

Winmostar チュートリアル

Amber

基礎編

V8.000

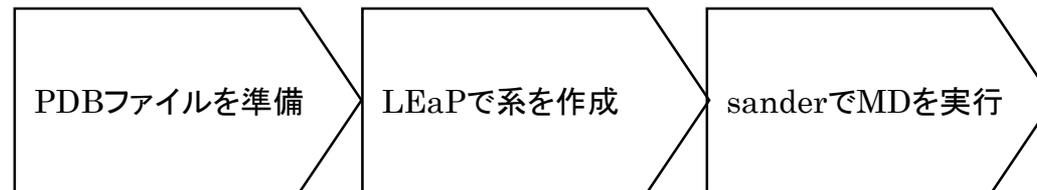
株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2017/10/01

概要

- このチュートリアルでは、シニョリンタンパクのPDBファイルからAmberで計算を流すための手段を示します。



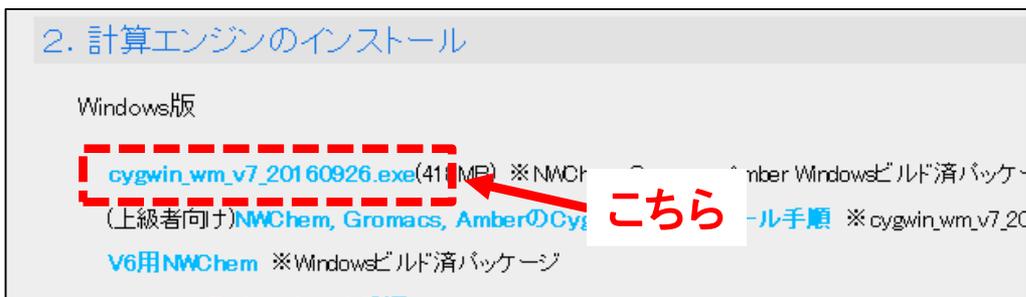
注意点:

- ここでは一般的なMD計算の手続きのうちごく一部の手順しか示しません。
- 系全体を中性に保つためNaイオンを投入します。
- 系のサイズ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。
- “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。

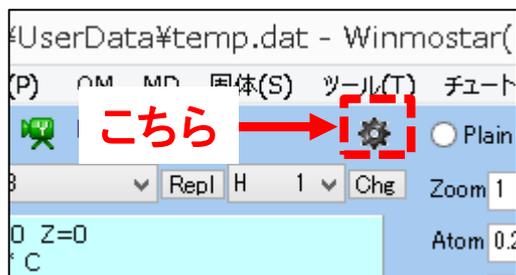
動作環境設定

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。



I. 系の作成

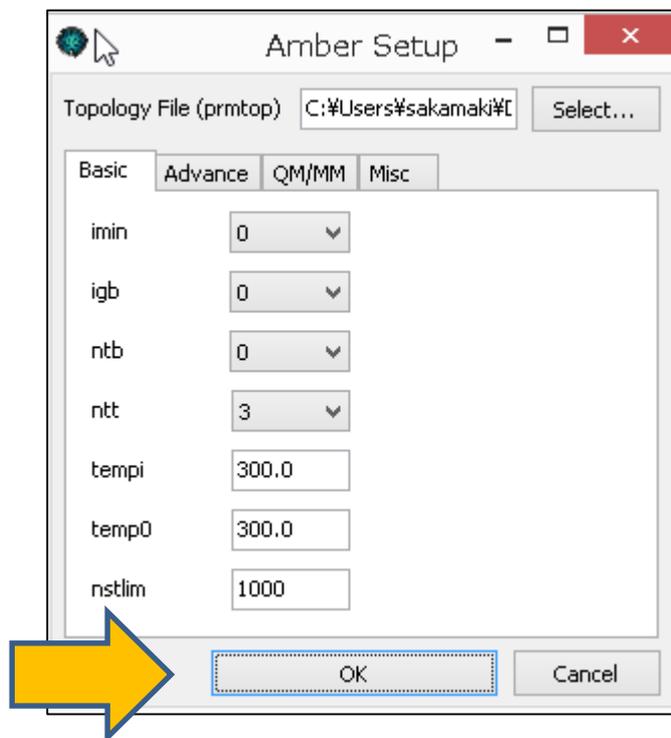
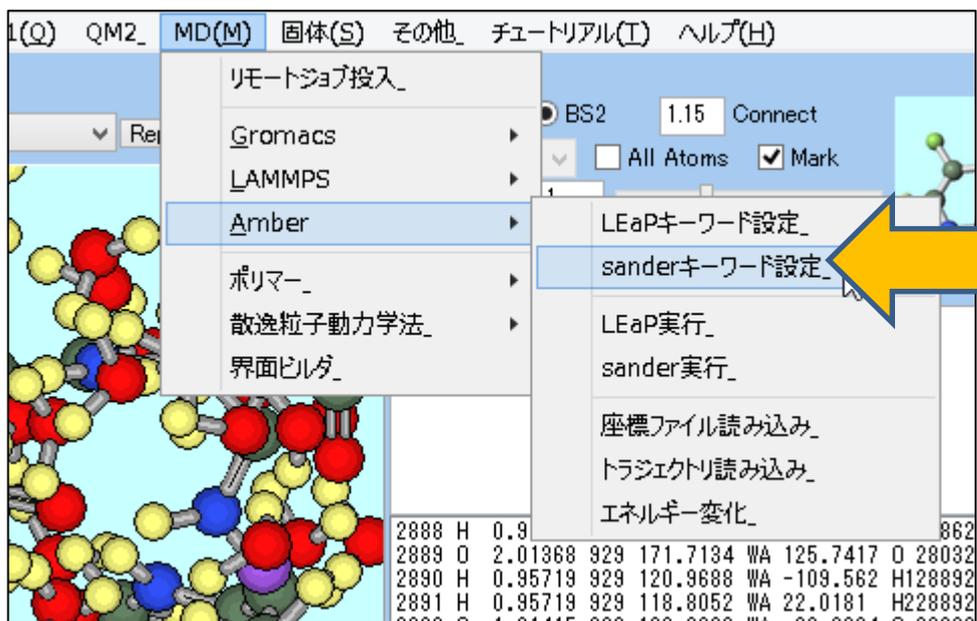
「メニュー>開く」からWinmostarのインストールディレクトリの下sample以下にある1uao.pdbを開く。(デフォルトではC:\winmos8\samples\1uao.pdb)
ここで一旦、「ファイル>名前を付けて保存」から、「1uao_last.pdb」として保存する。
(複数レコード含むpdbファイルから、最終レコードのみを取り出す)

The screenshot shows the LAMMPS Winmostar interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a protein structure. The top menu bar includes 'LAMMPS' and various tool icons. The left sidebar contains icons for file operations and simulation controls. The right sidebar shows a table of atom coordinates.

Atom ID	Element	X (Å)	Y (Å)	Z (Å)	Neighbor 1 ID	Neighbor 1 Element	Neighbor 2 ID	Neighbor 2 Element	Neighbor 3 ID	Neighbor 3 Element
118	C	1.39491	121.6355	179.9164	116	C	114	C	112	C
119	C	1.40548	120.4617	-179.8960	117	C	114	C	112	C
120	C	1.39669	119.5159	-0.0380	118	C	116	C	114	C
121	H	0.97623	119.9730	-0.1755	107	H	95	H	94	H
122	H	1.07923	109.7013	51.1449	108	H	107	H	95	H
123	H	1.07966	109.4186	83.7207	111	H	108	H	107	H
124	H	1.08049	109.4065	-156.5045	111	H	108	H	107	H
125	H	1.07990	125.5690	-0.4584	113	H	112	H	111	H
126	H	0.97880	125.3150	179.9047	115	H	113	H	112	H
127	H	1.07872	119.5408	-0.1564	117	H	114	H	112	H
128	H	1.08069	120.2182	-179.9662	118	H	116	H	114	H
129	H	1.07926	119.7891	179.8815	119	H	117	H	114	H
130	H	1.08004	120.1003	-179.9615	120	H	118	H	116	H
131	N	1.30500	117.5588	107.1073	109	N	108	N	107	N
132	C	1.49127	120.0351	-179.9288	131	C	109	C	108	C
133	C	1.52965	109.6117	-49.4860	132	C	131	C	109	C
134	O	1.22020	117.9804	98.8415	133	O	132	O	131	O
135	O	1.21994	118.0456	-81.2499	133	O	132	O	131	O
136	H	0.97888	119.9738	-0.0947	131	H	109	H	108	H
137	H	1.08014	109.4730	70.7001	132	H	131	H	109	H
138	H	1.079895	109.4415	-169.2955	132	H	131	H	109	H

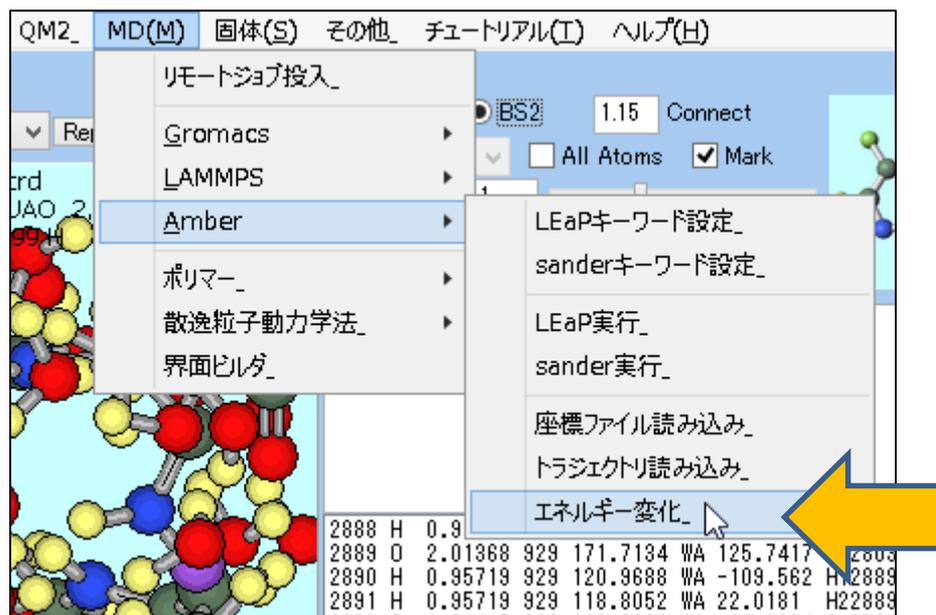
II. MD計算の実行

「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

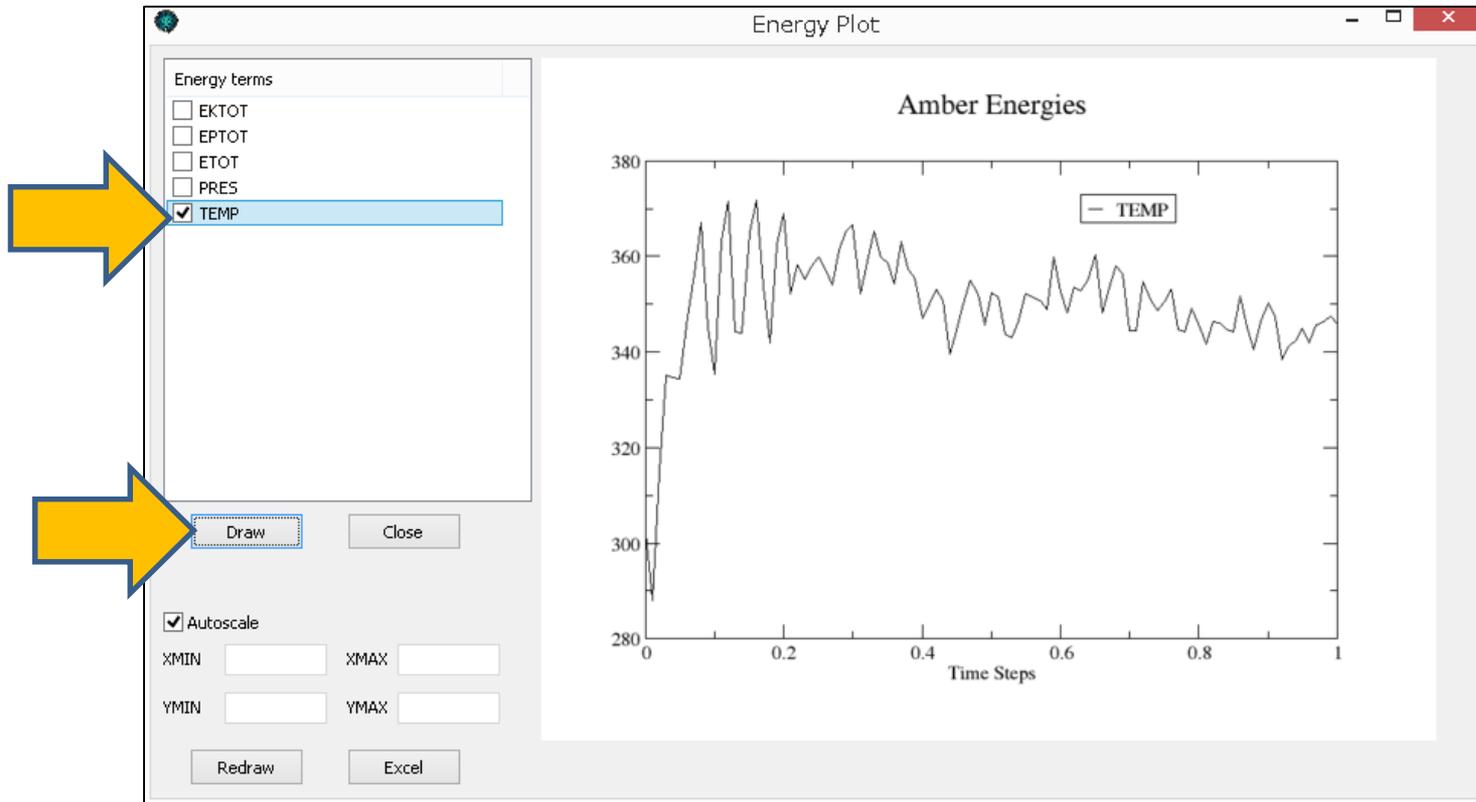
MD計算終了後、「MD>Amber>エネルギー変化」を選択する。
ログファイルの位置を聞かれるが、デフォルトで直前のMD計算のログファイルが
選ばれるので、そのまま「開く」とする。



III. エネルギーの時間変化の表示

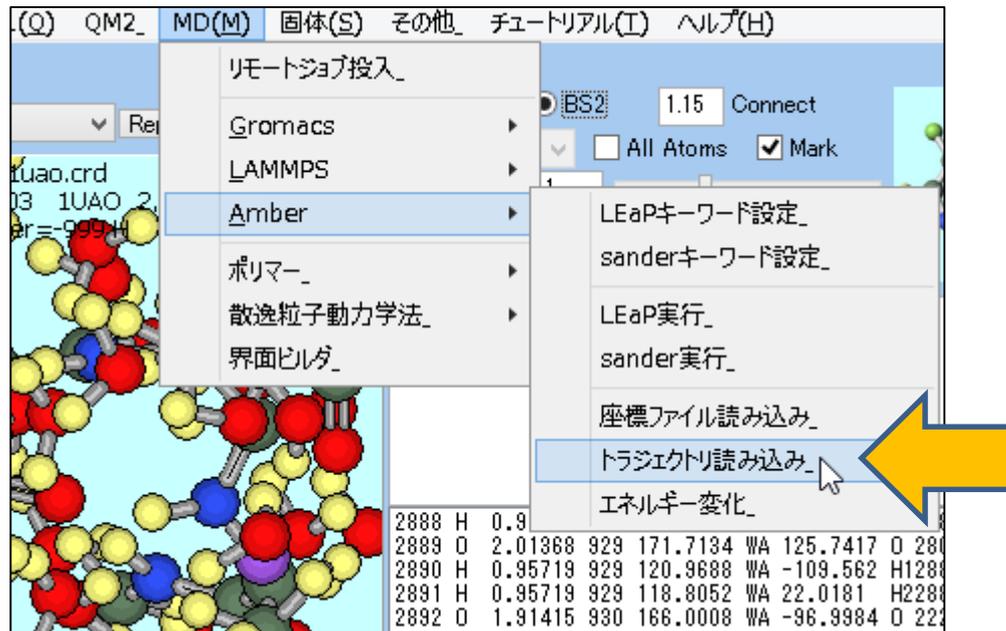
開かれたウインドウにおいて、プロットしたい「Energy Term」にチェックを入れ、「Draw」を押すとグラフが表示される。

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 main interface of X-Ability. On the left is a 3D ball-and-stick model of a protein structure. In the center is a data table for atom coordinates and properties. On the right is the 'Animation' control panel.

Number	Atom	Bond
2888	H	0.96500 928 172.828
2889	O	1.85990 929 167.136
2890	H	0.96163 929 108.013
2891	H	1.01236 929 73.0357
2892	O	1.89333 930 172.096
2893	H	1.01037 930 91.9255
2894	H	0.94159 930 99.7605
2895	O	1.90873 931 173.910
2896	H	0.99381 931 111.567
2897	O	0.98596 931 101.678
2898	O	1.72372 932 165.716
2899	H	0.98394 932 97.7221
2900	H	0.99368 932 157.852
2901	O	2.70428 933 138.976
2902	H	0.96168 933 91.8263
2903	H	0.96644 933 9.1608

The Animation panel includes a frame list (0-24), 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', a '3D' checkbox, an 'Excel' button, a 'Play' button (|>), and a 'Quit' button. A yellow arrow points to the Play button, and another points to the Quit 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...

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!