#### **M** winmostar チュートリアル

# Gromacs タンパク質

#### V11.13.0 2025年 7月 1日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.



- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方はビギナーズマニュアルを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
  - Winmostar導入講習会:基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
  - <u>Winmostar基礎講習会</u>:理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
  - 個別講習会:ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず<u>よくある質問</u>を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の 再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾な く、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。



 このチュートリアルでは、ニワトリタンパクリゾチームのPDBファイルからGromacsで計算を 流すための手段を示します。



#### 注意点:

- PDBのXRDからの情報に含まれる結晶水の情報を削除し、逆に含まれていない水素を補完する 必要があります。
- 系のサイズ(溶媒の数)もタンパク質の挙動に影響を与えます。
- 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があります。
- 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。

#### 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/installation/</u>インストール方法のCygwinの設定手順に従い セットアップします。

(6) 以下のいずれかのリンク先の手順でWinmostar用のCygwin環境 (cygwin\_wmと呼びます)を構築します。 ビルド済みのcygwin wmをインストールする場合 (推奨) ← こちら

<u>cygwin wmをビルドする場合</u>(非推奨、上級者向け) Cygwinの代わりにWindows Sub*s*ystem for Linuxを用いる場合(ベータ版)

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。

チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)	; プログラムパス		L	^
🞰 🛱 🕶 📑 (ラベル/電荷を隠す) ∨	 5¥jmol.bat	GAMESS(1): GAMESS(2):	C:¥Users¥Public¥gamess-64¥games C:¥ff820_windows¥Firefly820.exe	
Replace 🔮 🍝 🗊 🚳 😍 🍄 😫 🛱	Files¥CCDC¥Mercury 1	こちら NWChem:	C:¥G16W¥g16.exe C:¥nwchem¥bin¥nwchem.exe	
255	Files¥OpenSCAD¥open:	Cygwin:	C:¥cygwin_wm	

#### Winmostar V11の動作モード

V11にはプロジェクトモードとファイルモードの2つの動作モードが用意されています。 本書ではプロジェクトモードでの操作方法を解説します。 ファイルモードの操作方法はV10のチュートリアルを参照してください。

#### Winmostar (PREMIUM) V11.0.1

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(D) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)



基本的な操作方法はGromacs基礎編チュートリアルを参照してください。

- **1. ファイル | 新規プロジェクト**をクリックし、プロジェクト名に「protein」と入力して保存を クリックします。
- 2. ファイル | インポート | Samplesファイル | 1aki.pdbをクリックします。
  - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりにファイル | ファイルをインポートを使います。
- 3. ファイルをインポートダイアログで破棄して読み込みをクリックします。



- 1. 選択 | 分子種によるグループ選択をクリックし、Comp2 O 78の行をクリックし、Closeを クリックします。
- 2. **グループ編集 | グループを削除**をクリックし、**Delete**をクリックします。



- 1. 編集 | 水素を付加 | pdb2gmxを使用をクリックし、Executeをクリックします。
  - 後で残基情報から力場を割り当てるため、水素が予め含まれるpdbデータの場合もこの処
     理が必要な場合があります。





- 1. 
  御 溶媒を配置/セルを構築をクリックします。
- **2. Add Displayed Molecule**をクリックし、「**1**」と入力し**OK**をクリックします。
- 3. Add Waterをクリックし「3000」と入力しOKをクリックします。
- **4. Set Density**に「**0.9**」と入力し**Build**をクリックします。「…処理を続行しますか?」と表示されたら**はい**をクリックします。



- 1. MD | 水をイオンに置換をクリックします。警告が表示されるのではいをクリックします。
- 2. Executeをクリックします。

echo "SOL"   gmx genion -	%OUTPUTNAME%.tmp.tpr -o	%OUTPUTNA	ME% ^
			~
			>
Hide Detail	Execut	ie 💦	
Item	Value	~~~~	
Neutral	True		$\sim$
Concentration [mol/L]	0.15		
Cations	NA		
Number of Cations	0		
Anions	CL		
	0		



### II. 計算の実行(タンパク拘束エネルギー極小化)

- 1. ソルバからGromacsを選択し、 [M] (ワークフロー設定)を開きます。
- 2. 「…電荷を設定しますか?」と表示されたらいいえをクリックします。
- 3. 力場を割り当てウィンドウでOKをクリックします。「NOTE: …」と表示されたらOKをクリックします。「力場が設定されました」と表示されたらOKをクリックします。
- **4. Gromacs Workflow Setup**ウィンドウで# of Jobsの一ボタンを2回クリックします。
  - このエネルギー極小化計算は収束しませんが、のちのNVT計算への悪影響はありません。 現在のWinmostarの仕様上、収束しなかった場合に連続計算が打ち切られるため、ここ ではエネルギー極小化計算のみ実行します。連続計算を実行し打ち切られた場合も、後で work1から継続すれば同様の計算ができます。
- 5. PrecisionをLowに変更し、Detailsをクリックします。

🞯 Gromacs Workflow Setup			—		×	
Preset Fluid/Amorphous NPT Equilibrat	ion v (modifie	l) # of J	obs: +	1	] - 🕻	
		Enable scan	calculation	Config	g	
1st job						
Ensemble Minimize $\vee$	Temperature [K] 30	. Pressure [atm]	1.		]	
Simulation time [ps] 10.	# of snapshots 50	Initial velocity	From par	rent		_
Free boudnary condition	Precision	n De	etails	$\langle$		
					_	-
Reset Import 🔽 E	Export	0	ж	Cano	el	

## II. 計算の実行(タンパク拘束エネルギー極小化)

- 1. Advanced タブに移動し-DPOSRES にチェックを入れOKをクリックします。。
- 2. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。

Gromacs Keyword Set	up		_		×
Preset	~				
Basic Advanced	n Other	Automatic Ontions			
Boundary Condition		Constraints			
pbc	xyz 🗸 🗸	constraints	hbonds		$\sim$
Energy Minimization		constraint-algorithm	LINCS		$\sim$
emtol [KJ/mol/nm]	100.0	continuation	no		$\sim$
emstep [nm]	0.01	lincs-order	4		
Run Control		lincs-iter	1		
comm-mode	Linear 🗸 🗸	shake-tol	1e-5		
nstcomm	50	Misc.			
Temperature/Pressur	e Coupling	print-nose-hoover-chain-v	ariables	yes	$\sim$
nh-chain-length	10	define		IBLE	
nsttcouple	-1		-DPOS	RES	
nstpcouple	-1				
refcoord-scaling	no 🗸	Extend simulation from	full-precisi	on trajec	tory
Reset Import	Export	ОК		F	lun

### II. 計算の実行(タンパク拘束平衡化)

- 1. work1\_GMX\_MINの計算が終了し**状態**がABORTに変化したら、 **(ワークフロー設定**)を開きます。
  - ABORTでも最終構造が出力されている場合は継続計算は可能です。
- 2. 「継続ジョブを実行しますか?…」と表示されたらはいをクリックします。
- 3. OKをクリックします。「無視して処理を継続しますか?」と表示されたらはいをクリックします。

<b>5</b> 34		ons v			
名前	状態	70			
work1_GMX_MIN	ABORT	Lo			
		>			
TARLEY (works) (MV MIN)					
アクション (work1_GMX_MIN)					

222000 ENC 2001 PACE	「ルツを選択		- 1
ョブの維続元の作業フォル	ダを選択してくださ	50	
	状態	プロファイル	出力ファイル場所
work1_GMX_MIN	ABORT	Local Job	Local

## II. 計算の実行(タンパク拘束平衡化)

- **1. Preset**で「Fluid/Amorphous NPT Equilibration」を選択し直します。
- 2. 1st jobの欄の右上の「-」ボタンをクリックします。
- 3. 1st jobと2nd jobのPrecisionを「Low」に変更します。
- 4. 1st jobのDetailsをクリックします。-DPOSRESにチェックを入れOKをクリックします。
- 5. 2nd jobのDetailsをクリックします。-DPOSRESにチェックを入れOKをクリックします。
- 6. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。

		Gromacs Work	flow Setup				- 🗆	×
		Preset Fluid/Amorp	hous NPT Equilibrati	ion v (mod	lified)	# of Job	s: + 2	-
		Coninue from work1	_GMX_MIN			Enable scan ca	lculation Conf	fig
		1st job					+ -	
🚳 Gromacs Workflow Setup	– 🗆 ×	Ensemble	NVT $\sim$	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1	
Preset Fluid/Amorphous NPT Equilibration	# of Jobs: + 3 -	Simulation time [ps]	10	# of snapshots	50	Initial velocity	Random	/
Coninue from work1_GMX_MIN	Enable scan calculation Config	Free boudnary		Precision	Low $\checkmark$	Details (	modifi	
1st job       Ensemble     Minimize     ✓       Temperature [K]     300.     F	Pressure [atm]	2nd job					+ -	
Simulation time [ps] 10. # of snapshots 50 I	initial velocity From parent V	Ensemble	NPT ~	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1	
Description Madium of	Deteile	Simulation time [ps]	50	# of snapshots	50	Initial velocity	From parent	/
		Free boudnary	>	Precision	Low $\checkmark$	Details (	modifie	
		Reset I	mport E	Export	$\square$	ОК	Car	ncel

#### II. 計算の実行(平衡化)

- work3\_GMX\_NPTの計算が終了し状態がENDに変化したら、 (ワークフロー設定)を開きます。
- 2. 「継続ジョブを実行しますか?…」と表示されたらはいをクリックします。
- 3. work3\_GMX\_NPTを選択しOKをクリックします。
- **4. Preset**で「Fluid/Amorphous NPT Equilibration」を選択し直します。
- 5. 1st, 2nd, 3rd jobのPrecisionを「Low」に変更します。
- 6. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。

×	プロジェクト			
作講	莨フォルダ (protein)		Options ▼	
	名前	状態	70	
	work1_GMX_MIN	ABO	RT Lo	
0	work2_GMX_NVT	END	Lo	
	work3_GMX_NPT	END	Lo	
<			>	
アクション (work3_GMX_NPT)				
	Coordinato (Toitial)		~	

		Reset
winmostar	Copyright 2008-2025 X-Ability Co.,	Ltd.

🚾 Gromacs Workflow Setup				_		Х
Preset Fluid/Amorphous NPT Equilibrat	tion ~ (ma	odified)	# of Jo	obs: +	3	-
Coninue from work3_GMX_NPT			Enable scan	calculation	Confi	ig
1st job						
Ensemble Minimize ~	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.		
Simulation time [ps] 10.	# of snapshots	50	Initial velocity	From par	rent 🗸	
Free boudnary condition	Precision	Low ~	De	tails		
2nd job						
Ensemble NVT ~	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.		
Simulation time [ps] 10.	# of snapshots	50	Initial velocity	Random	~	
Free boudnary condition	Precision	Low $\checkmark$	De	tails		
3rd job						
Ensemble NPT ~	Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.		
Simulation time [ps] 50	# of snapshots	50	Initial velocity	From par	rent 🗸	
Free boudnary condition	Precision	Low ~	De	tails		]
Reset	Export		0	ĸŖ	Can	cel

#### II. 計算の実行(本計算)

- work6\_GMX\_NPTの計算が終了し状態がENDに変化したら、 (ワークフロー設定)を開きます。
- 2. 「継続ジョブを実行しますか?…」と表示されたらはいをクリックします。
- 3. work6\_GMX\_NPTを選択しOKをクリックします。
- **4. Preset**で「Fluid/Amorphous NPT Production」を選択します。
- 5. PrecisionとSimulation timeを適宜変更します。本書ではPrecisionを「Low」に変更します。
- 6. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。

♥ プロジェクト				
作算	莨フォルダ (protein)	Opti	ons 🔻	
	名前	状態	70	
	work1_GMX_MIN	ABORT	Lo	
	work2_GMX_NVT	END	Lo	
	work3_GMX_NPT	END	Lo	
0	work4_GMX_MIN	END	Lo	
	work5_GMX_NVT	END	Lo	
	work6_GMX	END	Lo	
<			>	
$\pi h$	State (work4_CMV_MIN)			

🚾 Gromacs Workflow Setup	- 🗆 X
Preset Fluid/Amorphous NPT Production $\checkmark$ (modified)	# of Jobs: + 1 -
Coninue from work6_GMX_NPT	Enable scan calculation Config
1st job	
Ensemble NPT V Temperature [K] 300.	Pressure [atm] 1.
Simulation time [ps] 50 # of snapshots 250	Initial velocity From parent $\sim$
Free boudnary condition     Precision     Low	Details
Reset Import 💌 Export	OK Cancel

#### III.結果解析

ここではタンパク質の拘束を確認する方法を紹介します。

- **1. 作業フォルダ**で確認したいジョブ(本書ではwork3\_GMX\_NPT)をクリックし、**アクション** でRoot Mean Square Deviationをクリックします。
- 2. Target Groupで「5: Main Chain」を選択しDrawをクリックします。





• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、基礎編チュートリアルについては<u>Winmostar基礎講習会</u> へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては<u>個別講習会</u>のご依頼をご検討ください。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず<u>よくある質問</u>を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の 再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上