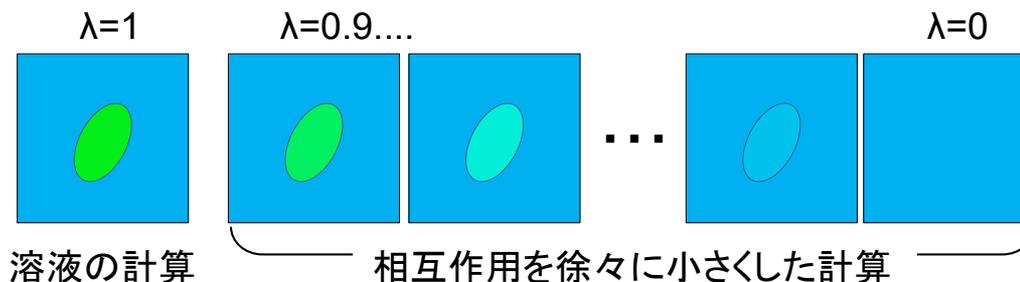


Winmostar™ チュートリアル  
Gromacs  
溶媒和自由エネルギー (BAR法)  
V9.2.1

株式会社クロスアビリティ  
2019年5月10日

## 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 $\lambda$ 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。



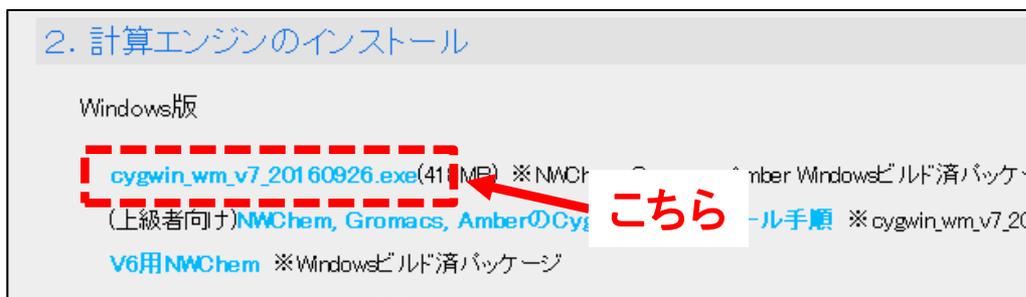
### 注意点:

- 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。
- $\lambda$ 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。

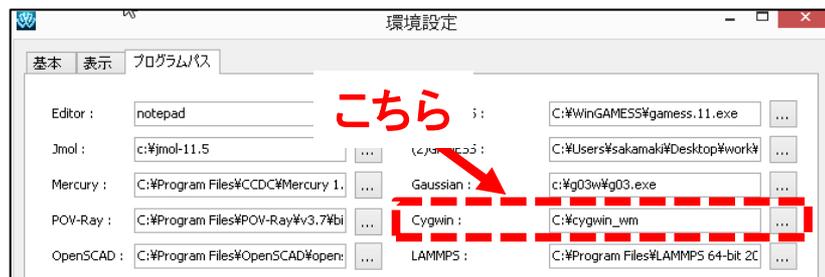
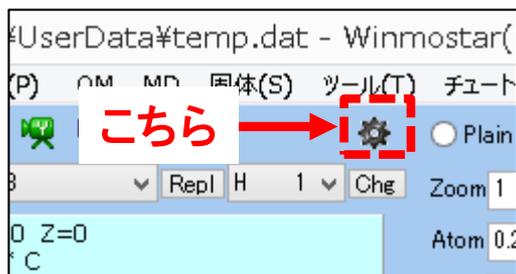
# 動作環境設定

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](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。

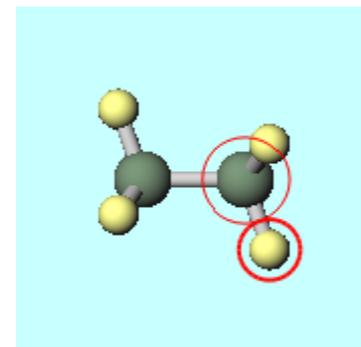
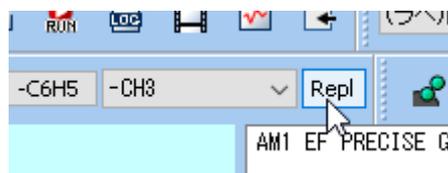
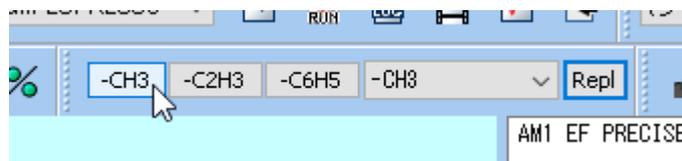


- デフォルトではC:\直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」>「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



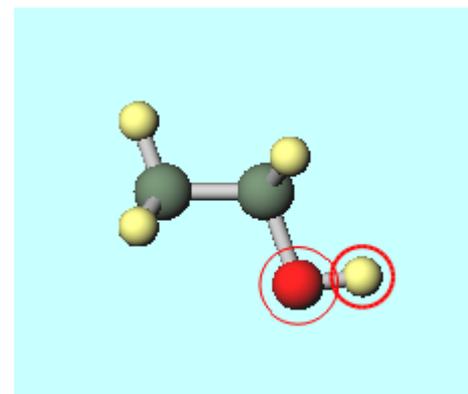
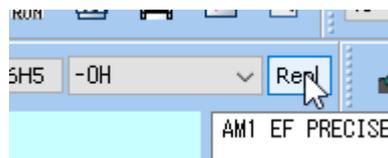
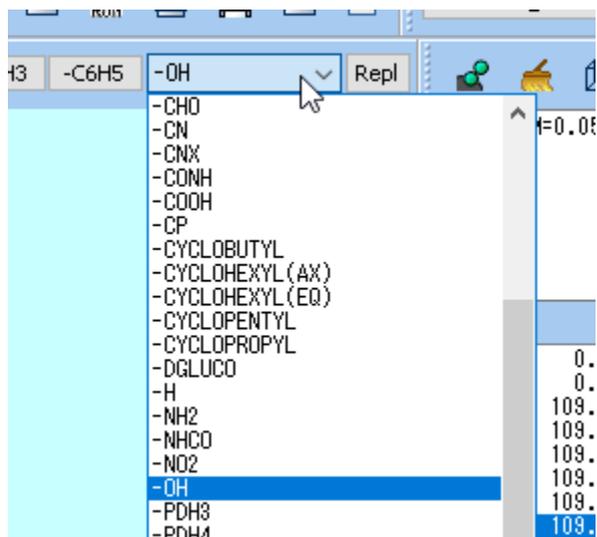
# I. 溶液 ( $\lambda=0$ ) のMD計算

ファイル | 新規をクリックする。-CH3ボタンをクリックしてからReplボタンを2回クリックする。



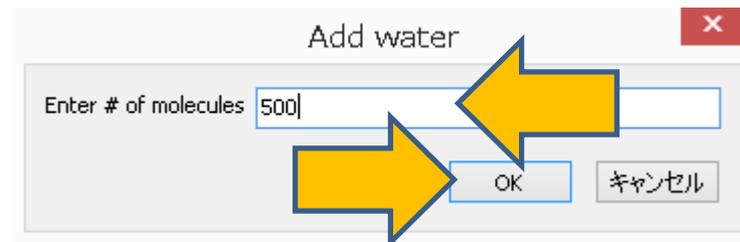
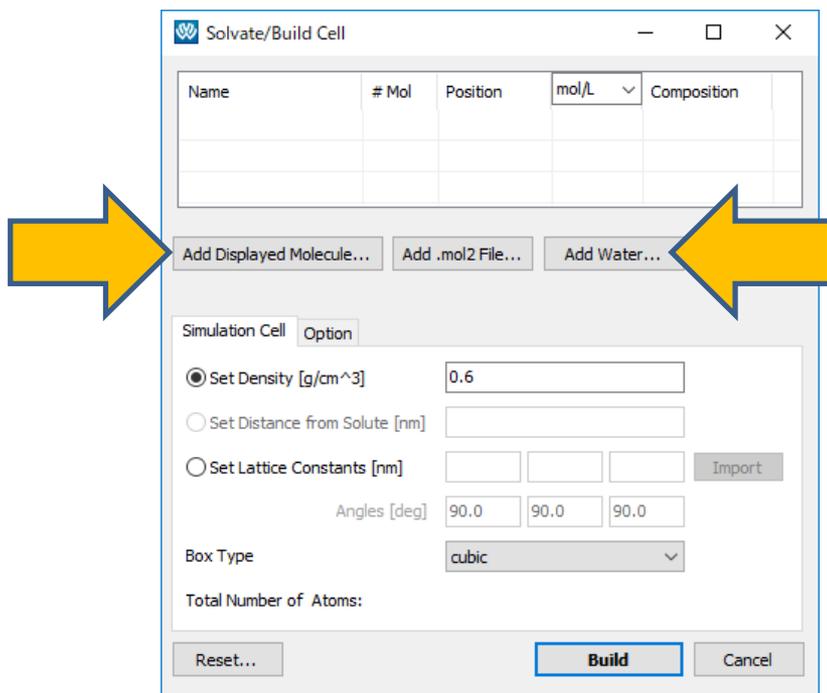
# I. 溶液 ( $\lambda=0$ ) のMD計算

フラグメントを選択メニューで-OHを選択し、Repl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。



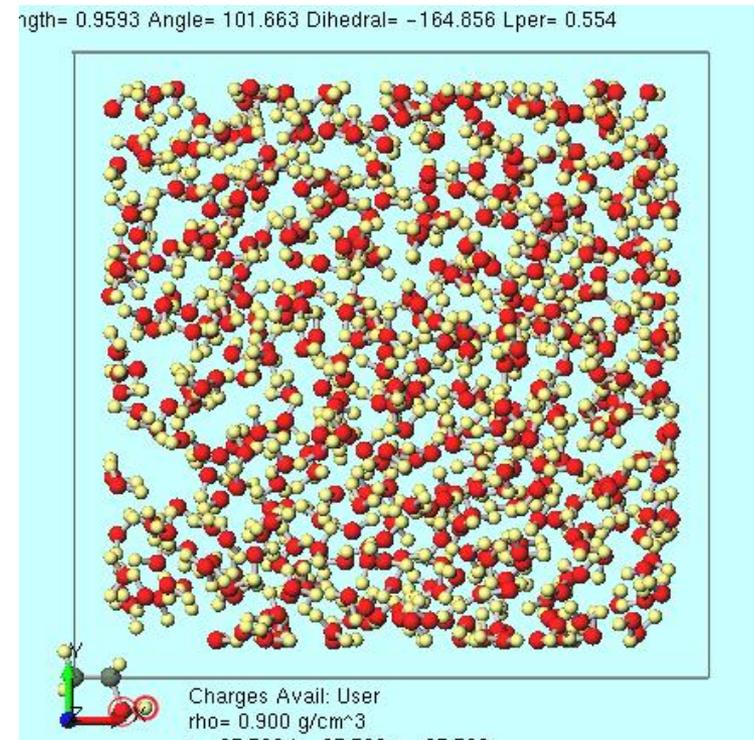
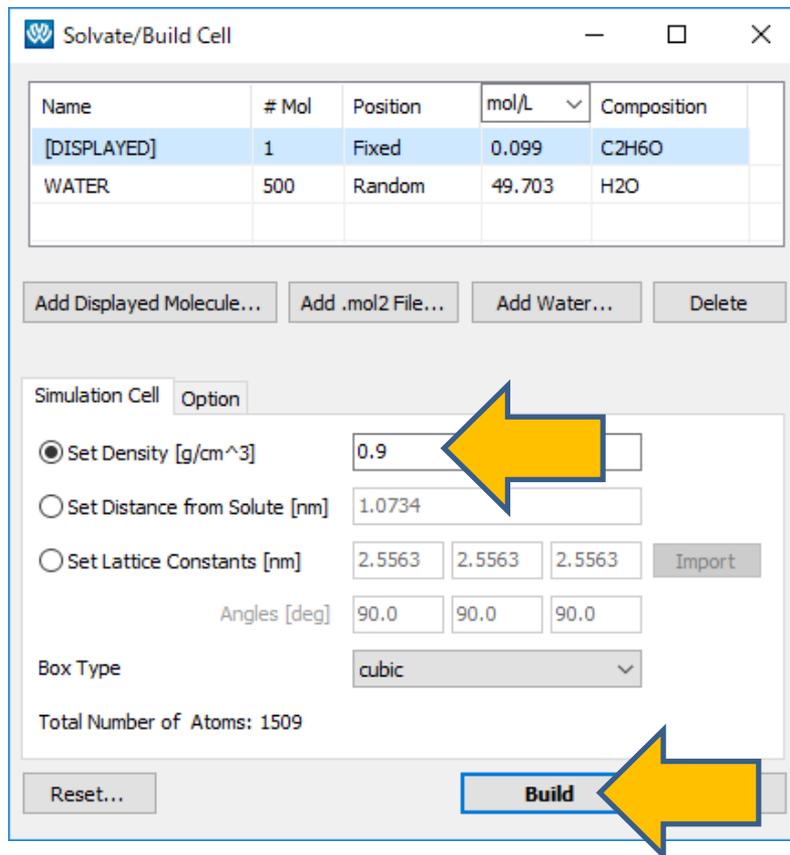
# 1. 溶液 ( $\lambda=0$ ) のMD計算

1.  (溶媒を配置/セルを作成) 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MD計算

1. **Set Density**に**0.9**と入力する。
2. **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

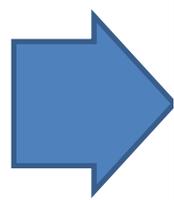
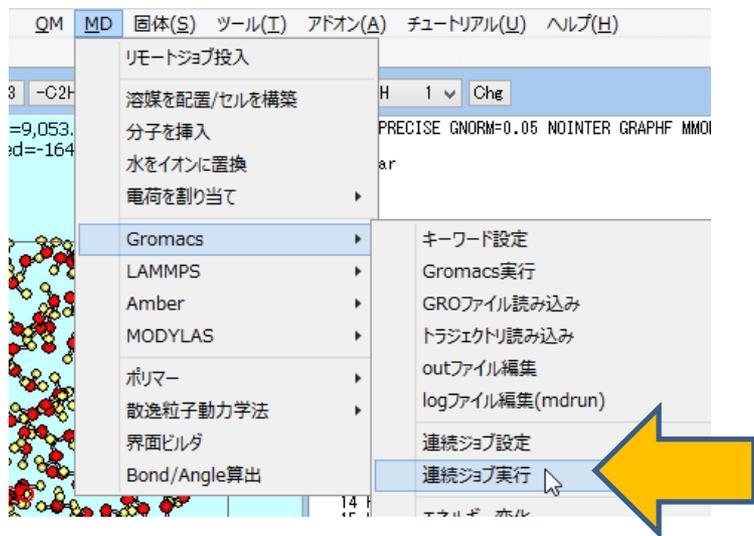
1. MD | Gromacs | 連続ジョブ設定をクリックする。
2. User presetでMinimize (fast)を選び>>> Add >>>を1回クリックする。
3. User presetでNVT (fast)を選び>>> Add >>>を1回クリックする。
4. User presetでNPT (fast)を選び>>> Add >>>を2回クリックする。
5. Setをクリックする。

The screenshot shows the 'Sequential Job' configuration window. The 'Job setting' section has 'Use preset' selected, and the dropdown menu shows 'NPT (fast)'. The 'Presets' table is as follows:

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

# I. 溶液 ( $\lambda=0$ ) のMD計算

1. MD | Gromacs | 連続ジョブ実行をクリックする。
2. 座標ファイル名とトポロジーファイル名はそれぞれetohaq.gro、etohaq.topとする。



```

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= 4.56777e+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. $\lambda$ を変化させたMD計算

1. MD | Gromacs | BAR法実行をクリックする。
2. Integration Pathタブでは、 $\lambda$  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)

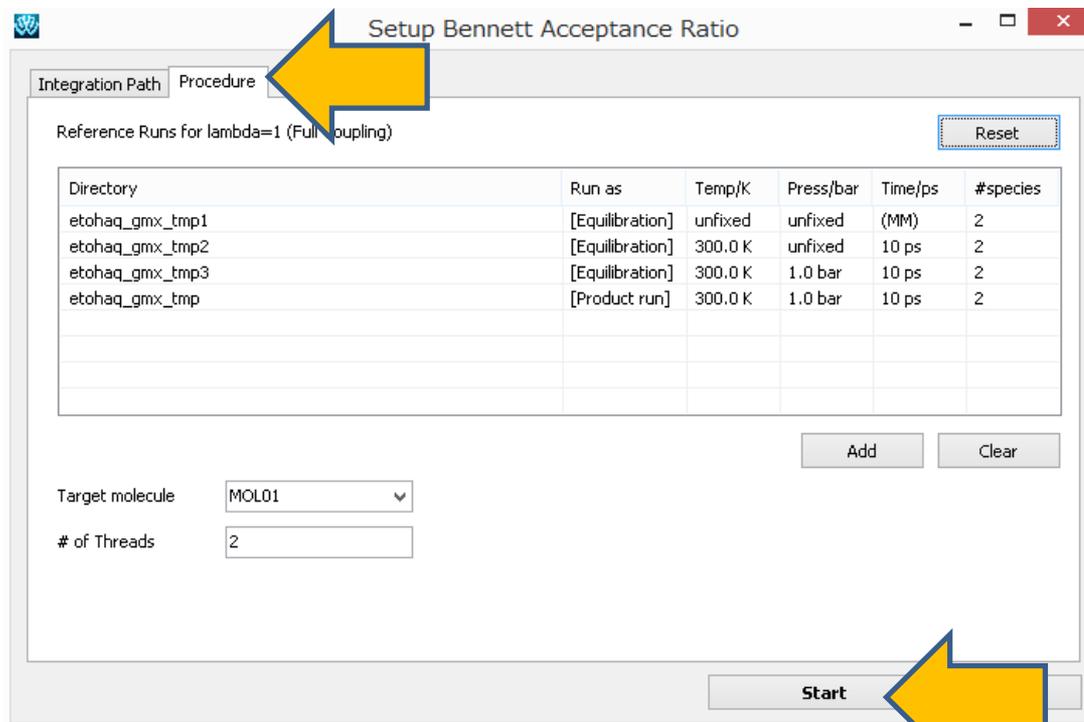
The screenshot shows the 'Setup Bennett Acceptance Ratio' dialog box. The 'Integration Path' tab is selected, displaying a table of lambda values for vdW and Coulomb interactions. A graph on the right shows the lambda values for vdW and Coulomb interactions over time. A blue arrow points from the 'BAR法実行' option in the main menu to the dialog box, and a yellow arrow points from the 'Integration Path' tab to the table.

| 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 graph shows the lambda values for vdW (blue line) and Coulomb (orange line) interactions over time. The X-axis is labeled 'i' and ranges from 0 to 15. The Y-axis is labeled ' $\lambda_j$ ' and ranges from 0 to 1. The vdW curve starts at 0 and increases to 1. The Coulomb curve starts at 0 and increases to 0.5 at i=14.

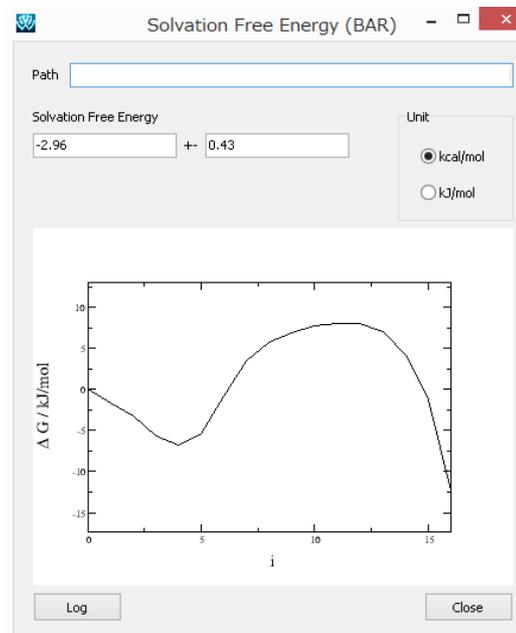
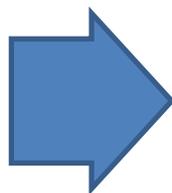
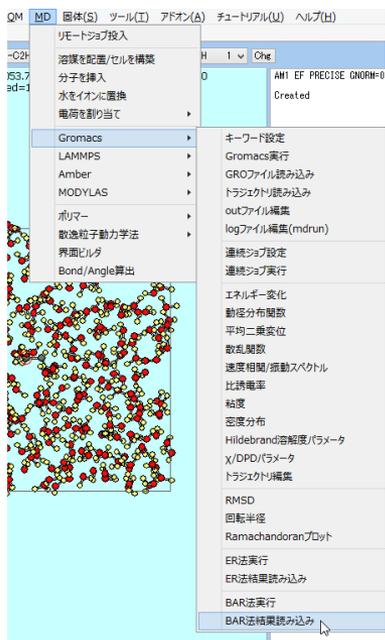
## II. $\lambda$ を変化させたMD計算

1. **Procedure**タブでは、各 $\lambda$ 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 $\lambda$ 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。



<https://www.facebook.com/X-Ability-CoLtd-168949106498088/>

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.さんや他の友

アカウント登録 ログイン

**X-Ability**  
クロスアビリティ

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

山口 達明

X-Ability Co.,Ltd.  
11月14日 20:30 · 公開

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\\_au\\_detailpage\\_o00\\_s00...](http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_au_detailpage_o00_s00...)

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 · 公開