

Winmostar チュートリアル

Amber

基礎編

V9.2.4

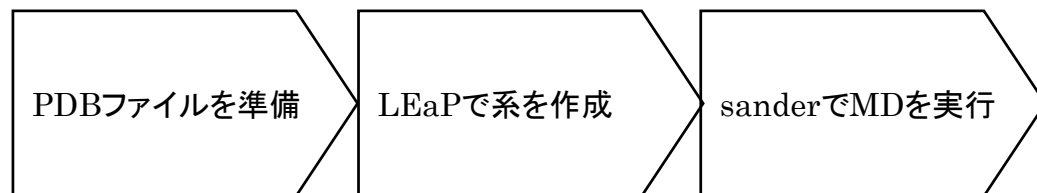
株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2019年07月08日

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/gmx4wm_jp.html の「1. 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。

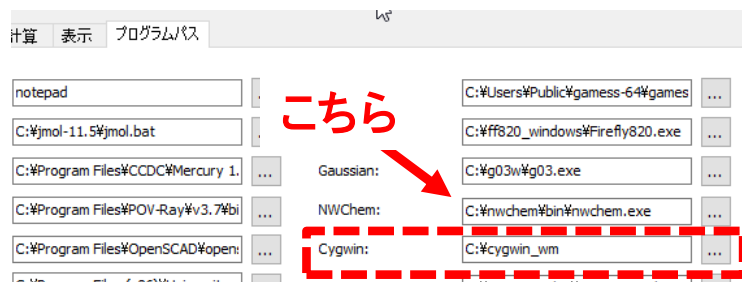
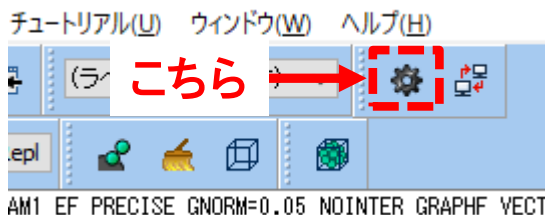
1. インストール

下記リンクから各パッケージがビルドコンパイル済のCygwinのインストーラをダウンロードし、実行します。
ダウンロードや実行が上手くいかない場合は、他のブラウザをお試しください。

[cygwin_wm_v9_20190402.exe\(549MB\)](#)

← **こちら**

- 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。



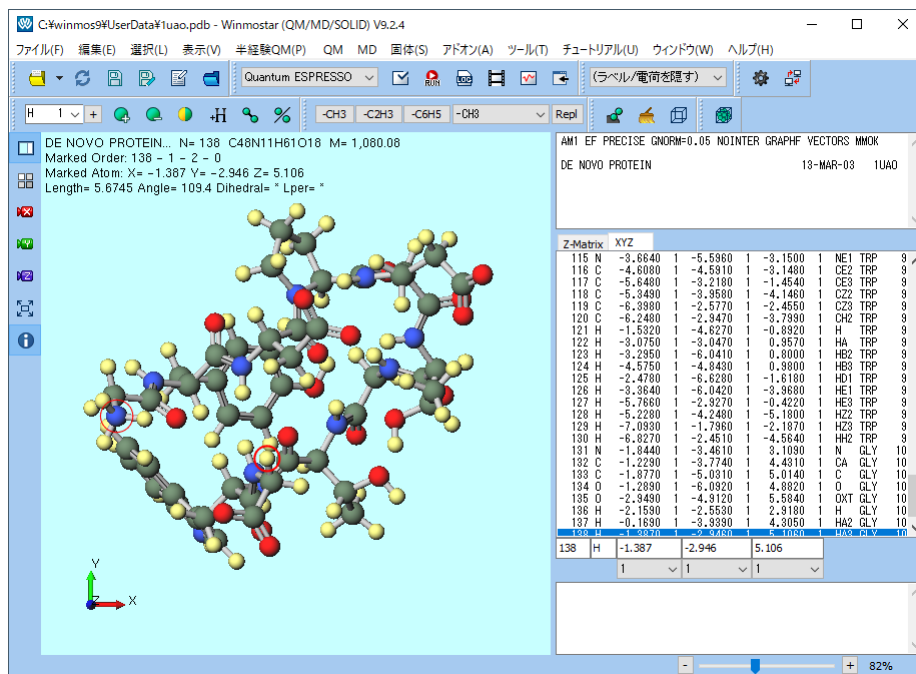
I. 系の作成

[チュートリアル]-[samplesフォルダを開く]でWinmostarのインストールディレクトリの下
のsampleフォルダをエクスプローラで開きます。1uao.pdbファイルをWinmostarに
ドラッグ & ドロップして開きます。

(デフォルトではファイル名はC:¥winmos9¥UserData¥1uao.pdbになります。)

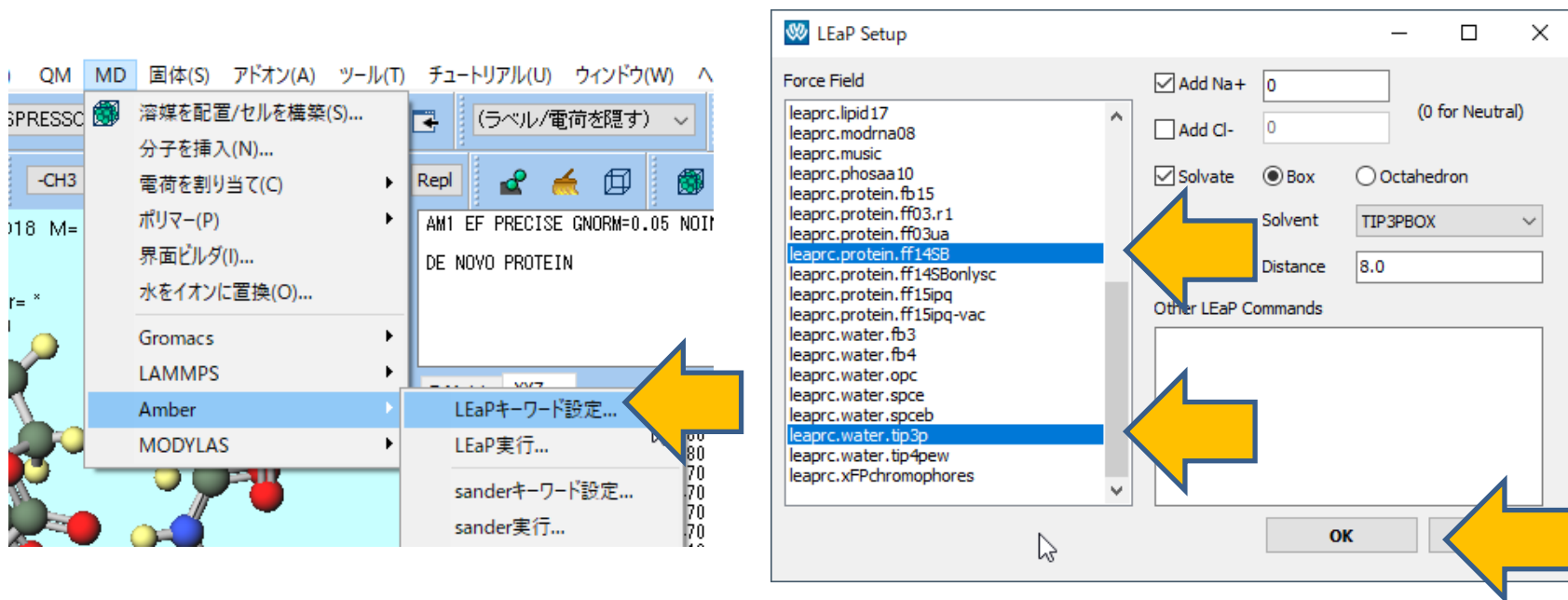
ここで一旦、[ファイル]-[上書き保存]で保存し直します。

(これにより複数レコード含むpdbファイルから、最終レコードのみが取り出されます)



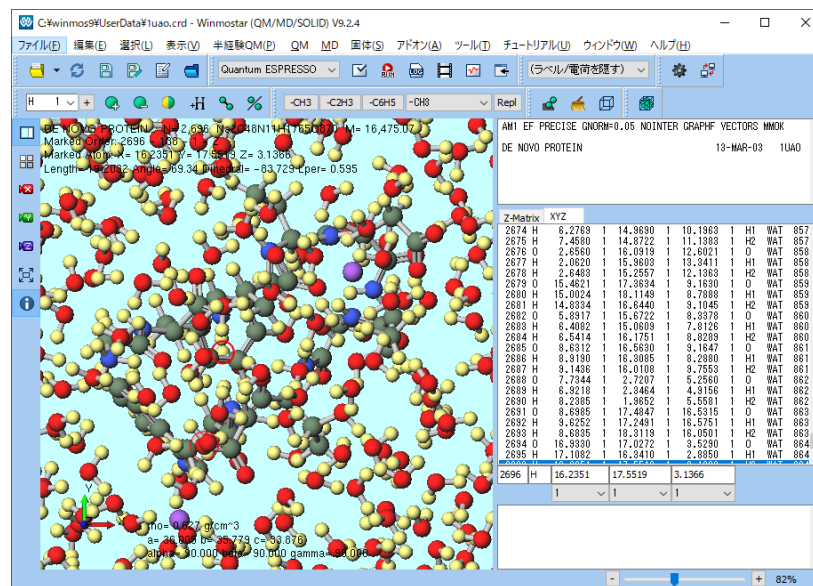
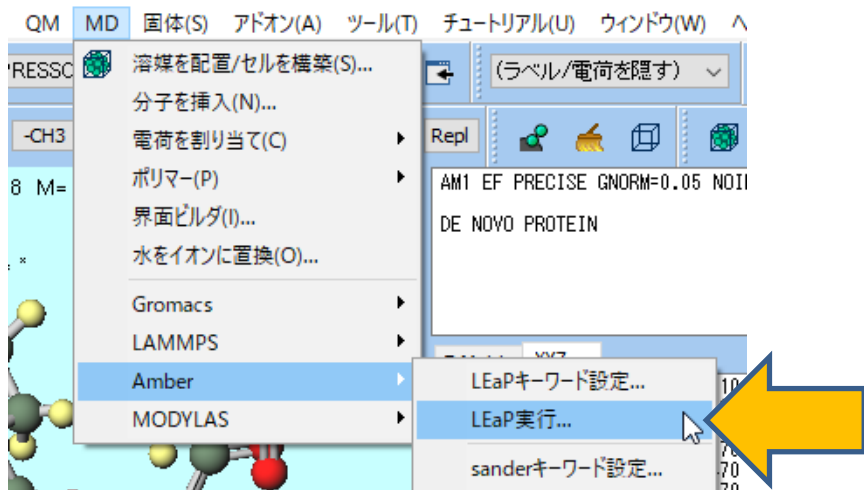
I. 系の作成

[MD]-[Amber]-[LEaPキーワード設定]を選択します。
ForceFieldでleaprc.protein.ff14SBとleaprc.water.tip3pをCtrlキーを押しながらクリックすることによって同時に選択します。OKボタンを押します。



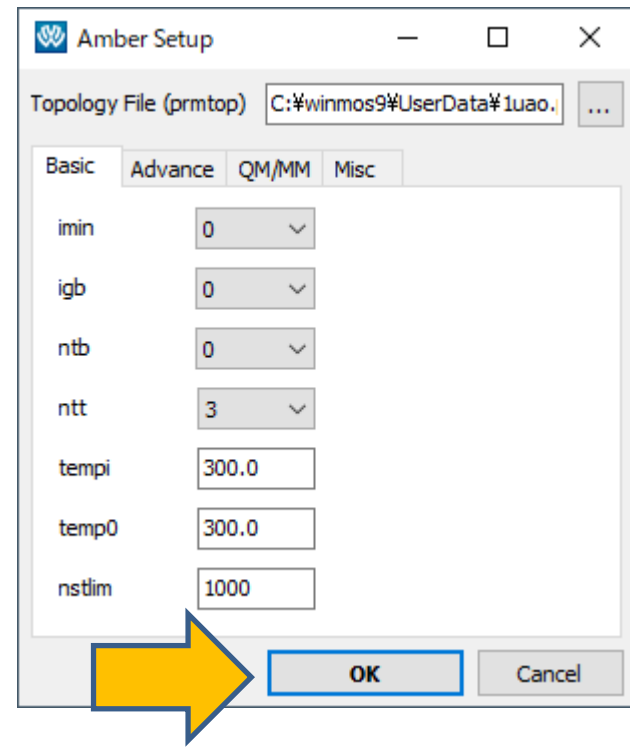
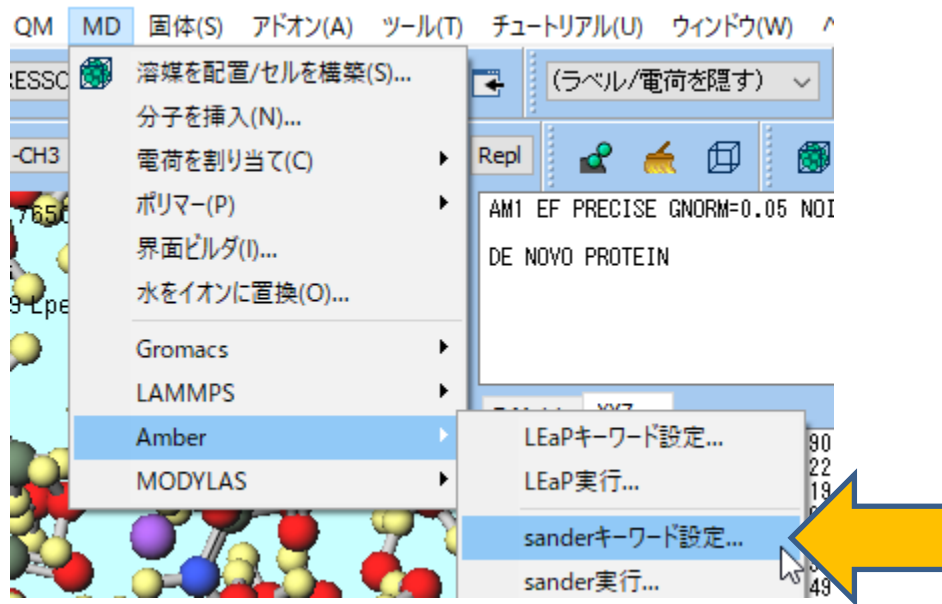
I. 系の作成

[MD]-[Amber]-[LEaP実行]を選択します。
座標(crd)ファイルとトポロジ(prmtop)ファイルを保存する際の名前を聞かれるので、
提示されている1uaoのままOKを押します。処理後、作成された系がメイン画面に出現します。



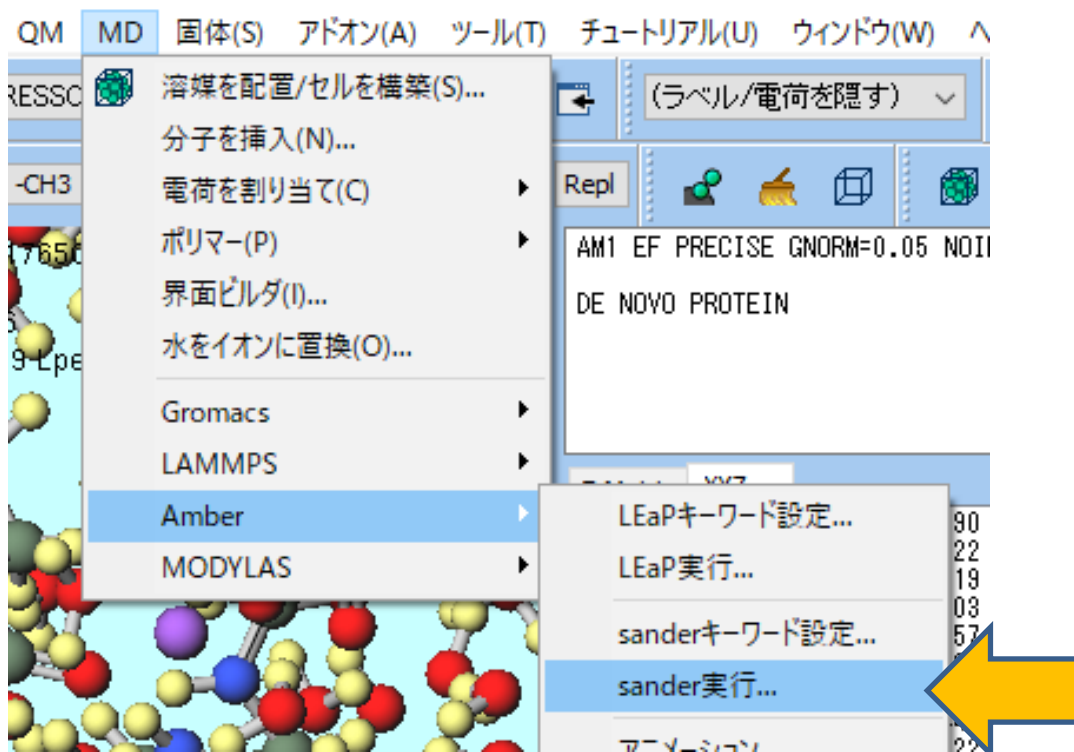
II. MD計算の実行

[MD]-[Amber]-[sanderキーワード設定]を選択し、デフォルトの設定で「OK」とします。
デフォルトの設定では、300 Kの温度一定MD計算が1000ステップ流れます。



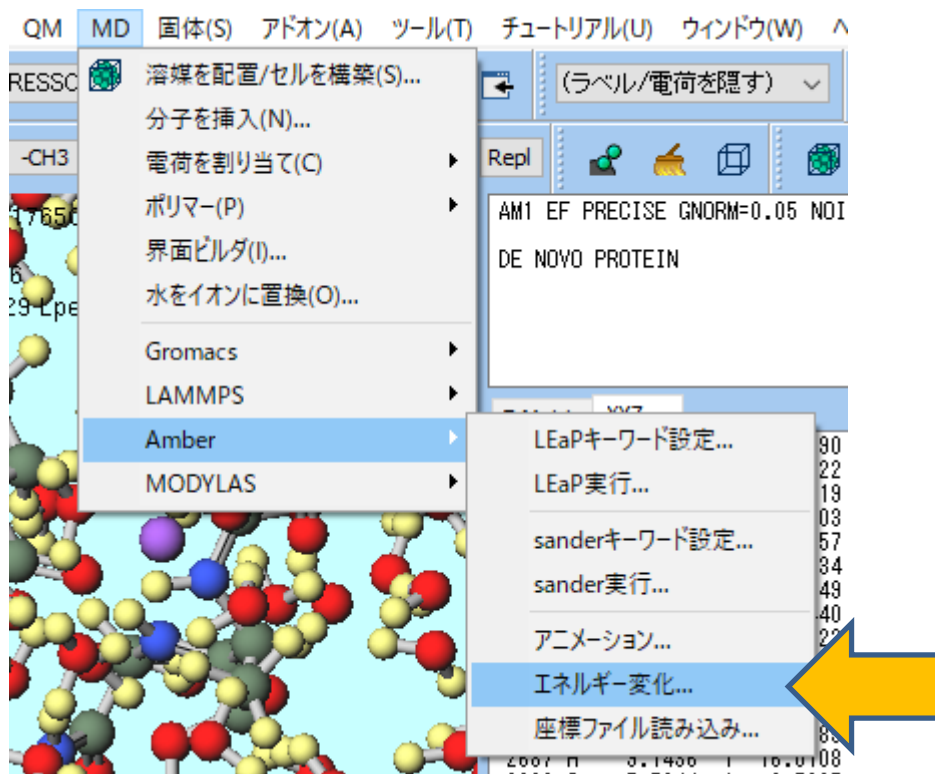
II. MD計算の実行

[MD]-[Amber]-[sander実行]を選択します。



III. エネルギーの時間変化の表示

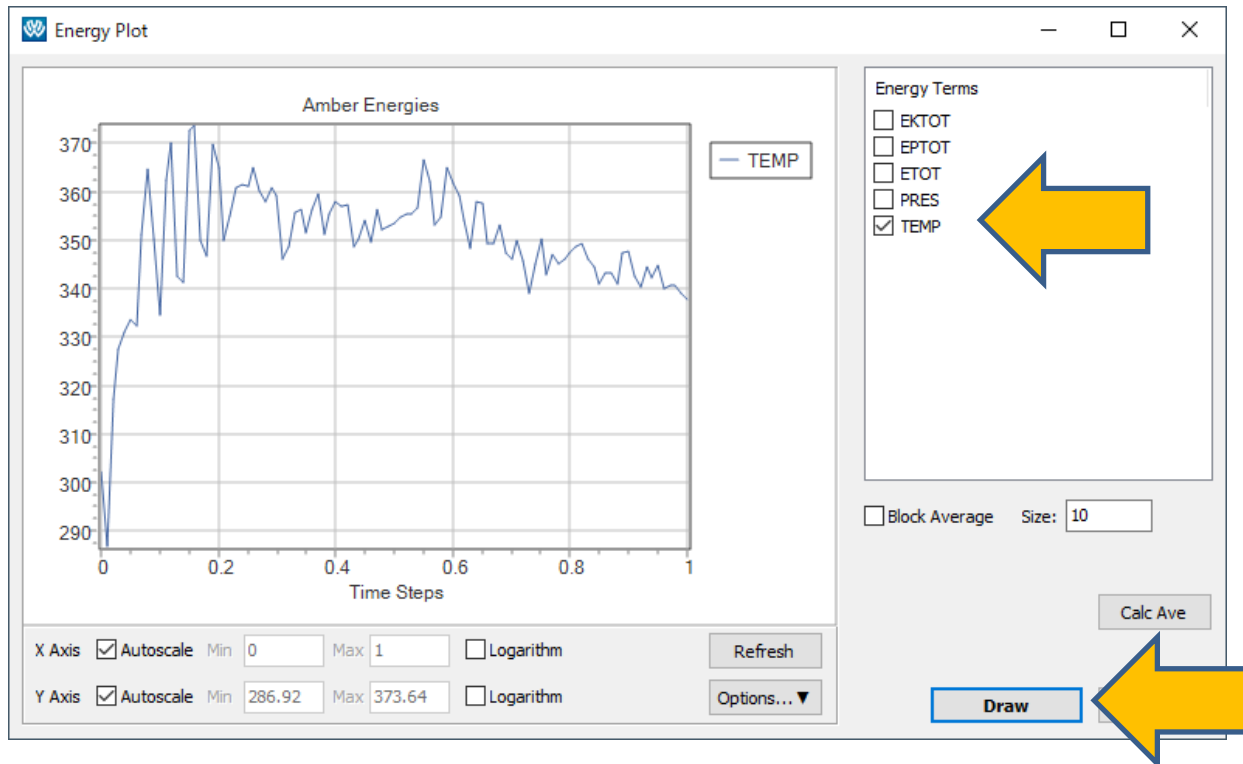
MD計算終了後、[MD]-[Amber]-[エネルギー変化]を選択します。
ログファイルの位置を聞かれますが、直前のMD計算のログファイルが選ば
れるので、そのまま「開く」とします。



III. エネルギーの時間変化の表示

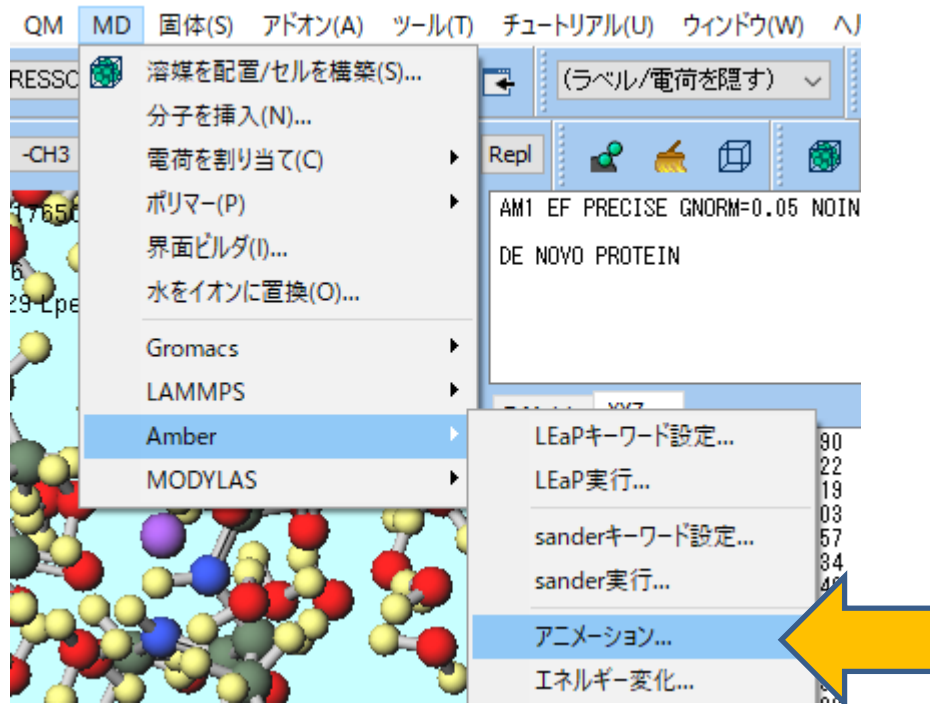
開かれたウインドウにおいて、プロットしたい「Energy Term」にチェックを入れ、「Draw」を押すとグラフが表示される。

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。



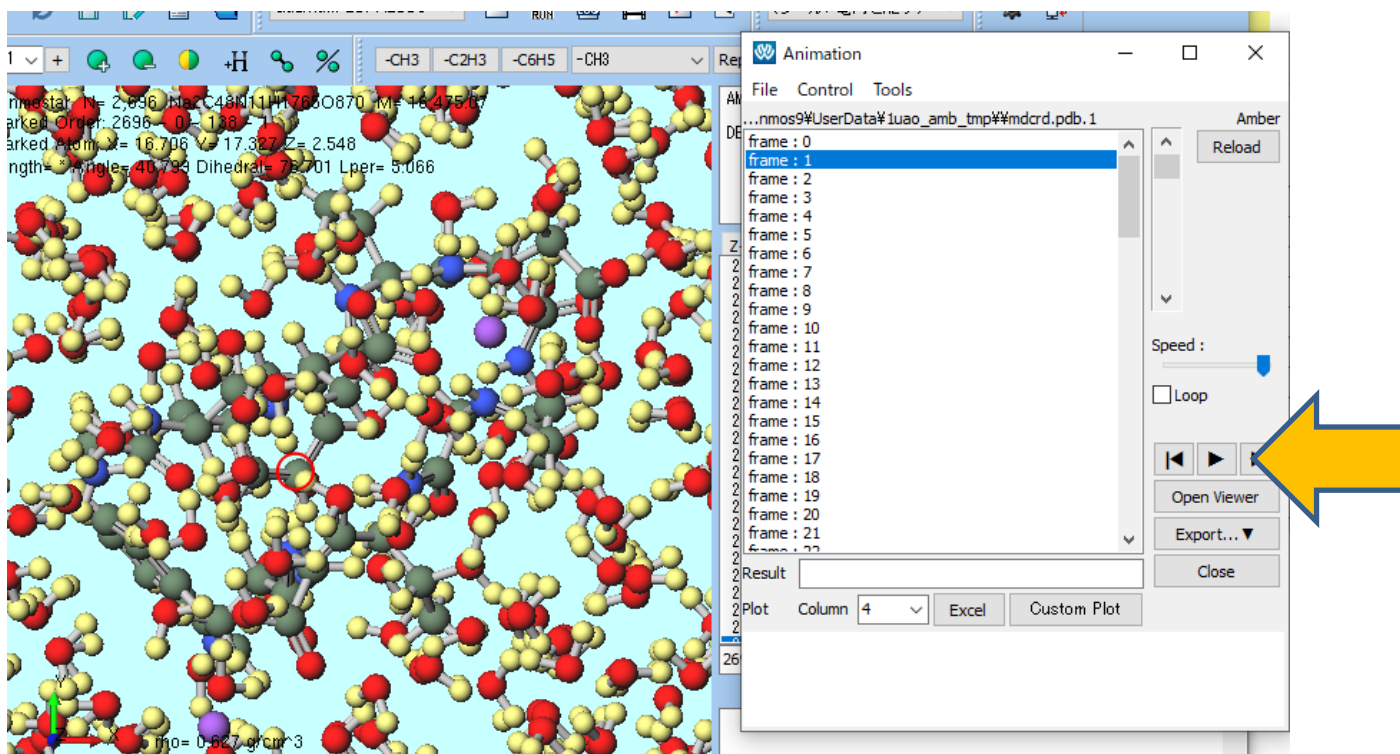
IV. アニメーション表示

MD計算終了後、[MD]-[Amber]-[アニメーション]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ますが、直前のMD計算の
ファイルが選ばれるので、そのまま「開く」とします。



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します。「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ます。



<https://www.facebook.com/X-Ability-CoLtd-168949106498088/>

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.さんや他の友

アカウント登録 ログイン

X-Ability
クロスアビリティ

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! 138件

情報

<http://x-ability.jp/>

写真

山口 達明

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30 · 公開

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_au_detailpage_o00_s00...

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 · 公開