

# Winmostar<sup>TM</sup> 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) <sup>V9.2.1</sup>

# 株式会社クロスアビリティ 2019年5月10日



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 場合はあります。
- "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。

<u>https://winmostar.com/jp/manual\_jp.html</u>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。

2. 計算エンジンのインストール	
Windows版	
cygwin_wm_v7_20160926.exe(41 MP) ※ NMCF (上級者向け)NWChem, Gromacs, AmberのCyg こち	<sup>*</sup> mber Windowsビルド済パッケ~ -ル手順 ※cygwin_wm_v7_20
V6用NWChem ※Windowsビルド済パッケージ	

 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 (C) 2019 X-Ability Co., Ltd. All rights reserved.



#### I. 溶液の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。





溶液のMD計算 Ι.

#### 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。





## I. 溶液の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。

Name	# Mol	Position	mol/L 🗸 i	Composition
Add Displayed Mole	ecule Add	.mol2 File	Add Water	
Simulation Cell Or	otion			
Set Density [a]	cm^3]	0.6		
C occocharty [g/	un oj			
0 0 - 1 D'- 1	om Solute [nm]			
O Set Distance fr				
Set Distance fro	stants [nm]			Imp
<ul> <li>Set Distance from</li> <li>Set Lattice Con</li> </ul>	stants [nm] Angles [deg]	90.0	90.0 90.0	Imp
<ul> <li>Set Distance from</li> <li>Set Lattice Con</li> <li>Box Type</li> </ul>	astants [nm] Angles [deg]	90.0	90.0 90.0	Imp





I. 溶液のMD計算

- 1. Set Densityに0.9と入力する。
- 2. Buildをクリックすると左図のような系が作成される。

🥺 Solvate/Build Cell				_		×		
Name	# Mol	Position	mol/L ~	Comp	osition			
[DISPLAYED]	1	Fixed	0.099	C2H6	0			
WATER	500	Random	49.703	H2O				
Add Displayed Molecule Add .mol2 File Add Water Dele								
Simulation Cell Option								
• Set Density [g/cm^3]	]	0.9						
O Set Distance from So	lute [nm]	1.0734						
O Set Lattice Constants	s [nm]	2.5563 2.	5563 2.5	5563	Import			
Ang	jles [deg]	90.0 90	).0 90	.0				
Box Type		cubic		$\sim$				
Total Number of Atoms: 1509								
Reset		[	Build	$\triangleleft$				

ngth= 0.9593 Angle= 101.663 Dihedral= -164.856 Lper= 0.554



Copyright (C) 2019 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved.



# . 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. Use presetでMinimize (fast)を選び>>> Add >>>を1回クリックする。
- 3. Use presetでNVT (fast)を選び>>> Add >>>を1回クリックする。
- 4. Use presetでNPT (fast)を選び>>> Add >>>を1回クリックする。
- 5. Setをクリックする。





## I. 溶液のMD計算(平衡化)

- 1. **MD | Gromacs | 連続ジョブ実行**を選択する。
- 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。

<u>M</u> D	固体( <u>S</u> )	アドオン( <u>A</u> )	ツール( <u>T</u>	) チ:	ュートリアル( <u>U</u> )	ウィンドウ( <u>W</u> )	AJU:
	溶媒を配置 分子を挿2 電荷を割り ポリマー(P) 界面ビルダ 水をイオン(	፪/セルを構築 \(N)  当て(C) (I) こ置換(O)	(S) ►	EF f	(ラベリレイ電 全 MECISE GNOR Ar	荷を隠す) (戸) (デ) (ボーク、05 NOINT)	ER GRA
	Gromacs				キーワード設定		
	LAMMPS		ł	Ron	実行		
	MODYLAS	5	•	i constanti da la constanti da	ロッを扱い (IO 標準出力を表	g) (示	
			-	<b>∏</b> <b>∼</b>	アニメーション エネルギー変化 最終構造を読 連続ジョブ設な 連続ジョブ実行	ビ 記み込み (gro) 定 テ	
	<b>.</b>				動径分布関数	<u>م</u>	

Copyright (C) 2019 X-Ability Co., Ltd. All rights reserved.



# I. 溶液のMD計算(本計算)

- 1. ソルバー覧からGromacsを選択し、 M (キーワード設定)をクリックする。
- 2. Basicタブのnstepsを50000に変更する。



🥺 Gromacs Setup	– 🗆 X					
Extending Simulation	# of Threads 1					
Preset NPT (fast) ~	MPI (for Remote Job) 1 Processes					
Basic Advance Output Interaction Other	Automatic Options Force Field					
Run Control	Temperature Coupling					
dt [ps] 0.002	tcoupl berendsen ~					
nsteps 50000	System					
Total time: 100 ps	ref-t [K] 300.0					
integrator md $\checkmark$	tau-t [ps] 1.0					
Velocity Generation	Pressure Coupling					
gen-vel no ~	pcoupl Parrinello-Rahma $ \smallsetminus $					
Fix random seed	pcoupltype isotropic $\vee$					
gen-seed 12345	ref-p [bar] 1.0					
Explicitly set gen-temp [K] 300.	tau-p [ps] 1.0					
	compressibility [/bar] 4.5e-5					
	Constraints					
	constraints $$ hbonds $$ $$ $$					
Reset Load Save	OK Cancel Run					



# I. 溶液のMD計算(本計算)

- 1. Outputタブのnstxout-compressedを5に変更する。
- 2. **Run**をクリックする。

Gromacs Setup				_		×
Extending Simulation		# of Threa	ads	1	]	
Preset NPT (fast)	~	MPI (for	Remote Job	<b>b)</b> 1	Process	es
asic Advance Output	Interaction Other	Automatic	Options F	orce Field		
Output Control						
stxout	100					
nstvout	100					
nstenergy	10	1	_			
nstxout-compressed	5					
compressed-x-grps	~					
Estimated trr file size: 18	MB					
Reset Load	Save	[	ОК	Cancel	Ru	n

Copyright (C) 2019 X-Ability Co., Ltd. All rights reserved.



## II. 溶媒のMD計算

- 1. (溶媒を配置/セルを作成)をクリックする。
- 2. Add Waterをクリックする。
- 3. Enter # of moleculesに500と入力しOKをクリックする。

Solvate/Build Cell				-		×	
Name	# Mol	Position	mol/L ·	✓ Comp	osition		
					∕∟		Add water
imulation Cell Option	1 Add	.moi2 File	Add Wat	ter			Enter # of molecules
● Set Density [g/cm^	·3]	0.6					
Oset Distance from S	Solute [nm]						
Set Lattice Constar	n <b>ts [nm]</b>	90.0	90.0	0.0	Impor	t	
Sox Type	ngies [deg]	cubic	50.0	~			
Total Number of Atom	s:						
Reset			Build		Can	cal	

×

Cancel

OK



## II. 溶媒のMD計算

- 1. Set Densityに0.9と入力する。
- 2. Buildをクリックすると左図のような系が作成される。

😻 Solvate/Build Cell				_		$\times$
				1 -		
Name	# Mol	Position	mol/L ~	Comp	position	
WATER	500	Random	49.955	H2O		
						_
Add Displayed Molecule	Add	mol2 File	Add Wate		Delet	
Add Displayed Molecule	Auu	.moiz File	Aud Wate		Delet	-
Coulo Kan Call						
Simulation Cell Option						
• Set Density [g/cm^3]		0.9				
◯ Set Distance from Solu	ute [nm]					
	[nm]	2.552 2	.552 2.5	52	Import	. 1
U der Lature constants	frand.				Import	
Angl	es [deg]	90.0 90	90.	0		
Box Type		cubic		~		
Total Number of Atoms:	1500					
		_				
Reset			Build	$\boldsymbol{\langle}$		



# 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. 座標ファイル名とトポロジーファイル名はそれぞれ 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。

			🥨 Gromacs Setup	
😻 Gromace	s Setup	-	Extending Simulation	
🗹 Extendi	ng Simulation		Basic Advance Outp	put r /
Preset	NPT (fast) V		Output Control	
Basic Adv	vance Output Interaction Other		nstxout	100
Run Cont	rol		nstvout	100
dt [oc]	0.002		nstenergy	10
ut (psj	0.002		nstxout-compressed	50
nsteps	25000		compressed-x-grps	
	Cromacs Extendit Preset Basic Adv Run Contr dt [ps] nsteps	Gromacs Setup  Extending Simulation  Preset NPT (fast)  Basic Advance Output Interaction Other  Run Control  dt [ps] 0.002 15000  Control Contro Control Control Control Control Control Control Contr	Gromacs Setup   Extending Simulation   Preset   NPT (fast)   Basic   Advance   Output   Interaction   Other   dt [ps]   0.002   nsteps   25000	Image: Setup   Image: Commace Setup   Image: Commace Setup   Image: Preset NPT (fast)   Image: Preset NPT (fast)   Image: Basic Advance Output Interaction Other   Image: Basic Advance Output Interaction Other   Image: Run Control   Image: Basic Advance Output Interaction Other   Image: Ba

Copyright (C) 2019 X-Ability Co., Ltd. All rights reserved.



## Ⅲ. 溶質のMD計算

- 1. ファイル | 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)をクリックする。
- 4. CreateのSet Distanceに「12」と入力しをCreateボタンをクリックする





#### Ⅲ. 溶質のMD計算

Marked Order: 9 - 8 - 2 - 5

Marked Atom: X= 2.9062 Y= -1.2584 Z= -0.1632

#### 1. OKボタンをクリックする。

2. <a>2</a> (ウィンドウに合わせる)ボタンをクリックする。

Length= 0.96 Angle= 101.703 Dihedral= -164.871 Lper= 0.554 🥨 Create/Edit Cell × Box Vectors Lattice Constants LAMMPS Tilt Factors Create Х Y Ζ Boundary 12 Set Distance [A] Create ٧1 27.2643 0.0000 0.0000 Periodic  $\sim$ Use Cubic Cell 27.2643 0.0000 ٧2 0.0000 Periodic  $\sim$ O Set Dimension [A] 15. Create 0.0000 0.0000 ٧3 27.2643  $\sim$ Periodic Expand Width [A] 5. Expand origin -12.6325 -13.8093 -13.6503 Οx Οz Axis OY Side  $\bigcirc +$ 0-●+/-OK Reset Apply rho= 0.004 g/cm^3 a= 27.264 b= 27.264 c= 27.264 alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000



# 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。
- MD | Gromacs | 連続ジョブ実行をクリックする。
   座標ファイル名とトポロジーファイル名はそれぞれ etoh.gro、etoh.topとして保存する。

🥺 Sequential Job		- 0	×
# of Threads: 1			
Job Setting	#	Setting	
Use preset     Add >>	0	Preset: Minimize (vapor, fast)	
NVT (vapor, fast)	1	Preset: NVT (vapor, fast)	
O Use setting file << Delete <<	-		_
Reset		Set	
Copyright (C) 2019 X-Ability Co.,Ltd	. All rig	hts reserved.	



# III. 溶質のMD計算(本計算)

- 1. 計算終了後、**(キーワード設定**)を選択する。
- 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。

💖 Gromacs Setup		- □ >	<	🥨 Gromacs Setup					_
Extending Simulation	# of Threads	1		Extending Simulation			# of Thre	ads	
Preset /T (vapor, fa	ist)  V MPI (for Remote 2	Job) 1 Processes		Preset VT (vapor, fa	st)	~	MPI (fa	r Remote Job	5)
Run Conti	Interaction Other Automatic Options Temperature Cou	Force Field pling		Basic Output	Interaction	Other	Automatic	Options Fo	orc
dt [ps]	0.002 tcoupl	berendsen $\sim$		Output Control					
nsteps	25000000	System		nstxout	100000				
Total time: 50000 ps	ref-t [K]	300.0		nstvout	100000	$\sim$			
integrator	md v tau-t [ps]	1.0		nstenergy	10000	2			
Velocity Generation	Pressure Coupling	I				י <i>א</i>			
gen-vel	no	no 🗸		nstxout-compressed	50	$\mathbf{\langle}$			
- · ·				1					



#### 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、 <sup>d</sup> (フォルダを開く)で開くことができる。
- 2. MD | Gromacs | ER法実行をクリックする。







## 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。
- 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 (C) 2019 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved.



#### 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。

🥺 Setup Energy Representation Me	nod – 🗆 X							
Solution Solvent So	te							
S Displa	number of species : 1 molecule name : MOL01 number of molecules : 1 ensemble : NVT v							
Trajectory/structure (.xtc/gro) C:¥winmo ¥gmx_tmp	Trajectory/structure (.xtc/gro) C:¥winmos9¥UserData¥etoh_gmx_tmp ¥gmx_tmp_mdrun.xtc							
Solute ty	e: flexible							
Options Reset	Solute Name MOL01 V							

Copyright (C) 2019 X-Ability Co., Ltd. All rights reserved.



#### 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。

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。



Copyright (1) 2019 X-Ability Co., Ltd. All rights reserved.



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



Copyright (C) 2019 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved.