

# Winmostar - Amber Tutorial 1

基礎編

V6.016

株式会社クロスアビリティ

[question@winmostar.com](mailto:question@winmostar.com)

2016/06/01

# 修正履歴

2016/05/06版

- 初版

2016/05/30版

- V.6.016向け変更

# Contents

- I. PDBファイルの入手
- II. 系の作成
- III. MD計算の実行
- IV. エネルギーの時間変化の表示
- V. アニメーション表示

# 動作環境設定

現在のWinmostarではAmberToolsに含まれるsanderを利用した計算に対応しているため、下記リンクの手順に従いCygwinをセットアップする必要がある。

[https://winmostar.com/jp/gmx4wm\\_jp.html](https://winmostar.com/jp/gmx4wm_jp.html)

## Winmostar用 Gromacs, Amberのインストールマニュアル

### 1. 簡易インストール方法(Windows)

下記リンクから各パッケージがコンパイル済のCygwinの自己解凍書庫をダウンロードし、実行します。

`cygwin_wm_20160512.exe`

#AVX対応CPUをご利用の方は、`C:%cygwin_wm%etc%bash.bashrc`を以下の通り書き換えると高速版が有効になります。

```
source /usr/local/gromacs_sse/bin/GMXRC
```

↓

```
source /usr/local/gromacs_avx/bin/GMXRC
```

これにより、GROMACS, Amber(sander)の実行に必要な環境 (Cygwin,Gromacs,OpenBabelなど) が全て整います。

以上でインストール作業は全て終了です。

以降に記述の作業を行う必要は一切ありません。

既にcygwin\_wmがインストールされている場合は、追加の設定が不要である。

# I. PDBファイルの入手

① <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>  
にアクセスする。または「pdb」と検索する。

② 「1UAO」と入力する。

The screenshot shows the RCSB PDB website interface. At the top, there is a navigation bar with links: RCSB PDB, Deposit, Search, Visualize, Analyze, Download, Learn, More, and a MyPDB Login button. Below the navigation bar is the PDB logo and the text 'An Information Portal to 118587 Biological Macromolecular Structures'. A search bar is visible with '1UAO' entered and a 'Go' button. A dropdown menu below the search bar shows 'PDB ID' and '1UAO'. The main content area features a sidebar with navigation options: Welcome, Deposit, Search, Visualize, Analyze, Download, and Learn. The main content area has a heading 'A Structural View of Biology' and a large 3D molecular model of a protein complex.

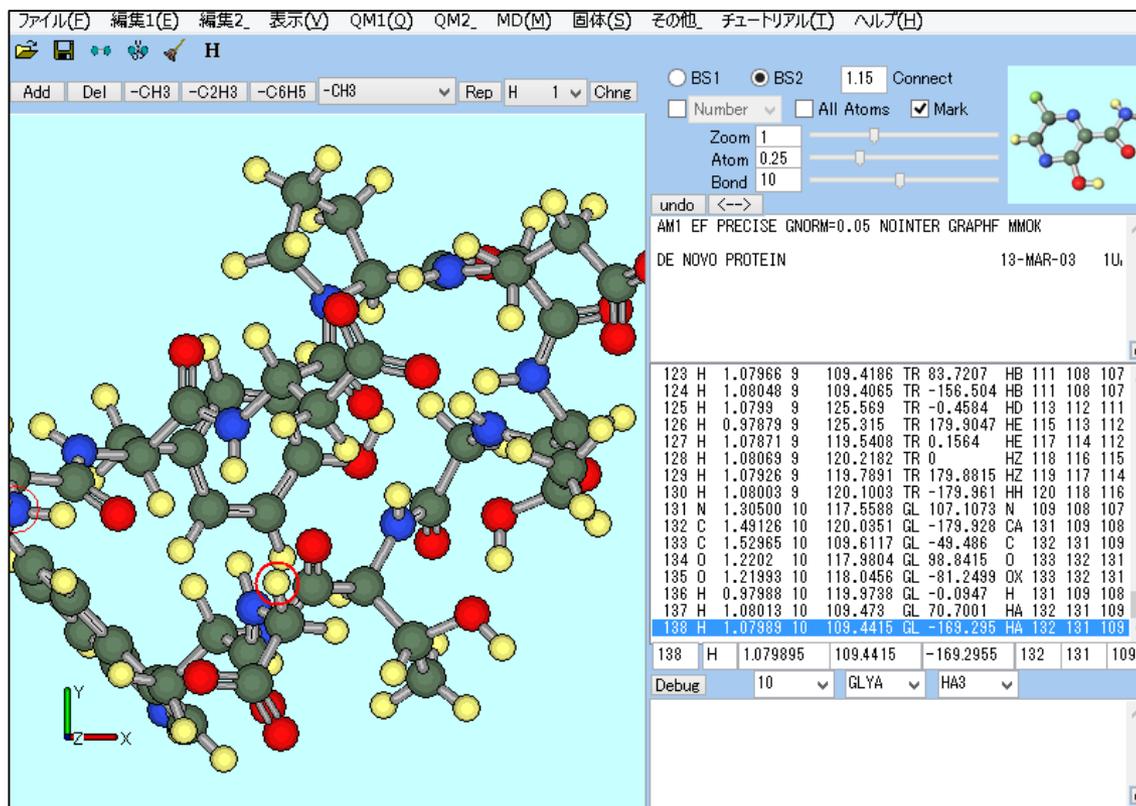
# I. PDBファイルの入手



「Download Files」から「PDB Format」を選択し、  
ファイルを「1uao\_ori.pdb」として保存する。

## II. 系の作成

「メニュー>開く」からダウンロードしたPDBファイルを開く。  
 ここで一旦、「ファイル>名前を付けて保存」から、「1uao.pdb」として保存する。  
 (pdbファイルに複数レコード入っている場合、この作業で最終レコードのみを取り出せる)

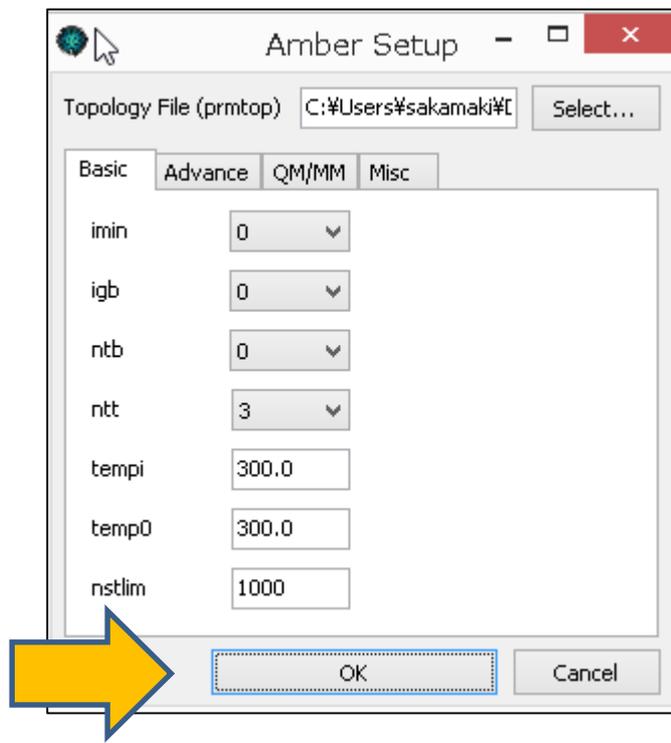
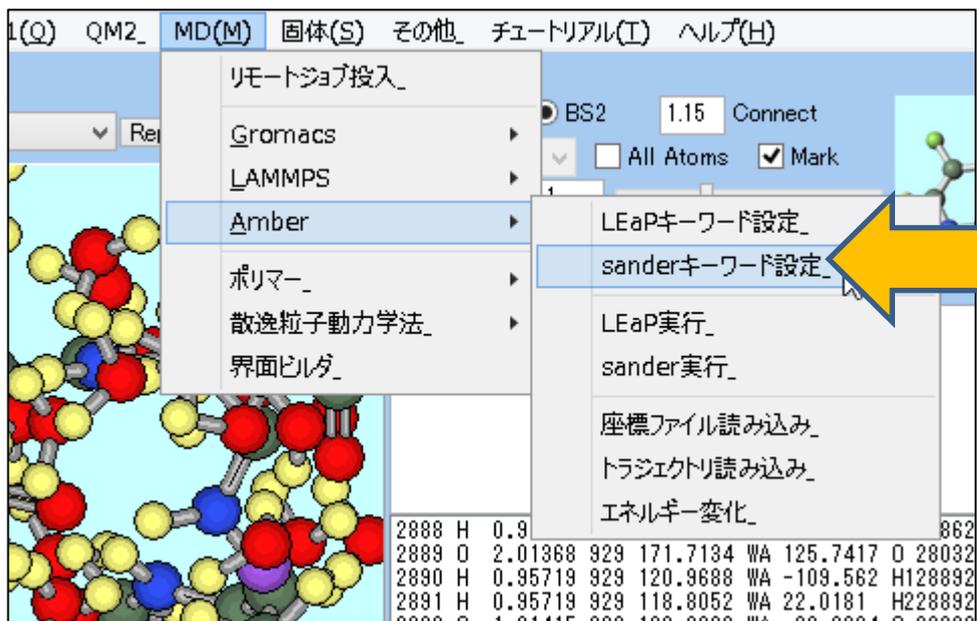






### III. MD計算の実行

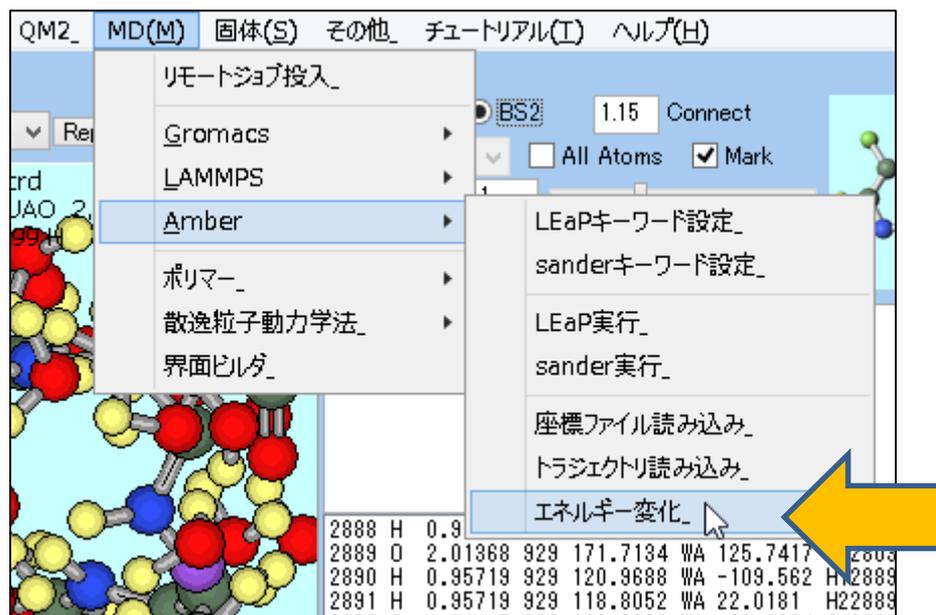
「MD>Amber>sanderキーワード設定」を選択し、デフォルトの設定で「OK」する。  
デフォルトの設定では、300 Kの温度一定MD計算が1000ステップ流れる。





## IV. エネルギーの時間変化の表示

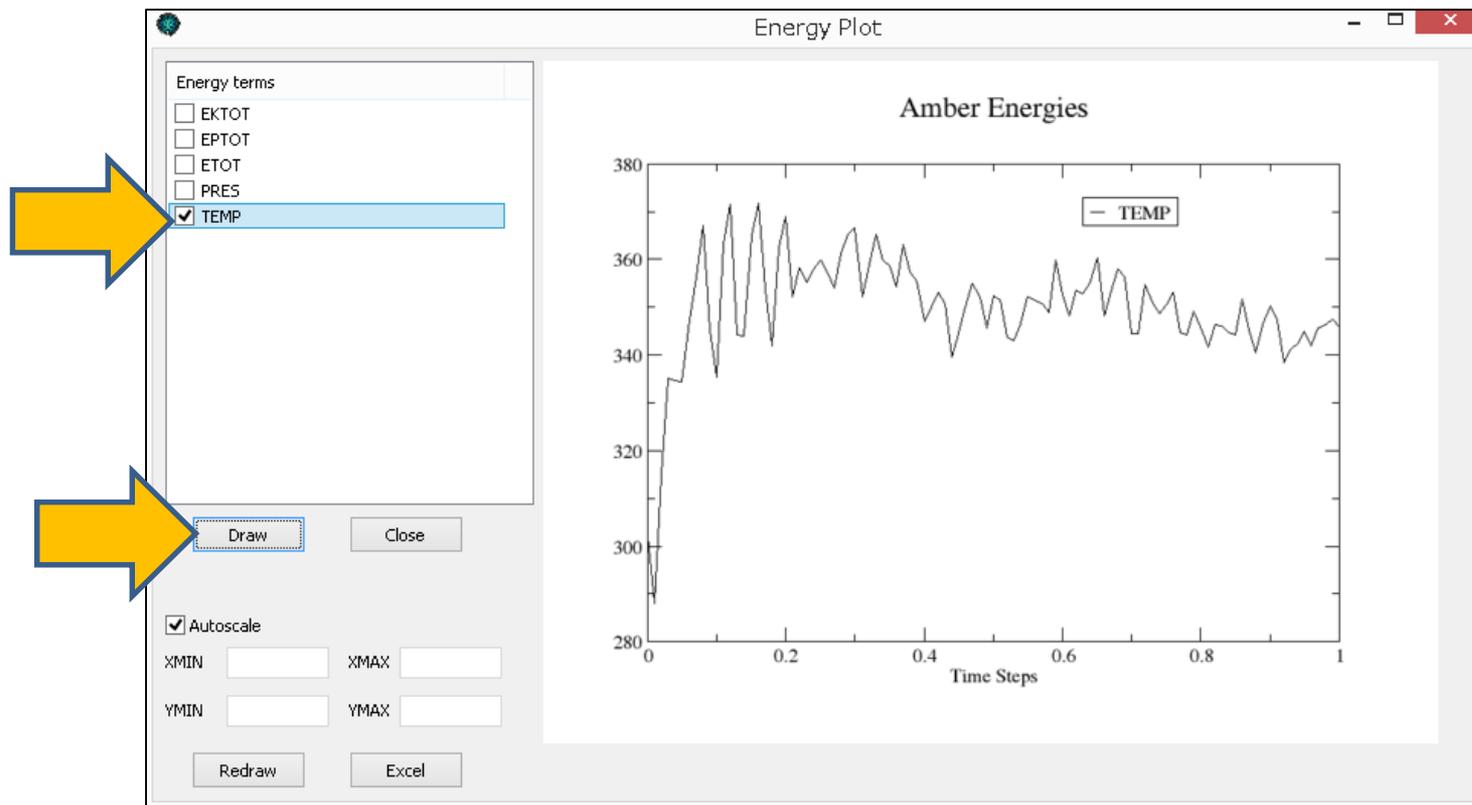
MD計算終了後、「MD>Amber>エネルギー変化」を選択する。  
ログファイルの位置を聞かれるが、デフォルトで直前のMD計算のログファイルが  
選ばれるので、そのまま「開く」とする。



## IV. エネルギーの時間変化の表示

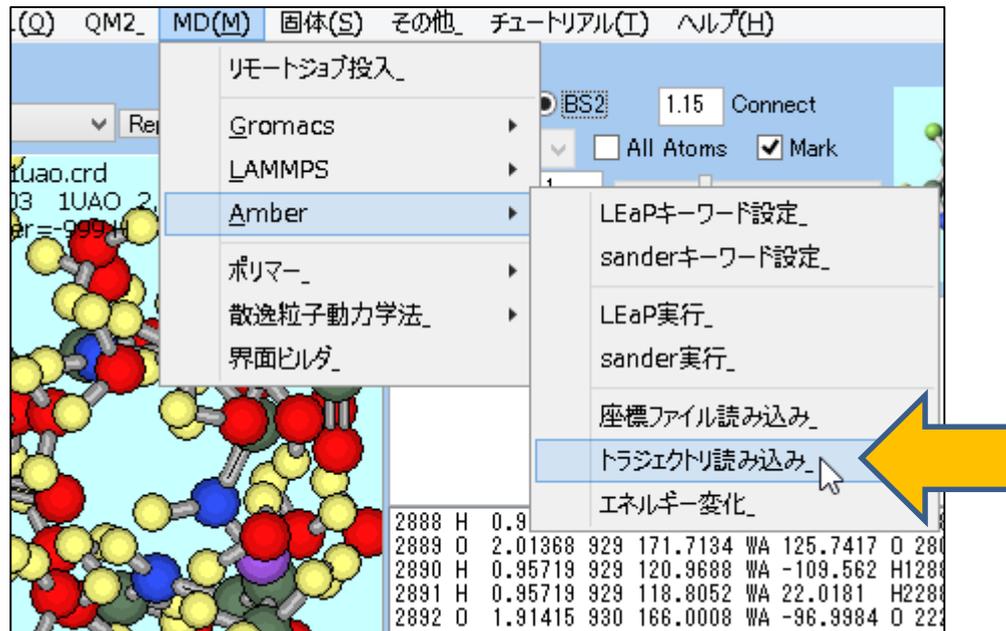
開かれたウインドウにおいて、プロットしたい「Energy Term」にチェックを入れ、「Draw」を押すとグラフが表示される。

例えば、「TEMP」(温度)にチェックを入れて描画すると下図のようになる。



## V. アニメーション表示

MD計算終了後、「MD>Amber>トラジェクトリ読み込み」を選択する。  
座標ファイルとトポロジファイルの位置を聞かれるが、デフォルトで直前のMD計算のファイルが選ばれるので、そのまま「開く」とする。



## V. アニメーション表示

ファイル読み込み処理終了後、以下のようなウインドウが出現する。  
「Animation」ウインドウ上で任意のフレームを選択したり、「|>」(再生)ボタンをクリックすることで、メイン画面にスナップショットが表示される。

The screenshot shows the X-Ability software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a protein structure. The Animation window on the right contains the following elements:

- Frame list: frame : 0, frame : 1, frame : 2, frame : 3, frame : 4, frame : 5, frame : 6, frame : 7, frame : 8, frame : 9, frame : 10, frame : 11, frame : 12, frame : 13, frame : 14, frame : 15, frame : 16, frame : 17, frame : 18, frame : 19, frame : 20, frame : 21, frame : 22, frame : 23, frame : 24
- Buttons: Reload, Rewind, Last, Slow, Fast, temp, 3D animation, jpeg, gif, autorew, Excel, ▶ (play), Quit

Two yellow arrows are overlaid on the image: one points from the play button (▶) in the Animation window to the 3D model, and the other points from the Quit button in the Animation window to the right edge of the window.

facebook アカウント登録

メールアドレスまたは携帯番号 パスワード

ログインしたままにする

X-Ability Co.,Ltd.  
さんはFacebookを利用しています。  
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の

アカウント登録 ログイン

**X-Ability Co.,Ltd.**  
コンピュータ・テクノロジー

タイムライン 基本データ 写真 いいね! 動画

ユーザー

いいね! 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ビジター投稿

X-Ability Co.,Ltd.  
11月14日 20:30

最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。  
[http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh\\_aui\\_detailpage\\_o00\\_s00...](http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_detailpage_o00_s00...)

山口 達明

フロンティアオービタルによる新有機化学教程  
フロンティアオービタルによる新有機化学教程  
AMAZON.CO.JP

いいね! コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)  
11月9日 21:38

いいね!