

自由エネルギー計算 (Filling potential 法 + WHAM 法) 解析ツール仕様書

1. 目的

Filled Potential 計算における反発ポテンシャルと求心ポテンシャルを示す Umbrella Potential ファイルを作成するツールと、座標トラジェクトリ群と Umbrella Potential の解析結果から自由エネルギーのヒストグラムを解析するツールを作成する。

本ツールは拡張および保守が容易であるように、共通手続きや共通宣言をまとめる。

また、引数の型・配列宣言の不一致などプログラミングでのバグが入りづらいように Fortran90 言語を使用する。(Fortran90 のモジュール機能を使用し、コンパイル時にバグを摘出する)

1. 1. ソースファイル構成

Makefile.compaq	: compaq 計算機用 makefile
Makefile.sgi	: sgi 計算機用 makefile
Makefile.sun	: sun 計算機用 makefile
Size_Data.f90	: データサイズおよび共通定数宣言
Umbrella_Method.f90	: Umbrella Potential 計算処理群
Utility.f90	: ファイル入出力処理群
Extract_Atom.f90	: トラジェクトリ切り出しツールメイン
Generate_NextFP.f90	: Umbrella Potential 指定ファイル作成ツールメイン
Wham_Analysis.f90	: WHAM 解析ツールメイン

1. 2. ロード構成

Extract_Atom	: トラジェクトリ切り出しツール
Generate_NextFP	: Umbrella Potential 指定ファイル作成ツール
Wham_Analysis	: WHAM 解析ツール

1. 3. サンプルファイル

Extract_Atom.inp	: トラジェクトリ切り出し制御ファイル
Generate_NextFP.inp	: Umbrella Potential 指定ファイル作成制御ファイル
Wham_Analysis.inp	: WHAM 解析制御ファイル
newopt_fp	: 初回の Umbrella Potential 指定ファイル

2. ツール仕様

2. 1. Umbrella Potential 作成ツール

2. 1. 1. 概要

MD の座標トラジェクトリ、この MD での Umbrella Potential ファイル、およびユーザ指定を読み込み、新規の Umbrella Potential ファイルを作成する。

新規機能として、以下 2 点を拡張する。

- ・球状 harmonic, 球状 linear, 楕円体 harmonic, 楕円体 linear の求心関数の指定が可能
- ・入力、および出力の Umbrella Potential のファイル名称の指定が可能

2. 1. 2. 入力

(1)制御ファイル	旧 fp ツールとの対応
(1-1)前回の MD での Umbrella Potential 指定ファイル名	新規
(1-2)出力 Umbrella Potential 指定ファイル名	新規
(1-3)初期座標 PDB ファイル名	
(1-4)前回の MD での座標トラジェクトリファイル名	
(1-5)座標トラジェクトリの読み飛ばし回数	
(1-6)座標トラジェクトリ読み込み回数	
(1-7)座標トラジェクトリファイル形式 ("s"ingle "d"ouble)	
(1-8)PDB ファイルの画面表示オプション("y"es "n"o)	
(1-9)求心関数の種別	新規
(1-10)温度	
(1-11)ガウス型反発関数の高さ	
(1-12)ガウス型ポテンシャル中心座標の更新間隔を制御する範囲	*1) 新規
(1-13)ガウス型反発関数の幅	
(1-14)目標とする最終座標	*2) 変更
(2)初期座標 PDB ファイル	
(3)前回の MD での座標トラジェクトリファイル	
(4)前回の MD 入力の Umbrella Potential 指定ファイル	

*1) ガウス型ポテンシャルは初期位置から特定の範囲で中心座標の更新間隔を短くとる必要がある

*2) 楕円体の場合目標原子座標は焦点の 2 点を指定

制御ファイル例) 求心関数=HAR1 の場合

```

newopt_fp          ; 入力 Umbrella Potential 指定ファイル
newopt_fp2         ; 出力 Umbrella Potential 指定ファイル
initial.pdb        ; 初期座標
xx_traject.cor     ; 前回の MD のトラジェクトリ
-1000              ; トラジェクトリの読み飛ばし回数
2000               ; トラジェクトリ読み込み回数
s                  ; トラジェクトリファイル形式
y                  ; PDB ファイルの原子表示
HAR1               ; 求心関数種別 (HAR1 | HAR2 | LIN1 | LIN2)
300.0              ; 対象の温度
0.5                ; 関数の高さ
2.0 6.0            ; ガウス型ポテンシャル中心座標の更新間隔を制御する範囲
3.0                ; 関数の幅
ATOM 4131 0 WAT 839 0.000 0.000 -8.000 16.00 -0.83 ; 目標原子座標

```

制御ファイル例) 求心関数=HAR2 の場合

```

newopt_fp          ; 入力 Umbrella Potential 指定ファイル
newopt_fp2         ; 出力 Umbrella Potential 指定ファイル
initial.pdb        ; 初期座標
xx_traject.cor     ; 前回の MD のトラジェクトリ
-1000              ; トラジェクトリの読み飛ばし回数
2000               ; トラジェクトリ読み込み回数
s                  ; トラジェクトリファイル形式
y                  ; PDB ファイルの原子表示
HAR2               ; 求心関数種別 (HAR1 | HAR2 | LIN1 | LIN2)
300.0              ; 対象の温度
0.5                ; 関数の高さ
3.0                ; 関数の幅
ATOM 4131 0 WAT 839 0.000 0.000 -8.000 15.00 -0.83 ; 目標焦点座標 1
ATOM 4131 0 WAT 839 0.000 0.000 -8.000 17.00 -0.83 ; 目標焦点座標 2

```

2. 1. 3. 出力

(1) Umbrella Potential ファイル

前回の MD で使用した UmbrellaPotential 指定ファイルに対し、新規次元のポテンシャル指定を追加する。

本ツールで作成した Umbrella Potential 指定ファイルの例を以下に示す。

```
; this file generated by FP-tool
FILL> GAUS
      2      1 ; DIMENSION      NUMBER OF ATOMS
      6      ; ATOM ID

      0.000000 ; WEIGHT DIM=      1
      0.030000 ; RADIUS DIM=      1
ATOM                                0.000  0.000 -2.000 ; CENTER-1 ATOM=      6

      0.500000 ; WEIGHT DIM=      2
      3.000000 ; RADIUS DIM=      2
ATOM                                0.283  0.269 -2.312 ; CENTER-1 ATOM=      6

FILL> HAR1
      1      1 ; DIMENSION      NUMBER OF ATOMS
      6      ; ATOM ID

      0.500000 ; WEIGHT DIM=      1
      3.000000 ; RADIUS DIM=      1
ATOM                                0.283  0.269 -2.312 ; CENTER-1 ATOM=      6
```

2. 1. 4. 機能

入力した UmbrellaPotential のガウス型反発関数の次数を追加し、また、追加した次数に対応する求心関数を付加する。

追加した反発関数の中心座標は初期座標から 0.2 Å 程度の幅で、最終座標に近づくように設定し、楕円体の場合は焦点の中心が最終座標に近づくように設定する。

2. 1. 5. 制限事項

以下の場合、エラーとして処理を中断する。

- (1) 入力した Umbrella Potential 指定ファイルに複数の求心関数を指定している場合
- (2) 入力した Umbrella Potential 指定ファイルの求心関数の次数が 2 以上の場合
- (3) 指定した座標トラジェクトリの個数が読み込み数分に満たない場合
- (4) 最終目標座標の個数が、必要な数に満たない場合

2. 2. トラジェクトリ切り出しツール

2. 2. 1. 概要

MDの座標トラジェクトリ、このMDでのUmbrella Potential ファイル、およびユーザ指定を読み込み、Umbrella Potential 対象原子の座標のみ切り出したトラジェクトリファイルを生成する。

2. 2. 2. 入力

(1) 制御ファイル

旧 fp ツールとの対応

- | | |
|---|----|
| (1-1) Umbrella Potential 指定ファイル名 | 新規 |
| (1-2) 座標トラジェクトリファイルの原子数 | |
| (1-3) 座標トラジェクトリファイル数 | |
| (1-4) 入力、出力座標トラジェクトリファイル名 | |
| (1-5) 座標トラジェクトリの読み飛ばし回数 | |
| (1-6) 座標トラジェクトリ読み込み回数 | |
| (1-7) 座標トラジェクトリファイル形式 ("s"ingle "d"ouble) | |
| (2) 座標トラジェクトリファイル群 | |
| (3) 前回の MD 入力の Umbrella Potential ファイル | |

制御ファイル例)

newopt_fp		;	入力 Umbrella Potential 指定ファイル
1023		;	トラジェクトリファイルの原子数
4		;	入力トラジェクトリファイル数
xx_trj1.cor	w_1.cor	;	入力/出力トラジェクトリファイル名 - 1
xx_trj2.cor	w_2.cor	;	入力/出力トラジェクトリファイル名 - 2
xx_trj3.cor	w_3.cor	;	入力/出力トラジェクトリファイル名 - 3
xx_trj4.cor	w_4.cor	;	入力/出力トラジェクトリファイル名 - 4
-1000		;	トラジェクトリの読み飛ばし回数
2000		;	トラジェクトリ読み込み回数
s		;	トラジェクトリファイル形式

2. 2. 3. 出力

(1) Umbrella Potential 対象原子のトラジェクトリファイル

入力した Umbrella Potential 指定ファイルで指定された原子のみの座標を切り出した座標トラジェクトリファイルを出力する。

2. 2. 4. 機能

入力した全原子の座標トラジェクトリファイルから UmbrellaPotential 指定ファイルで指定された原子の座標のみを取り出し、新規の座標トラジェクトリファイルを作成する。

2. 3. WHAM 解析ツール

2. 3. 1. 概要

複数 MD の座標トラジェクトリと、Umbrella Potential 指定 ファイルから、各トラジェクトリでの自由エネルギーを計算する。

旧 FP ツールでは、WHAM 解析用に Umbrella Potential 指定ファイルの原子指定部分の変更が必要であるが、本ツールではこの部分を自動的に処理するように変更する。

2. 3. 2. 入力

(1) 制御ファイル

旧 fp ツールとの対応

(1-1) Umbrella Potential 指定ファイル名	新規
(1-2) 座標トラジェクトリファイル数	
(1-3) 入力座標トラジェクトリファイル名	
(1-4) 座標トラジェクトリの読み飛ばし回数	
(1-5) 座標トラジェクトリ読み込み回数	
(1-6) 座標トラジェクトリファイル形式 ("s"ingle "d"ouble)	
(1-7) 自由エネルギー計算の平均値計算のサンプリング距離	新規
(1-8) WHAM 解析の収束ループ数	新規
(1-7) WHAM 解析時のメモリ指定 ("m"emory "s"peed)	*1) 新規
(2) 座標トラジェクトリファイル群	
(3) 前回の MD 入力の Umbrella Potential ファイル	

制御ファイル例)

newopt_fp	;	入力 Umbrella Potential 指定ファイル
4	;	入力トラジェクトリファイル数
w_1.cor	;	入力/出力トラジェクトリファイル名 - 1
w_2.cor	;	入力/出力トラジェクトリファイル名 - 2
w_3.cor	;	入力/出力トラジェクトリファイル名 - 3
w_4.cor	;	入力/出力トラジェクトリファイル名 - 4
-1000	;	トラジェクトリの読み飛ばし回数
2000	;	トラジェクトリ読み込み回数
s	;	トラジェクトリファイル形式
0.5	;	自由エネルギー計算の平均値計算のサンプリング距離
1000	;	WHAM 解析収束ループ
m	;	メモリ優先

*1) "m" 指定時は作業用のメモリを確保しないため、小さなメモリの計算機でも動作させることができる。

現在の FP ツールは WHAM 解析用に 8byte*3 次元*10 原子*150umb 対象*4000 世代 = 1.44Gbyte のメモリを使用する。作業メモリを使用した方が実行速度は速いため、メモリを動的に確保する方式をとることで、適用範囲を広げる。

2. 3. 3. 出力

(1) 自由エネルギー計算結果

標準出力の最後に下記のようなトラジェクトリ番号、RMSD、自由エネルギーの表を出力する。指定された範囲に座標が存在しない場合は自由エネルギーの欄に“-----”を出力する。

INFORMATION> WHAM ANALYSIS RESULT			
EXP-ID	R. M. S. D (A)	AVERAGE	FREE-ENERGY
1	4.000000	0.000000115	0.984069810E+01
2	4.513558	0.000000103	0.990723128E+01
3	4.090083	0.000000228	0.942155513E+01
4	3.778652	0.000000000	-----

2. 3. 4. 機能

入力したトラジェクトリファイルの座標に対し、Umbrella Potential 指定ファイルに記述しているポテンシャルを計算、各トラジェクトリに対する自由エネルギーを計算する。

切り出したトラジェクトリと Umbrella Potential 指定ファイルでは原子指定部分が一致しないため、Umbrella Potential 指定ファイルの原子番号を昇順にした時の逐次番号を座標トラジェクトリの座標に対応させる。

例) 下記の場合、(6, 8, 9, 11, 2, 4)が UmbrellaPotential 対象原子であり、座標トラジェクトリは(2, 4, 6, 8, 9, 11)の順で格納されているため、Umbrella Potential の原子 ID を対応するトラジェクトリの番号(3, 4, 5, 6, 1, 2)に変更して解析を行う。

```
; this file generated by FP-tool
FILL> GAUS
  1      6 ; DIMENSION      NUMBER OF ATOMS
  6      ; ATOM ID
  8      ; ATOM ID
  9      ; ATOM ID
 11      ; ATOM ID
  2      ; ATOM ID
  4      ; ATOM ID
  :
```

#WHAM 解析では入力した Umbrella Potential 指定ファイルの求心ポテンシャルの計算は行わず、GAUSE 型ポテンシャルのみの計算を行う。

—以上—