

WinmostarTM チュートリアル Gromacs タンパク質 _{V9.0.1}

株式会社クロスアビリティ 2019年2月8日



概要

 このチュートリアルでは、ニワトリタンパクリゾチームのPDBファイルから Gromacsで計算を流すための手段を示します。



注意点:

- PDBのXRDからの情報に含まれる結晶水の情報を削除し、逆に含まれていない水素を補完する必要があります。
- 系のサイズ(溶媒の数)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 場合はあります。
- 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。

 <u>https://winmostar.com/jp/manual_jp.html</u>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。

② 計算工`バンのインストール	
Windows版	
<mark>cygwin_wm_v7_20160926.exe(411</mark> MP) ※NMCh (上級者向け) <mark>NWChem, Gromacs, AmberのCyg</mark>	t nber Windowsビルド済バッケ・ こちら -ル手順 ※cygwin_wm_v7_2(
V6用NWChem ※Windowsビルド済バッケージ	

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





- 1. 🔁 (ファイルを開く)をクリックする。
- 2. サンプルフォルダ内の1aki.pdbを開く。

(デフォルトではC:¥winmos9¥samples¥1aki.pdb)

80	C:¥winmos9¥UserData¥1aki.pdb - Winmostar (QM/MD/SOLID/SCG) V9.0.1		×
6		 ✓ C (5ベル/電荷を隠す) ∨ ◆ 提 	
Н	1 🗸 💽 🕒 Н 🗞 % Снз -с2нз -сенз -сня	- Repl 🛃 🥧 🗊	
	HYDROLASE N= 1,079 C613N193S10O263 M= 14,594.55	AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF VECTORS MMOK	^
	Marked Atom: X = 43.755 Y = 23.843 Z = 8.038 Length = 21.757 Angle= 65.064 Dihedral= * Lper= *	HYDROLASE 19-MAY-97 1AKI	
×			~
1	Salar and	Z-Matrix XYZ	94 .
R	Sector Sector	1057 0 22.6710 38.6910 8.2450 0 H0H 1 1058 0 33.9660 33.1120 6.8370 0 H0H 1	85
		1060 0 14.7900 15.6720 -1.4200 0 HOH 1 1060 0 14.7900 15.6720 -7.2590 0 HOH 1 1061 0 19.1120 28.0220 -14.6470 0 HOH 1	87 88 89
0		1062 U 17.302U 33.053U -12.453U U HUH 1 1063 U 16.1980 14.5020 5.5770 U HUH 1 1064 U 17.2450 46.2460 -7.0800 U HUH 1	90 91 92
		1065 0 14.3920 31.3000 -4.2420 0 HOH 1 1065 0 28.1960 44.7750 -3.1480 0 HOH 1	92 93 94
		1067 0 29.4790 13.8680 -9.1070 0 HOH 1 1068 0 23.6130 44.8110 2.6080 0 HOH 1	95 96
		1069 0 40.5720 22.1840 -6.3580 0 H0H 1 1070 0 12.4750 31.8600 -6.2260 0 H0H 1 1021 0 10 0040 -5 0200 0 H0H 1	97 98
		1071 0 18.6340 13.5340 -0.5320 0 HOH 1 1072 0 27.5340 38.0590 -12.8620 0 HOH 2 1073 0 25.8320 35.9730 11.5630 0 HOH 2	00 01
		1074 0 24.7900 25.1820 16.0630 0 HOH 2 1075 0 12.5800 21.2140 5.0060 0 HOH 2	02 03
		1076 0 19.6870 23.7500 -4.8510 0 HOH 2 1077 0 27.0980 35.9560 -12.3580 0 HOH 2	04 05
	and the second	1078 U 37.2550 9.6340 10.0020 U HUH 2 1079 U 43.7550 23.8430 8.0380 U HUH 2	06
	V Same and and	1079 O 43.755 23.843 8.038	
	1		<u>^</u>
	X X		
			~
		+ 25%	



- 1. 選択 | 分子単位でグループ選択をクリックする。
- 2. Select byウインドウでComp O 78の項目にチェックを入れる。

選択(<u>L</u>)	表示(⊻)	半経験QM(<u>P</u>)	QM	<u>M</u> D	固
₫^	くてをグルーフ	¹ 選択(A)			
グル	/ープ選択を	解除(N)			
グル	/-プ選択の	範囲を反転(I)			
分子	子種によるグ	ループ選択(S)			
分子	子によるグル	−プ選択(M)			
元录	素によるグル	−プ選択(E)			
選打	尺記述言語	によるグループ選択	₹(L)		

ID	Component	# Mols	its	
Comp1	C613N193S10	1		
Comp2	0	78		

メイン画面上で結晶水の酸素原子が グループ選択された(青丸で囲まれた)状態になる。



- 結晶水の酸素原子が選択された状態で、

 (部分編集) | グループ削除をクリックする。
- 2. SelectionでDeleteをクリックすると、結晶水が削除される。





- 1. 編集 | 水素を付加 | pdb2gmxを使用をクリックする。
- 2. Protonate with pdb2gmxウインドウでExecuteをクリックする。





タンパク質に水素が付加される。 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。



- 1. (溶媒を配置/セルを作成)をクリックする。
- Add Displayed Moleculeをクリックし、
 Enter # of moleculesに1と入力しOKをクリックする。
- 3. Add Waterをクリックし、

Enter # of moleculesに3000と入力しOKをクリックする。

Name ;	# Mol	Position	mol/L	- ~ Co	omposition	
				14/		
Add Displayed Molecule.			Add	water		
Simulation Cell Option						
• Set Density [g/cm^3]		0.6				
O Set Distance from Solut	te [nm]					
O Set Lattice Constants [nm]				Impo	rt
Angle	s [deg]	90.0	90.0	90.0		
Box Type		cubic			~	
Total Number of Atoms:						
			_			



- 1. Set Densityに0.9と入力する。
- 2. Buildをクリックする。

🥸 Solvate/Build Cell				-		×
Name	# Mol	Position	mol/L ~	Comp	osition	
[DISPLAYED]	1	Fixed	0.013	C613	N193H	
WATER	3000	Random	39.496	H2O		
Add Displayed Molecule.	Add	.mol2 File	Add Wate	r	Delete	2
Simulation Cell Option						
• Set Density [g/cm^3]]	0.9				
◯ Set Distance from So	lute [nm]	0.0024			-	
O Set Lattice Constants	s [nm]	5.015 5.	015 5.0	15	Import	
Ang	jles [deg]	90.0 90	.0 90.	0		
Box Type		cubic		~		
Total Number of Atoms:	10960				1	
Reset		[Build	\triangleleft		





- 1. MD | 水をイオンに置換をクリックする。
- 2. 警告が表示されるのではいをクリックする。
- 3. Generate lons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。





II. 系の平衡化

- 1. ソルバー覧からGromacsを選択し、 M(キーワード設定)をクリックする。
- 2. **Reset**をクリックする。
- 3. PresetにMinimize (fast)を指定し、# of Threadsに並列数を指定する。



🥨 Gromacs Setup			- <u> </u>
Extending Simulation		# of Threads	2
Preset Minimize (fast)		r Remote Job)	1 Prisses
Basic Advance Output	Interaction	Automatic Options Forc	e Field
Run Control		Temperature Coupling	
dt [ps]	0.002	tcoupl	berendsen \lor
nsteps	5000	tc-grps	System
Total time: N/A		ref-t [K]	300.0
integrator	steep \lor	tau-t [ps]	1.0
Velocity Generation		Pressure Coupling	
gen-vel	yes \lor	pcoupl	no 🗸
Fix random seed		pcoupltype	isotropic \vee
gen-seed	12345	ref-p [bar]	1.0
Explicitly set gen-temp	[K] 300.	tau-p [ps]	1.0
		compressibility [/bar]	4.5e-5
		Constraints	
		constraints	hbonds \checkmark
Reset		ОК	Cancel Run



- 1. Advanceタブの-DPOSRESにチェックする。
- 2. **Run**をクリックする。
- 3. ファイル名は1aki.groおよび1aki.topとして保存する。

🖉 Gromacs Setup			– 🗆 X
Extending Simulation		# of Threads	2
Preset Minimize (fa	 ~	MPI (for Remote Job)	1 Processes
Basic Advance	Dther	Automatic Options Ford	ce Field
Boundary Condition		Constraints	
pbc	xyz 🗸	constraint-algorithm	LINCS ~
Energy Minimization		continuation	no 🗸
emtol [KJ/mol/nm]	100.0	lincs-order	4
emstep [nm]	0.01	lincs-iter	1
Run Control		shake-tol	1e-4
comm-mode	Linear V	Misc.	
nstcomm	50	print-nose-hoover-chain-	variables yes 🗸
Temperature/Pressur	e Coupling	define	
nh-chain-length	10		-DPOSRES
nsttcouple	-1		
nstpcouple	-1		•
refcoord-scaling	no 🗸		
Reset Load	Save	ОК	Cancel Run



- 1. 計算終了後、 (キーワード設定)をクリックする。
- 2. Extending Simulationにチェックを入れる。
- 3. PresetにNVT (fast)を指定する。 Advanceタブの-DPOSRESにチェックを入れる。
- 4. Runをクリックする。

Extending Simulation		# of Threads	2	
Preset NVT (fast)		or Remote Job)	1 Processe	5
Basic Advance Output	t Interaction	Automatic Options For	ce Field	
Boundary Condition		Constraints		
pbc	xyz 🗸 🗸	constraint-algorithm	LINCS ~	
Energy Minimization		continuation	no V	
emtol [KJ/mol/nm]	100.0	lincs-order	4	
emstep [nm]	0.01	lincs-iter	1]
Run Control		shake-tol	1e-4	
comm-mode	Linear V	Misc.		
nstcomm	50	print-nose-hoover-chain-	variables yes ~	
Temperature/Pressu	re Coupling	define		
nh-chain-length	10			
nsttcouple	-1]		
nstpcouple	-1			
refcoord-scaling	no 🗸			

Copyright (C) 2019 X-Ability Co., Ltd. All rights reserved.

N



- 1. 計算終了後、 (キーワード設定)をクリックする。
- 2. PresetにNPT (fast)を指定する。Basicタブにてnstepsに15000を指定する。
- 3. Advanceタブの-DPOSRESにチェックを入れる。
- 4. Runをクリックする。

Gromacs Setup	4	- 🗆 X	🥨 Grom	nacs Setup			- 🗆 🗙
Extending Simulation	# of Threads	2	Exte	ending Simulation		# of Threads	2
Preset (Fact)	or Remote Job)	1 Processes	Preset	NPT (fast)	~	MPI (for Remote Job)	1 Processes
Basic eraction	er Automatic Options Force	e Field	Basic	Advance	Dther	Automatic Options For	ce Field
Run Contro	Temperature Coupling		Bound	ary Condition		Constraints	
dt [ps] 0.002	troug	berendsen \checkmark	pbc		xyz V	constraint-algorithm	LINCS \checkmark
nsteps 15000		System	Energy	y Minimization		continuation	no 🗸
Total time: 30 ps	ref-t [K]	300.0	emtol [}	(]/mol/nm]	100.0	lincs-order	4
integrator md	✓ tau-t [ps]	1.0	emstep	[nm]	0.01	lincs-iter	1
Velocity Generation	Pressure Coupling		Run Co	ontrol		shake-tol	1e-4
gen-vel no	~ pcoupl	Parrinello-Rahma $ \smallsetminus $	comm-n	node	Linear V	Misc.	
Fix random seed	pcoupltype	isotropic V	nstcom	m	50	print-nose-hoover-chain-	variables yes ~
gen-seed 12345	ref-p [bar]	1.0	Tempe	erature/Pressure	Coupling	define	
Explicitly set gen-temp [K] 300.	tau-p [ps]	1.0	nh-chai	n-length	10		
	compressibility [/bar]	4.5e-5	nsttcou	ple	-1		
	Constraints		nstpcou	ıple	-1		
	constraints	hbonds ~	refcoor	d-scaling	no 🗸		
Reset Load Save	ОК	Cancel Run	Reset	. Load	Save	ОК	Cancel Run



- 1. 計算終了後、 (キーワード設定)をクリックする。
- 2. PresetにNVT (fast)を指定し、gen-velにnoを選択する。
- 3. Runをクリックする。

🥨 Gromacs Setup		4	- 🗆 X	
Extending Simulation		# of Threads	2	
Preset NVT (fast)		emote Job) 1 Processes	
Basic Advance Output	t Interaction Other	utomatic Options Fo	rce Field	
Run Control		Temperature Couplin	ng	
dt [ps]	0.002	tcoupl	berendsen \checkmark	
nsteps	5000	tc-grps	System	
Total time: 10 ps		ref-t [K]	300.0	
integrator	md \sim	tau-t [ps]	1.0	これによりrestraintが解かれた
Velocity Generation		Pressure Coupling		計算が行われる。
gen-vel	no		no 🗸	
Fix random seed		pcoupitype	isotropic 🗸 🗸	
gen-seed	12345	ref-p [bar]	1.0	
Explicitly set gen-temp	[K] 300.	tau-p [ps]	1.0	
		compressibility [/bar]	4.5e-5	
		Constraints		
		constraints	hbonds \checkmark	
	-			
Reset Load	Save	OK	Cancel Run	



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。

- 1. 計算終了後、 🔁 (結果解析) | RMSDをクリックする。
- 2. 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をクリックする。
 RMSDの時間変化を確認する。回転半径も同様の手順で取得できる。





- 1. 計算終了後、 🗹 (キーワード設定) をクリックする。
- 2. PresetにNPT (fast)を指定する。
- 3. **Run**をクリックする。

Extending Simulation			# of Threads	2
Preset NPT (fast)			(for Remote Job)	1 Processes
asic Advance Output	Interaction	er	Automatic Options Force	e Field
Run Control			Temperature Coupling	
dt [ps]	0.002		tcoupl	berendsen 🗸
nsteps	5000		tc-grps	System
Total time: 10 ps			ref-t [K]	300.0
integrator	md	\sim	tau-t [ps]	1.0
Velocity Generation			Pressure Coupling	
gen-vel	no	\sim	pcoupl	Parrinello-Rahma $ \smallsetminus $
Fix random seed			pcoupltype	isotropic \checkmark
gen-seed	12345		ref-p [bar]	1.0
Explicitly set gen-temp	[K] 300.		tau-p [ps]	1.0
			compressibility [/bar]	4.5e-5
			Constraints	
			constraints	hbonds ~



Ⅲ. 本計算・アニメーション表示

- 1. 平衡化計算終了後、 🤮 (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)
- 2. 本計算終了後、 1 (トラジェクトリ読み込み)をクリックする。
- 3. デフォルトで選ばれるファイルを開く操作を2回行う。
- 4. AnimationウインドウでOpen Viewerをクリックする。



9 2/		ŀ	Animation		_ □	×		
C:¥winmos	s7009tes	st¥samples¥	laki_gmx_tmp	femx_tmp;	mdrun.trr	Gromacs		
				Reload	Rewind			
frame	0	time =	10.00000	0	^			
frame	1	time =	10.199999	8				
rame	2	time =	10.399999	6				
rame	3	time =	10.600000	4				
rame	4	time =	10.800000	2				
rame	5	time =	11.000000	0				
rame	6	time =	11.199999	8				
rame		time =	11.399999	6				
rame	8	time =	11.600000	4				
rame	. 9	time =	11.800000	2	Y			
rame	10	time =	12.000000	0	Last			
rame	11	time =	12.199999	8	Edot			
rame	12	time =	12.399999	6	Clow	East		
rame	13	time =	12.600000	4	31000	Fast		
rame	14	time =	12.800000	2	temp			
rame	15	time =	13.000000	0				
rame	16	time =	13.199999	8	3D ar	nimation		
rame	17	time =	13.399999	6	lipeg	🗌 gif 🖌		
rame	18	time =	13.600000	4	Dutor			
rame	19	time =	13.800000	2	autor	ew 🧹		
rame	20	time =	14.000000	0	3D			
rame	21	time =	14.199999	8	E I		_	
rame	22	time =	14.399999	6	Excel			
rame	23	time =	14.600000	4	⊳			
rame	24	time =	14.800000	2 *	Out.			
					Quit	4 🗸		



Ⅲ. 本計算・アニメーション表示

- 1. Winmostar Viewerにて、View | Representationsをクリックする。
- 2. Compositionをチェックして、各分子種毎に表示の設定を変える。
- 3. 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。





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

