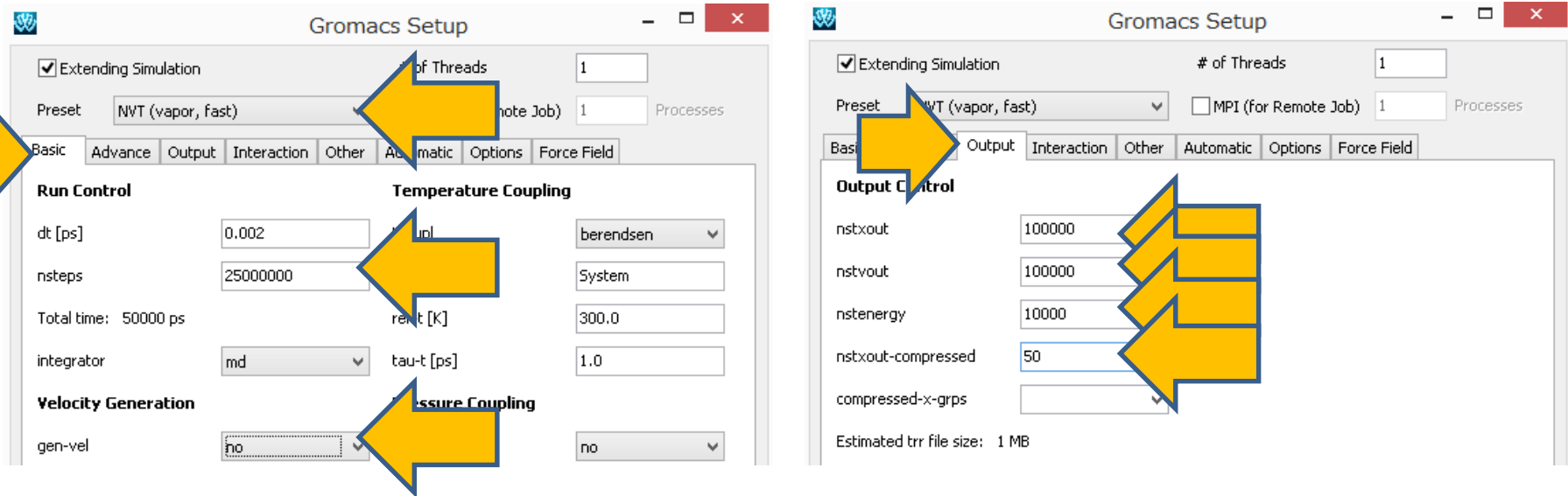
計算終了後、「MD>Gromacs>キーワード設定」を選択する。

「Preset」に「NVT (vapor, fast)」を選択し、

「Basic」タブの「nsteps」を「25000000」に、「gen-vel」を「no」に変更する。

「Output」タブの「nstxout」と「nstvout」を「100000」に、「nstenergy」を「10000」に、「nstxout-compressed」を「50」に変更して「OK」をクリックする。

最後に、「MD>Gromacs>Gromacs実行」を選択する。



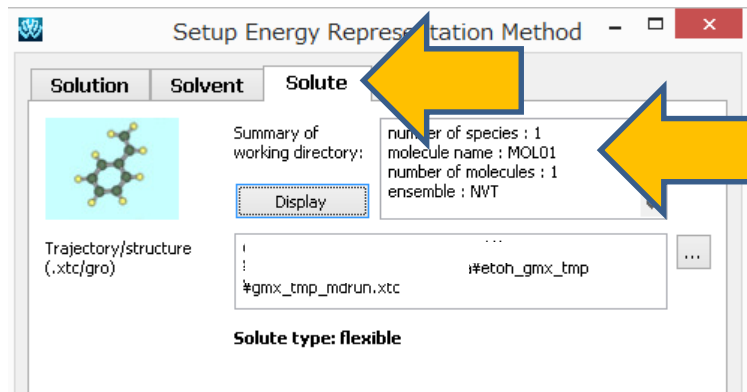
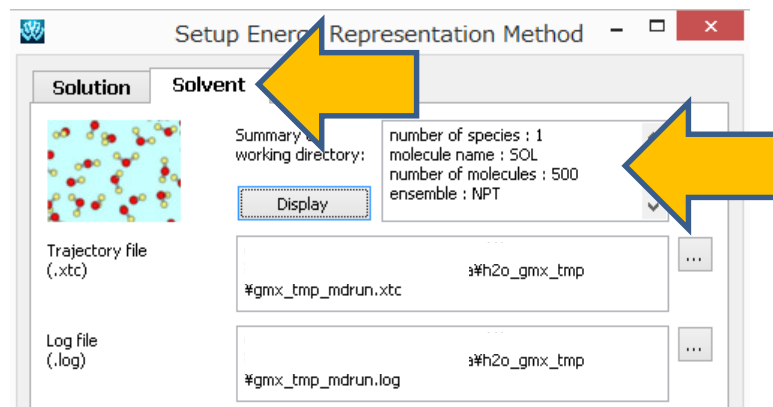
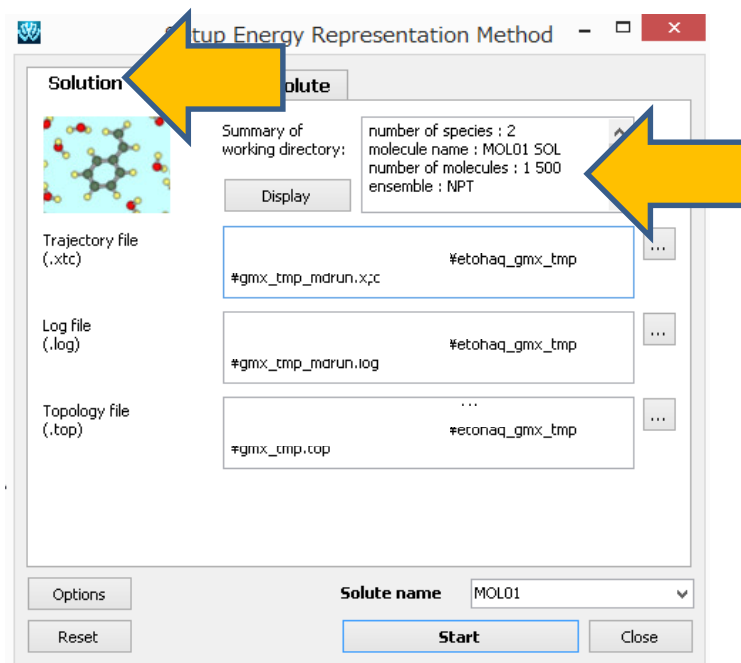
IV. ER法実行

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、「ファイル>フォルダを開く」で開くことができる。次に、「MD>Gromacs>ER法実行」を選択する。

The image shows a file explorer window on the left containing a directory of files related to molecular dynamics simulations, including folders like 'etoh_gmx_tmp', 'h2o_gmx_tmp', and 'etoh_top_tmp', and files like 'etoh.gro', 'h2o.gro', and 'etoh.gro.bat'. A large blue arrow points from this directory to a software application window on the right. The software window shows a menu structure where 'MD' is selected, followed by 'Gromacs', and finally 'ER法実行' (ER Method Execution) is highlighted with a yellow arrow.

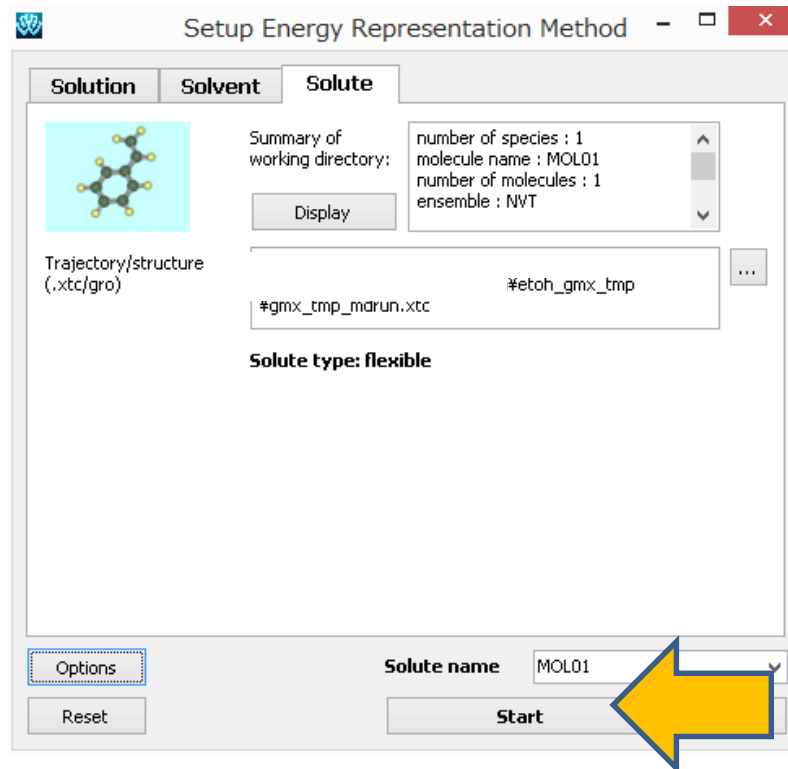
IV. ER法実行

「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。
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。



IV. ER法実行

「Start」ボタンを押し、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。



V. 結果の表示

計算終了後、「MD>Gromacs>ER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、「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。
 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 screenshot shows the X-Ability software interface. On the left, the 'MD' menu is open, and the path 'MD > Gromacs > ER法結果読み込み' is highlighted. A yellow arrow points from this menu item to the 'Solvation Free Energy (ER)' window on the right. The window displays the following data:

| Parameter | Value | Standard Error (twice) | Unit |
|-----------------------|----------|------------------------|----------|
| Solvation Free Energy | -3.4248 | 0.2235 | kcal/mol |
| Solvation Energy | -18.9142 | 0.4631 | kJ/mol |

Below the data is a histogram showing the distribution of energy (E / kcal/mol) for the 'Solution' (black line) and 'Reference' (red line). The x-axis ranges from -5 to 10 kcal/mol, and the y-axis is 'Histogram' from 0 to 0.2. The 'Solution' distribution is broader and centered around 0 kcal/mol, while the 'Reference' distribution is narrower and centered around 1 kcal/mol. A blue arrow points from the menu to the histogram area.

At the bottom of the window, there are 'Log', 'Excel', and 'Close' buttons, and a 'Citations' section with references to N. Matubayasi and M. Nakahara, J. Chem. Phys. 113, 6070-6081 (2000) and J. Chem. Phys. 117, 3605-3616 (2002).

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!