

# Winmostar チュートリアル

Amber

基礎編

V7.000

株式会社クロスアビリティ

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

2016/10/01

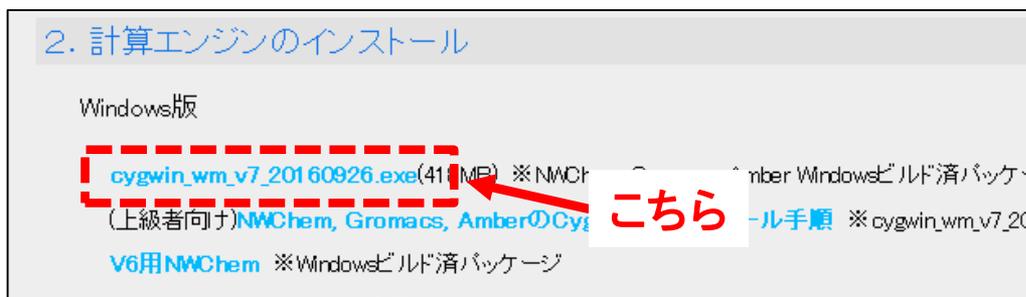
# Contents

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

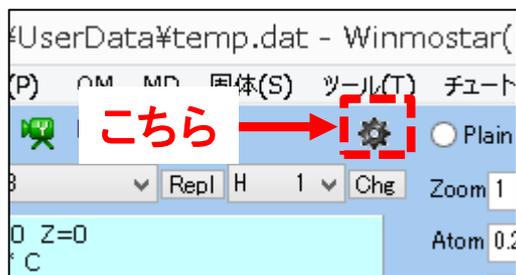
# 動作環境設定

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/manual\\_jp.html](https://winmostar.com/jp/manual_jp.html)の「2. 計算エンジンのインストール」から、Cygwinの自己解凍書庫(exe)を入手し実行してください。

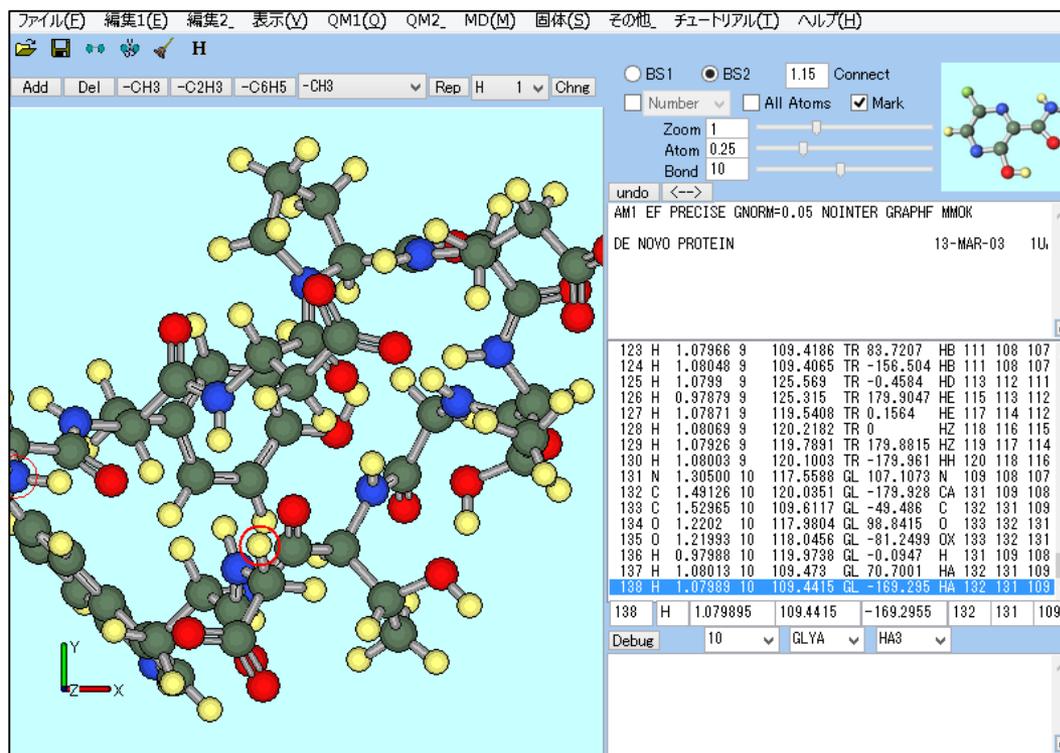


- デフォルトではC:¥直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」>「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



# I. 系の作成

「メニュー>開く」からWinmostarのインストールディレクトリの下のsample以下にある1uao.pdbを開く。(デフォルトではC:\¥winmos7¥samples¥1uao.pdb)  
ここで一旦、「ファイル>名前を付けて保存」から、「1uao\_last.pdb」として保存する。  
(複数レコード含むpdbファイルから、最終レコードのみを取り出す)

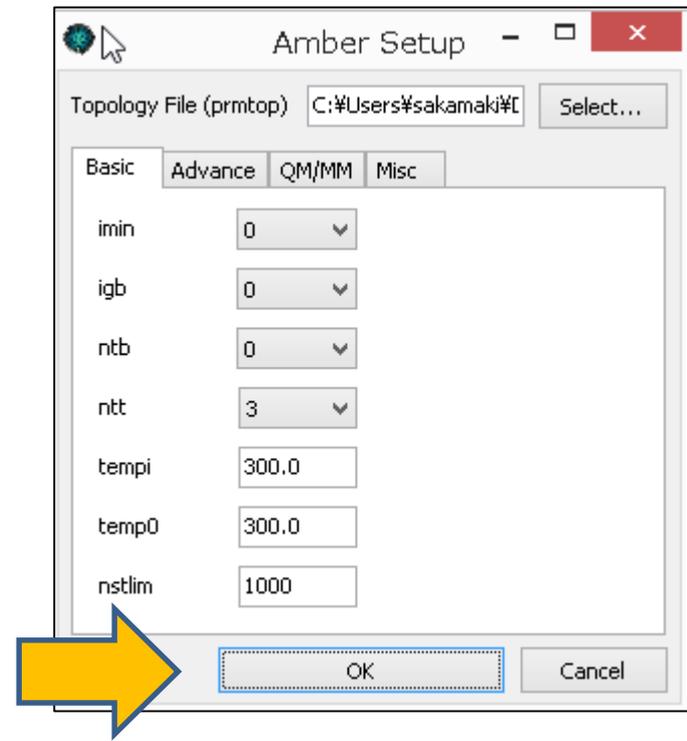
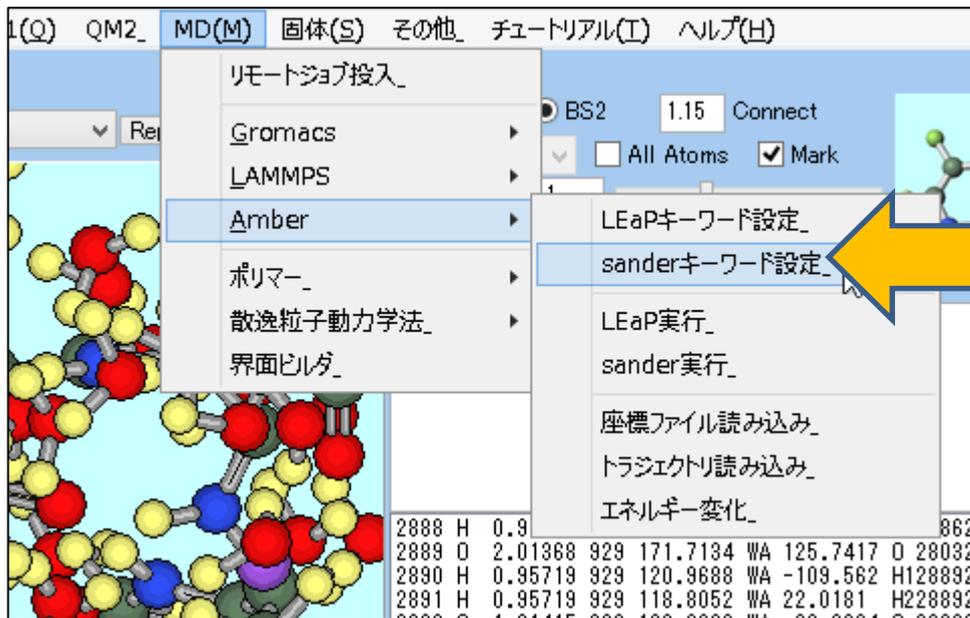






## II. MD計算の実行

「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。



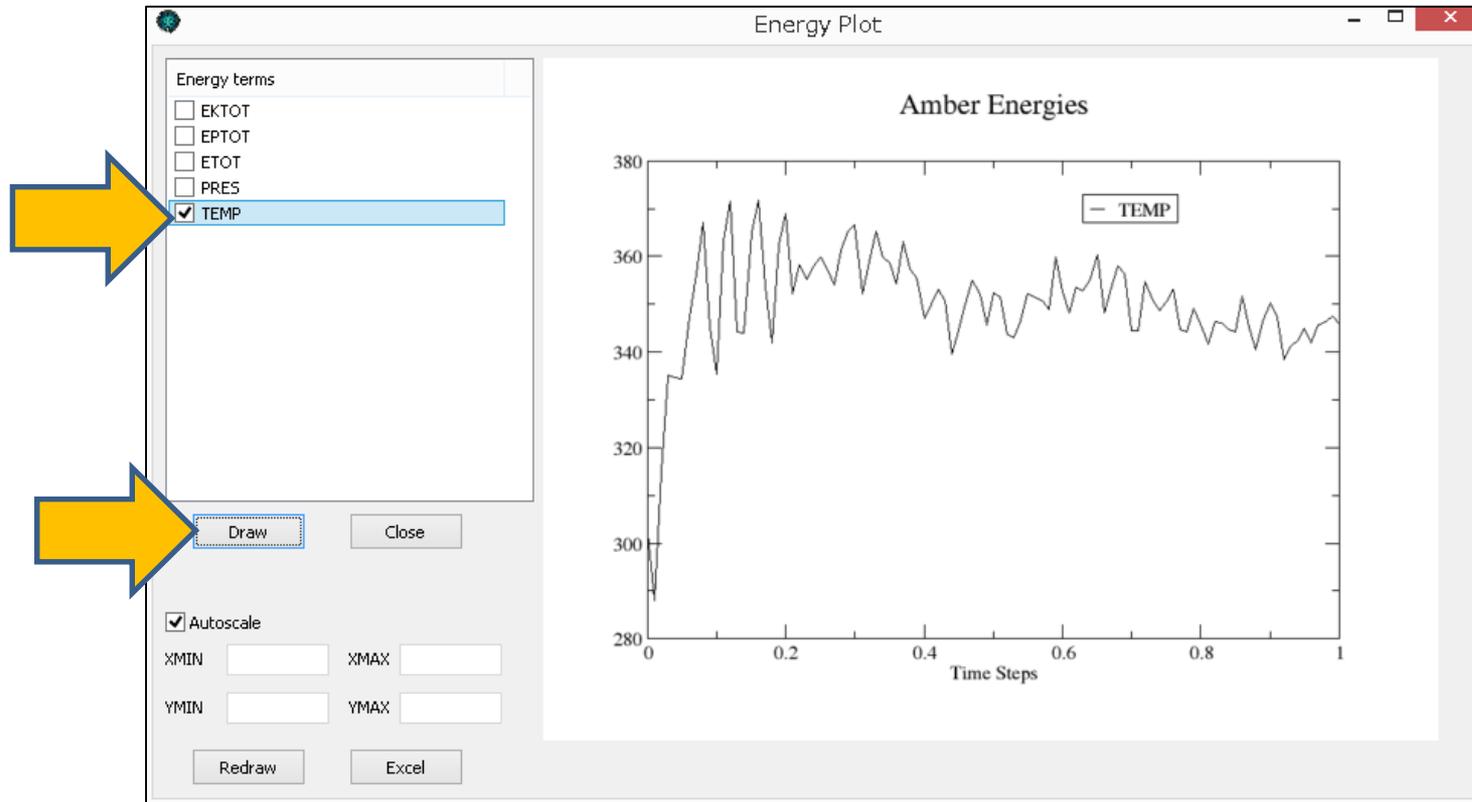




### III. エネルギーの時間変化の表示

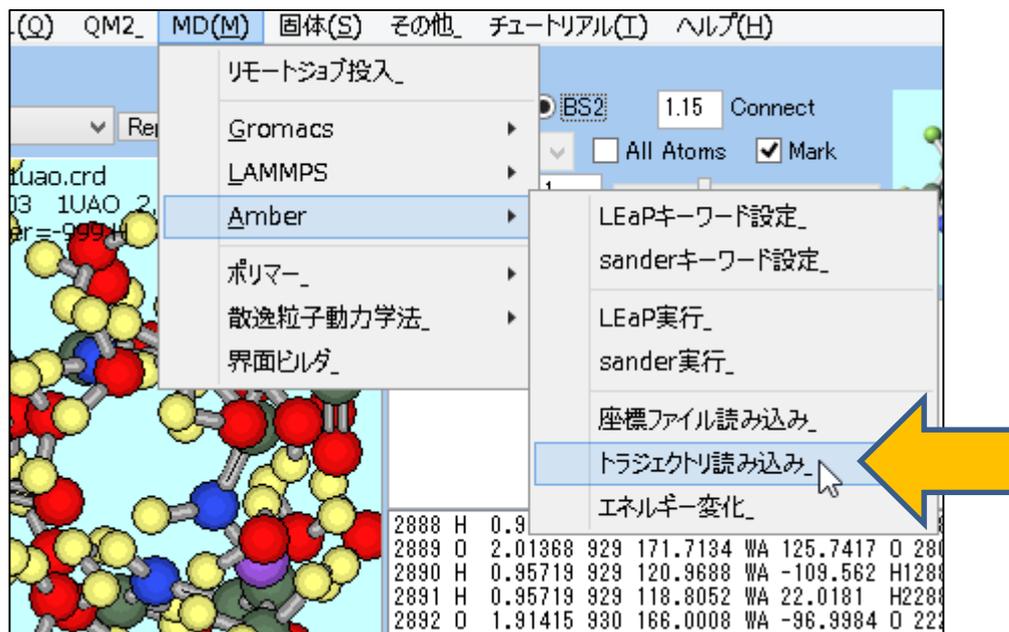
開かれたウインドウにおいて、プロットしたい「Energy Term」にチェックを入れ、「Draw」を押すとグラフが表示される。

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。



## IV. 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。



## IV. 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 has a frame list from 0 to 24, a 'Reload' button, a 'Rewind' button, a 'Last' button, 'Slow' and 'Fast' speed options, a 'temp' input field, checkboxes for '3D animation', 'jpeg', 'gif', and 'autorew', and buttons for 'Excel', '▶' (play), and 'Quit'. A yellow arrow points to the '▶' button, and another yellow arrow points to the 'Excel' button.

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!