

myPresto 4.2

- *cosgene "ANALYSIS"* -

USER MANUAL

Version 1.0

Copyright (C) 2004-2010 National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

Copyright (C) 2004-2010 Japan Biological Informatics Consortium (JBIC)

本ドキュメントについて

本ドキュメントは、「*myPresto 4.2* USER MANUAL」の別冊です。コピーライト、プログラム使用許諾条件、著者および引用文献については、「*myPresto 4.2* USER MANUAL」の記述に準じます。

謝辞

本ソフトウェアの研究開発は、新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)、及び、経済産業省(METI)の援助によって行われました。ここに感謝の意を記します。

本ソフトウェアは、故・京極好正博士の推進する研究プロジェクトで開発されました。

目次

1	cosgene "ANALYSIS"の概要.....	5
1.1	実行方法.....	5
1.2	入力データの作成.....	5
1.2.1	コントロールファイル.....	5
1.2.1.1	EXE> INPUT グループ.....	6
1.2.1.2	EXE> ANALysis グループ.....	10
2	計算例.....	21

(余白)

1 cosgene "ANALYSIS"の概要

cosgene は、MIN や MD のエネルギートラジェクトリファイルおよび座標トラジェクトリファイルを解析する機能"ANALYSIS"を含んでいます。

1.1 実行方法

参照座標やトポロジーファイル、計算条件などの分子情報は、MIN/MD 計算と同様にコントロールファイルで指定します (以下、ユーザマニュアル「cosgene」の章を参照)。

```
% cosgene < control_file > output
```

1.2 入力データの作成

1.2.1 コントロールファイル

コントロールファイルは、以下のグループからなり、各グループは "QUIT" で終了します。

- EXE> INPUT **グループ** : 主な入力ファイル名を指定します。
- EXE> ANALYSIS **グループ** : トラジェクトリ解析のオプションを指定します。
- EXE> OUTPUT **グループ** : 最終結果の出力を指定します。
- EXE> END : コントロールファイルの終わりを示します。

```
EXE> INPUT
      TOPOLOGY=  FORM      NAMETO=   initial.tpl ;系のとポロジーファイル
      COORDINA=  PDB      NAMECO=   initial.pdb ;系のPDBファイル
      REFCOORD=  PDB      NAMERE=   initial.pdb ;参照座標
      QUIT
EXE> ANALYS
      METHOD=     MD
      NAMETR=    traject.cor ;MD計算の座標トラジェクトリファイル
      DATATY=    COR4      ;トラジェクトリファイルの種類指定
      LOGFOR=    DETAIL    ;標準出力の指定
      INTERV=    1         ;解析のステップ間隔
      STARTT=    0.0       ;解析開始時刻 (PSEC)
      ENDTIM=    20.0      ;解析終了時刻 (PSEC)
      UNITBS=    61        ;NAMEBSのI/Oユニット番号
      NAMEBS=    setbst_1.bst ;座標重ね合わせに用いる原子指定
      BESTFI=    YES       ;座標の重ね合わせを行なう。
      FLUCTU=    YES       ;揺らぎの計算を行なう。
      NAMEPL=    rmsd_plot.data ;RMSDのプロットデータ
      QUIT
EXE> OUTPUT
      COORDINATE= PDB      NAMECO=    mean.pdb ;出力する平均構造
      QUIT
EXE> END
```

トラジェクトリ解析の場合のコントロールファイルの例

1.2.1.1 EXE> INPUT グループ

MIN/MD 計算と同様に、INPUT グループでは、トポロジーファイル、初期座標、各種拘束・モニター対象の原子の指定などのために、それらの外部ファイルの指定を行います（各外部ファイルの書式は、ユーザマニュアル巻末「A 入出力ファイル」参照）。

ANALISIS では、次の指定が可能です。

INPUT グループでの指定事項：

- (1) 系のトポロジーの指定
- (2) 系の座標の指定
- (3) 固定原子(fix atom)・自由原子の指定
- (4) CAP ポテンシャルの指定
- (5) RMSD を計算するときの指定
- (6) 位置拘束の指定
- (7) 原子間距離拘束の指定
- (8) 二面角拘束の指定
- (9) QUIT

(1) 系のトポロジーの指定

TOPOLogy：トポロジーファイルの書式（ ）

- =NOEad ; トポロジーファイル入力なし（デフォルト）
- =FORMatted ; 書式つきアスキーファイル
- =BINArY ; バイナリーファイル

UNITTOpology：トポロジーファイルの IO unit（ ）

- =10 ;(デフォルト)

NAMETOpology=(トポロジーファイル名、80 文字以内。TOPOLogy=[FORM|BINA]のとき)

(2) 系の座標の指定

COORDinate:PDB 書式 3 次元座標ファイルの書式（ ）

- =NOEad ; 座標入力なし（デフォルト）
- =PDB ; PDB ファイルフォーマット
- =BINArY ; バイナリーファイル

UNITCOordiante：座標ファイルの IO unit（ ）

- =11 ;(デフォルト)

NAMECOordinate=(座標ファイル名、80 文字以内。COORD=[PDB|BINA]のとき)

(3) 固定原子(fix atom)・自由原子の指定

固定原子指定は、指定した原子を MIN/MD 計算の対象から外し力場を与える点として扱います。自由原子は通常の MIN/MD 計算の対象となる原子です。固定すべき原子番号を指定するか、または特定の中心と半径 R1,R2 を指定し、中心からの距離 R が $R1 < R < R2$ 内となる原子を指定することができます。そのための指定ファイルが必要です。同様に自由原子の指定が行われます。この指定がなければ、系の原子はすべて自由原子として扱われます。

```
SETVARIABLES=:固定原子・自由原子指定ファイルの書式( )
    =NOREAD ;固定原子指定なし(デフォルト)
    =READ   ;固定原子指定あり
UNITVARIABLES :固定原子指定ファイルの IO unit ( )
    =13     ;(デフォルト)
NAMEVARIABLES =(固定原子指定ファイル名、80 文字以内。)
```

(4) CAP ポテンシャルの指定

CAP ポテンシャルを適用する原子と CAP の中心の座標、半径・力の定数を指定します。CAP 指定ファイルに原子を指定、中心座標などは CAP 指定ファイルでもコントロールファイルでも指定できますが、コントロールファイルの入力が優先されます。

```
SETBOUNDARY :CAP ポテンシャルを適用する原子と CAP の半径・力の定数を指定( )
    =NOREAD      ;CAP を使用しない(デフォルト)
    =READ        ;CAP を使用する
UNITBOUNDARY :CAP 指定ファイルの IO Unit ( )
    =14          ;(デフォルト)
NAMEBOUNDARY =(CAP 指定ファイルの名前、80 文字以内( ))
```

(5) RMSD を計算するときの指定 (MIN、MD 使用時)

```
REFCOORDINATE :参照ファイル。基準となる PDB 書式の座標ファイル( )
    =NOREAD      ;使用しない(デフォルト)
    =PDB        ;使用する
UNITREFCOORDI :参照ファイルの IO Unit ( )
    =15          ;(デフォルト)
NAMEREFCOORDI =(参照ファイルのファイル名、80 文字以内)
```

(6) 位置拘束の指定

位置拘束を使用するには、次の2つのファイルの準備が必要です。

- ・ 拘束の対象原子の指定と力の定数に関する情報を記載した拘束指定ファイル
- ・ 拘束する座標を記載した PDB 形式の参照ファイル

REFC00rdinate : 参照ファイル、RMSD の時と同じ ()
=NOREad ; 使用しない (デフォルト)
=PDB ; 使用する

UNITREfcoordi : 参照ファイルの IO Unit ()
=15 ; (デフォルト)

NAMEREFcoordi=(参照ファイルのファイル名、80 文字以内 ())

POSITIonrestrain : 対象原子、力の定数などの指定 ()
=NOREad ; 使用しない (デフォルト)
=READ ; 使用する

UNITPOsition : 拘束対象指定ファイルの IO Unit
=16 ; (デフォルト) ()

NAMEPOsition=(拘束指定ファイルの名前、80 文字以内 ())

(7) 原子間距離拘束の指定

原子間距離拘束指定ファイルを用意します。

DISTANcerestrain : 原子間距離拘束を用いる
=NOREad ; 適用しない (デフォルト)
=READ ; 適用する

UNITDIstance : 距離指定ファイルの IO Unit
=17 ; (デフォルト) ()

NAMEDIstance=(原子間距離拘束指定ファイルの名前、80 文字以内)

(8) 二面角拘束の指定

二面角拘束指定ファイルを用意します。

DIHEDRAlrestrain : 2 面角拘束を用いる
=NOREad ; 適用しない (デフォルト)
=READ ; 適用する

UNITDH : 2 面角拘束指定ファイルの IO Unit
=18 ; (デフォルト) ()

NAMEDH= (2 面角拘束指定ファイルの名前、80 文字以内)

(9) QUIT

EXE>グループの入力の終わりを示す。

1.2.1.2 EXE> ANALysis グループ

ここでは、トラジェクトリー解析に必要な、方法、計算結果の出力、計算に用いるエネルギー項の指定、境界条件・拘束条件の指定を行います。

エネルギー計算に関する指定のほとんどは、EXE> MD グループと共通です。

(1) 解析手法

(1 - 1) 単一の構造を解析する手法

INPUT グループで指定される座標ファイルを解析する。

VIOLATioncheck : 異常結合長、異常結合角、van der Waals 接触の検査を行なう。

=NO ;(デフォルト)

=YES

FORCEAnalysis : 各原子に働く力を atom data file に出力する。

MIN/MD と同様にエネルギーパラメーターの指定が必要である。FMM/PME には対応していない。

=NO ;(デフォルト)

=YES

ELECTRostatic : 各原子に働く 1-5 静電相互作用を計算し atom data file に出力する。

誘電率の指定が必要。

=NO ;(デフォルト)

=YES

【注意】現在、空のファイルをトラジェクトリーファイルとして用意し、形式的にトラジェクトリーファイルの入力指定"NAMETR" (後述)を行なわなければならない。

(1 - 2) トラジェクトリーファイルを解析する手法

ENERGYtrajectory : エネルギートラジェクトリーを計算し、平均値・標準偏差を計算、plot-data file に出力する。

=NO ;(デフォルト)

=YES

DISTANceanalysis : 座標のトラジェクトリーファイルから、原子間距離のトラジェクトリーを計算し、plot-data file に出力する。距離拘束の制御ファイルを読み込む必要がある。

=NO ;(デフォルト)

=YES

DIHEDRalanalysis : 座標のトラジェクトリーファイルから、2面角のトラジェクト

リーを計算し、plot-data file に出力する。2 面角拘束の制御ファイルを読み込む必要がある。

=NO ;(デフォルト)

=YES

FLUCTUation : 座標のトラジェクトリーファイルから、平均構造と、RMSD, 座標の揺らぎを計算し、plot-data file に出力する。平均構造は、OUTPUT セクションで出力される。

=NO ;(デフォルト)

=YES

(2) 計算結果の標準出力指定

LOGFormat : 標準出力の書式 ()

=SHORT ; 1 行 80 文字以内の簡易出力 (デフォルト)

=DETAIL ; 1 行 80 文字以内の詳細出力。各エネルギーを追加。

(3) 構造重ね合わせ計算の指定

BESTFit : 参照構造に対する系の第 1 チェイン、または、座標重ね合わせ指定ファイルで指定された原子の重ねあわせを行なう。平均構造・座標の揺らぎ・RMSD を計算する場合 (FLUCTUation = YES) に指定する。

=NO ; 計算しない (デフォルト)

=YES ; 計算する。

【注意】参照構造として、EXE> INPUT フェーズにて "REFCOORD", "NAMERE" を指定する必要がある。()

(4) 解析用データ入力

(4 - 1) トラジェクトリーファイル

NAMETR = (トラジェクトリーのファイルの名前)

UNITRA : トラジェクトリーのファイルの IO Unit

=60 ;(デフォルト)

DATAType = (トラジェクトリーファイルの種類)

= ENER ; エネルギートラジェクトリーファイル (デフォルト)

= COR4 ; 単精度座標トラジェクトリーファイル

= COR8 ; 倍精度座標トラジェクトリーファイル

(4 - 2) 座標重ね合わせの指定ファイル

平均構造・座標の揺らぎ・RMSD を計算する場合 (FLUCTUation=YES)、レファレンス座標への座標の重ね合わせに用いる原子の指定をする。

NAMEBS = (原子名指定ファイルの名前)

UNITBS : 原子名指定ファイルの IO Unit

=0 ; (デフォルト)

【注意】 "UNITBS" が 0 または負数の場合、"NAMEBS" で指定したファイルは読み込まれず、第一チェーンの全原子が用いられる。正の値 (=61) に指定すれば、ファイルが読み込まれ、複数のチェーンの原子を指定することができる。ただし、指定する原子は、第一チェーンの原子を必ず含む必要がある。

(5) 解析用データ出力

NAMEPL = (plot data ファイルの名前)

UNITPL : plot data ファイルの IO Unit

=62 ; (デフォルト)

NAMEAT = (atom data ファイルの名前)

UNITAT : atom data ファイルの IO Unit

=63 ; (デフォルト)

(6) エネルギートラジェクトリの計算の指定

METHOD : エネルギートラジェクトリの種別を指定する。

= MINI ; minimization の結果のエネルギートラジェクトリ解析 (デフォルト)

= MD ; MD の結果のエネルギートラジェクトリ解析

以下は、METHOD=MINI の場合にのみ有効である。

STARTLoop : 解析を始めるループ回数

=0 ; (デフォルト)

ENDLoop : 解析を終了するループ回数

=10000 ; (デフォルト)

以下は、METHOD=MD の場合にのみ有効である。

INTERVal : 解析を行なうステップ間隔
=1 ;(デフォルト)
STARTTime : 解析を始める時刻 (PSEC)
=0 ;(デフォルト)
ENDTime : 解析を終了する時刻 (PSEC)
=10000 ;(デフォルト)

(7) "FORCEAnalysis=YES" の場合の制御パラメーター

トラジェクトリを生成した時と同じパラメータを指定します。

(7 - 1) 相互作用 CUTOFF の方法

CUTMethoD : 相互作用 CUTOFF の方法
=RESC ; residue base cutoff (デフォルト)
残基の重心間の距離が、CUTOFF 長以下なら残基に含まれる全原子間の相互作用を計算する。
=ATOM ; atom base cutoff
原子重心間の距離が、CUTOFF 長以下なら原子間の相互作用を計算する。
=RESA ; residue base cutoff
残基に含まれる 2 原子間の最短の距離が、CUTOFF 長以下なら残基に含まれる全原子間の相互作用を計算する。
CUTLEngth : cutoff 長 (A)
=8.0 ;(デフォルト)
DIEFUNctioN : 空間の比誘電率の形式
=CONS ; 誘電率は定数 (デフォルト)
=DIST ; 誘電率は距離に比例する。 =DIEVAL * 距離 (A)
DIEVALue : 空間の比誘電率
=1.0 ;(デフォルト)

(7 - 2) 相互作用計算のスイッチ

特定の相互作用を計算する(しない)場合に、以下のスイッチを用います。

(7 - 2 - 1) 1-2、1-3、1-4 相互作用のスイッチ

通常の MIN/MD 計算では、すべてデフォルト値を用います。極めてまれですが、特定の相互作用を計算したくない場合にのみ用います。

CALBONd : 1-2 相互作用の計算

=CALC ; 計算する (デフォルト)

=NOCALc ; 計算しない

CALANGl e : 1-3 相互作用の計算

=CALC ; 計算する (デフォルト)

=NOCALc ; 計算しない

CALTORSion : torsion 相互作用の計算

=CALC ; 計算する (デフォルト)

=NOCALc ; 計算しない

CALIMProper : improper torsion の計算

=CALC ; 計算する (デフォルト)

=NOCALc ; 計算しない

CALV14 : 1-4 van der Waals の計算

=CALC ; 計算する (デフォルト)

=NOCALc ; 計算しない

CALE14 : 1-4 静電相互作用の計算

=CALC ; 計算する (デフォルト)

=NOCALc ; 計算しない

(7 - 2 - 2) 1-5 相互作用計算のスイッチ

CUTOFF を用いる計算 (相互作用テーブルを用いる計算) をする場合と、CUTOFF を用いないで全ての 1-5 相互作用を全原子対に対し計算 (直接計算) する場合で、スイッチの指定を切り替えます。デフォルトでは、CUTOFF を用いる場合に設定されています。通常、1-5 van der Waals, 1-5 静電相互作用、水素結合はすべて計算します (デフォルト)。極めてまれですが、特定の相互作用を計算したくないときにスイッチを切り替えてください。水素結合 (12-10 ポテンシャル) を含まない力場を用いる場合は、スイッチ CALHYD の値に関わらず水素結合は計算されません。

相互作用テーブルを使用する (CUTOFF を用いる) 場合

以下の CALV15, CLAE15, CALHYD を=CALC に設定、 CALV5N, CALE5N, CALH5N を=NOCALC に設定する。(デフォルト)

CALV15 : 1-5 van der Waals
 =CALC ; 計算する (デフォルト)
 =NOCALC ; 計算しない

CALE15 : 1-5 静電相互作用
 =CALC ; 計算する (デフォルト) PME/FMM のとき必須
 =NOCALC ; 計算しない

CALHYD : 水素結合
 =CALC ; 計算する (デフォルト)
 =NOCALC ; 計算しない

相互作用テーブルを使用しない場合

以上の CALV15, CLAE15, CALHYD を=NOCALC に設定、 CALV5N, CALE5N, CALH5N を=CALC に設定する。

CALV5N : 1-5 van der Waals
 =NOCALC ; 1-5 van der Waals を直接計算しない (デフォルト)
 =CALC ; 計算する

CALE5N : 1-5 静電相互作用
 =NOCALC ; 1-5 静電相互作用を直接計算しない (デフォルト)
 =CALC ; 計算する

CALH5N : 水素結合
 =NOCALC ; 水素結合を直接計算しない (デフォルト)
 =CALC ; 計算する

(7 - 2 - 3) 拘束ポテンシャル

拘束用ポテンシャルはデフォルトでは全て NOCALC(計算しない)にセットされています。CAP 拘束、position restraint, distance/angle/torsion restraint、van der Waals 反発項のソフトコア (soft repulsion) などを用いる場合、それぞれのエネルギー計算項を CALC に設定してください。さらに、通常これらのポテンシャルは対象原子の指定 (EXE>INPUT の章を参照) と、力の定数などのパラメーターを必要とするため各々のパラメーターも入力してください。

これらの拘束ポテンシャルはすべて、系全体のポテンシャルエネルギー項に加算されます。

CALPSR : position restraint

=NOCALC ; 計算しない (デフォルト)

=CALC ; 計算する

EXE>INPUT フェーズにて、以下を指定する。

POSITION=READ

NAMEPO= (position restraint 指定ファイル)

REFCOORD=PDB

NAMERE= (参照座標ファイル)

CALDSR : distance-restraint

=NOCALC ; 計算しない (デフォルト)

=CALC ; 計算する

EXE>INPUT フェーズにて、以下を指定する。

DISTANcerestrain =READ

NAMEDistance= (distance restraint 指定ファイル)

CALDHR : dihedral-restraint

=NOCALC ; 計算しない (デフォルト)

=CALC ; 計算する

EXE>INPUT フェーズにて、以下を指定する。

DIHEDRalrestrain =READ

NAMEDH= (dihedral restraint 指定ファイル)

CALREP : simple repulsion

=NOCALC ; 計算しない (デフォルト)

=CALC ; 計算する

CALCAP : CAP 拘束

=NOCALC ; 計算しない (デフォルト)

=CALC ; 計算する

EXE>INPUT フェーズにて、以下を指定する。

SETBOUndary =READ

NAMEBOUndary = (CAP boundary 指定ファイル)

拘束ポテンシャルに必要なパラメーター

TEMPERature: 拘束に用いる温度 (K) (Position, Distance, Repulsion, Dihedral).

=300.0 ; (デフォルト) ()

WETDSR : distance restraint の重み

=1.0 ;(デフォルト)

WETPSR : position restraint の重み

=5.0 ;(デフォルト)

WETDHR : dihedral restraint の重み

=10.0 ;(デフォルト)

Simple repulsion のパラメーター

WETREP : simple repulsion の重み

=1.0 ;(デフォルト)

REPScale : van der Waals 半径のスケール因子

=1.0 ;(デフォルト)

REPDELta : 許容誤差

=1.0 ;(デフォルト)

CAP 拘束のパラメーター

CAP 拘束では、CAP 拘束対象原子の指定ファイル (EXE>INPUT の章参照)、"CALCAP=CALC" の指定以外に、CAP の中心、半径、壁を形成する反発ポテンシャルの型と力の係数についてのパラメーターが必要になります。

RADCAP : CAP 拘束の半径(A)。

(この半径の内側では拘束力は 0、外側ではポテンシャルで拘束されます)

=20.0 ;(デフォルト)

FORCAP : CAP の壁を作る反発ポテンシャルの力の定数

=150.0 ;(デフォルト)

FUNCAP : CAP の壁の反発ポテンシャルの形

=HARmonic : 2 次関数パラボラポテンシャル (デフォルト)

$$F = 0.5 * FORCAP * (R - RADCAP) **2$$

ここで、R = (チェインの重心) - (CAP の中心)。

=BIQUadratic : 4 次関数型ポテンシャル

$$F = 0.25 * FORCAP * (R**2 - RADCAP**2) **2$$

ここで、R = (チェインの重心) - (CAP の中心)。

(8) 境界条件

myPresto で使用できる境界条件は、球・楕円体、周期境界条件（直方体 6 面体セル）です。球・楕円体では、弾性衝突を実現する剛体壁が用いられます。中心の指定など一部変数は共通の名前が使用されます。周期境界条件使用時は、ユニットセルへの座標引き戻しのサイクル（UPDATE）を忘れずに指定してください。CAP 拘束と異なり対象原子指定ファイルは不要です。

BOUNDary : 境界条件の種類

=NO ; 境界なし（デフォルト）

=PERI ; 周期境界条件。

=ELLIPSoId ; 楕円体境界

=SPHERE ; 球境界

(8 - 1) 境界条件のサイズの設定

周期境界条件の場合：

ユニットセルの X 軸・Y 軸・Z 軸の長さ（A）を指定します。

LXCELL= 40.0 ;(デフォルト)

LYCELL= 40.0 ;(デフォルト)

LZCELL= 40.0 ;(デフォルト)

楕円体の場合：

楕円は、長軸・短軸が、XYZ 座標方向に揃っているものとし、X 軸 Y 軸 Z 軸方向の半径（A）を指定します。

ELLIPA= 30.0 ;(デフォルト)

ELLIPB= 30.0 ;(デフォルト)

ELLIPC= 30.0 ;(デフォルト)

球の場合：

球の半径を指定します。

RADIUS= 30.0 ;(デフォルト)

(9) LIST

「LIST」を書き加えれば、現在のパラメーター設定が表示されます。引数なし。

(1 0) QUIT

EXE>グループ入力の終了を示します。引数なし。

(余白)

2 計算例

制御ファイル (md.inp)

```
EXE> INPUT
  TOPOLOGY= FORM      NAMETO=  initial.tpl
  COORDINA= PDB      NAMECO=  initial.pdb
  POSITION=  READ      NAMEPO=  M_all.res
  REFCOORD= PDB      NAMERE=  initia0.pdb
  SETBOU=  READ      NAMEBO=  M_dock.capbc
  SETSHAKE= READ      NAMESH=  initial.shk
  QUIT
EXE> MD
  LOOPLI=  10000
  SETTIM=  5000.0D0  CPUTIM= 3600000.0D0
  UPDATE=  20
  TIMEST=  2.0D0
  OUTLOG=  200      LOGFOR=  DETA
  STOPCE=  NO

  OUTCOO=  100
  NAMECO=  traject.cor ;座標トラジェクトリーファイル
  MNTRCO=  SING

  OUTENE=  200
  NAMEEN=  traject.ene ;エネルギートラジェクトリーファイル
  MNTREN=  ASCI

  NAMETO=  traject.eto
  MNTRTO=  ASCI

  METHOD=  CANONICAL
  SETTEM= 300.0D0  INITIA=  SET
  STARTT=300.0D0  RANDOM= 654321
  SHAKEM= ALLB
  CALCAP= CALC      RADCAP= 22.0
  FORCAP= 100.0     FUNCAP= HARMonic
  SETCEN= NO
  CALPSR= CALC      WETPSR= 10.00
  BESTFI= YES
  CUTMET= RESA      CUTLEN= 10.0D0
  DIEFUN= CONS      DIEVAL= 1.0D0
  CALV15= CALC      CALE15= CALC
  CALHYD= NOCALC    CALV5N= NOCALC
  CALE5N= NOCALC    CALH5N= NOCALC
  QUIT
EXE> OUTPUT
  COORDINATE= PDB      NAMECO=  final.pdb
  QUIT
EXE> END
```

位置拘束によって固定されたタンパク質の一部と、それに配位した金属原子・リガンドを含む系を CAP 水によって囲んだ系を計算します。系は、第 1 チェインがタンパク質、第 2 - 4 チェインが Ca イオン、第 5 チェインが Zn イオン、第 6 チェインがリガンド、第 7 チェイン以降が水分子です。系の MD は、上記の md.inp を制御ファイルとして行ないます。

位置拘束ファイル M_all.res は以下のように指定し、リガンド分子と水分子は CAP ポテンシャル内で自由に動けるようになっています。

位置拘束指定ファイル (M_all.res)

```
GROUP> LIST
  1  1  1 137  CA  *  1.0  MASS  YES
  1  1  1 137  N   *  1.0  MASS  YES
  1  1  1 137  C   *  1.0  MASS  YES
  1  1  1 137  O   *  1.0  MASS  YES
  2  5  1  1   *  *  1.0  MASS  YES
END
GROUP> STOP
```

この座標トラジェクトリーファイルを解析し、座標トラジェクトリーの各ステップでの参照座標からのずれ (RMSD) の推移と、平均構造を求めます。RMSD の推移は、標準出力とプロットデータに出力され、平均構造は NAMECO で指定するファイルに出力されます。

制御ファイル ana_1.inp

```
EXE> INPUT
  TOPOLOGY=  FORM      NAMETO=  initial.tpl ;系のトポロジーファイル
  COORDINA=  PDB      NAMECO=  initial.pdb ;系のPDBファイル
  REFCOORD=  PDB      NAMERE=  initial.pdb ;参照座標
  QUIT
EXE> ANALYS
  METHOD=     MD
  NAMETR=    traject.cor ;MD計算の座標トラジェクトリーファイル
  DATATY=    COR4      ;トラジェクトリーファイルの種類の指定
  LOGFOR=    DETAIL    ;標準出力の指定
  INTERV=    1         ;解析のステップ間隔
  STARTT=    0.0       ;解析開始時刻 (PSEC)
  ENDTIM=    20.0      ;解析終了時刻 (PSEC)
  UNITBS=    61        ;NAMEBSの10ユニット番号
  NAMEBS=    setbst_1.bst ;座標重ね合わせに用いる原子指定
  BESTFI=    YES       ;座標の重ね合わせを行なう。
  FLUCTU=    YES       ;揺らぎの計算を行なう。
  NAMEPL=    rmsd_plot.data ;RMSDのプロットデータ
  QUIT
EXE> OUTPUT
  COORDINATE= PDB      NAMECO=  mean.pdb ;出力する平均構造
  QUIT
EXE> END
```

RMSD の計算は、参照座標にトラジェクトリーファイルの座標を重ね合わせて計算しますが、原子の重ね合わせは、何も指定しないと第一チェーンの全原子が指定されます。水素原子は、重ね合わせの指定から外し、第 2 - 5 チェインまでの金属原子も重ね合わせにもちいるように指定したいので、以下のような原子指定ファイルを作成し、指定します。2 行目、FIX で、いったん全ての原子の指定を解除し、それ以降の行で改めて原子を指定します。指定するとき、必ず第一チェーンの原子が指定に含まれていないといけません。

原子指定ファイル (setbst_1.bst)

```

SETBST> LIST
FIX  1  1  1 137  *  YES  ; 原子指定を外す。
FREE 1  1  1 137  C* YES  ; 全ての C から始まる原子名の原子を指定する。
FREE 1  1  1 137  N* YES  ; 全ての N から始まる原子名の原子を指定する。
FREE 1  1  1 137  O* YES  ; 全ての O から始まる原子名の原子を指定する。
FREE 1  1  1 137  S* YES  ; 全ての S から始まる原子名の原子を指定する。
FREE 2  5  1  1  *  YES  ; 第 2 - 5 チェインの全ての原子を指定する。
SETBST> END

```

標準出力ファイルには、RMSD の推移、平均構造、各原子の RMSD と、RMSD の x,y,z 成分などが出力されます。

標準出力ファイル (ana_1.out)

```

INFORMATION> ANALYS
  CALCULATE AVERAGE AND FLUCTUATION
    NUMBER OF SELECTED DATA   : 100

  RMSD DATA
  NUMBER OF ATOMS OF FIRST CHAIN : 2008
  NUMBER OF ATOMS FOR BEST-FIT  : 1049
  1) AVERAGE
    ALL ATOM      : 4.2578762709675724
    SELCTED ATOM : 0.41109270952623123
  2) SD
    ALL ATOM      : 1.3583200792547043
    SELCTED ATOM : 3.94575716745282287E-2

  EACH ATOM DATA ; 平均構造の x,y,z 座標、RMSD, RMSD の x,y,z 成分
    1 N      GLY      1      1  1 -16.58385  5.37864 14.14423  0.12539
0.7546969E-01 0.8198197E-01 0.5748686E-01
    2 H1     GLY      1      1  1 -16.96925  5.08163 14.94453  0.04053
0.1919956E-01 0.3203947E-01 0.1574088E-01

```

プロットデータには RMSD の推移が出力されます。第 1 カラムは、経過時間 (PSEC)、第 2 カラムは RMSD () です。最初に、トラジェクトリーの座標を、重ね合わせ原子の指定によって指定された原子を参照座標に重ね合わせ、全原子の RMSD を計算して出力します。次に、#RMSD PART 以降に、トラジェクトリーの座標を、重ね合わせ原子の指定によって指定された原子を参照座標に重ね合わせ、指定された原子のみの RMSD の値を出力します。通常は、#RMSD PART 以降の値を解析に用います。

プロットデータ (rmsd_plot.data)

# RMSD ALL	; 全原子の RMSD
0.2000000	0.7820804
0.4000000	1.1031598
0.6000000	1.3053278
0.8000000	1.4847158
:	
:	
:	
19.7999992	6.1756648
20.0000000	6.2183821
# RMSD PART	; 指定した原子の RMSD
0.2000000	0.2947671
0.4000000	0.3071040
0.6000000	0.3031894
0.8000000	0.3269165
:	
:	
:	

(余白)

myPresto 4.2
- cosgene "ANALYSIS" -