

使用 MolAICal 软件计算 Potential of Mean Force (PMF)

作者: Qifeng Bai

更多教程 (含英文教程) 请见如下:

MolAICal 官方主页: <https://molaical.github.io>

MolAICal 官方主页中国镜像: <https://molaical.gitlab.io>

MolAICal 中文博客: <https://molaical.gitlab.io/cntutorial.html>

1. 介绍

Potential of Mean Force (PMF) 可用于描述自由能级图 (free energy landscape)。沿坐标的 PMF 是根据平均分布函数计算的, 公式如下:

$$\Delta G = -k_B T \ln \rho(x, y)$$

其中 T 是温度、 k_B 是玻尔兹曼常数。 x 和 y 代表两个主成分。 在本教程中, 本示例选择了胰高血糖素受体 (GCGR) 的分子动力学 (MD) 模拟结果 (Front Chem. 2019 Dec 17;7:851) [1].

2. 材料

2.1. 所需软件

1) MolAICal: <https://molaical.github.io> 或 <https://molaical.gitlab.io>

2.2. 示例文件

1) 所有必需的教程文件均可从以下网址下载:

<https://gitee.com/molaical/tutorials/tree/master/007-PMF>

3. 步骤

3.1. 用 MolAICal 软件绘制自由能级图

```
#> cd 007-PMF
```

打开 “rmsd-dis.dat”, 第一列是 RMSD 值, 第二列是距离。 您也可以使用指定的主成份替换这些数据。然后, 运行命令:

```
#> molaical.exe -pmf -i rmsd-dis.dat
```

绘制的结果如图 1 所示

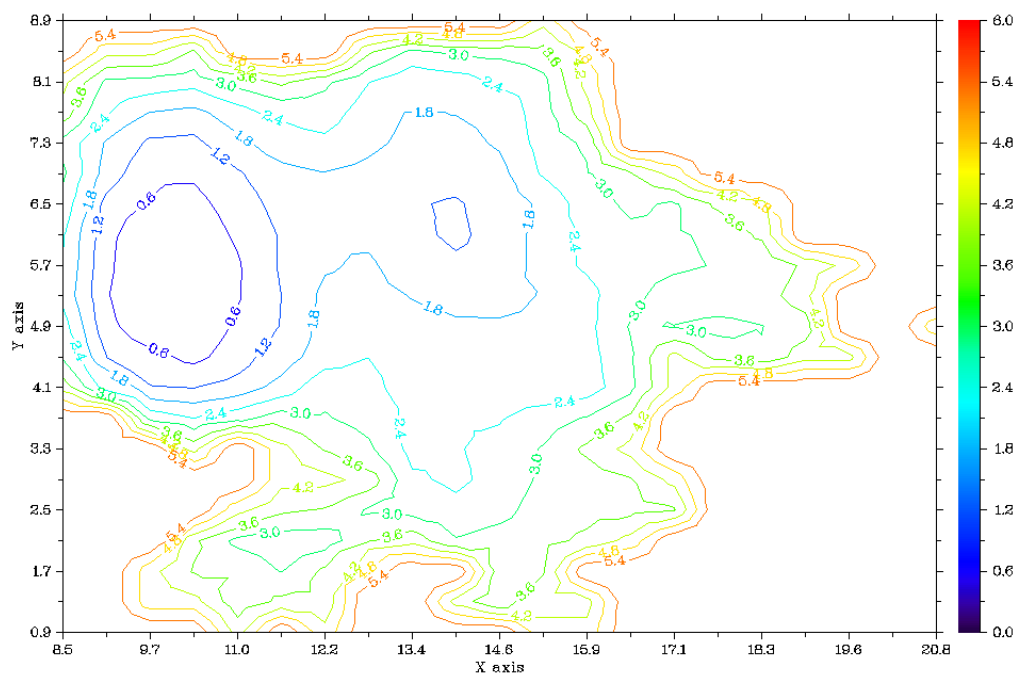


图 1. PMF 轮廓 (自由能单位: kcal/mol)

运行如下命令, 将以其他形状绘制图形 (参见图 2)。

```
#> molaical.exe -pmf -i D:/pmf/rmsd-dis.dat -g 20 -l 10 -m conshd -b none -x "RMSD" -y "Distance"
```

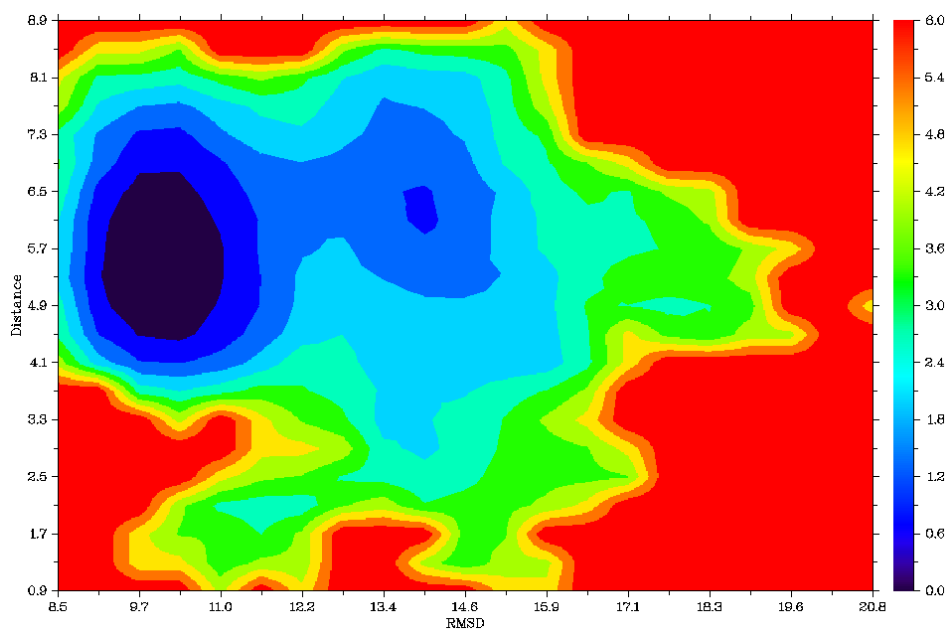


图 2. PMF 轮廓 (自由能单位: kcal/mol)

3.2. 高级教程

该部分使用 OriginLab 软件画出更优美的图片。如果您对此部分不感兴趣, 可以跳过。 可以从以下位置下载 OriginLab 的演示版本: <https://www.originlab.com>.

运行如下命令:

#> molaical.exe -pmf -i rmsd-dis.dat > plot.dat

其中，“plot.dat”文件可用于再现自由能全景图。

1) 导入“plot.dat”(见图 3)

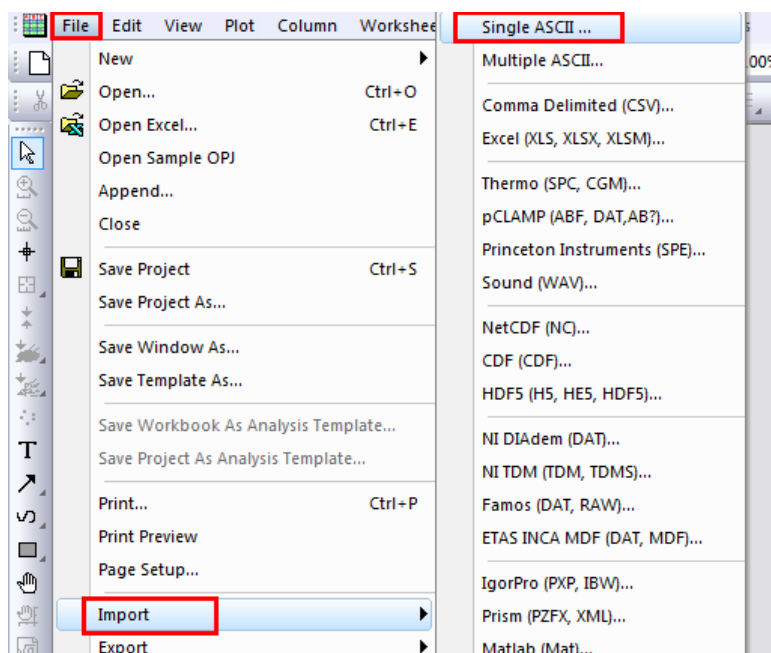


图 3. 导入数据

2) 双击选定的列 C (Y), 并将 C (Y) 更改为 Z (参见图 4)

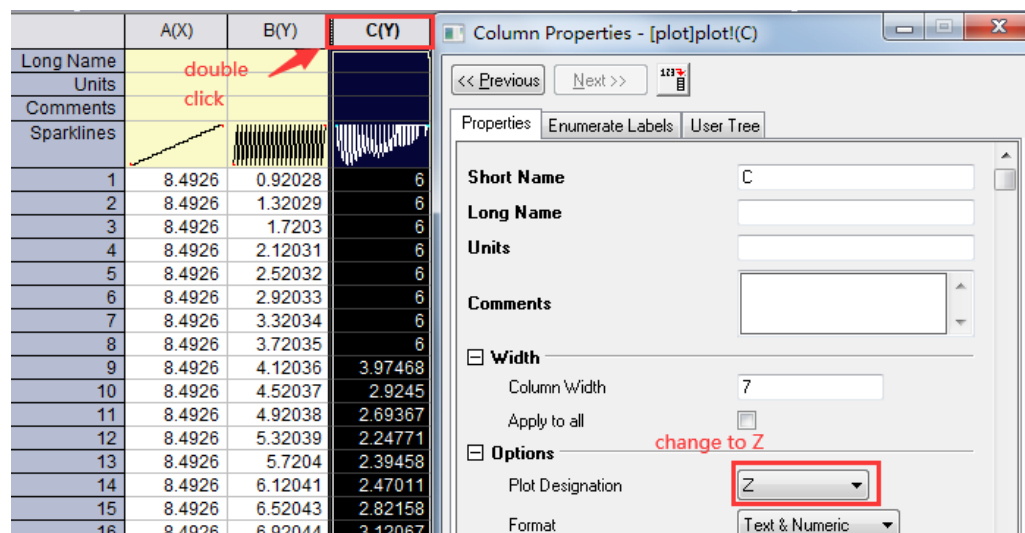


图 4. 设置绘图参数

3) 选择所有数据列并绘制轮廓 (参见图 5)

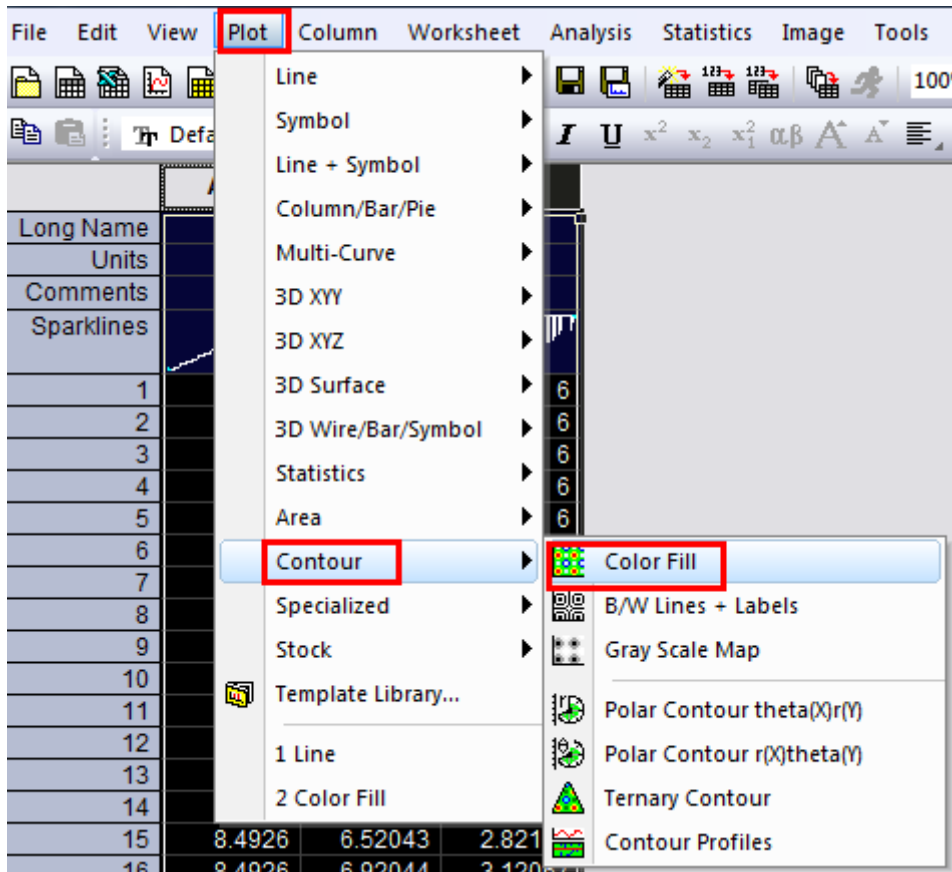


图 5. 绘制轮廓

- 4) 可能显示“Speed Mode is On”。您可以双击轮廓，单击“Layer1”，选择“Size / Speed”，然后取消图 6 红色框中的选项。如果不想取消“Speed Mode”，可以跳过此步骤。

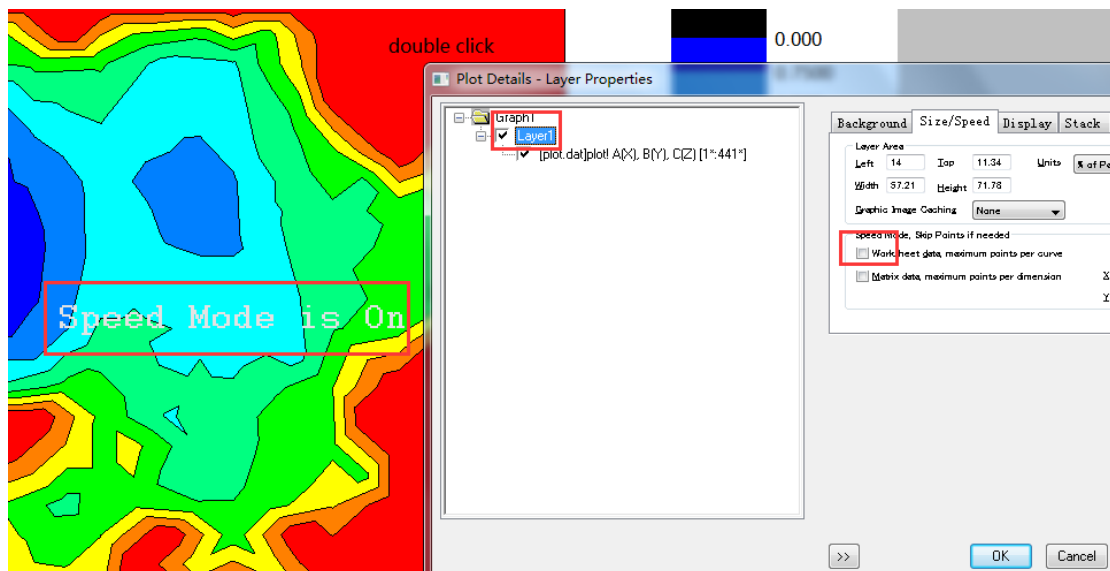


图 6. 取消“Speed Mode”

- 5) 如果要在轮廓线上显示数值，可以在轮廓上双击鼠标并选择红框中的 labels 选项，如图 7 所示。

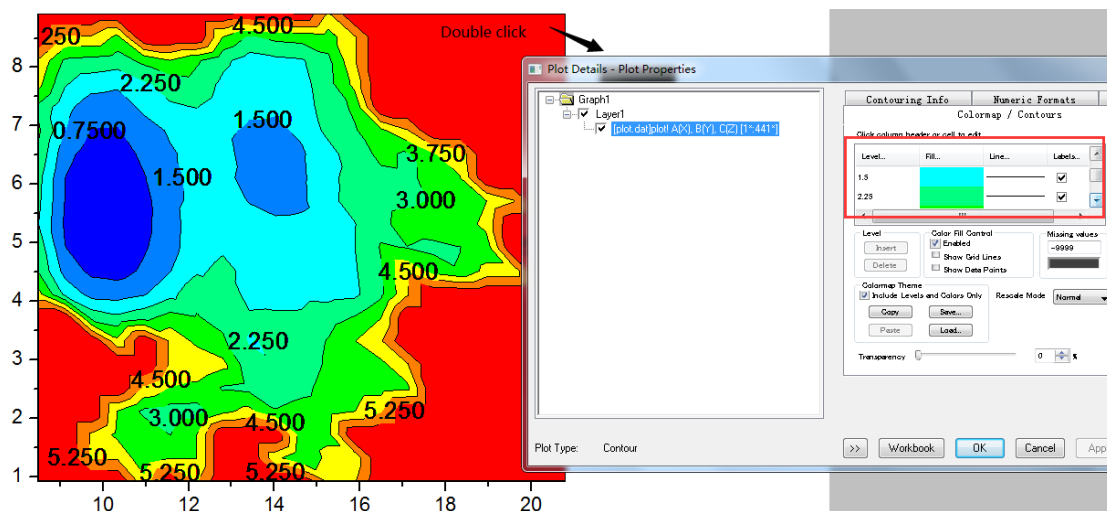


图 7. 绘制轮廓 (自由能单位: kcal/mol)

参考文献

1. Bai Q, Tan S, Perez-Sanchez H et al. Conformation Transition of Intracellular Part of Glucagon Receptor in Complex With Agonist Glucagon by Conventional and Accelerated Molecular Dynamics Simulations, *Front Chem* 2019;7:851.
<https://doi.org/10.3389/fchem.2019.00851>