

Winmostar チュートリアル

Gromacs

タンパク質

V7.016

株式会社クロスアビリティ

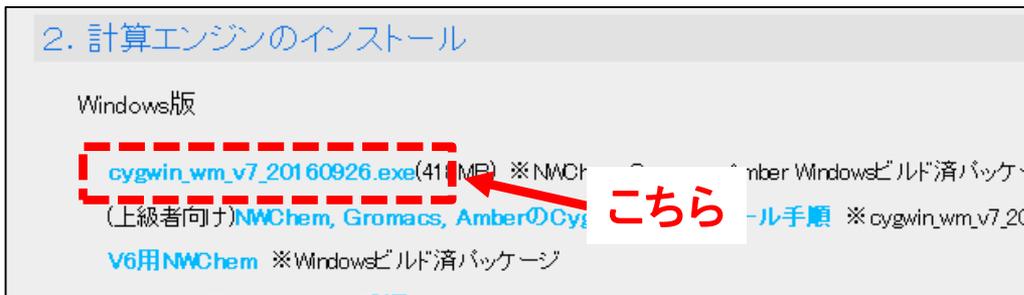
question@winmostar.com

2017/3/28

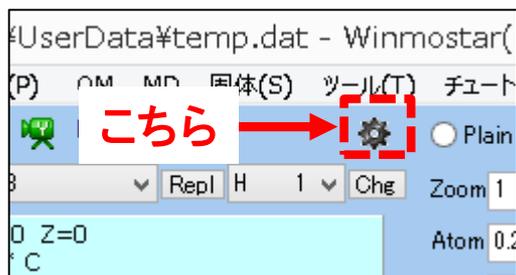
動作環境設定

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。

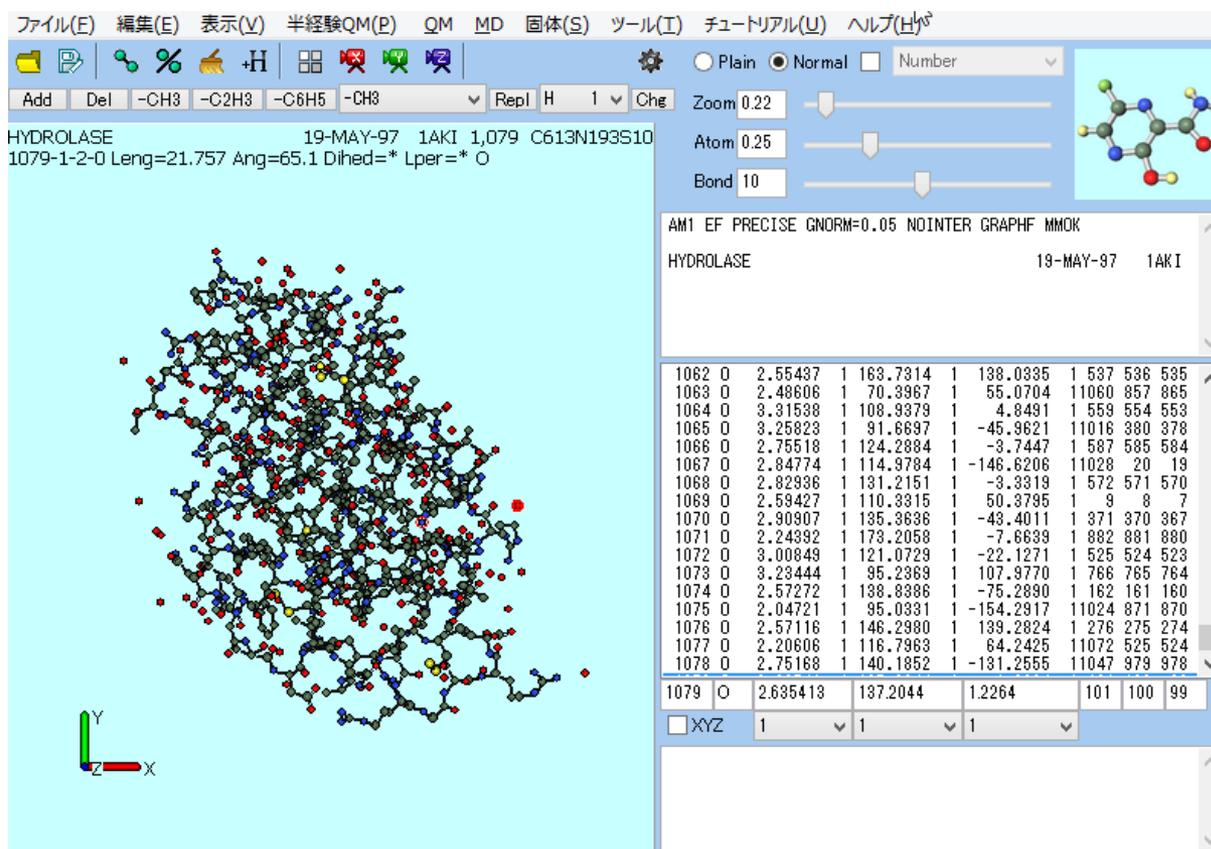


注意点

- 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。
- 基本的には“本計算”のステップ数が大きいほど、再現性が良く、信頼性の高い結果を取得することができます。
- 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。
- 系のサイズ(溶媒の数)について、本チュートリアルでは計算時間を短縮するために極端に小さく設定しています。

I. 系の作成

- [ファイル]>[開く]からサンプルフォルダ内の1AKI.pdbを開く。(デフォルトでは C:\¥winmos7¥samples¥1AKI.pdb)



I. 系の作成

- [編集]>[分子単位で選択]をクリックする。「Select Molecules」ウィンドウで「O 78」の項目にチェックを入れ、メイン画面上で結晶水の酸素原子が選択された(青丸で囲まれた)状態にする。

The screenshot shows the Winmostar (QM/MD/SOLID/SPS) V7.009 interface. The 'Edit' menu is open, and the '分子単位で選択' (Select by molecule) option is highlighted with a yellow arrow. The 'Select Molecules' dialog box is also open, showing a table of atoms. The 'O 78' entry is checked, and a yellow arrow points to it. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a protein structure (HYDROLASE) with a coordinate system (X, Y, Z) at the bottom left.

Select Molecules Dialog Box Table:

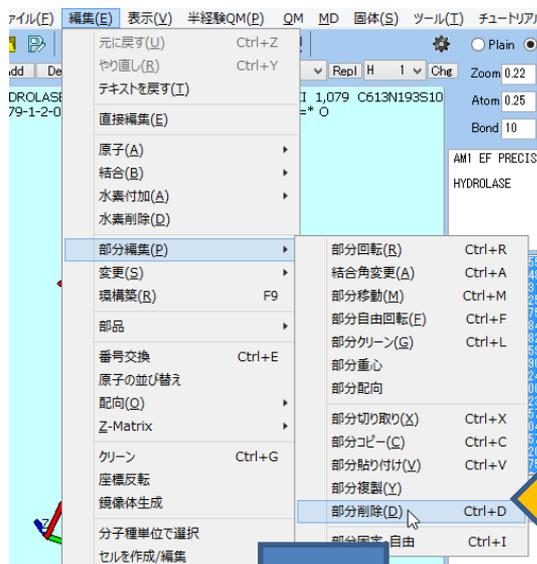
Composition	# Mol
<input type="checkbox"/> C613N193510O185	1
<input checked="" type="checkbox"/> O	78

Atom List Table (Bottom):

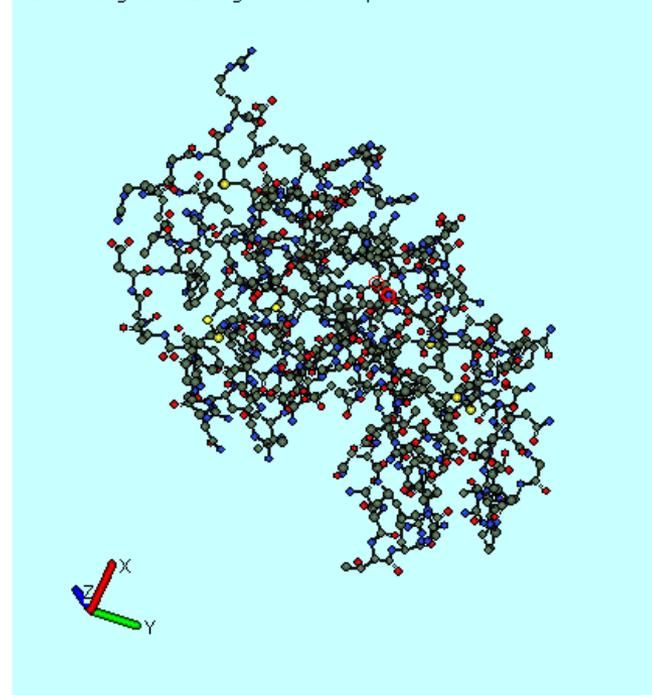
Atom	X	Y	Z
1082 O	2.55437		
1083 O	2.48606		
1084 O	3.31538		
1085 O	3.25823		
1086 O	2.75518		
1087 O	2.84774		
1088 O	2.82936	131.2151	-3.3319
1089 O	2.53427	110.3315	50.3795
1070 O	2.30907	135.3636	-43.4011
1071 O	2.24392	173.2058	-7.8639
1072 O	3.00849	121.0729	-22.1271
1073 O	3.23444	95.2389	107.9770
1074 O	2.57272	138.0306	-75.2890
1075 O	2.04721	95.0331	-154.2917
1076 O	2.57116	146.2380	139.2824
1077 O	2.20606	116.7963	64.2425
1078 O	2.75188	140.1852	-131.2555

I. 系の作成

- 結晶水の酸素原子が選択された状態で、[編集]>[部分編集]>[部分削除]をクリックする。「Selection」で[Delete]をクリックすると、結晶水が削除される。



```
HYDROLASE      19-MAY-97  1AKI  1,001  C613N193S10
1-2-0-0 Leng=1.4812 Ang=* Dihed=* Lper=* N
```



I. 系の作成

- [編集]>[水素付加]>[pdb2gmxを使用]をクリックする。「Protonate with pdb2gmx」ウインドウで[Execute]をクリックすると、タンパク質に水素が生成される。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。

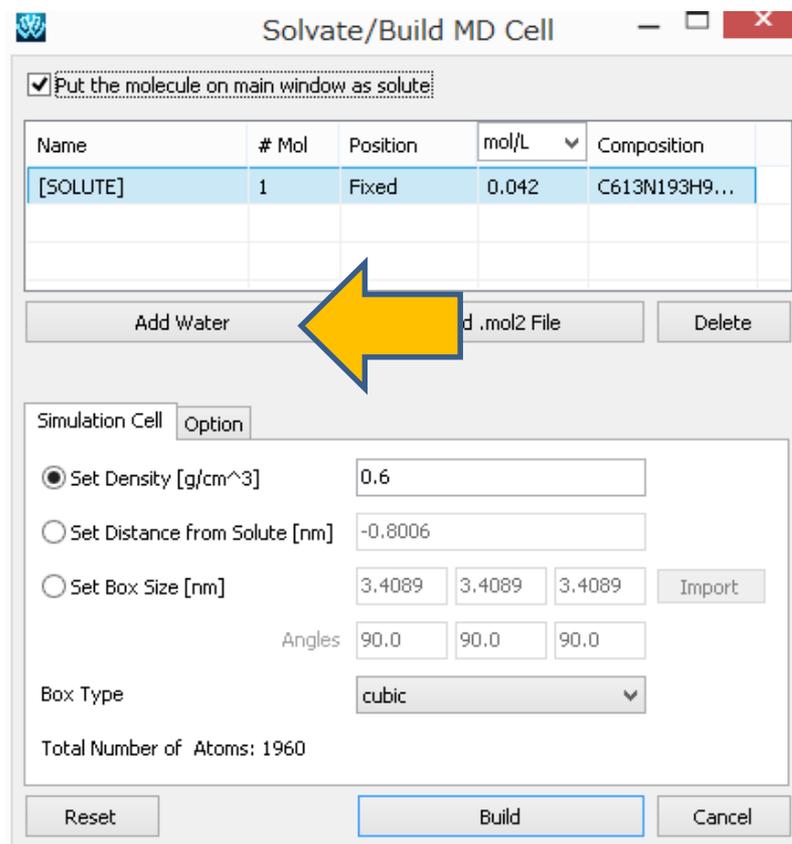
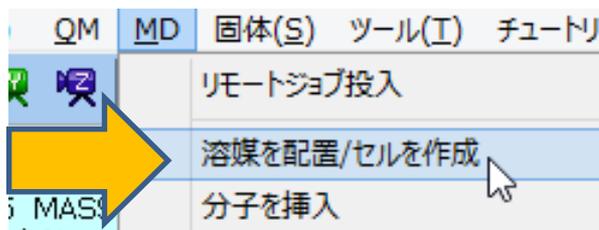
The screenshot shows the 'Edit' menu with 'Add Hydrogen' selected, and the sub-menu with 'Use pdb2gmx' highlighted. A yellow arrow points to this option. A blue arrow points from the menu to the 'Protonate with pdb2gmx' dialog box. The dialog box contains the command: `>cho "1" | gmx pdb2gmx -f %OUTPUTNAME%.tmp.pdb -o %OUTPUTNAME%`. A yellow arrow points to the 'Execute' button. A large blue arrow points from the dialog box to the final 3D molecular model of the protein structure.

```

HYDROLASE 1,960 C613N193H959S100185 MASS=14,313.21 X=35.36
L=2-0-0 Leng=0.9986 Ang=* Dihed=* Lper=* N
  
```

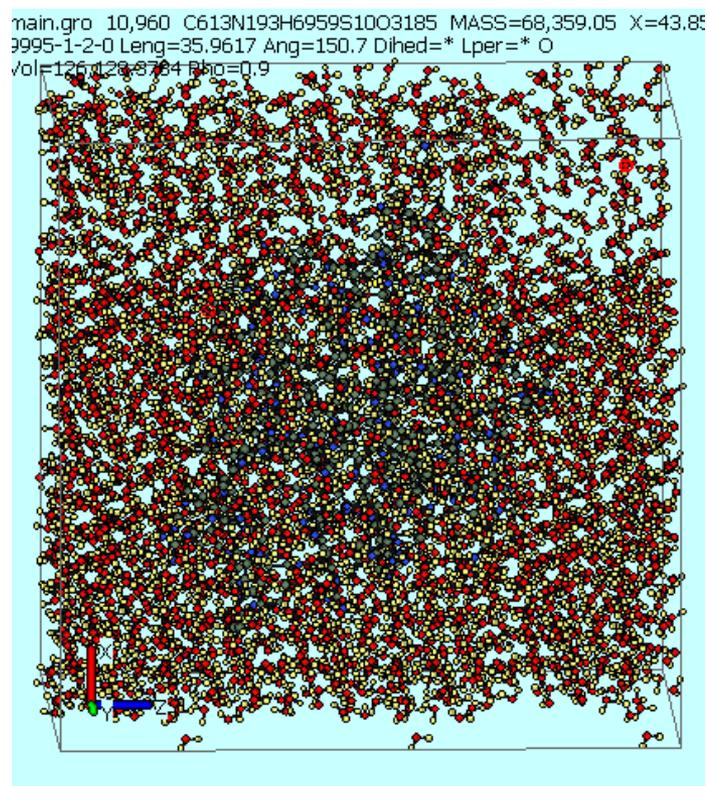
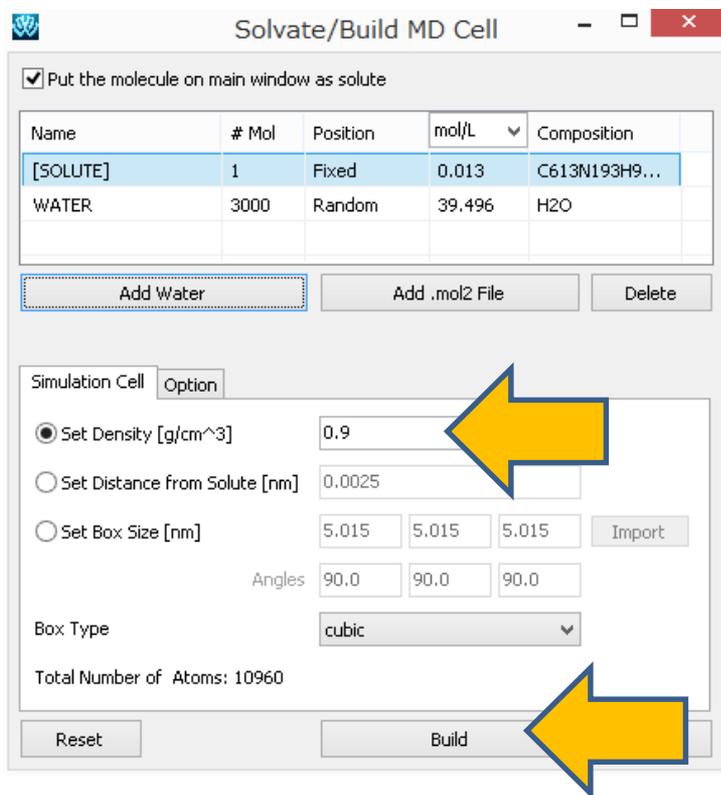
I. 系の作成

- [MD]>[溶媒を配置/セルを作成] をクリックする。[Add Water]をクリックし、「Enter # of molecules」に"3000"と入力し、[OK]する。



I. 系の作成

- [Set Density]に"0.9"と入力し、[Build]をクリックすると、水が配置されたセルが構築される。



I. 系の作成

- [MD]>[水をイオンに置換]をクリックし、「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。

generated 10,900 Na11C613N193H6899S1003155Cl19 MASS=68,745.0
9995-1-2-0 Leng=10.6997 Ang=105.6 Dihed=* Lper=* O
Vol=126,128.3784 Rho=0.9051

Commands for Cygwin:
echo "SOL" | gmx genion -s %OUTPUTNAME%.tmp.tpr -o %OUTPUTNAME%

Item	Value
Neutral	True
Concentration [mol/L]	0.15
Cations	NA
Number of Cations	0
Anions	CL
Number of Anions	0

II. 系の平衡化

- [MD>Gromacs>キーワード設定]にて、[Preset]に[Minimize (fast)]を指定し、[# of Threads]に並列数を指定する。[Advance]タブの[-POSRES]にチェックし[OK]する。

The screenshot shows the Gromacs Setup dialog box with the following configurations:

- Extending Simulation:**
- Preset:** Minimize (fast)
- # of Threads:** 2
- Process(es):** 1
- Basic Tab:**
 - Run Control:** dt [ps] = 0.002, nsteps = 5000, Total time: N/A, integrator = steep
 - Velocity Generation:** gen-vel = yes, Fix random seed, gen-seed = 12345, Explicitly set gen-temp [K] = 300.
 - Temperature Coupling:** tcoupl = berendsen, tc-grps = System, ref-t [K] = 300.0, tau-t [ps] = 1.0
 - Pressure Coupling:** pcoupl = no, pcoupltype = isotropic, ref-p [bar] = 1.0, tau-p [ps] = 1.0, compressibility [/bar] = 4.5e-5, refcoord-scaling = no
- Advance Tab:**
 - Boundary Condition:** pbc = xyz
 - Energy Minimization:** emtol [KJ/mol/nm] = 100.0, emstep [nm] = 0.01
 - Run Control:** comm-mode = Linear, nstcomm = 50
 - Temperature/Pressure Coupling:** nh-chain-length = 10, nsttcouple = -1, nstpcouple = -1
 - Constraints:** constraints = hbonds, constraint-algorithm = LINCS, continuation = no, lincs-order = 4, lincs-iter = 1, shake-tol = 1e-4
 - Misc.:** print-nose-hoover-chain-variables = yes, -DPOSRES

II. 系の平衡化

- [MD]>[Gromacs]>[Gromacs実行]をクリックする。座標ファイルとトポロジファイルの名前を聞かれるので、仮に"1AKI.gro"および"1AKI.top"とする。その後、Winmostar JMが起動し、Cygwin上で計算が開始される。

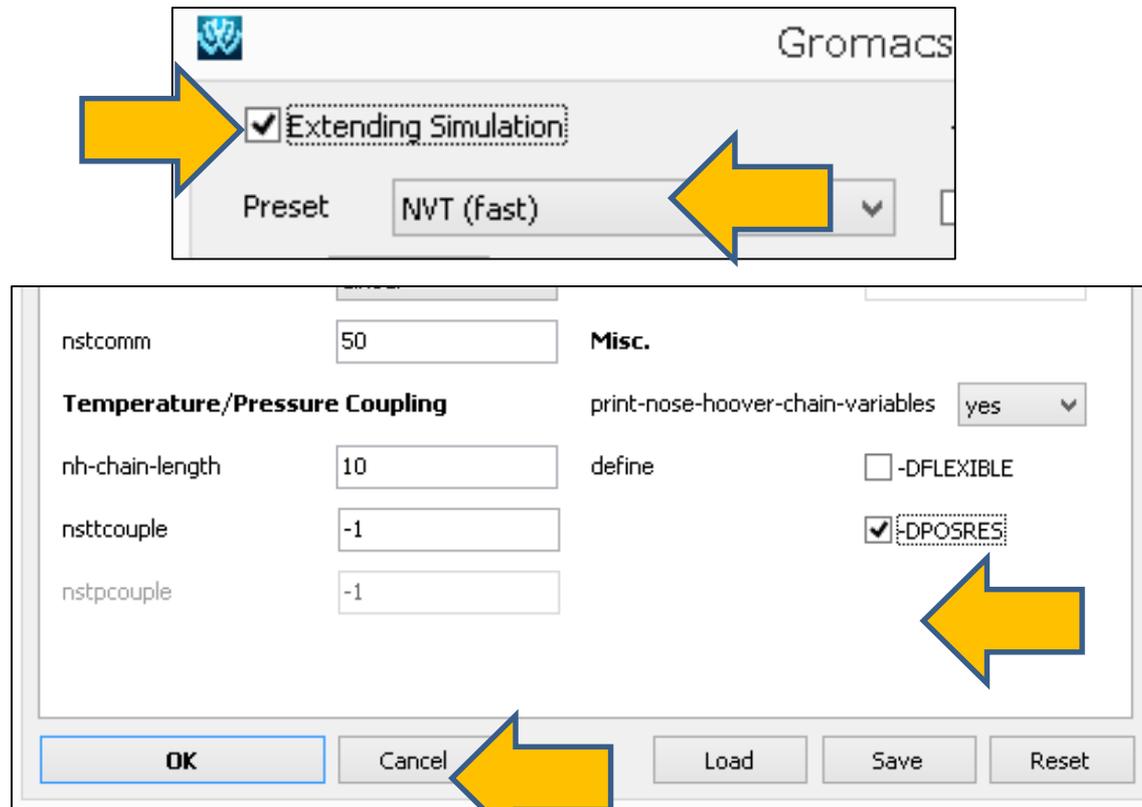


```

Winmostar/JM 20170105_110901 C:\winmos7009tes...
Step= 2333, Dmax= 3.1e-03 nm, Epot= -1.81631e+05 Fmax= 1.34236e+
Step= 2335, Dmax= 1.8e-03 nm, Epot= -1.81633e+05 Fmax= 1.47046e+
Step= 2336, Dmax= 2.2e-03 nm, Epot= -1.81635e+05 Fmax= 1.91499e+
Step= 2337, Dmax= 2.7e-03 nm, Epot= -1.81637e+05 Fmax= 2.13751e+
Step= 2338, Dmax= 3.2e-03 nm, Epot= -1.81638e+05 Fmax= 2.73518e+
Step= 2339, Dmax= 3.8e-03 nm, Epot= -1.81639e+05 Fmax= 3.10191e+
Step= 2341, Dmax= 2.3e-03 nm, Epot= -1.81645e+05 Fmax= 4.05734e+
Step= 2342, Dmax= 2.8e-03 nm, Epot= -1.81649e+05 Fmax= 3.77722e+
Step= 2343, Dmax= 3.3e-03 nm, Epot= -1.81657e+05 Fmax= 1.27366e+
Step= 2345, Dmax= 2.0e-03 nm, Epot= -1.81659e+05 Fmax= 1.74990e+
Step= 2346, Dmax= 2.4e-03 nm, Epot= -1.81661e+05 Fmax= 1.88865e+
Step= 2347, Dmax= 2.9e-03 nm, Epot= -1.81662e+05 Fmax= 2.46743e+
Step= 2348, Dmax= 3.4e-03 nm, Epot= -1.81663e+05 Fmax= 2.76982e+
Step= 2349, Dmax= 4.1e-03 nm, Epot= -1.81663e+05 Fmax= 3.50483e+
Step= 2350, Dmax= 4.9e-03 nm, Epot= -1.81664e+05 Fmax= 4.03403e+
Step= 2352, Dmax= 3.0e-03 nm, Epot= -1.81673e+05 Fmax= 4.84224e+
Step= 2354, Dmax= 1.8e-03 nm, Epot= -1.81676e+05 Fmax= 2.23965e+
Step= 2355, Dmax= 2.1e-03 nm, Epot= -1.81680e+05 Fmax= 1.01263e+
Step= 2356, Dmax= 2.6e-03 nm, Epot= -1.81680e+05 Fmax= 2.90177e+
Step= 2357, Dmax= 3.1e-03 nm, Epot= -1.81685e+05 Fmax= 1.78256e+
Step= 2358, Dmax= 3.7e-03 nm, Epot= -1.81682e+05 Fmax= 3.84875e+
  
```

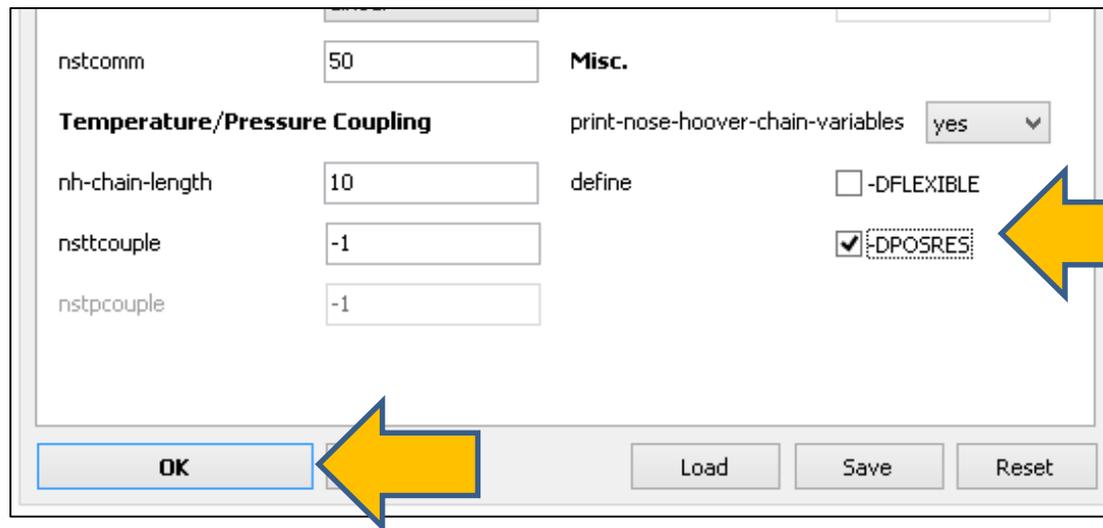
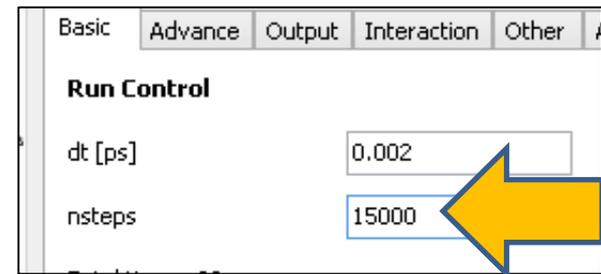
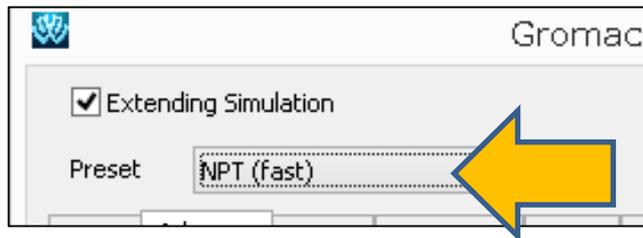
II. 系の平衡化

- 計算終了後、[MD]>[Gromacs]>[キーワード設定]にて、[Preset]に[NVT (fast)]を指定し、[Extending Simulation]にチェックを入れ、[Advance]タブの[-DPOSRES]にチェックを入れ[OK]する。次に、[MD]>[Gromacs]>[Gromacs実行]をクリックする。



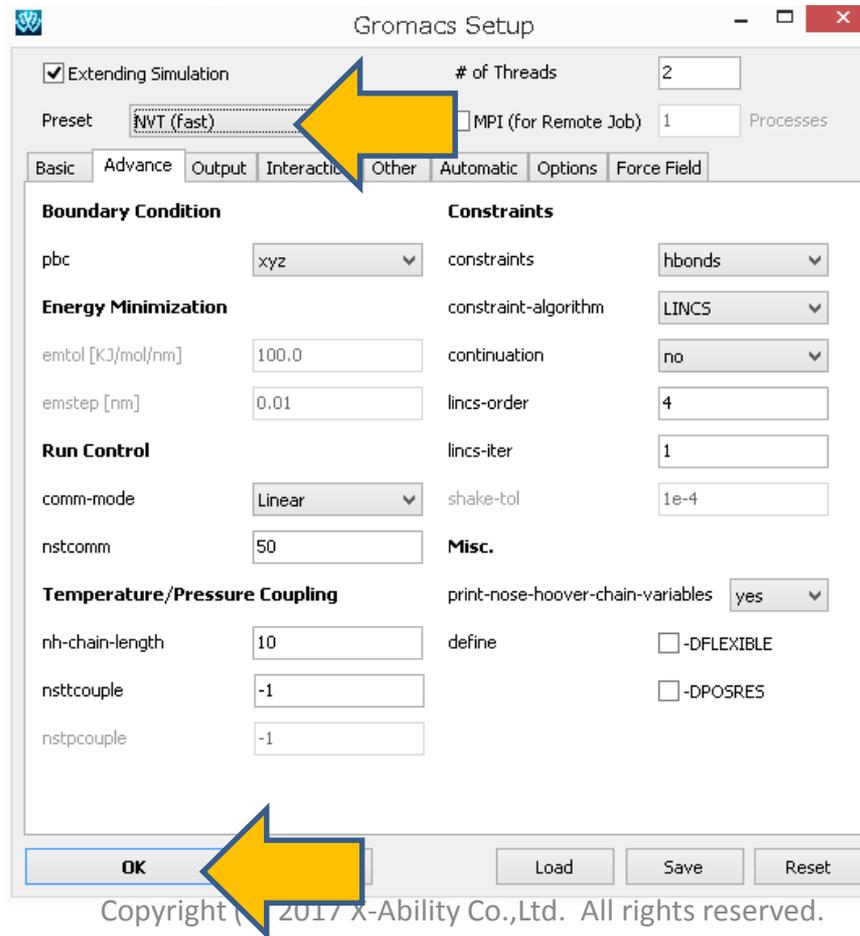
II. 系の平衡化

- 計算終了後、[MD]>[Gromacs]>[キーワード設定]にて、[Preset]に[NPT (fast)]を指定し、[Basic]タブの[nsteps]に"15000"を指定し、[Advance]タブの[-DPOSRES]にチェックを入れ[OK]する。次に、[MD]>[Gromacs]>[Gromacs実行]をクリックする。



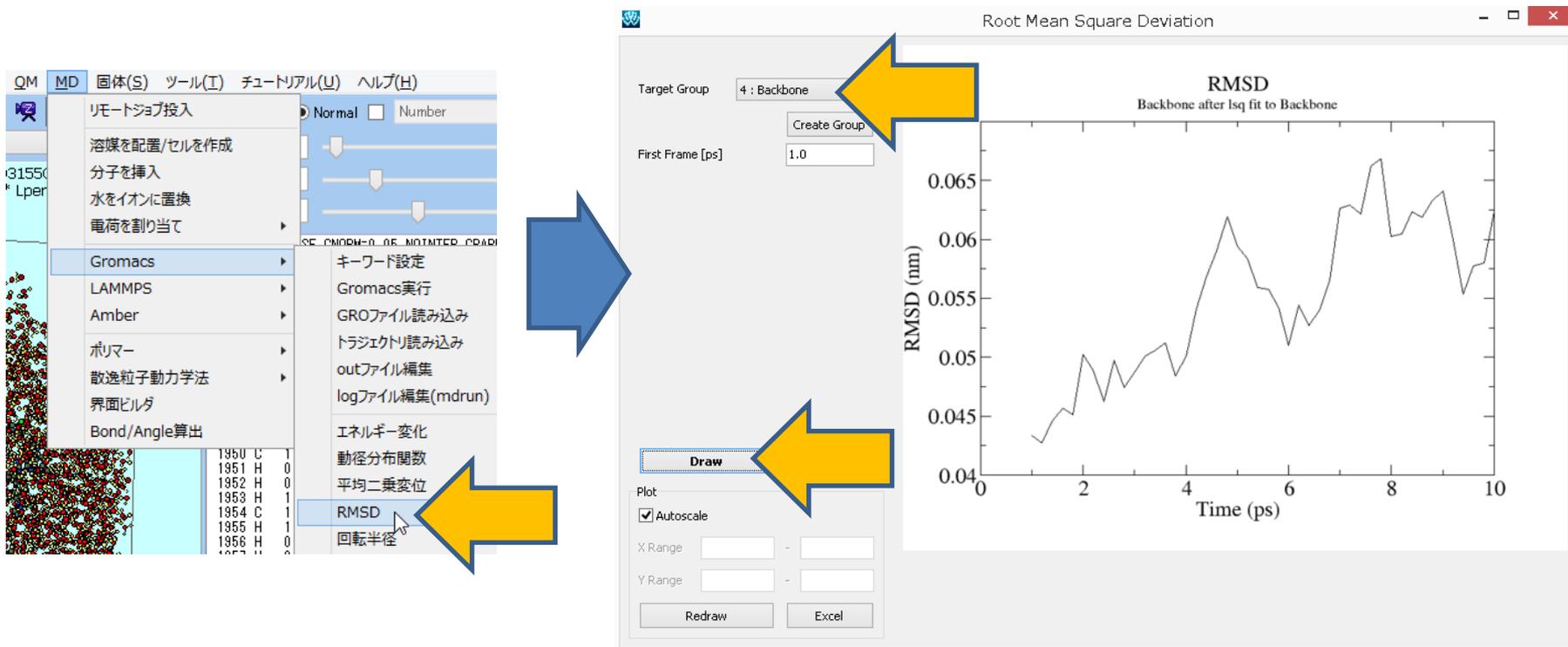
II. 系の平衡化

- 計算終了後、[MD]>[Gromacs]>[キーワード設定]にて、[Preset]に[NVT (fast)]を指定し、[OK]する。次に、[MD]>[Gromacs]>[Gromacs実行]をクリックする。これによりrestraintが解かれた計算が行われる。



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。
- 計算終了後、[MD]>[Gromacs]>[RMSD]にて、デフォルトで選ばれるファイルを開く操作を3回行う。[Target Group]に"Backbone"を選択し[Draw]をクリックし、RMSDの時間変化を取得する。回転半径も同様の手順で取得できる。



II. 系の平衡化

- 計算終了後、[MD]>[Gromacs]>[キーワード設定]にて、[Preset]に[NPT (fast)]を指定し、[OK]する。次に、[MD]>[Gromacs]>[Gromacs実行]をクリックする。

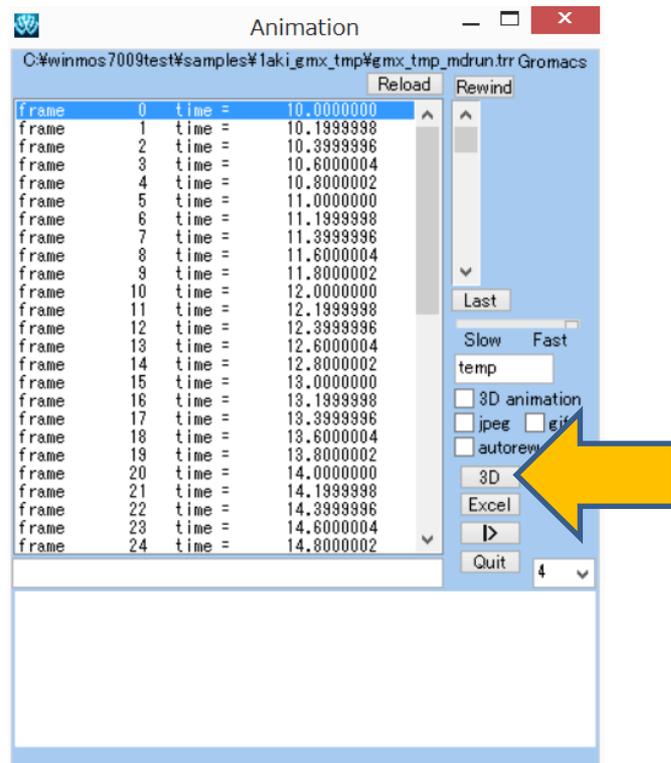
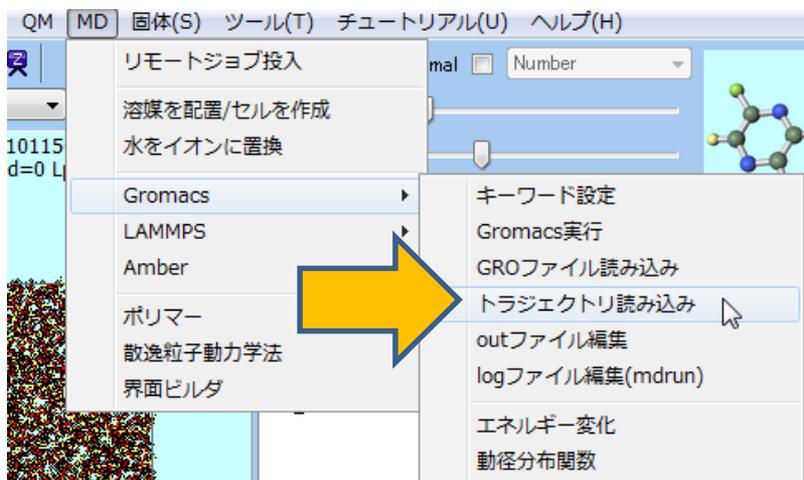
The screenshot shows the 'Gromacs Setup' window with the following settings:

- Extending Simulation
- # of Threads: 2
- Preset: NPT (fast) (indicated by a yellow arrow)
- PI (for Remote Job): 1 Processes
- Tab: Basic
- Boundary Condition: pbc, xyz
- Energy Minimization: emtol [KJ/mol/nm]: 100.0, emstep [nm]: 0.01
- Run Control: comm-mode: Linear, nstcomm: 50
- Temperature/Pressure Coupling: nh-chain-length: 10, nsttcouple: -1, nstpcouple: -1
- Constraints: constraints: hbonds, constraint-algorithm: LINCS, continuation: no, lincs-order: 4, lincs-iter: 1, shake-tol: 1e-4
- Misc.: print-nose-hoover-chain-variables: yes
- define: -DFLEXIBLE, -DPOSRES

Buttons at the bottom: OK, Cancel, Load, Save, Reset.

III. 本計算・アニメーション表示

- 平衡化計算終了後、再び[MD]>[Gromacs]>[Gromacs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)
- 本計算終了後、[MD]>[Gromacs]>[トラジェクトリ読み込み]をクリックし、デフォルトで選ばれるファイルを開く操作を2回行う。
- 「Animation」ウィンドウで[3D]をクリックする。



III. 本計算・アニメーション表示

- 起動したWinmostar 3Dにて、[View]>[Preferences]をクリックし、[Mol. Weight]をチェックして、各分子種毎に表示の設定を変える。
- 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。

The image shows the Winmostar 3D software interface. On the left, the 'View' menu is open, with 'Preferences' highlighted. A yellow arrow points from this menu item to the 'Preferences' dialog box. The dialog box has a 'File View Help' menu and a 'Play' button (represented by a right-pointing arrow) in the top left corner. A blue arrow points from this button to the 3D molecular model in the center. The 'Preferences' dialog box is open, showing various settings. A red dashed box highlights the 'Mol. Weight' option under 'Boundary Condition', which is checked. A yellow arrow points from this option to the 3D model. The 3D model shows a complex molecular structure with atoms colored by element (carbon in grey, oxygen in red, nitrogen in blue, etc.) and bonds in grey. The model is displayed in a perspective view within a 3D coordinate system.

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...

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!