winmostar チュートリアル

Gromacs
タンパク質

V10.0.5

2020年4月6日　　株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

本書について

- 本書はWinmostar V10の使用例を示すチュートリアルです。

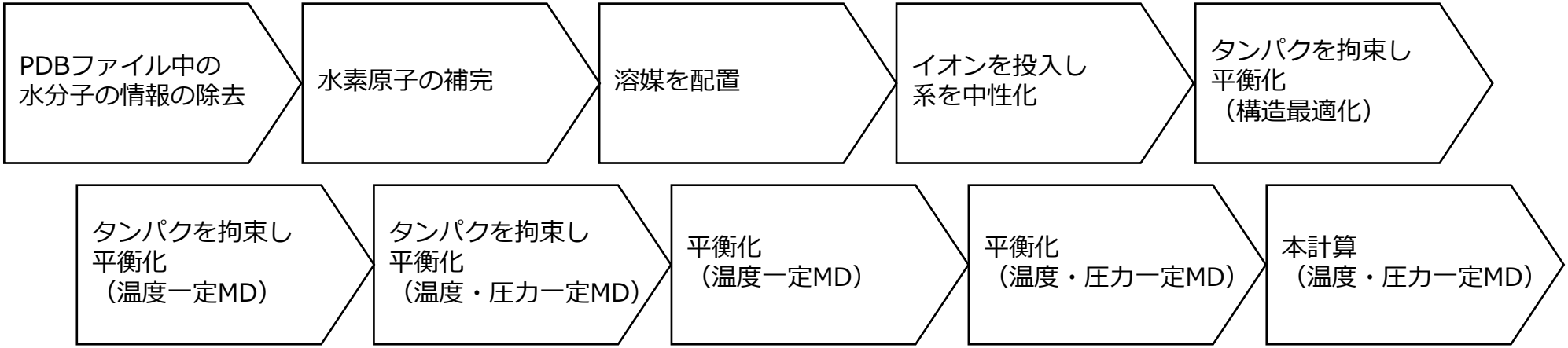
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方はビギナーズガイドを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方はユーザマニュアルを参照してください。

- 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。
  - Winmostar基礎講習会：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、まずよくある質問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。

概要

- 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。

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

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。
- https://winmostar.com/jp/installation/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。

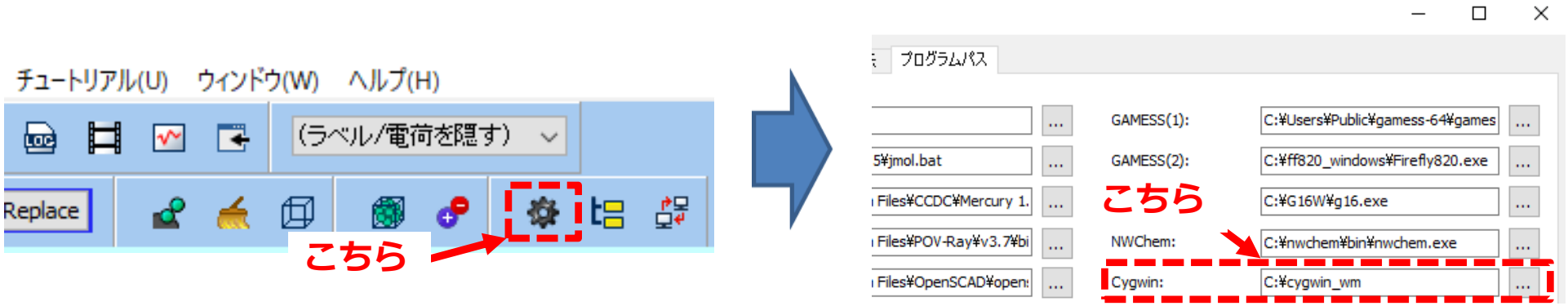
（6）以下のいずれかのリンク先の手順でWinmostar用のCygwin環境（cygwin_wmと呼びます）を構築します。

ビルド済みのcygwin_wmをインストールする場合（推奨） ← こちら

cygwin_wmをビルドする場合（非推奨、上級者向け）

Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合（ベータ版）

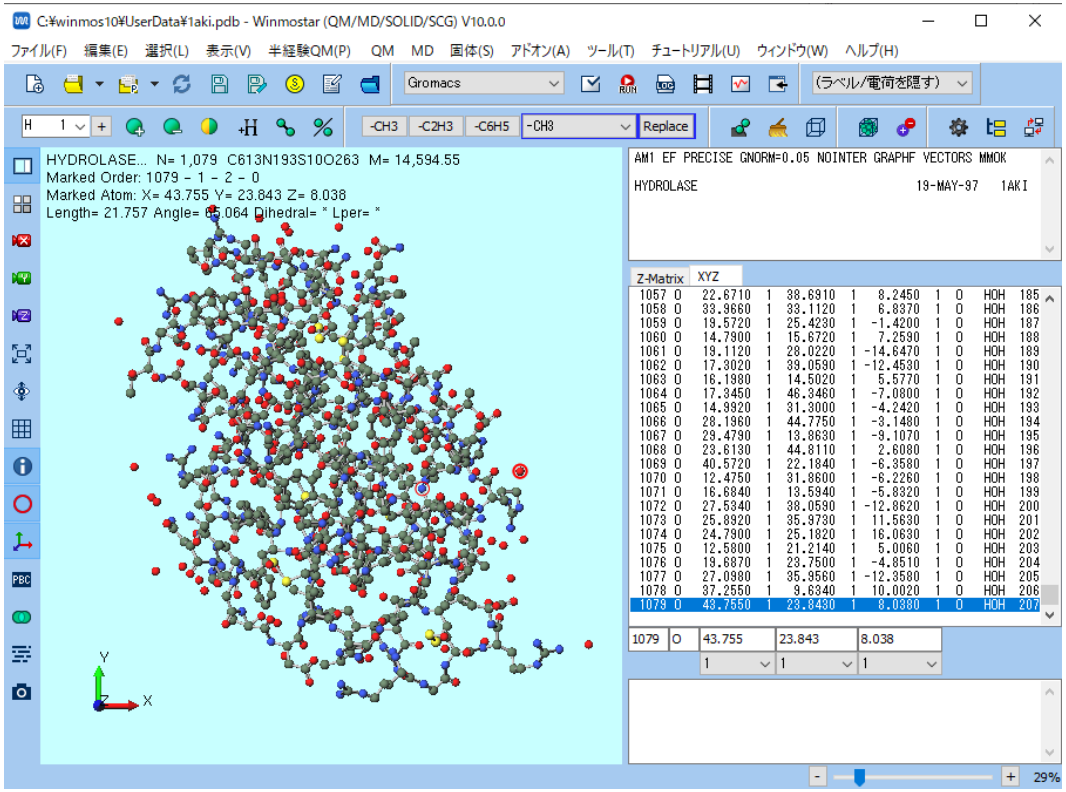
- デフォルトではC:¥直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」＞「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I.　系の作成

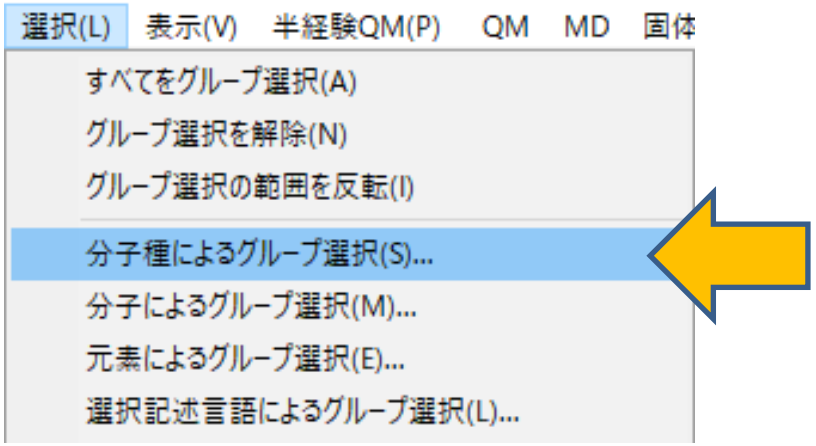
1. **ファイルメニュー | 開く**をクリックし、**開く**ダイアログで拡張子を**PDB File**に変更する
2. サンプルフォルダ内の**1aki.pdb**を開く。
   (デフォルトではC:¥winmos10¥samples¥1aki.pdb)

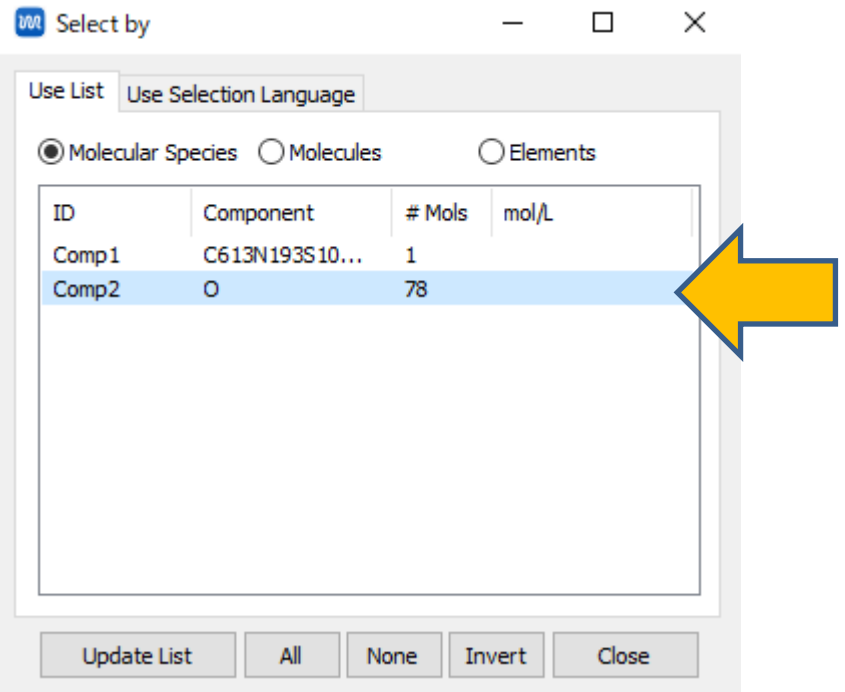


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I.　系の作成

1. **選択 | 分子種によるグループ選択**をクリックする。
2. **Select byウインドウ**で**Comp2 O 78**の項目にチェックを入れる。
3. **Close**ボタンをクリックする。



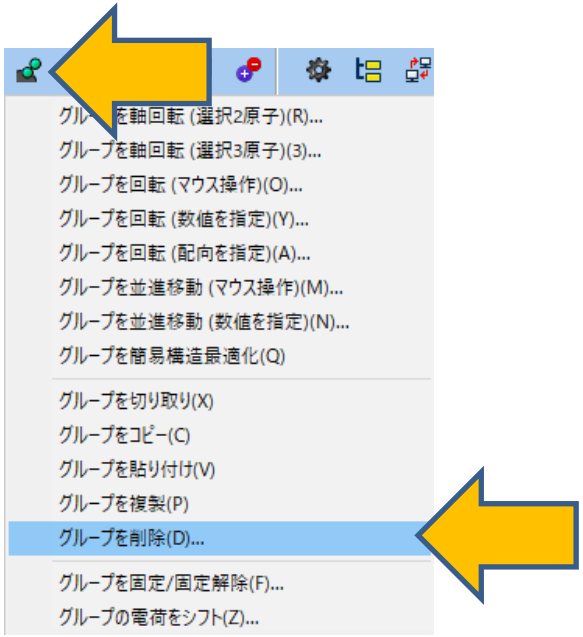


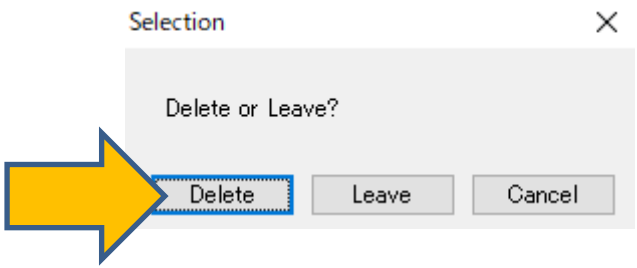
メイン画面上で結晶水の酸素原子が
グループ選択された（青丸で囲まれた）状態になる。

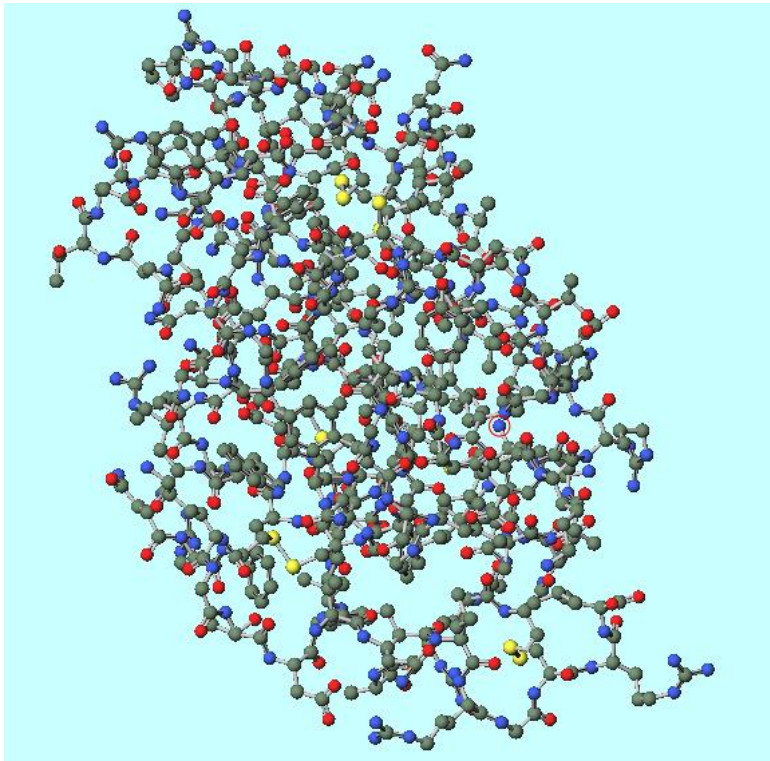
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I.　系の作成

1. 結晶水の酸素原子が選択された状態で、**グループ編集 | グループを削除**をクリックする。
2. **Selection**で**Delete**をクリックすると、結晶水が削除される。



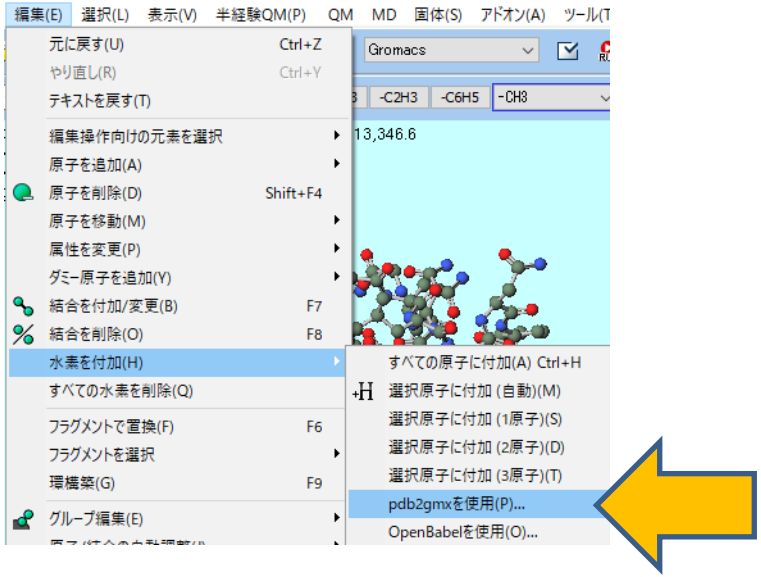


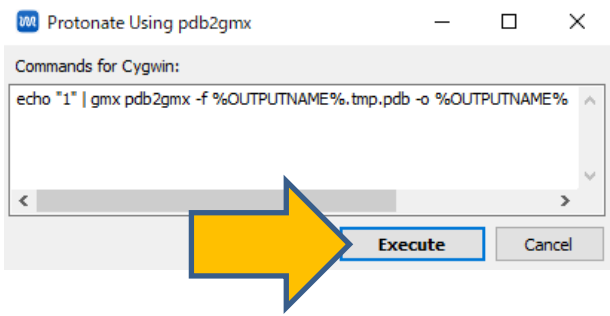


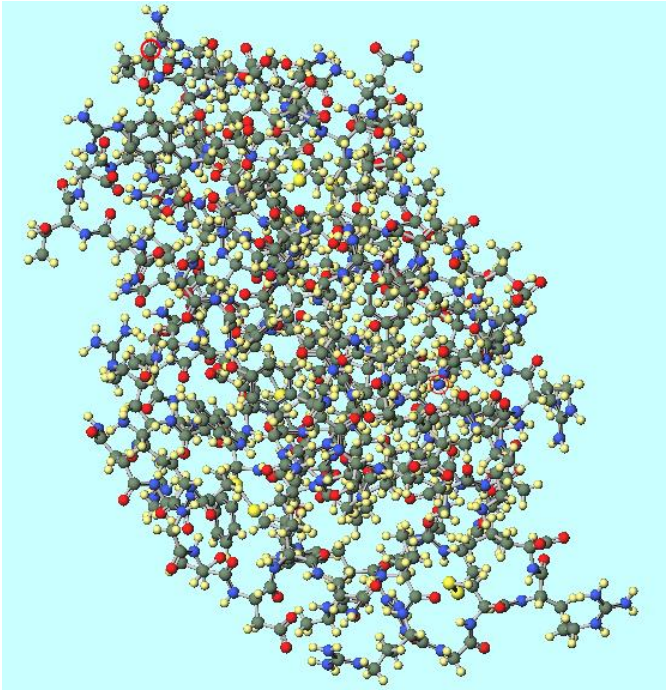
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 系の作成

1. **編集 | 水素を付加 | pdb2gmxを使用**をクリックする。
2. **Protonate Using pdb2gmxウインドウ**で**Execute**をクリックする。





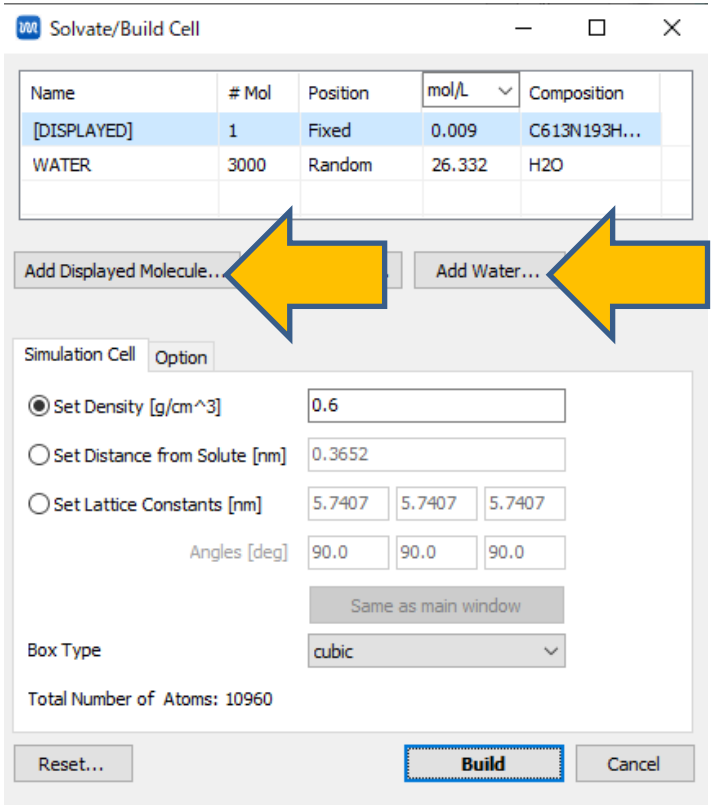


タンパク質に水素が付加される。
水素が予め付いたpdbデータの場合も、
この処理が必要な場合がある。

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 系の作成

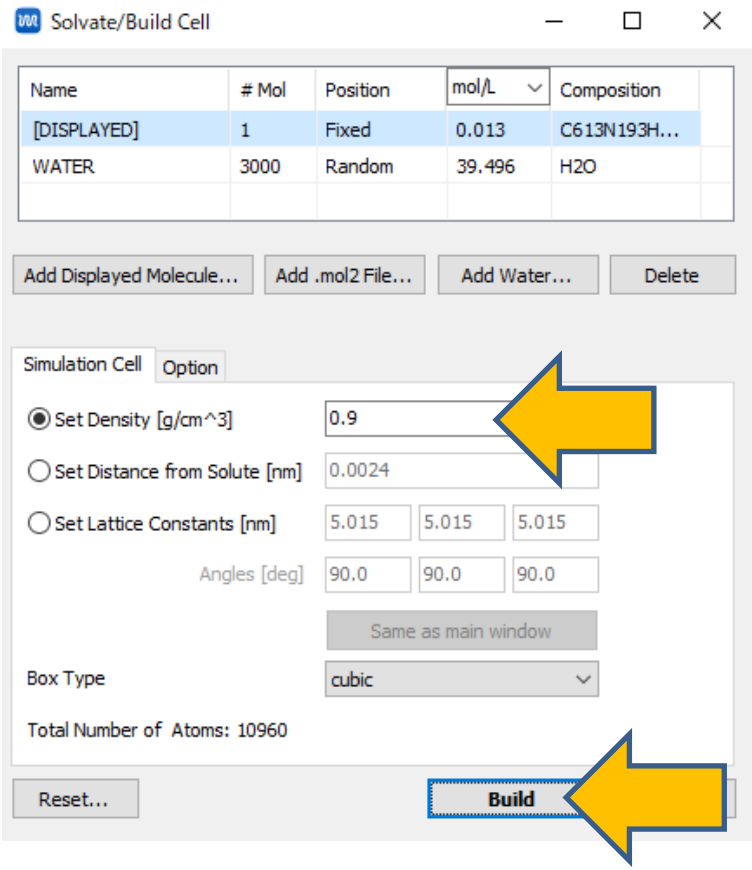
1. **溶媒を配置/セルを構築**をクリックする。
2. **Add Displayed Molecule**をクリックし、**Enter # of molecules**に**1**と入力し**OK**をクリックする。
3. **Add Water**をクリックし、**Enter # of molecules**に**3000**と入力し**OK**をクリックする。

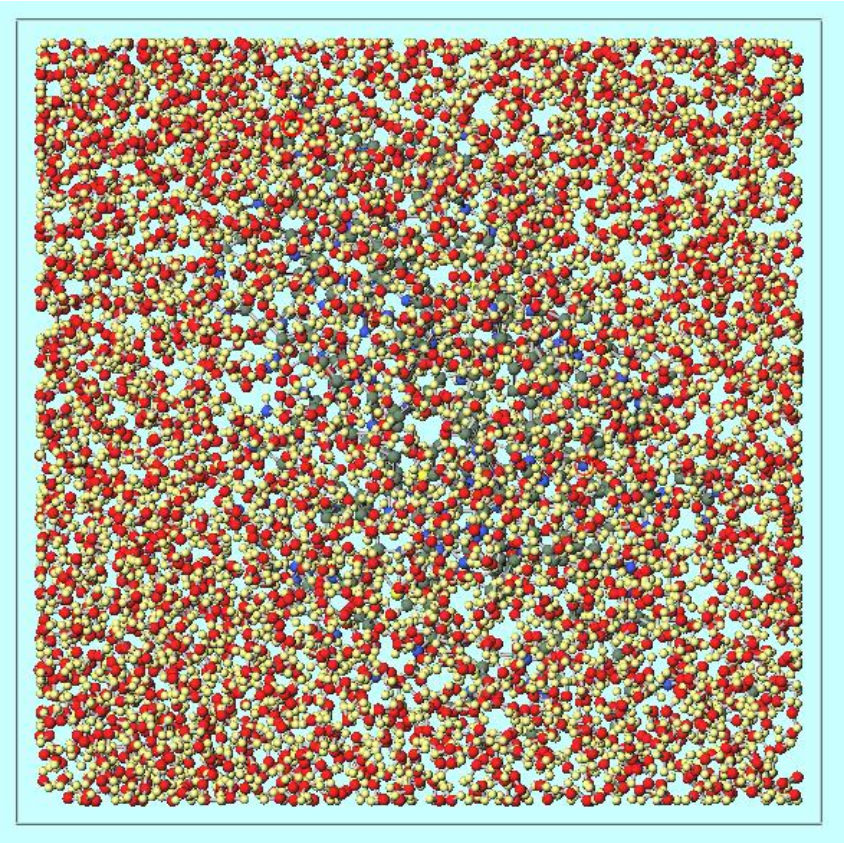


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 系の作成

1. **Set Density**に**0.9**と入力する。
2. **Build**をクリックする。

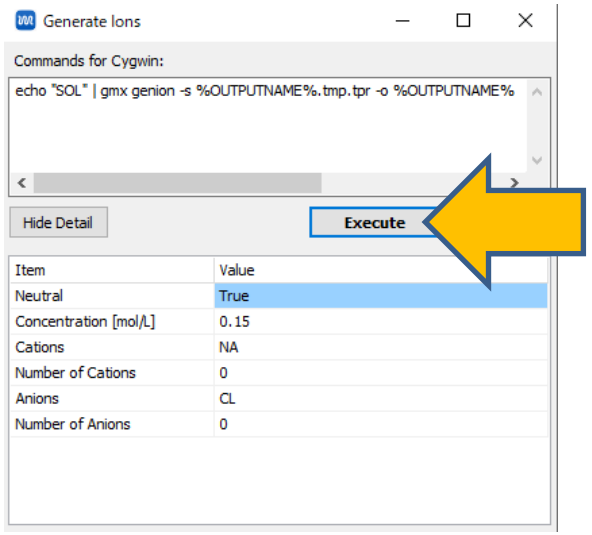


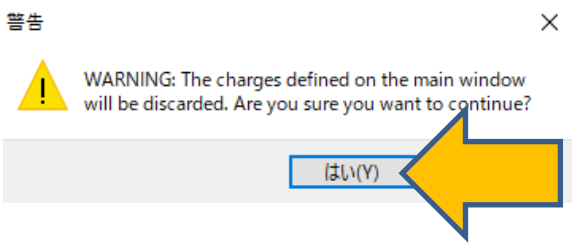


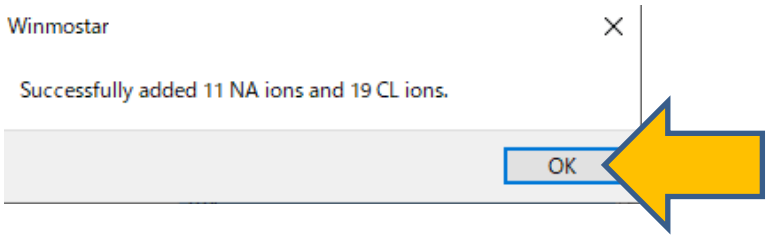
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 系の作成

1. **MD | 水をイオンに置換**をクリックする。
2. 警告が表示されるので**はい**をクリックする。
3. **Generate Ionsウインドウ**で**Execute**をクリックすると、
   イオンが系に配置され系が中和される。



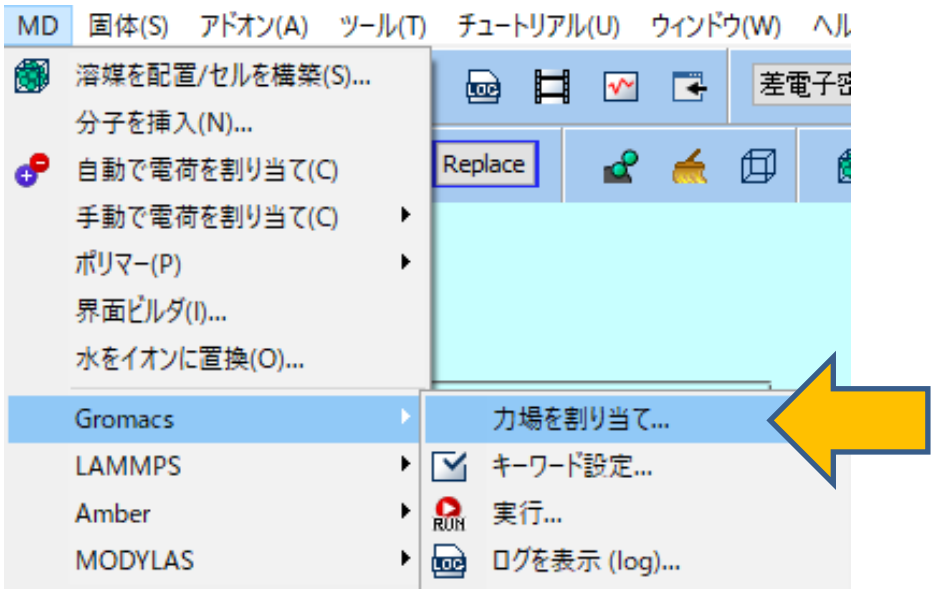


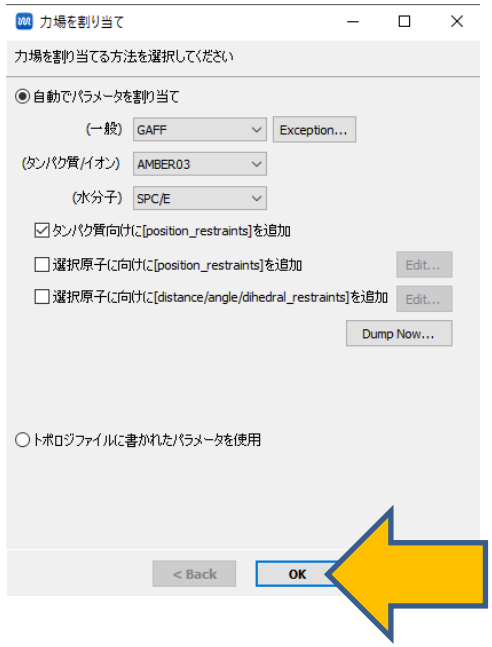


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I.　系の作成

1. **MD | Gromacs | 力場を割り当て**をクリックする。
2. 「電荷が含まれていない分子が含まれます。電荷を設定しますか？」と表示されたら**はい**をクリックし、**電荷を割り当て**ウィンドウで**OK**をクリックする。（V10.1.0以降）
3. **力場を割り当てウインドウ**で**OK**をクリックすると、設定した力場が割り当てられる。

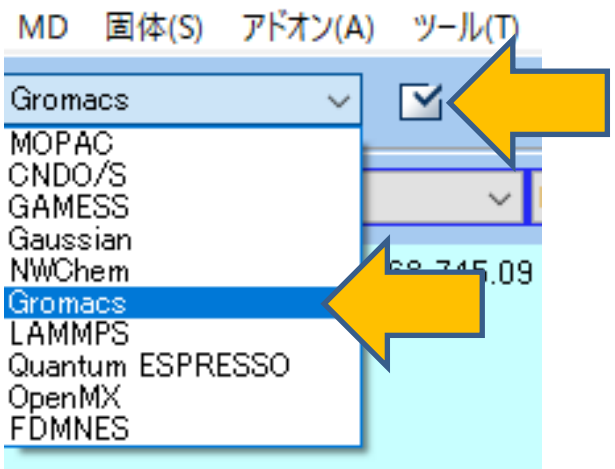


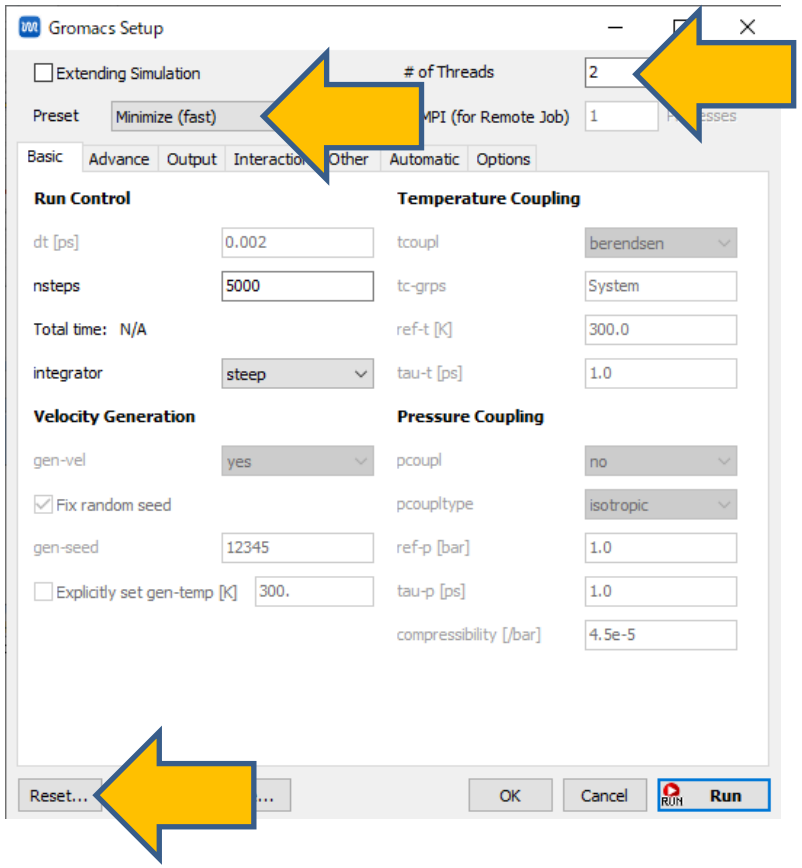


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 系の平衡化

1. ソルバー一覧から**Gromacs**を選択し、 **キーワード設定**をクリックする。
2. **Reset**をクリックする。
3. **Preset**に**Minimize (fast)**を指定し、**# of Threads**に並列数を指定する。

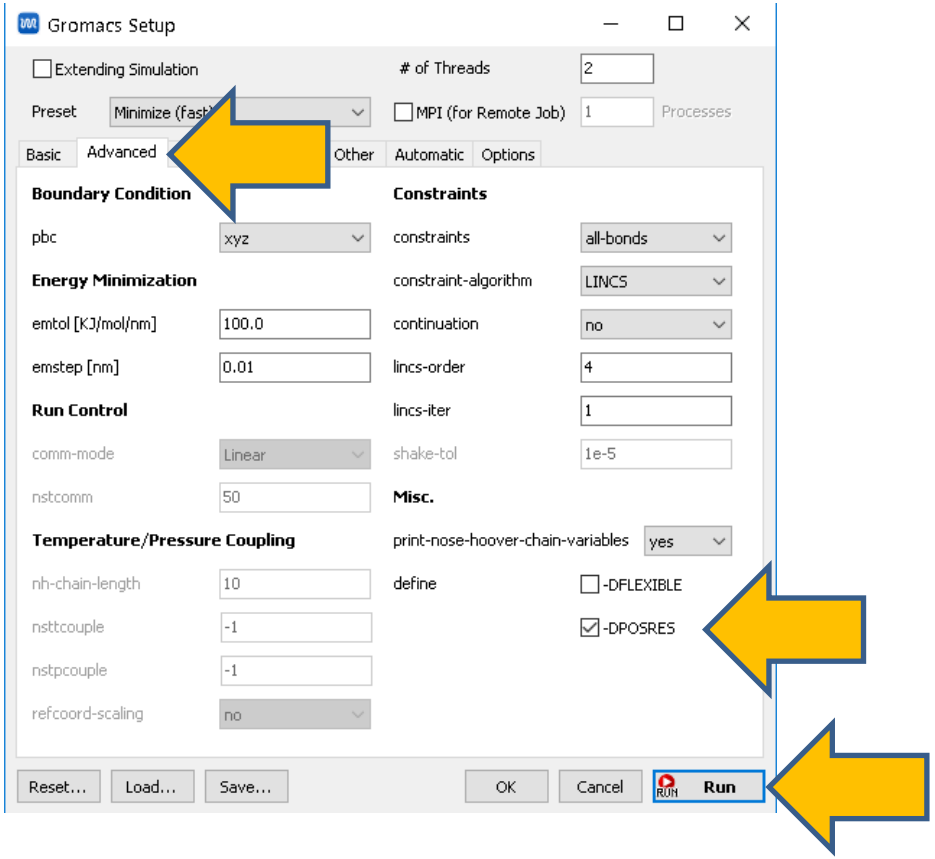




Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 系の平衡化

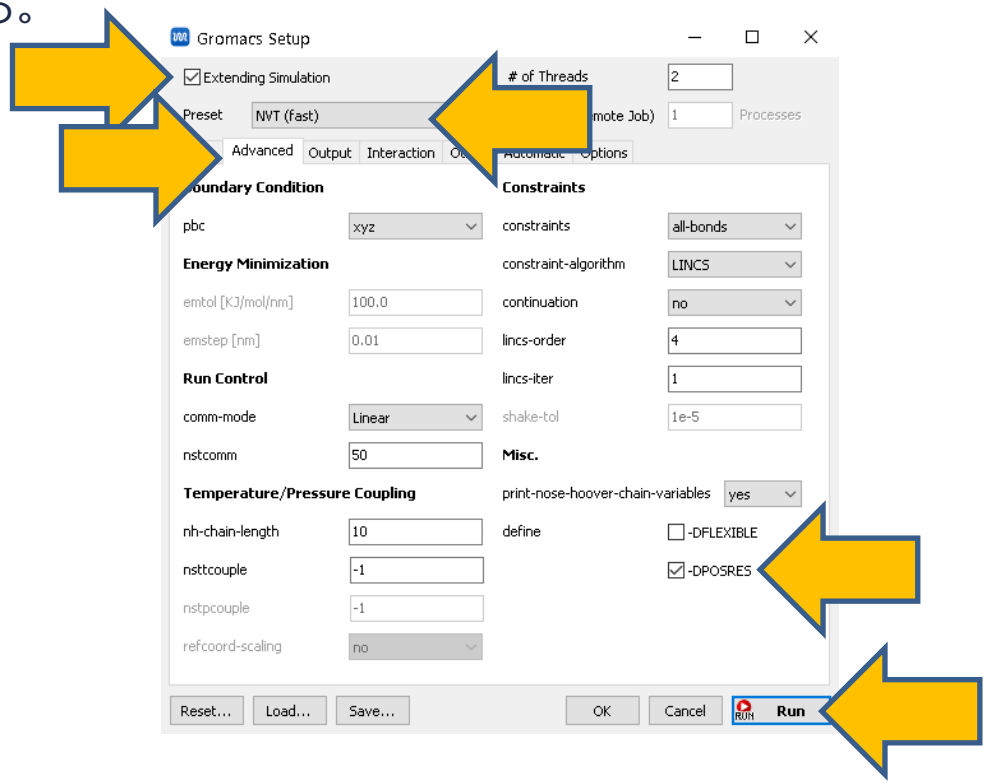
1. **Advancedタブ**の**-DPOSRES**にチェックする。
2. **Run**をクリックする。
3. ファイル名は**1aki.gro**および**1aki.top**として保存する。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 系の平衡化

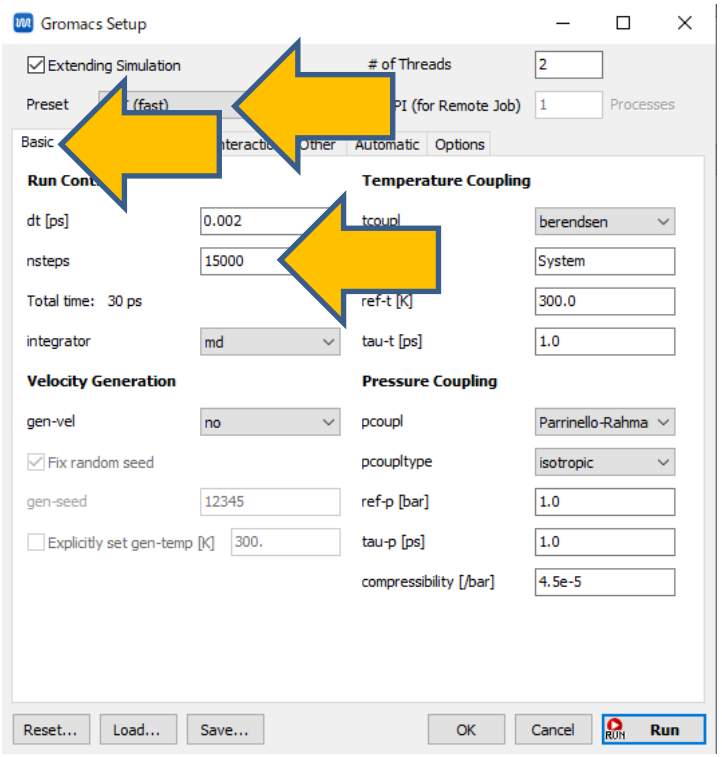
1. 計算終了後、 **キーワード設定**をクリックする。
2. **Extending Simulation**にチェックを入れる。
3. **Preset**に**NVT (fast)**を指定する。
4. **Advancedタブ**の**-DPOSRES**にチェックする。
5. **Run**をクリックする。

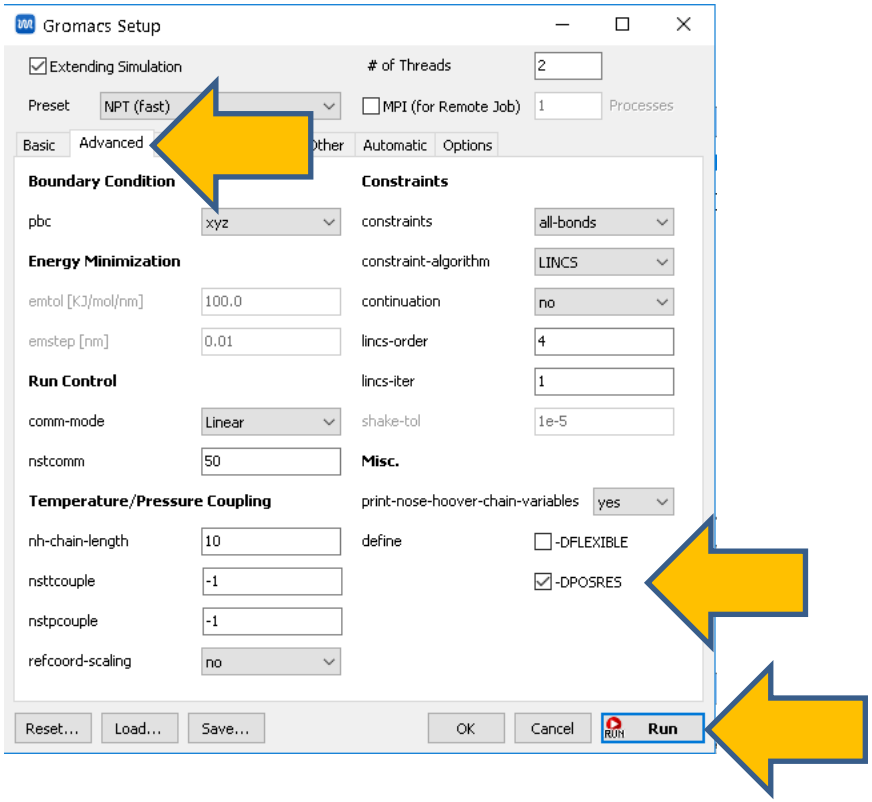


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 系の平衡化

1. 計算終了後、 **キーワード設定**をクリックする。
2. **Presetに**NPT (fast)を指定する。**Basicタブにて**nstepsに15000を指定する。
3. **Advancedタブの-DPOSRES**にチェックする。
4. **Run**をクリックする。

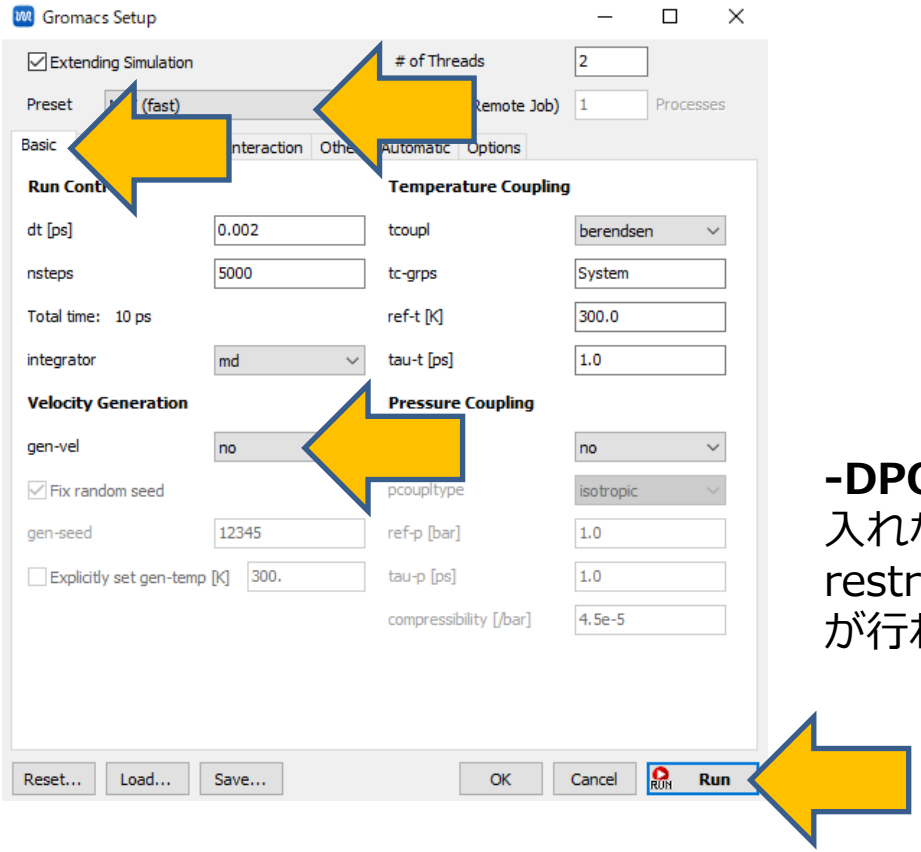




Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 系の平衡化

1. 計算終了後、**キーワード設定**をクリックする。
2. **Presetに**NVT (fast)を指定し、**Basicタブ**の**gen-velにno**を設定する。
3. **Run**をクリックする。



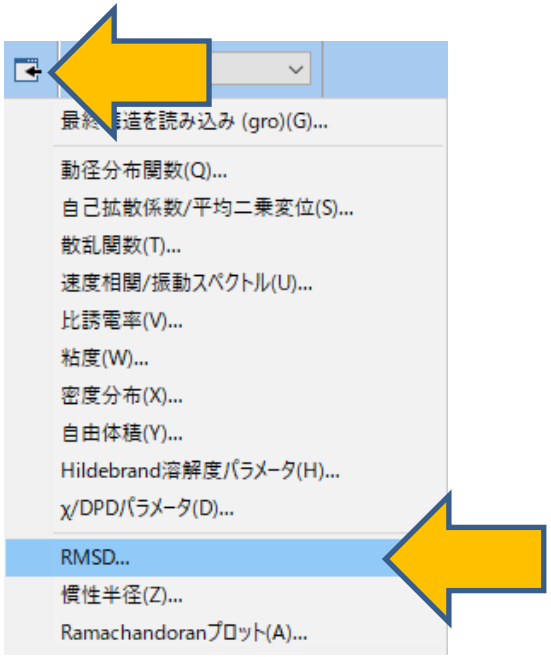
-DPOSRESにチェックを入れないことで、restraintsが解かれた計算が行われる。

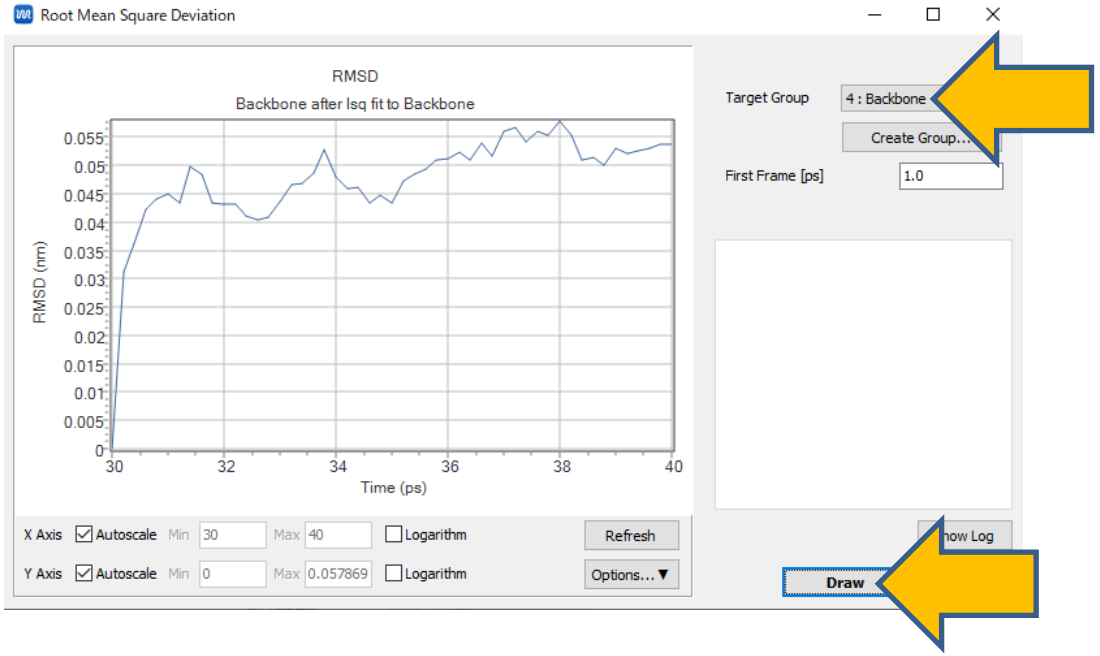
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 系の平衡化

タンパク質の拘束を解いた計算を実施したので、RMSDの時間変化を調べる。
これは必要に応じて都度実施する。

1. 計算終了後、 **結果解析 | RMSD**をクリックする。
2. デフォルトで選ばれるファイルを開く操作を3回行う。
3. **Target Group**に**Backbone**を選択し**Draw**をクリックする。
   RMSDの時間変化を確認する。回転半径も同様の手順で取得できる。

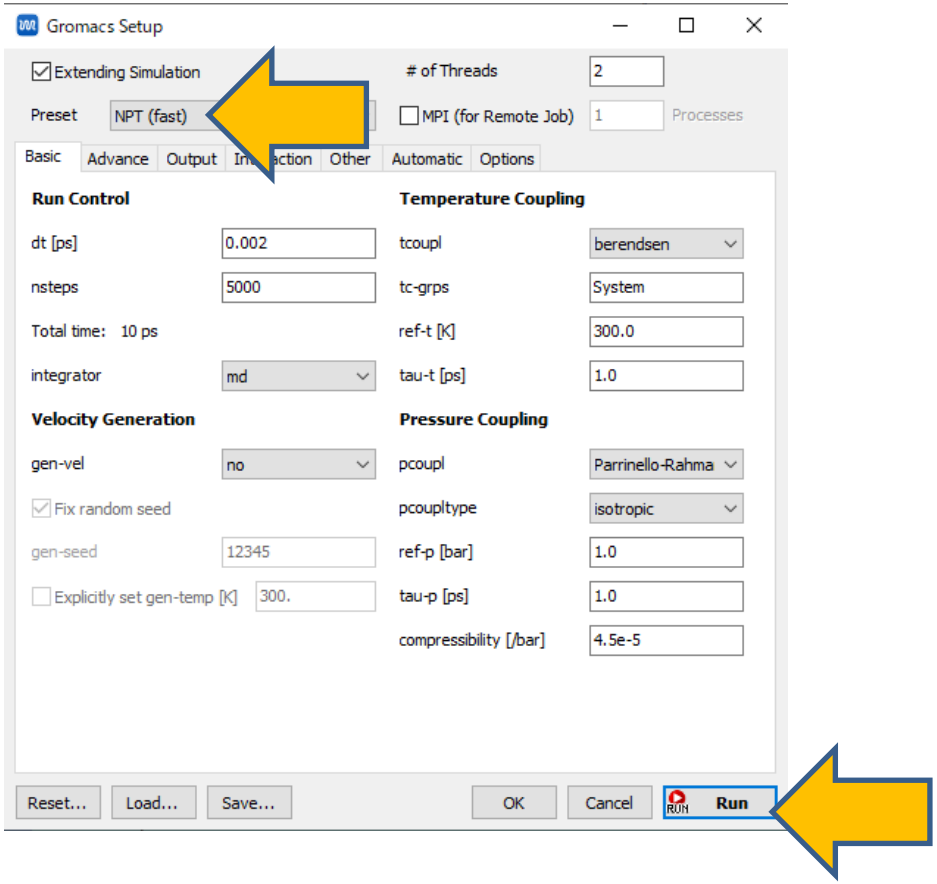




Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 系の平衡化

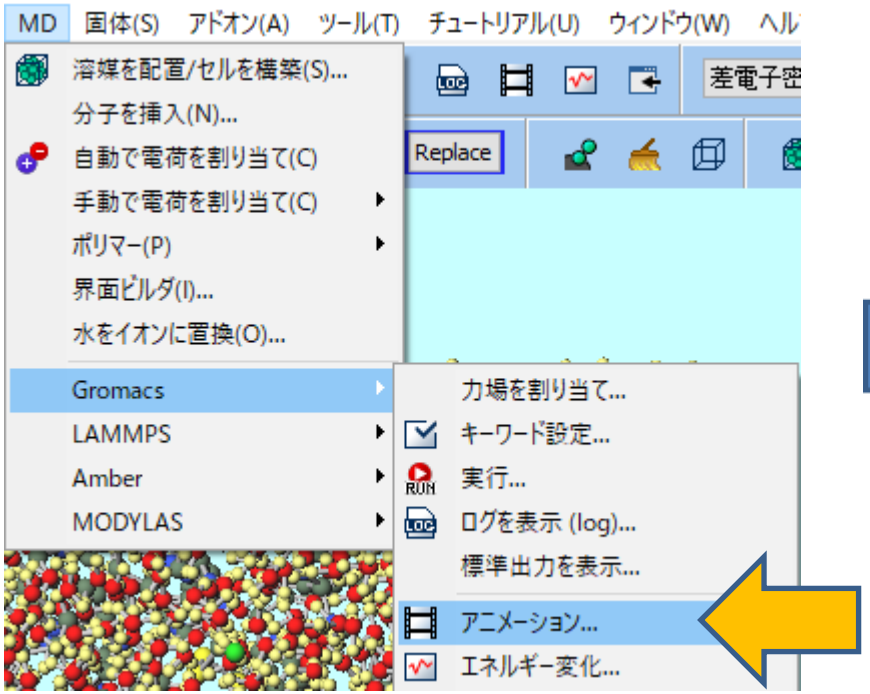
1. 計算終了後、 **キーワード設定**をクリックする。
2. **Presetに**NPT (fast)を指定する。
3. **Run**をクリックする。

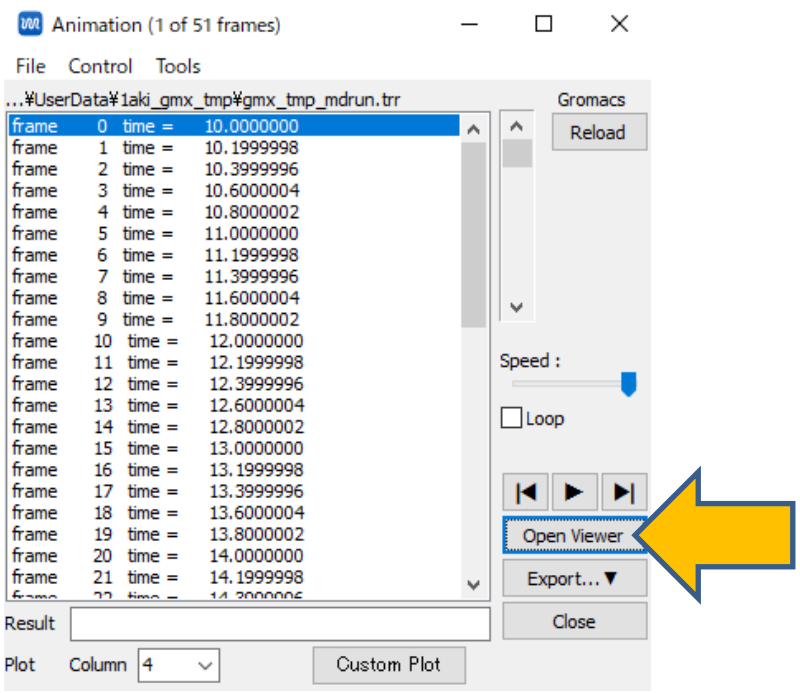


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.本計算・アニメーション表示

1. 平衡化計算終了後、 **実行**をクリックする（平衡化計算の最後のケースと同じ条件で計算する）。
2. 本計算終了後、 **アニメーション**をクリックする。
3. デフォルトで選ばれるファイルを開く操作を2回行う。
4. **AnimationウインドウでOpen Viewerをクリックする。**

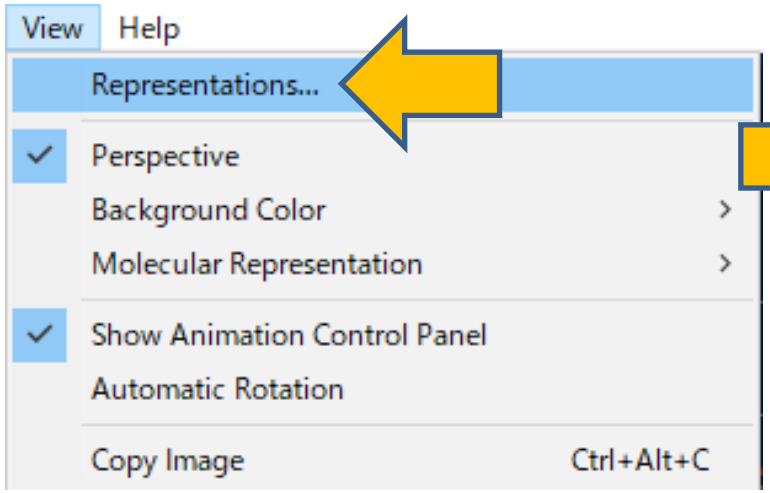


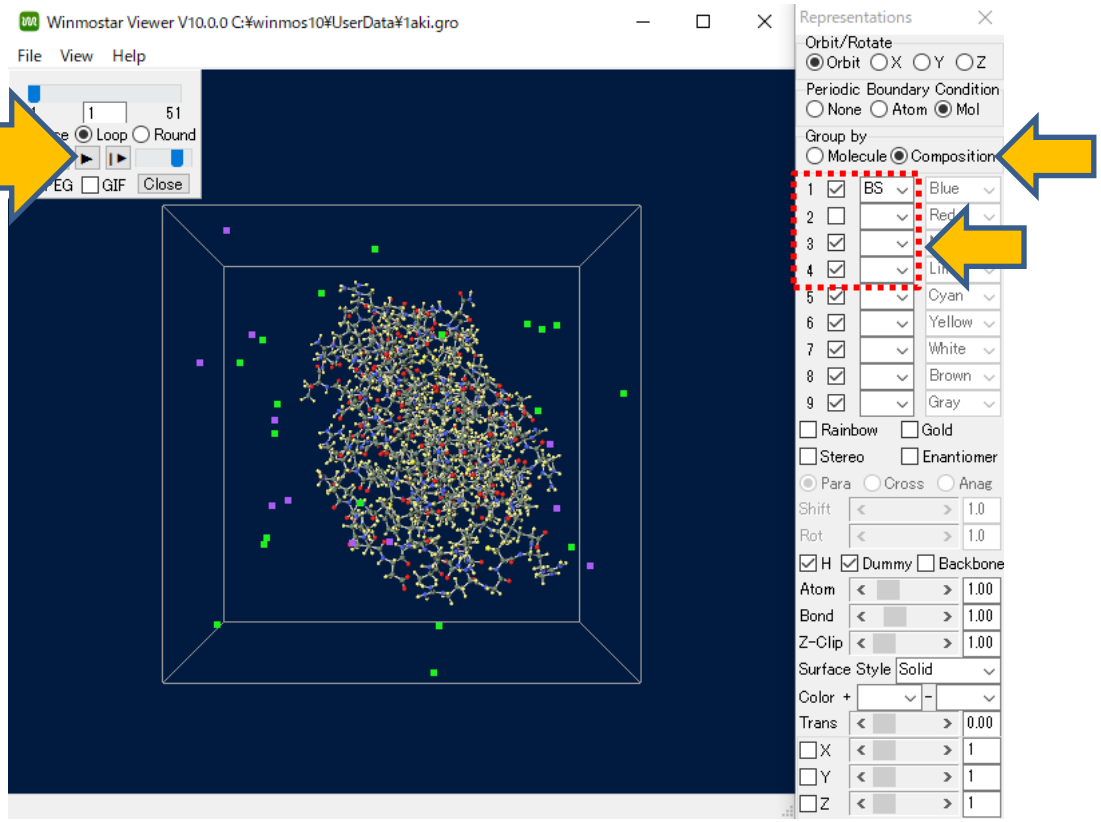


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.本計算・アニメーション表示

1. **Winmostar Viewer**にて、**View | Representations**をクリックする。
2. **Composition**をチェックして、各分子種毎に表示の設定を変える。
3. アニメーションを開始する場合はウインドウ左上の ▶ をクリックする。





Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

最後に

- 各機能の詳細を調べたい方はユーザマニュアルを参照してください。

ユーザマニュアル

Winmostar 講習会の風景

- 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Winmostar基礎講習会へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては個別講習会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、まずよくある質問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

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.