

# Winmostar- Gromacs Tutorial 2

タンパク系 (pdb2gmxを使用)  
V6.005

株式会社クロスアビリティ  
[question@winmostar.com](mailto:question@winmostar.com)

2016/1/15

## 修正履歴

2015/7/16版

- (スライド2) 修正履歴を追加
- (スライド7) 部分削除の操作修正
- (スライド9) MDP Run parameters画面の差し替え(refcoord-scaling の追加)
- (スライド9) 「Ignore H atomのチェックを残す」記述を追加

2016/1/15版

- V6.005 対応

# 水中のタンパクのシミュレーション

本チュートリアルは、Justin (Virginia Tech.)によるGROMACS Tutorial (Tutorial 1: Lysozyme in water)を参考に作成しています。 <http://www.bevanlab.biochem.vt.edu/Pages/Personal/justin/gmx-tutorials/>

## 手順概要

- I. PDBからタンパクの分子構造をダウンロードする。
- II. Winmostarを使って、計算可能な構造へ修正する。  
～結晶水(酸素原子)を取り除く～
- III. Gromacsを起動し、エネルギー極小化を実行する。
- IV. 熱平衡計算(温度一定)を実行する。
- V. 熱平衡計算(温度・圧力一定)を実行する。
- VI. 本計算(1 ナノ秒)を実行する。
- VII. 計算結果を確認する
- VIII. バックボーンのRMSDを計算する。
- IX. バックボーンの回転半径を計算する。

# I. PDBからタンパクの分子構造をダウンロードする(1)

- ① <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do> にアクセスする。あるいは検索エンジンで「pdb」を検索
- ② 1AKIと入力してリターン

The screenshot shows the RCSB Protein Data Bank homepage. The browser address bar displays <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>. The page features a search bar with the text "1AKI" entered. A blue arrow points from the search bar to the search button. The page content includes a "Biological Macromolecular Resource" section with a "Molecule of the Month" for Actinomycin, and a sidebar with "RCSB PDB News" and "Available on the App Store" links.

# I. PDBからタンパクの分子構造をダウンロードする(2)

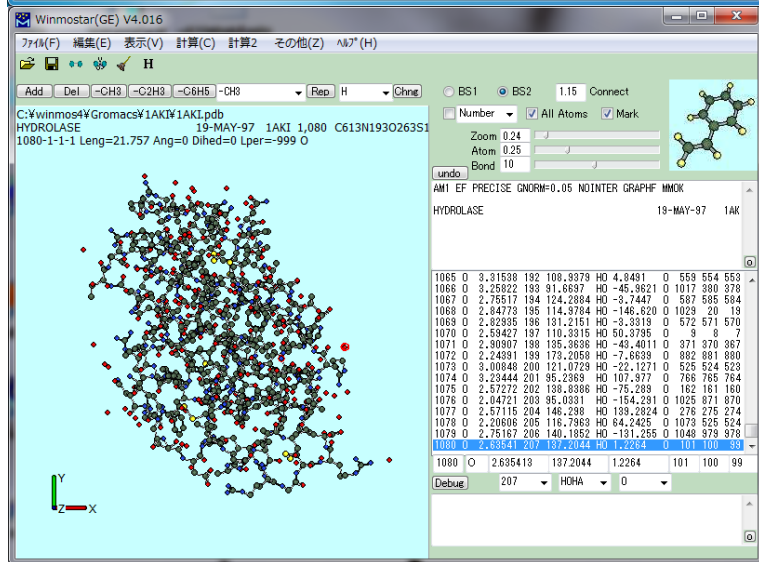
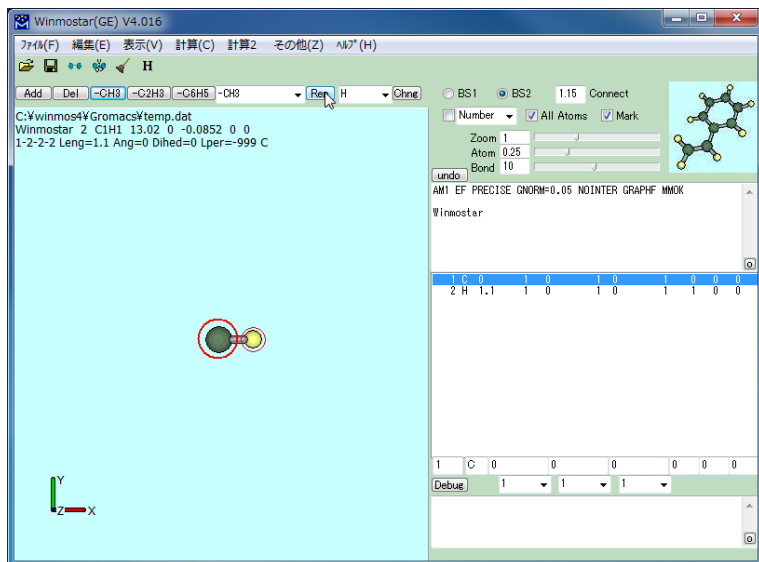
The screenshot shows the RCSB Protein Data Bank (PDB) website for entry 1AKI. The main content area displays the title "THE STRUCTURE OF THE ORTHORHOMBIC FORM OF HEN EGG-WHITE LYSOZYME AT 1.5 ANGSTROMS RESOLUTION" and various details like classification (Hydrolase), structure weight (14331.20), and molecular description (LYSOZYME, Gallus gallus). On the right side, there is a 3D ribbon diagram of the protein structure. A blue arrow points to the "Download Files" button in the top right corner. Another blue arrow points to the "PDB File (Text)" option in the dropdown menu that appears after clicking "Download Files".

③ 「Download Files」をクリック

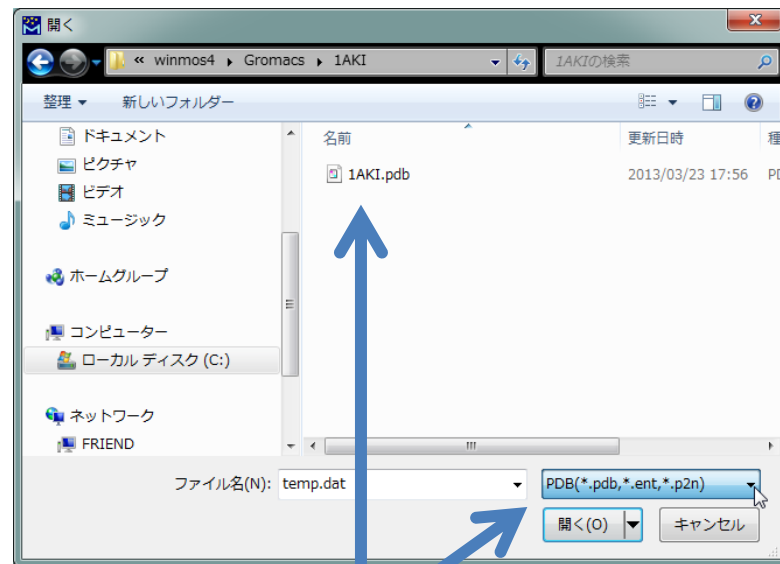
④ 「PDB file (Text)」を選択

⑤ ダウンロードして保存する。  
(ここでは1AKI.pdbとして保存)

## II. Winmostarを使って、計算可能な構造へ修正する(1)



[File] → [開く]



- ① [pdb]を選択
- ② 「1AKI.pdb」を選択

## II. Winmostarを使って、計算可能な構造へ修正する(2) ～結晶水の酸素原子を取り除く～

① 水の酸素原子をクリックする(どの酸素原子でもよい)

② タンパク分子のどれか一つの原子をクリックする(どの原子でもよい)

※ 必ず①、②の順でクリックすること

The screenshot shows the Winmostar interface with a protein structure and water molecules. A context menu is open, showing options like '元に戻す(U)', 'やり直し(R)', '直接編集', '回転方法', '原子', '水素付加', '水素削除', '部分回転(W)', '結合角変更', '部分移動(G)', '部分複製(Y)', '部分削除(X)', '部分自由回転(Z)', '部分固定・自由', '部分クリーン', '変更', and '環境構築'. The '部分削除(X)' option is highlighted. A dialog box titled 'Selection' is open, asking 'Delete or Leave?' with 'Delete', 'Leave', and 'Cancel' buttons. The 'Leave' button is highlighted.

pdbのデータを用いてMD計算を実行する際は、元々のpdbに含まれている水の酸素の座標は使わず、新規に水分子を配置する方が望ましい。

③ [編集]→[部分削除]を選択

④ 下記ポップアップウィンドウで[Leave]をクリック。

# III. Gromacsを起動し、エネルギー極小化を実行する(1)

「キーワード設定」 を選択し、計算条件を設定する

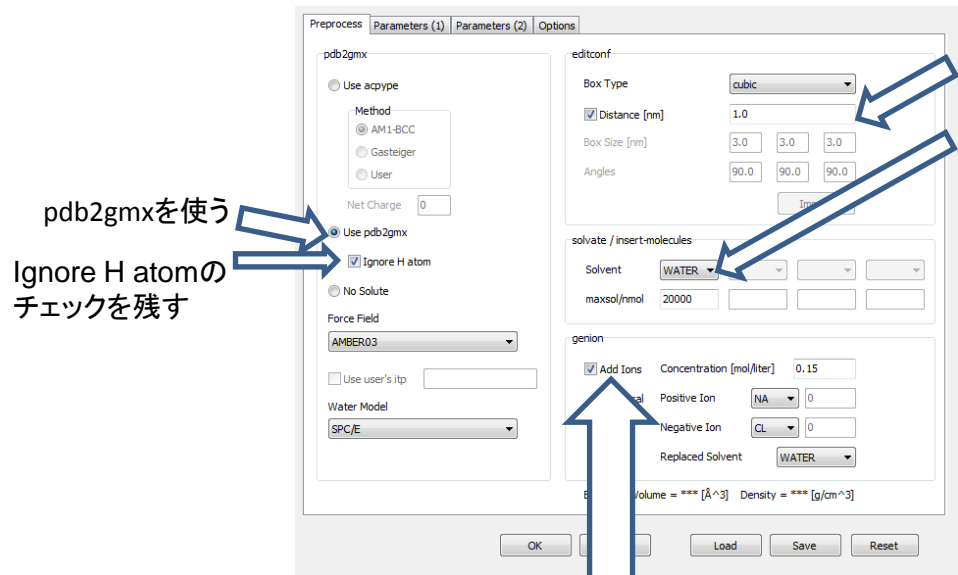
The screenshot shows the Winmostar (MD/NB/SPS) V6.005 interface. The 'MD(M)' menu is open, and 'キーワード設定' (Keyword Setting) is selected. The main window displays a 3D molecular model of a protein (HYDROLASE) and a table of atom coordinates.

ID	Atom	X	Y	Z	LE	OX	995	994	993
986	C	1.52018							
987	C	1.54042							
988	C	1.49755							
989	N	1.45626							
990	C	1.33622							
991	N	1.34173							
992	N	1.34181							
993	N	1.33489							
994	C	1.47111							
995	C	1.53063							
996	O	1.25549							
997	C	1.52663							
998	C	1.51205							
999	C	1.51280							
1000	C	1.52409							
1001	O	1.24130	129	112.2046	LE 79.7994	OX 995	994	993	
1001	O	1.241307		112.2046	79.7994		995	994	993

“1001原子”  
となっている確認



# III. Gromacsを起動し、エネルギー極小化を実行する(2)



系全体が中性となるようにイオンを付加する

step (最急降下法) を選択

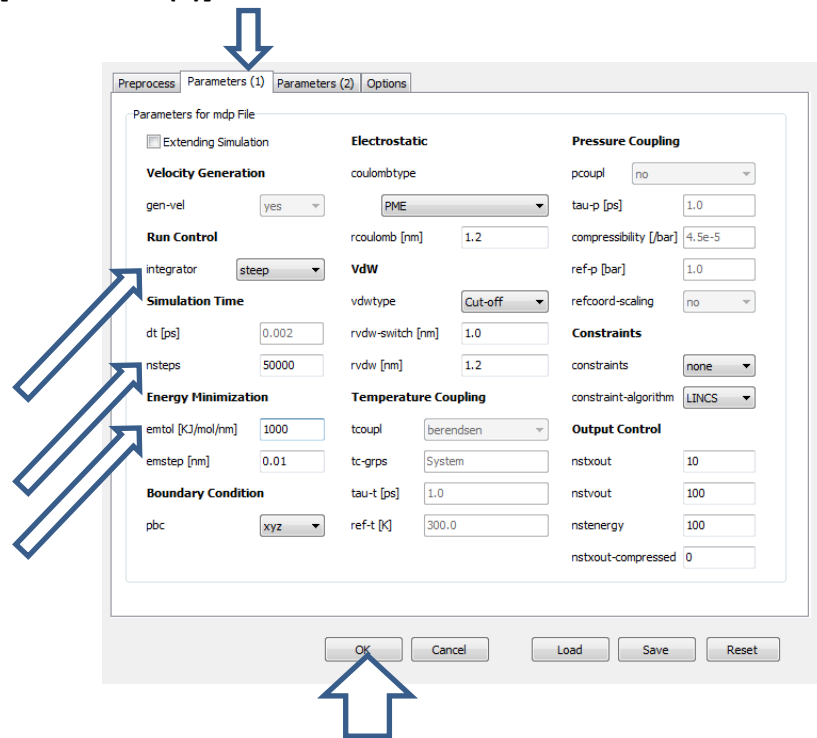
50,000 stepに設定

1000KJ/mol/nmに設定

1.0に変更する

水を配置する。maxsol20000分子に設定する  
(配置処理後、10747分子になる)。

[Parameters (1)]タブをクリック



最後に[OK]をクリックし、[File]メニューから名前を付けて  
保存する(1AKI\_waterとする)

# III. Gromacsを起動し、エネルギー極小化を実行する(3)

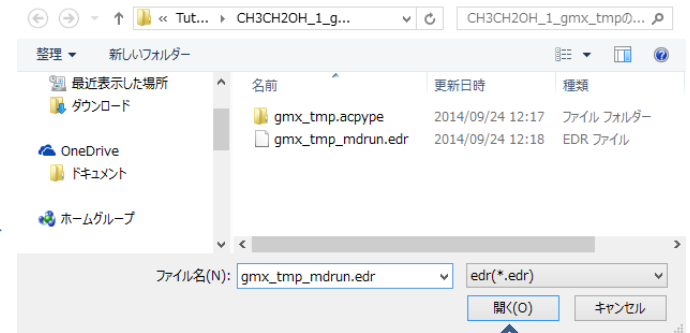
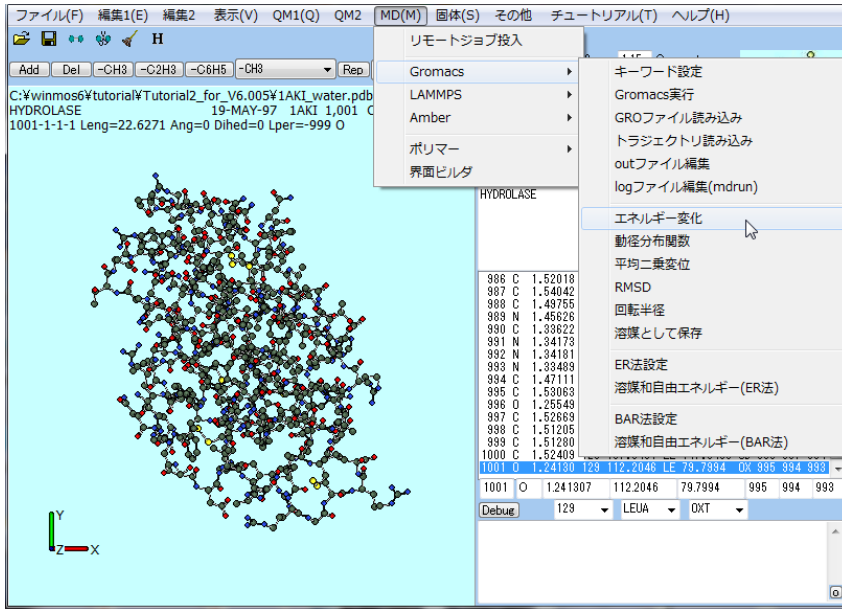
[MD(M)] → [Gromacs] → [Gromacs実行]を選択する

The screenshot shows the X-Ability software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a protein complex, labeled 'HYDROLASE'. The interface includes a menu bar at the top with options like 'ファイル(F)', '編集1(E)', '編集2', '表示(V)', 'QM1(Q)', 'QM2', 'MD(M)', '固体(S)', 'その他', 'チュートリアル(T)', and 'ヘルプ(H)'. A dropdown menu is open under 'MD(M)', showing options: 'リモートジョブ投入', 'Gromacs', 'LAMMPS', 'Amber', 'ポリマー', and '界面ビルダ'. The 'Gromacs' option is selected, and its sub-menu is open, showing options: 'キーワード設定', 'Gromacs実行', 'GROファイル読み込み', 'トラジェクトリ読み込み', 'outファイル編集', 'logファイル編集(mdrun)', 'エネルギー変化', '動径分布関数', '平均二乗変位', 'RMSD', '回転半径', '溶媒として保存', 'ER法設定', '溶媒和自由エネルギー(ER法)', 'BAR法設定', and '溶媒和自由エネルギー(BAR法)'. The 'Gromacs実行' option is highlighted by the mouse cursor. Below the menu, a table displays atom coordinates and simulation parameters.

986	C	1.52018				
987	C	1.54042				
988	C	1.49755				
989	N	1.45626				
990	C	1.33622				
991	N	1.34173				
992	N	1.34181				
993	N	1.33489				
994	C	1.47111				
995	C	1.53063				
996	O	1.25549				
997	C	1.52669				
998	C	1.51205				
999	C	1.51280				
1000	C	1.52409				
1001	O	1.24130	129	112.2046	LE	79.7994 OX 995 994 993
1001	O	1.241307		112.2046		79.7994 995 994 993

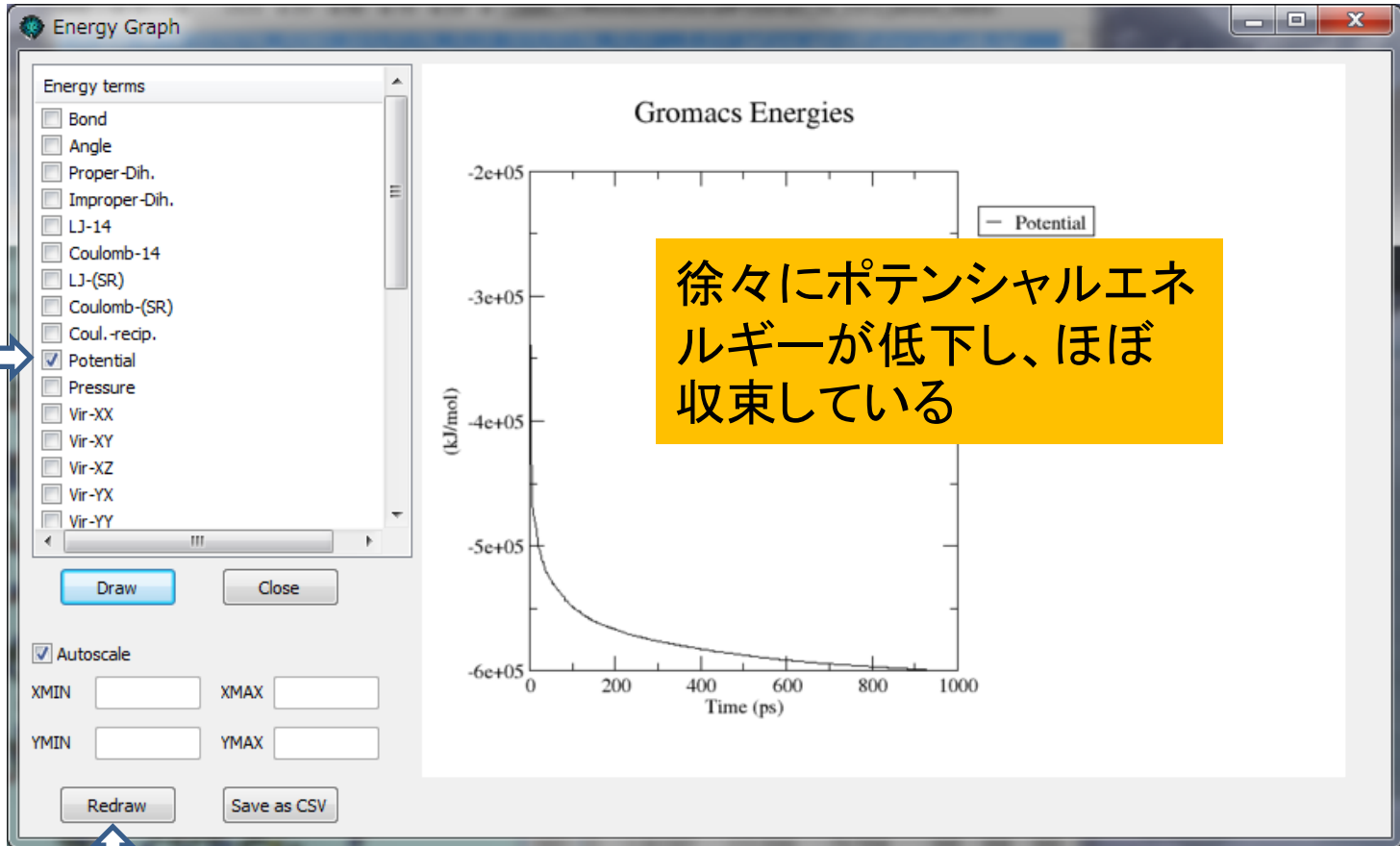
# III. Gromacsを起動し、エネルギー極小化を実行する(3) ～エネルギー極小化の結果を確認する 1～

[MD(M)] → [Gromacs] → [エネルギー変化]を選択する



[開く]をクリック

### III. Gromacsを起動し、エネルギー極小化を実行する(3) ～エネルギー極小化の結果を確認する 2～



# IV. 熱平衡計算(温度一定)を行う(1)

最初に[Parameters (1)]タブをクリック

Extending Simulationに  
チェックを入れる

integratorをmdに変更

100ピコ秒 (2 fs \* 50,000  
step) のMD計算を行う。

all bondsに変更  
(すべての結合を  
拘束する。)

500step毎にファ  
イル出力させる

V-rescale法で温度制御を行う。

Protein Non-protein と入力する。

どちらも300 K (約25°C) に設定する。

どちらも0.1 0.1 に設定する。

## IV. 熱平衡計算(温度一定)を行う(2)

[Parameters (2)]タブをクリック

Parameters for mdp File

**Neighbor Searching**

nstlist: 10  
ns-type: grid  
cutoff-scheme: Verlet  
 Use buffer-tolerance: 0.005  
rlist: 1

**Options for Ewald/PME/PPPM**

fourier-nx: 32  
fourier-ny: 32  
fourier-nz: 32  
ewald-rtol: 1e-5  
pme-order: 4

**Long Range Dispersion Correction**

DispCorr: EnerPres

**Options for Constraints**

lincs-order: 4  
lincs-iter: 1  
continuation: no  
shake-tol: 0.0001

**Misc.**

define:  -DFLEXIBLE  -DPOSRES  
print-nose-hoover-chain-variables: yes

**Other Parameters**

OK Cancel Load Save Reset

エネルギーと圧力の  
長距離補正を行う

タンパクの骨格原子を固定する。

[Options]タブをクリック

mdrun

MPI (for Remote Job)

# of Processes: 1  
# of Threads: 4

Verbose Output

maxwarn: 10

Backup Working Directory

Concatenate .edr and .trr File

Unwrap Atoms (trjconv -pbc nojump)

Enable Double Precision

Restore Working Directory

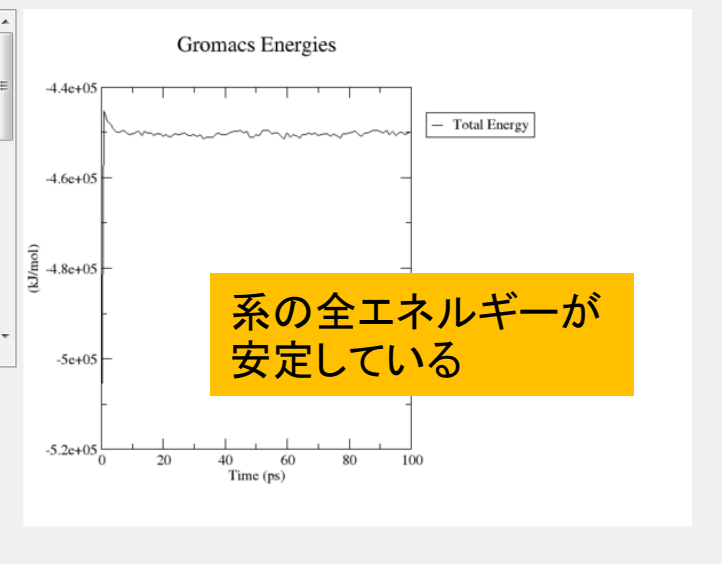
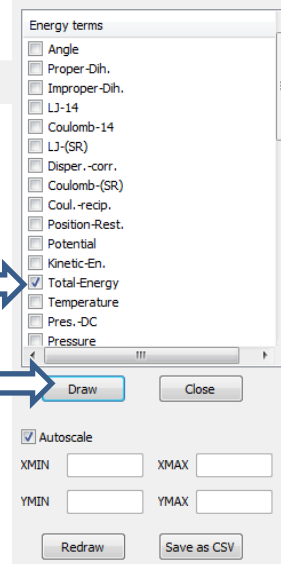
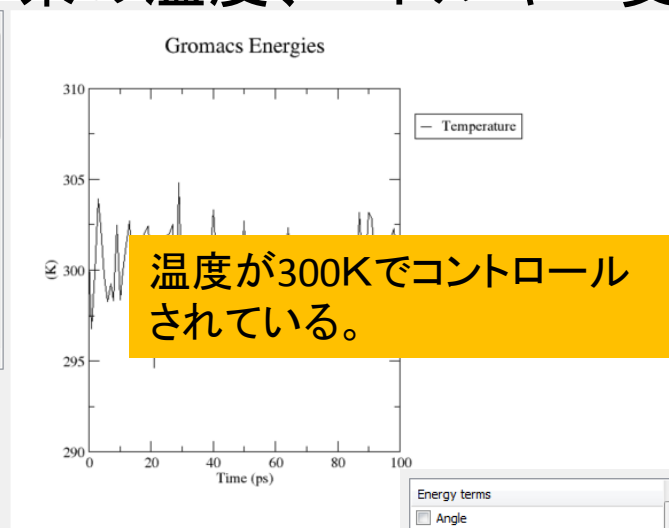
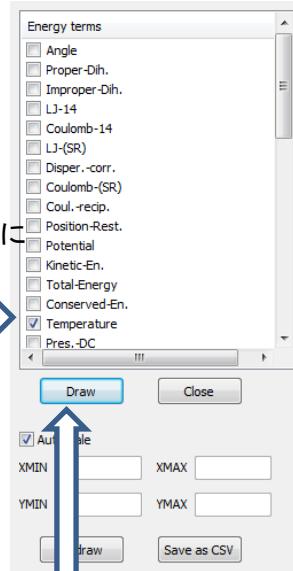
OK Cancel Load Save Reset

使用するPCのコア数  
に応じて変更する。

[OK]をクリック

→ Gromacsを起動 → 計算終了

## IV. 熱平衡計算(温度一定)を行う(2) ～系の温度、エネルギー変化を確認する～



# V. 熱平衡計算(温度・圧力一定)を行う(1)

最初に[Parameters (1)]タブをクリック

Extending Simulationに  
チェックを入れる。

integratorをmdに変更  
する。

100 ピコ秒 (2 fs \* 50,000  
step) のMD計算を行う。

Parinello-Rahman法  
で圧力制御を行う。

2.0に設定する。

all bondsに変更  
(すべての結合を  
拘束する。)

500step毎にファ  
イル出力させる

V-rescale 法で温度制御を行う。

V-rescale法で温度制御を行う。

Protein Non-proteinと入力する。

どちらも300 K (約25°C)に設定する。

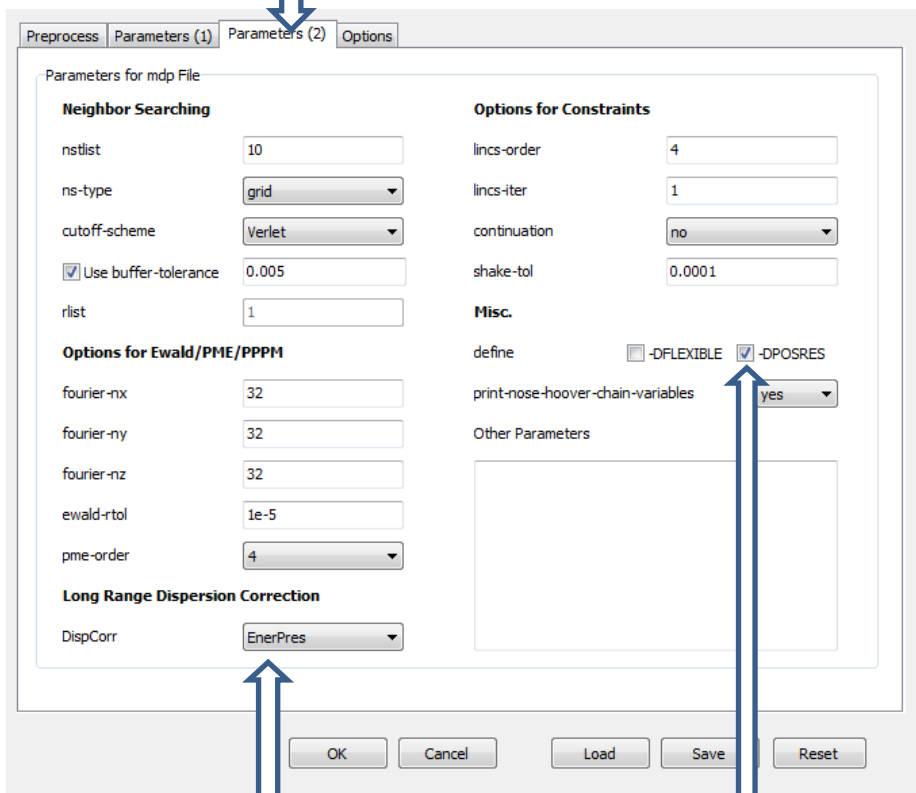
どちらも0.1 0.1に設定する。



# V. 熱平衡計算(温度・圧力一定)を行う(2)

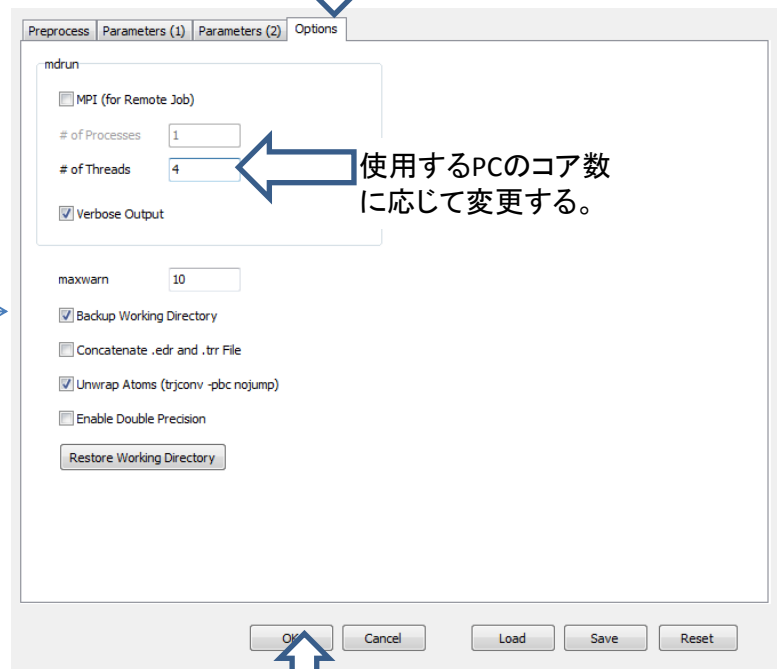
[Parameters (2)]タブをクリック

[mdrun]タブをクリック



エネルギーと圧力の  
長距離補正を行う

タンパクの骨格原子を固定する。



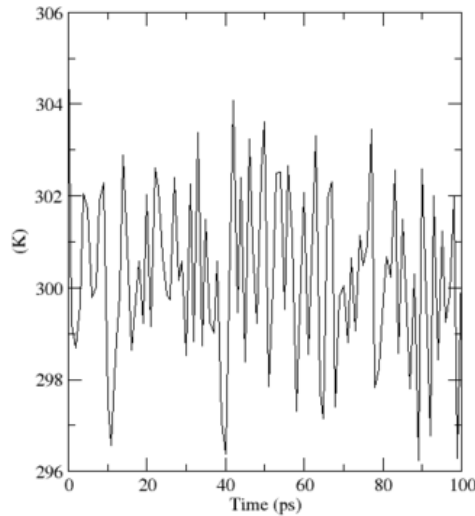
使用するPCのコア数  
に応じて変更する。

[OK]をクリック

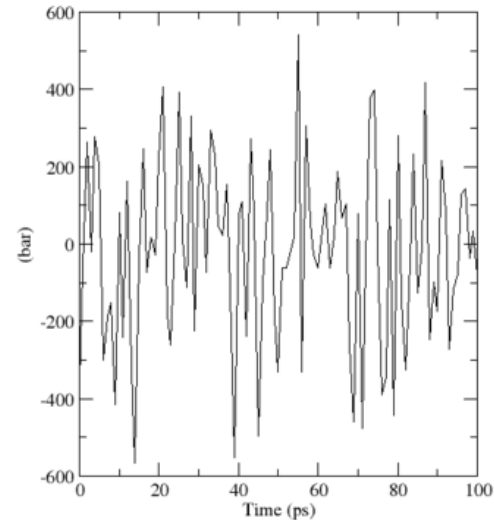
Gromacsを起動 → 計算終了  
⇒ 43:30

プロセッサ:	Intel(R) Core(TM) i5-2520M CPU @ 2.50GHz 2.50 GHz
実装メモリ (RAM):	8.00 GB (7.89 GB 使用可能)
システムの種類:	64 ビット オペレーティング システム

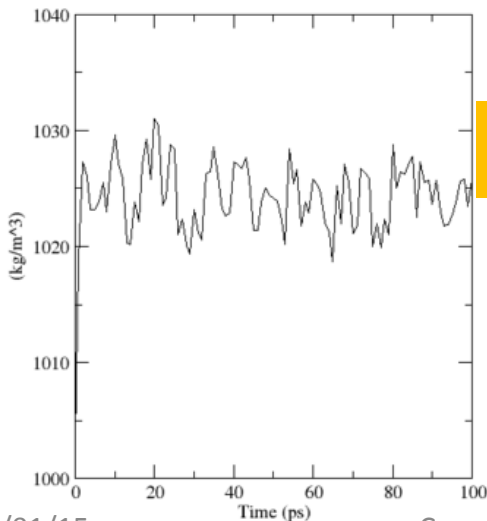
# V. 熱平衡計算(温度・圧力一定)を行う(2) ～系の温度、エネルギー、密度変化などを確認する～



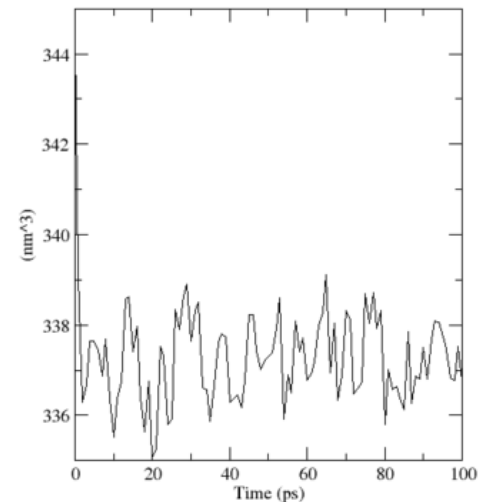
温度が300Kに制御されている。



圧力も制御されている。



密度が、ほぼ 1 g/cm<sup>3</sup> となっている。



体積変化も安定している。

# VI. 本計算(1ナノ秒)を実行する(1)

最初に[Parameters (1)]タブをクリック

Extending Simulationに  
チェックを入れる

gen-vel をno に変更する。

integratorをmdに変更

1ナノ秒 (2 fs \* 500,000  
step) のMD計算を行う。

Parinello-Rahman法で  
圧力を行う。  
2.0に設定する。

all bondsに変更  
(すべての結合を  
拘束する。)

1000step毎にファイ  
ル出力させる

V-rescale法で温度制御を行う。 どちらも300 K (約25°C)に設定する。

どちらも0.1 0.1に設定する。

## VI. 本計算(1ナノ秒)を実行する(2)

[Parameters (2)]タブをクリックする。

エネルギーと圧力の  
長距離補正を行う

チェックを外す。

[Option]タブをクリック

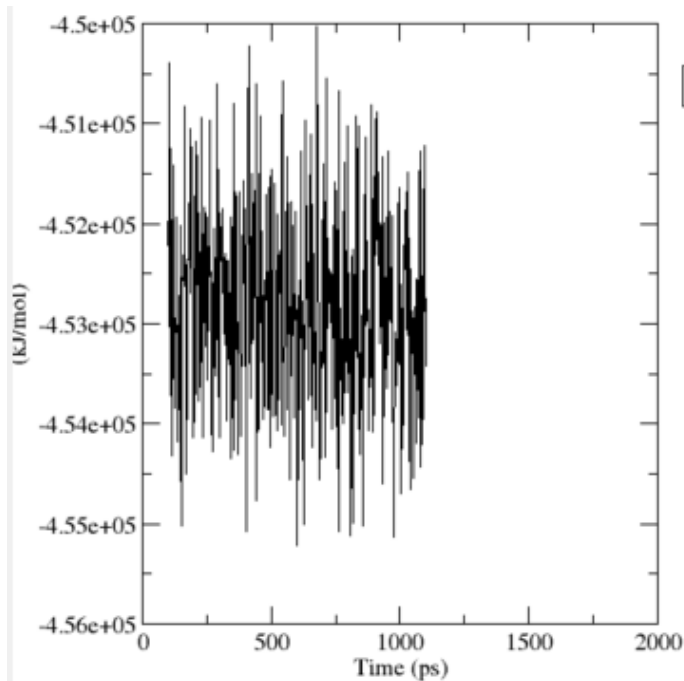
使用するPCのコア数  
に応じて変更する。

[OK]をクリック

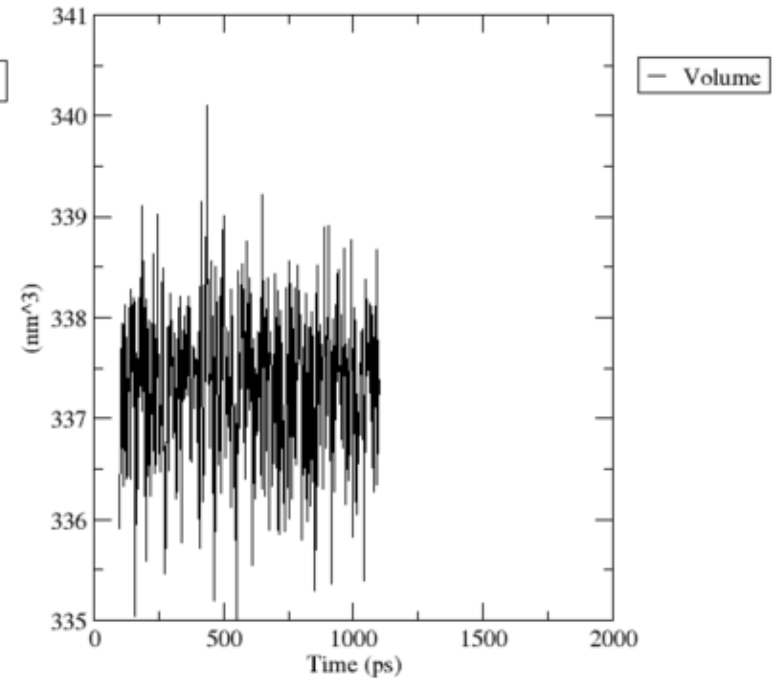
→ Gromacsを起動 → 計算終了

⇒ 7h10:11

## VII. 計算結果を確認する(1) ～系のエネルギー、体積変化などを確認する～



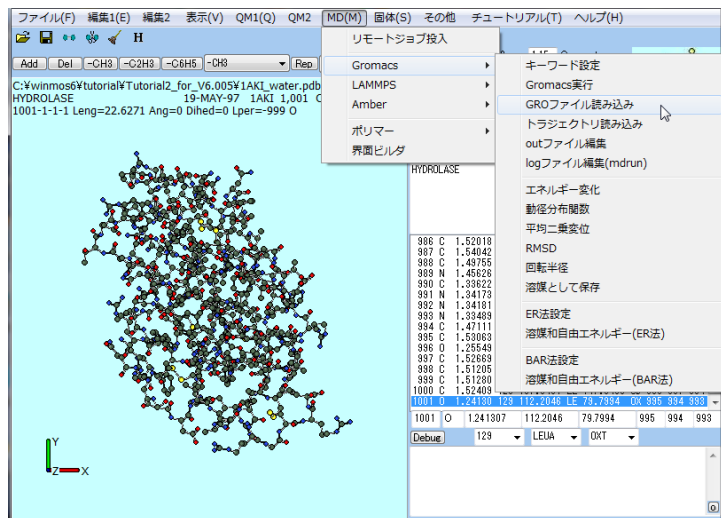
100ps ~ 1100 psの全エネルギーの変化



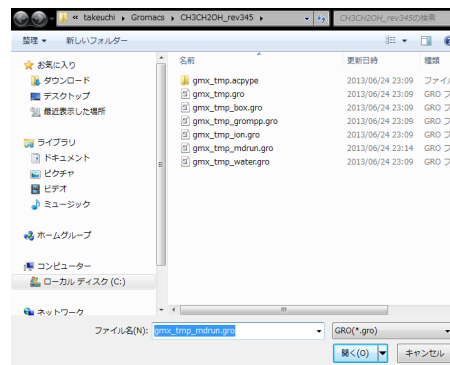
100ps ~ 1100 psの体積変化

# VII. 計算結果を確認する(2) ～トラジェクトリーを確認する 1～

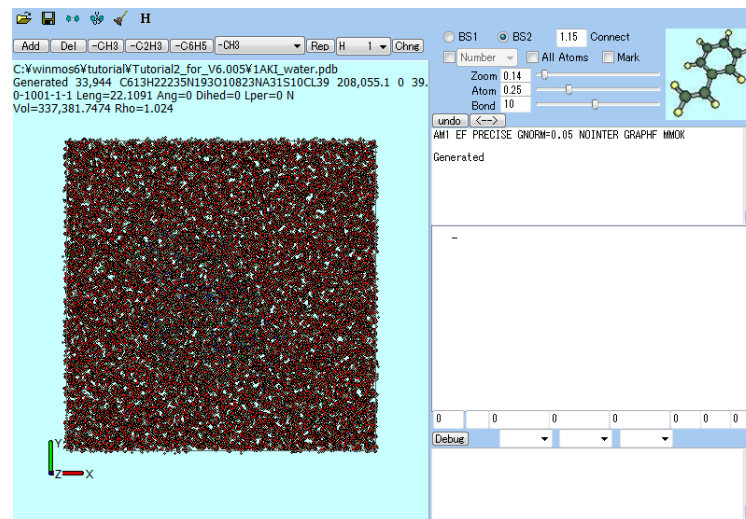
MD(M)→Gromacs→ GMOファイル読み込み を起動



gmx\_tmp\_mdrun.groを指定

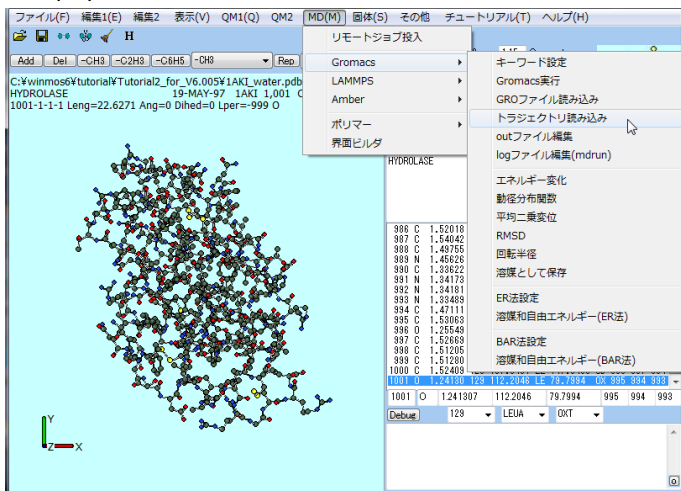


MDの最終ステップ(500,000ステップ  
= 1000 ps) の3D構造が表示される

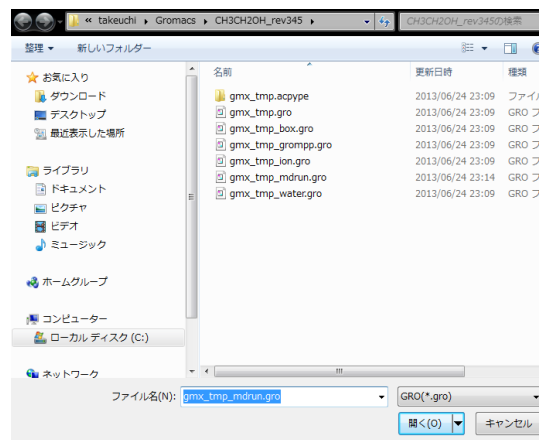


# VII. 計算結果を確認する(3) ～トラジェクトリーを確認する 2～

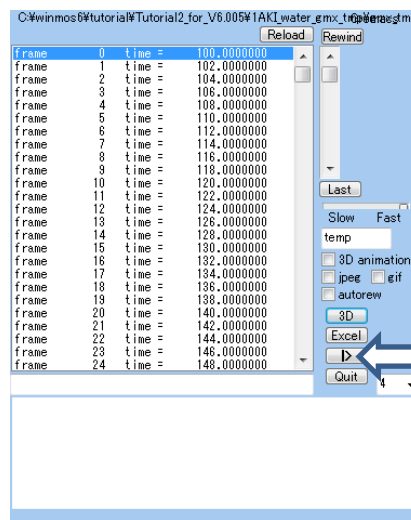
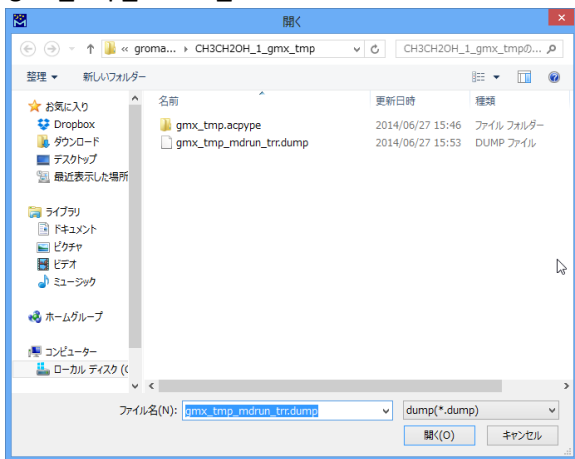
MD(M)→Gromacs→トラジェクトリ読み込みを起動



gmx\_tmp\_mdrun.groを指定

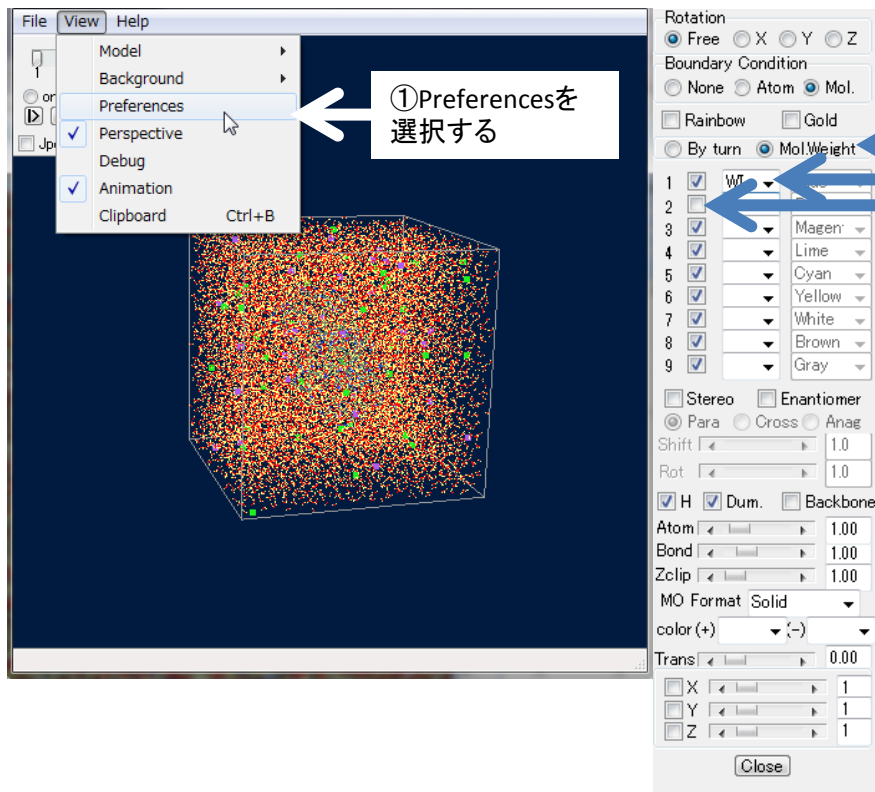


gmx\_tmp\_mdrun\_trrを指定



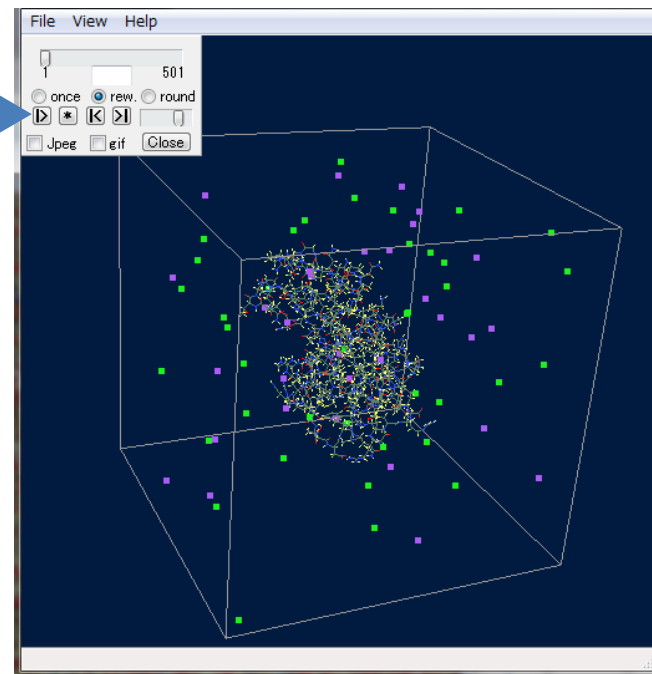
再生ボタンをクリック  
(開くのにかかる時間がある)

## VII. 計算結果を確認する(4) ～トラジェクトリーを確認する3～



- ② Mol. Weightを選択する。
- ③ WIを選択する。
- ④ チェックを外し水を非表示にする。

- ⑤ 再生ボタンをクリックする



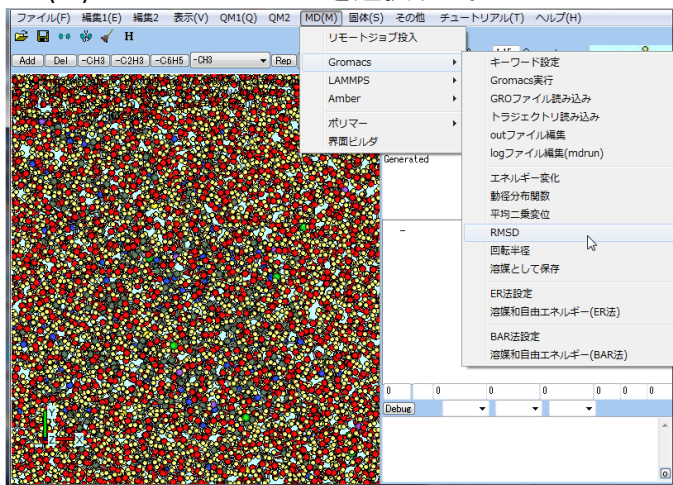
たんぱくとイオンが表示され、アニメーションが始まる。



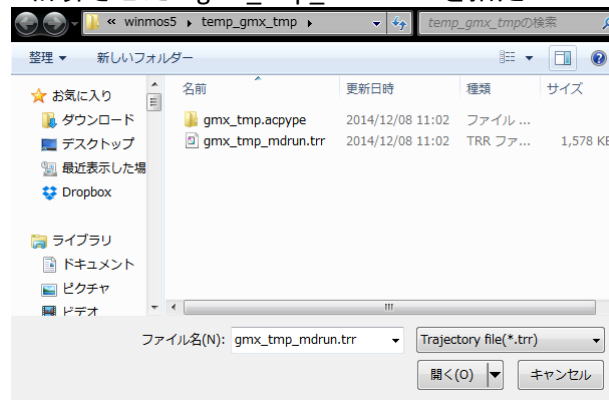
# VIII. バックボーンのRMSDを計算する(1)

タンパクのバックボーンの初期構造とMD計算途中の構造の差異をRMSDで比較し、タンパクの構造が崩れることなくMD計算が正常に進行したかを確認する。

MD(M)→Gromacs→RMSDを選択する。



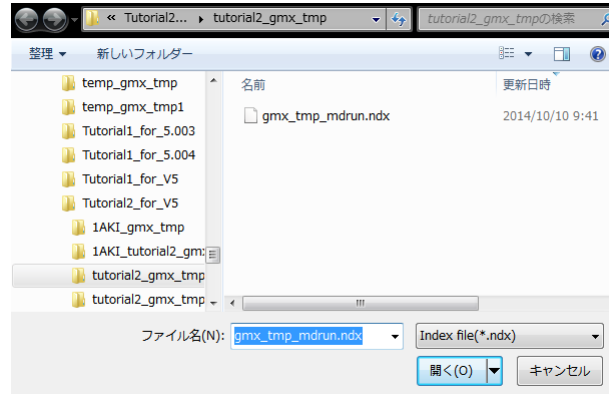
計算させたいgmx\_tmp\_mdrun.trrを指定



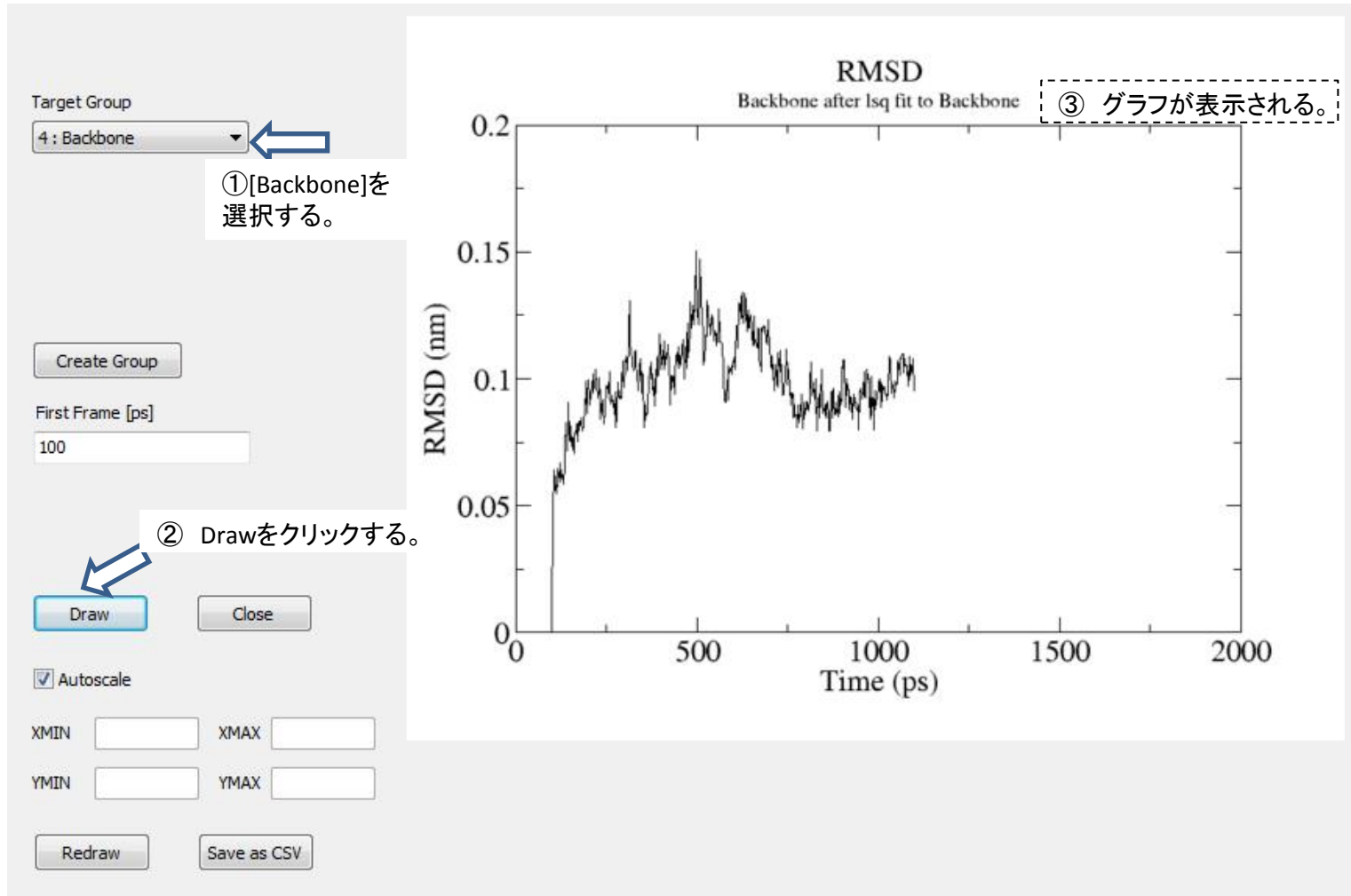
比較対象となるgmx tmp mdrun.tprを指定



インデックスファイルgmx\_tmp\_mdrun.ndxを選択



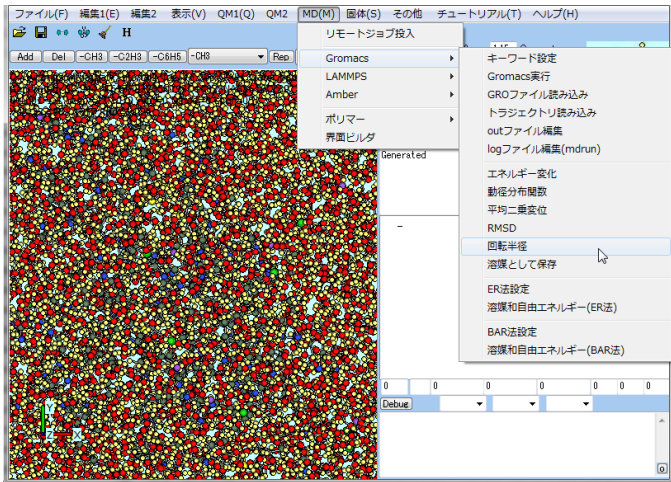
## VIII. バックボーンのRMSDを計算する(2)



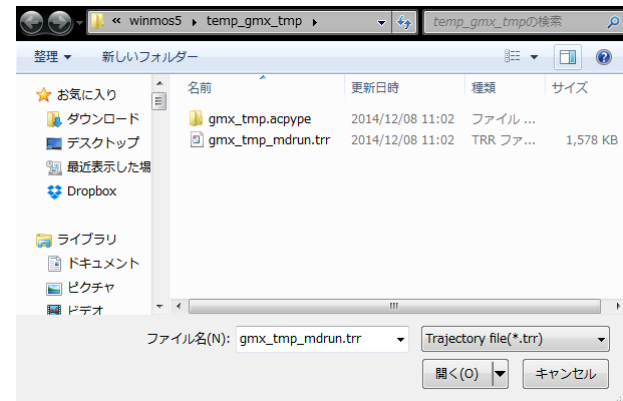
# IX. バックボーンの回転半径を計算する(1)

タンパクのバックボーンの回転半径(Rg)の時間変化を確認し、タンパクの構造が崩れることなくMD計算が正常に進行したかを確認する。

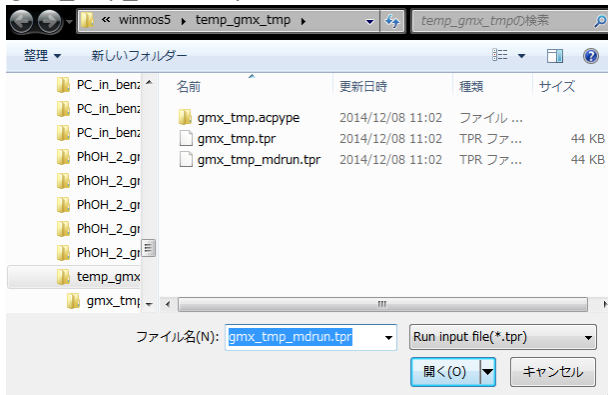
MD(M)→ Gromacs → 回転半径を選択する。



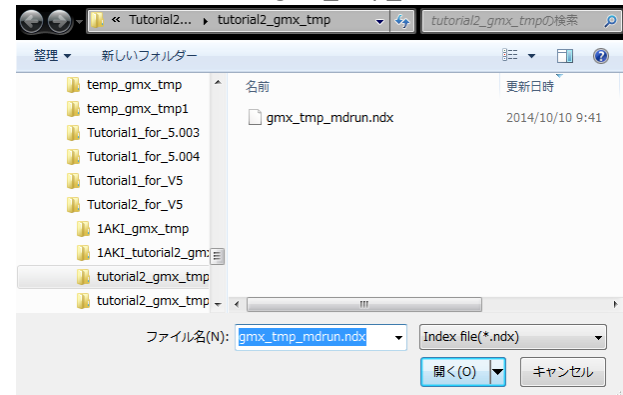
計算させたいgmx\_tmp\_mdrun.trrを指定



gmx\_tmp\_mdrun.tprを選択



インデックスファイルgmx\_tmp\_mdrun.ndxを選択



## IX. バックボーンの回転半径を計算する(2)

