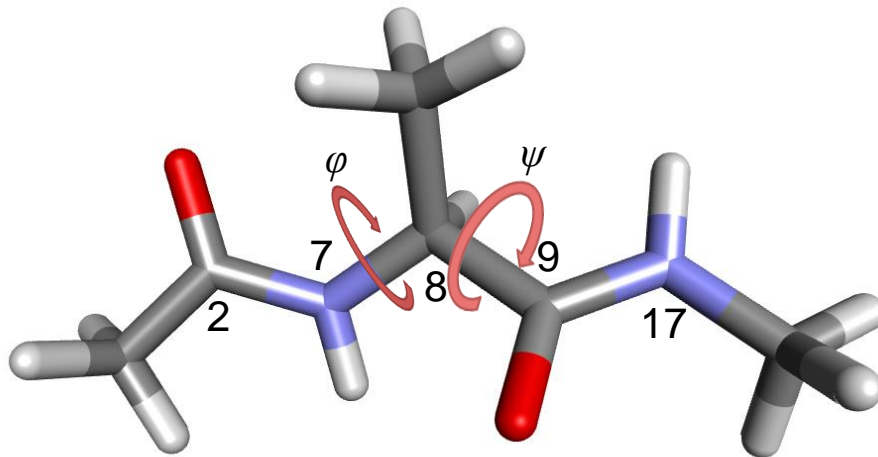


LogMFD (AFED)

1. 計算設定

本計算は以下の設定のもとで実施した。

- Method : AFED
- System : alanine dipeptide
- Number of replica : 8
- AFED Type : NVT
- Collective variables (CV) :
 - cv1 : 2 面角 ϕ (2-7-8-9)
 - cv2 : 2 面角 ψ (7-8-9-17)
- Initial position of CVs :
 - cv1 : -154.00 degree
 - cv2 : 133.65 degree
- Initial velocity of CVs :
 - cv1 : 0.1
 - cv2 : 0.1
- Number of CVs updates : 10000
- Constrained MD
 - Ensemble : NVT
 - time step : 0.5 fs
 - Potential : MM
 - Temperature : 300 K
 - Number of steps : 2000



2. 結果

各ステップでの cv 及び自由エネルギーは “afed.out” に出力される。

step	st	cv	r-ideal	r-mean	f-energy	-df/dr	dr/dt	h-energy	temp
0	LO	1	-154.000	-153.875	0.003000	0.000062	0.100000	0.001571	300
0	LO	2	133.650	133.873	0.003000	0.000112	0.100000	0.001571	300
1	LO	1	-153.900	-153.686	0.002983	0.000107	0.100000	0.001571	300
1	LO	2	133.750	133.777	0.002983	0.000013	0.100100	0.001571	300
2	LO	1	-153.800	-153.584	0.002971	0.000108	0.100100	0.001571	301
2	LO	2	133.850	134.206	0.002971	0.000177	0.100100	0.001571	301
3	LO	1	-153.700	-153.553	0.002942	0.000074	0.100200	0.001571	301
3	LO	2	133.950	134.163	0.002942	0.000106	0.100200	0.001571	301
4	LO	1	-153.599	-153.623	0.002924	-0.000013	0.100300	0.001571	302
4	LO	2	134.051	134.256	0.002924	0.000104	0.100300	0.001571	302
5	LO	1	-153.499	-153.208	0.002915	0.000144	0.100300	0.001571	302
5	LO	2	134.151	134.265	0.002915	0.000055	0.100400	0.001571	302

・・・以下、略・・・

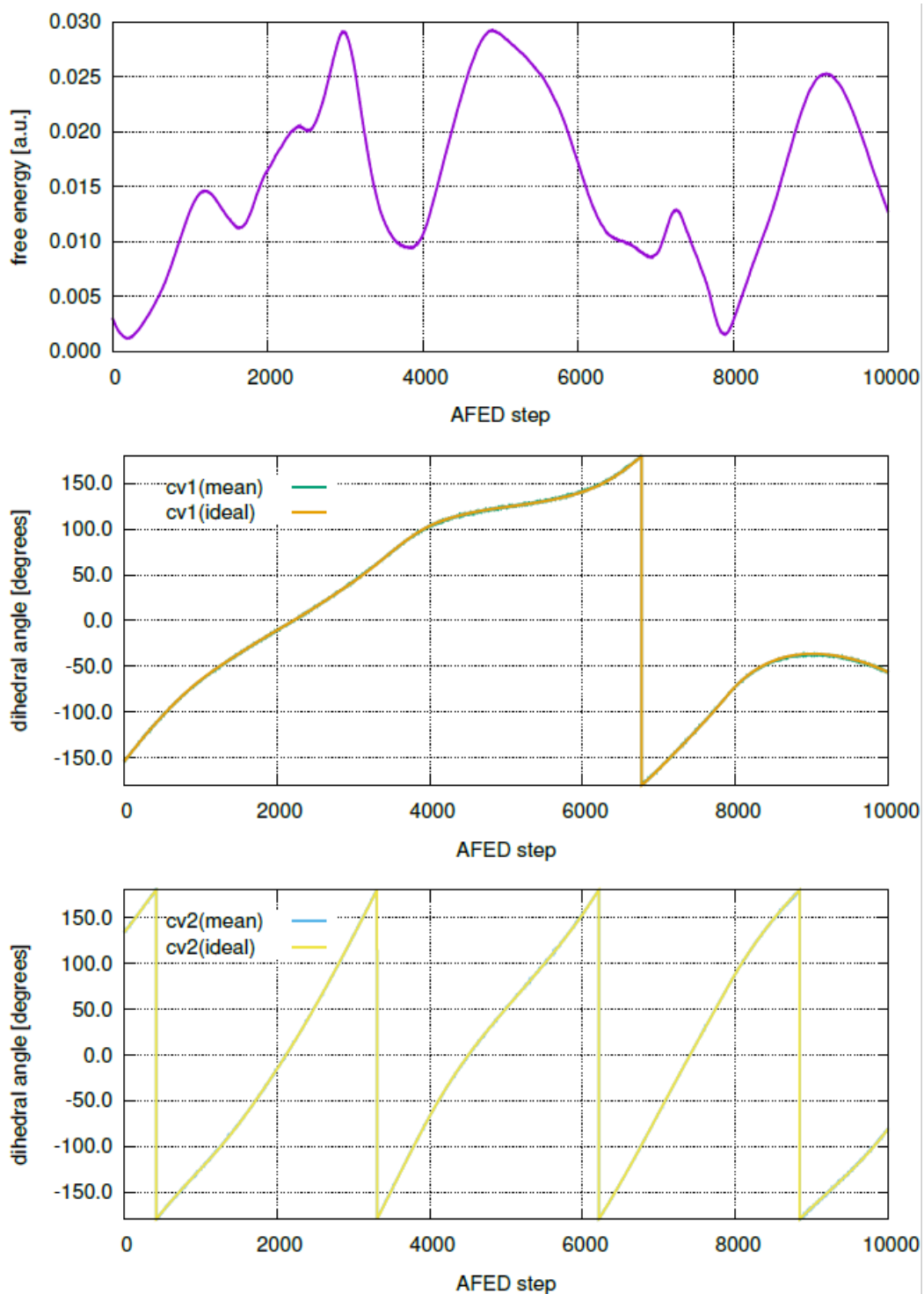
各ステップ、各レプリカの分子構造は “afed.xyz” に出力される。X ITER の X が cv 更新回数を表し、Y BEAD の Y がレプリカ番号を表す。

22			
LO	0 ITER	1 BEAD	0.03
CT3	0.14251	5.87000	-6.37483
C	1.39075	5.54128	-7.04126
O	1.52262	4.68107	-7.87827
HA	0.41156	6.60475	-5.55305
HA	-0.57420	6.34822	-7.06042
HA	-0.32026	4.98868	-5.98714
NH1	2.44116	6.24694	-6.63477
CT1	3.76350	6.20651	-7.26309
C	4.72217	6.60865	-6.15125
O	4.39585	7.47273	-5.33645
H	2.32078	6.76028	-5.75100
HB	3.92353	5.15340	-7.57956
CT3	3.76192	7.06066	-8.58569
HA	3.56468	8.17403	-8.50358
HA	4.75924	7.01800	-9.18023
HA	2.99783	6.68519	-9.30272
NH1	5.84176	5.83798	-6.03630
CT3	6.97673	6.15805	-5.28167
H	5.88082	5.02242	-6.61141
HA	7.69642	5.27538	-5.34265
HA	6.67775	6.30142	-4.22289
HA	7.37321	7.12344	-5.65148

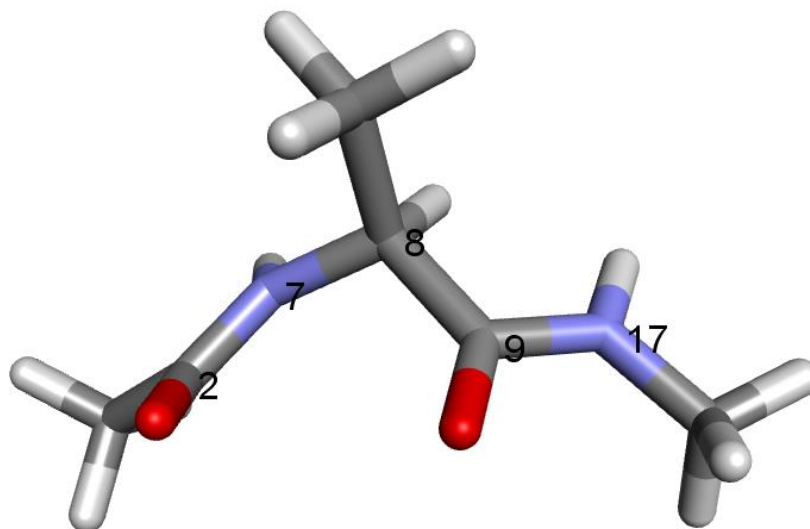
22

LO	0 ITER	2 BEAD	0.1
・・・以下、略・・・			

得られた2つのcv (ideal: 目標値、mean: 実績値) 及び自由エネルギーの変化を以下に示す。目標値を追隨して実績値が変化していることが見て取れる。



自由エネルギーの最も高い 3000 AFED step における構造スナップショットを以下に示す。これは、8つのレプリカを重み付き平均した際に最も寄与が大きかったレプリカの構造である。



このとき、cv の値はそれぞれ以下となっている。

	ideal (目標値)	mean (実績値)
cv1	39.86	39.26
cv2	131.26	131.27

また、このときの自由エネルギー障壁は 0.0293 [a.u.]となった。