GROMACS-Viewer

利用者マニュアル

平成26年3月

独立行政法人理化学研究所

HPCI 計算生命科学推進プログラム

目次

1. はじぬ	カに	
2. 動作理	景境	
3. インス	ストールと起動	
4. 操作書	手順	5
4.1.	トラジェクトリの読み込みと表示	5
4.2.	2 次元プロットの表示	9
4.3.	トラジェクトリと2次元プロットの時間同期	14
4.4. ā	表示モデルの変更	
4.4.1.	. 原子の選択	
4.4.2.	. 表示モデルの変更	
4.4.3.	. 色の変更	
4.4.4.	. 原子選択とトラジェクトリフレームの関係	
4.4.5.	. スクリプトの利用	19
4.4.6.	. Display メニュー	19
4.4.7.	. Open Trajectory ダイアログの Filter について	
4.5.	2次構造の表示	
4.6. 7	水素結合の表示	25
4. 7 . 🗉	画像出力	
5. jV 機i	能の制限	

1. はじめに

この利用者マニュアルでは、GROMACS-Viewer を実行する時の利用手順について記述し ます

2. 動作環境

本アプリケーションは以下の環境で動作します。

プラットフォーム	Windows7 以上
	Linux kernel 2.6 以上かつ glibc 2.12 以上
Java 実行環境	JRE 1.7

ユーザーの PATH 環境変数において、Java 実行環境へのパスが設定されている必要があります。

3. インストールと起動

アプリケーションの配布物をハードディスクにコピーすることで使用可能になります。配 布物に含まれる以下の起動ファイルをダブルクリックするとアプリケーションが起動しま す。

Windows の場合: gromacs-viewer.bat

Linux の場合: gromacs-viewer.sh

Linux の場合はあらかじめ起動ファイルに実行権限を付与する必要があります(chmod+x)。

■ 使用メモリの設定

アプリケーションが使用するメモリ量を設定するためには起動ファイルを編集します。起 動ファイルをテキストエディタで開くと最後の行が次のように記述されています。

Windows の場合

java -Xmx1024M -cp "%CLASSPATH%" %MAINCLASS%

Linux の場合

java -Xmx1024M -cp \$CLASSPATH \$MAINCLASS

最大使用可能メモリが 1GB に設定されています。例として 2GB に設定する場合、 「-Xmx1024M」の部分を「-Xmx2048M」と編集して保存します。 4. 操作手順

4.1. トラジェクトリの読み込みと表示

起動時は立体構造表示ウィンドウのみ表示されます。

<u>ی</u>			-	×
File Display	y Option			
Open 🔸	Trajectory			
Close 🔸	XVG			
Save 🕨	XPM			
Exit	PCA			
	DSSP			
	H-bond			
	Script			
Frame:	1 🜩	Tim	ie (ps):	

[File]-[Open]-[Trajectory]を選択すると以下の画面が出ます。 画面例: Open Trajectory ダイアログ

🖆 Open Trajectory	×
Reference file (.pdb, .gro): * files with unknown extensions are read as PDB.	Browse
Trajectory file (.xtc): * files with unknown extensions are read as XTC.	Browse
Frames: start 1 end step 1 * leave end field empty to read through the last frame.	
Filter: atom expression ISOL * ISOL means that only atoms not in residue SOL are read in.	
OK	Cancel

- [Reference file] と [Trajectory file] を必ず選択します。
- [Reference file] は、参照構造のファイルとして、PDB 形式または GRO ファイルを読み込めます(ファイル拡張子で判別)。
- [Trajectory file] は、XTC ファイルを読み込めます。
- [Frames] で、トラジェクトリの全てのフレームを読むのではなく、開始、終了、ステ ップを指定できます。上図のデフォルトでは、開始1ステップから、終了ステップま で1ステップ毎に全フレームを読み込みます。
- [Filter] で、参照構造ファイル中の全ての原子を読むのではなく、特定の原子のみ読む ことを指定できます。上図のデフォルトでは、SOL 残基(溶媒分子)を読み込みませ ん。詳細は 4.4.7 節を参照してください。
- 画面例: Open Trajectory ダイアログで[Reference file] と [Trajectory file] を指定して [OK]をクリック



トラジェクトリファイルの読み込みが終了すると、読み込んだ系をワイヤーフレーム表示 します。

トラジェクトリファイルのサイズが大きい場合は、読み込みに時間がかかる場合があります。

CA.	C:¥WINDOWS¥System32¥cmd.exe	 ×
read frame 478		\mathbf{A}
read frame 479		
read frame 480		
read frame 481		
read frame 482		
read frame 483		
read frame 484		
read frame 485		
read frame 486		
read frame 48/		
read frame 488		
read frame 489		
read frame 490		
read frame 491		
read frame 492		
read frame 493		
read frame 494		
read frame 490		
read frame 490		
read frame 497		
read frame 490		
read frame 499		
read frame 500		
read frame 501		
		× .

トラジェクトリファイル読み込み中は、コマンドウィンドウの以下の表示で確認できます。

メモリ使用量の限界を超えた大きなサイズのトラジェクトリファイルは読み込めません。

gromacs-viewer.bat または gromacs-viewer.sh のデフォルト設定値である 1GB のメモリ使 用量で読み込める系の目安は、原子数 4,896 の系(タンパク分子とリガンド分子)で 4,879 フレーム、原子数 44,352 の系(タンパク分子、リガンド分子、水分子)の場合、623 フレ ーム程度です。

それより、大きなサイズのトラジェクトリファイルを読み込みたい場合は、前節の方法で gromacs-viewer.bat または gromacs-viewer.sh を編集して最大使用メモリ量を拡大してか ら再実行します。 なお、水分子を含んだ3D表示をした際に、GROMACSでは水分子の一部原子が周期境界 条件によりボックスの反対側へ移った座標で記述されているため、下図のような線状の結 合が表示されることがあります。



分子の移動や回転といった基本的な操作はマウスで行うことができます。操作方法は下表 の通りです。

動作	マウス操作
X 軸(左右方向軸)回転 Y 軸(上下方向軸)回転	左ドラッグ
Z軸(奥行き方向軸)回転	Shift + 右ドラッグ (左右方向)
X 軸(左右)方向に移動 Y 軸(上下)方向に移動	右ドラッグ
Z軸(奥行き)方向に移動(拡大縮小)	Shift + 左ドラッグ

4.2. 2次元プロットの表示

[File]-[Open]-[XVG, XPM, PCA]メニュー項目を用います。



ファイルセレクション画面で、2次元プロットを表示したい XVG, XPM, PCA ファイルを 選択するとグラフを表示します。

表示できるグラフ数に制限はありません。

XVG ファイル、XPM ファイルの形式であれば必要な情報を読み取り、一般的に描画できます。その際に、

- ・データ数と最大、最小値を読み取って縦横軸を自動スケールします。
- title, subtitle, legend, xaxis label/x-label, yaxis label/y-label の語句をパースして 自動的に表記します。

PCA ファイルは以下で説明するフォーマット指定があります。

<XVG ファイル描画例>



<XPM ファイル描画例>



<PCAファイル描画例>



2次元プロット図は x 軸方向、y 軸方向独立にメニューから拡大・縮小表示ができます。



2次元プロット図の[Y-axis]-[range]メニューを使うと、y 軸方向のスケールの最大値と最小 値をユーザが指定できます。

[Reset]をクリックすると初期表示に戻ります。

<u>\$</u>	Y-axis range
Y-axis range:	
min -536900.0	max -532400.0
	OK Cancel Reset
	OK Calicel Reset

■ PCA データファイルに関して

現在 PCA データファイルは、分子構造を記述する GRO ファイルのフォーマットが用いられ、以下のファイル形式に対応しています。

[ファイル例]

3D proj. of	traj. (on eigen	۷.	1, 2 and	1 3
5001					
1 ???	С	1 5.9	88	-1.202	-1.015
2 ???	С	2 6.3	24	-1.603	-2.970
3 ???	С	3 5.8	71	-1.352	-2.953
4 ???	С	4 6.3	16	-0.956	-3.825
5 ???	С	5 6.2	95	-0.326	-3. 668
6 ???	С	6 6.2	34	-0. 043	-4. 025
7 ???	С	7 5.6	31	-0. 793	-3. 689
8 ???	С	8 6.1	86	-0.073	-4. 733
9 ???	C	9 5.8	04	-1.086	-3.960
10 ???	C	10 5.5	48	-0.265	-4. 768
4999 ???	C 499	99 –6.3	43	-4. 850	-4. 058
5000 ???	C 500	00 -6.5	97	-5.667	-4. 235
5001 ???	C 500	01 -6.5	58	-4. 802	-3. 750
1.00000	1.000	00 1.0	000	0	

以下のフォーマットと解釈

第4カラム:時刻	
第5カラム:第1主成分軸の射影値(nm)	
第6カラム:第2主成分軸の射影値(nm)	
第7カラム:第3主成分軸の射影値(nm)	

そのため、[File]-[Open]-[PCA]で開くファイル選択画面では、下図の通り、スタート時間(ps) と、ステップ(ps)をユーザが指定します(デフォルト値は、スタート時間 0ps、ステップ 10ps)。 この指定は、トラジェクトリファイルの時間と表示の同期をとるために必要です。

S Open PCA	×
PCA file (.gro): C:\tmp\gromacs\CDK2_CS246\3d_prot_pca.gro	Browse
Time: start (ps) 0 step (ps) 10	
	OK Cancel

4.3. トラジェクトリと2次元プロットの時間同期

トラジェクトリ(3D表示)と2次元プロットは時間同期します。



3D表示画面の下にあるスライドバーまたはスピナーによって、トラジェクトリ内のフレ ーム位置を変更できます。

x 軸が時間であるすべての2次元プロットに、3D表示の表示時間に該当する位置に赤い縦 線を表示します。

2次元プロット上でマウスクリックにより時間を選択した場合、その時間の3D表示をします。

ただし、同一時刻のデータを保持していない場合は以下の動作となります。

[3D表示側で時間を選択した場合]

2次元プロットでは、描画範囲内ならば縦線を表示します、グラフ下部の y 座標の値は 出力しません。

[2次元プロット側で時間を選択した場合]

3D表示では最も近い時間のフレームを表示します(ちょうど中間の場合は時刻の小さい方)。

■ PCA データファイルの2次元プロットに関して

PCA データファイルの2次元プロットの場合は、3D表示側で時間を選択した場合のみ、 対応点が白く光ります。2次元プロット側からの時間選択はできません。

4.4. 表示モデルの変更

原子単位で表示モデルや色を変更できます。まず対象とする原子を選択し、選択された原 子に対して表示モデルや色を変更します。これらは jV が提供しているコマンドラインイン ターフェースによって行います。[File]-[Option]-[Command Line]メニューを選択するとコ マンドラインウィンドウが表示され、コマンドを使用できるようになります。jV のコマン ドー覧は jV のマニュアル http://pdbj.org/jv/manual/comlist_category_ja.html を参照して ください。ただし、一部本アプリケーションで使用できないコマンドがあります(5 章参照)。

4.4.1. 原子の選択

原子の選択には select コマンドを用います。select コマンドの引数には選択したい原子を表わした原子表現を指定します。以下のような指定が可能です(詳細は jV のマニュアル http://pdbj.org/jv/manual/atom_ja.html を参照)。

1) 基本表現による指定

以下の書式により原子群を指定します。

残基名 [残基 ID][:鎖 ID][.原子名][;交代位置] 角括弧で囲まれた語句は省略できます。

使用例)

用途	コマンド
リガンドを選択	select LIG
溶媒を選択	select SOL
セリン残基に含まれるα炭素	select SER.CA

2) 既定グループ名による指定

予め定義されたキーワードにより原子群を指定します。

使用例)

用途	コマンド
タンパク分子を選択	select protein

3) 比較演算子による指定

予め定義された項目に対する比較演算により原子群を指定します。

使用例)

用途	コマンド
原子 ID が 100 番の原子を選択	select atomno=100
水素原子を全て選択	select elemno=1

4) 残基範囲による指定

残基 ID により原子群を指定します。

使用例)

用途	コマンド
1~20番までの残基を選択	select 1-20

5) 距離による指定

原子表現で指定された原子群から指定された距離以内の原子群を選択します。

使用例)

用途	コマンド
リガンドから 5A以内の原子を全て選択	select within(5.0, LIG)

6) 上記の論理結合による指定

原子表現を論理積(**&**)、論理和(|)、否定(!)で結合することができます。 使用例)

用途	コマンド
溶媒以外を選択	select !SOL
リガンドから 5A以内の溶媒を選択	select within(5.0, LIG) & SOL

4.4.2. 表示モデルの変更

以下のコマンドが使用できます。選択されている原子の表示モデルが更新されます。

用途	コマンド
原子間結合のワイヤーフレーム表示	wireframe
原子の球表示	spacefill
バックボーン結合のワイヤーフレーム表示	backbone
残基のリボン表示	ribbon
残基の厚いリボン表示	cartoon
残基のチューブ表示	trace
水素結合のワイヤーフレーム表示	hbond
(太さ0の場合は破線)	
ジスルフィド結合のワイヤーフレーム表示	ssbond
(太さ0の場合は破線)	

wireframe または wireframe on とすると太さ0のワイヤーフレームが表示され、wireframe

off とするとワイヤーフレーム表示が消えます。また wireframe <raidus>のように数値引数 を与えると、指定した太さ(半径)でワイヤーフレームが表示されます (stick 表示)。他の コマンドも同様に使用します。数値引数はÅ単位ですが、小数点を含む場合はそのままの 値、小数点を含まない整数値だと 250 で割った値 (Rasmol 単位)となります。残基に対す る操作は C α 原子が選択されている場合、操作対象となります。原子間結合、バックボーン 結合 (C α 間の仮想結合)、水素結合、ジスルフィド結合は両端の原子がともに選択されて いる場合に操作対象となります。少なくとも一方の原子が選択されている場合に操作対象 としたい場合は、set bondmode or コマンドを事前に発行しておきます。アプリケーション 起動時は set bondmode and コマンドが発行された状態になっています。

4.4.3. 色の変更

color コマンドを使用します。選択されている原子の色が更新されます。以下のような色の 指定が可能です。

用途	コマンド
定義済みの名前で指定	color green
RGB 値で指定	color [0,255,0]

また、定義済みの配色を指定することもできます。

用途	コマンド
分子鎖ごとに色を変える	color chain
2次構造ごとに色を変える	color structure

詳細は jV のマニュアル http://pdbj.org/jv/manual/color_ja.html を参照してください。

本アプリケーションでは独自に dssp 配色を定義しています。4.5 節の内容に沿って Gromacs の DSSP 計算結果を読み込んだ場合、そこに記述されている配色を使用すること ができます。

color コマンドは引数を二つ取る書式を用いて残基単位や結合単位で色を設定することもで きます。color ribbons green のように使用できます。

4.4.4. 原子選択とトラジェクトリフレームの関係

原子の選択状態は全てのフレームで共通となります。例として、リガンドから 5 Å以内の溶 媒を選択するコマンド (select within(5.0, LIG) & SOL)を発行した場合、どの原子が選択 されるかはコマンドを発行したときに表示しているフレームに基づいて評価されます。他 のフレームでリガンドから 5 Å以内の条件が満たされているとは限りません。

4.4.5. スクリプトの利用

頻繁に使用する一連のコマンドを外部ファイルに記録しておき、読み込んで実行すること ができます。[File]-[Open]-[Script]メニューからファイルを選択して実行できます。または コマンドラインインターフェースにおいて script <filepath> コマンドを使用します。

4.4.6. Display メニュー

使用頻度の高いと思われる表示モデルが Display メニューに用意されています。メニュー 項目は以下の通りです。

メニュー項目	動作内容と等価なコマンド
Protein-Wireframe	タンパク質分子をワイヤーフレーム表示します。
	set bondmode and
	select protein
	wireframe on
	spacefill off
	backbone off
	ribbon off
Protein-Backbone	タンパク質分子をバックボーン表示します。
	set bondmode and
	select protein
	wireframe off
	spacefill off
	backbone 0.3
	ribbon off
Protein-Stick	タンパク質分子をスティック表示します。
	set bondmode and
	select protein
	wireframe 0.2
	spacefill off
	backbone off
	ribbon off
Protein-Spacefill	タンパク質分子を球表示します。
	set bondmode and
	select protein
	wireframe off
	spacefill on
	backbone off

	ribbon off
Protein-Ball & Stick	タンパク質分子を球とスティックで表示します。
	set bondmode and
	select protein
	wireframe 0.2
	spacefill 0.5
	backbone off
	ribbon off
Protein-Ribbon	タンパク質分子をリボン表示します。
	set bondmode and
	select protein
	wireframe off
	spacefill off
	backbone off
	ribbon on
Protein-Cartoon	タンパク質分子を厚いリボンで表示します。
	set bondmode and
	select protein
	wireframe off
	spacefill off
	backbone off
	cartoon on
Ligand-Wireframe	リガンド分子をワイヤーフレーム表示します。
	set bondmode and
	select LIG
	wireframe on
	spacefill off
	backbone off
	ribbon off
Ligand -Stick	リガンド分子をスティック表示します。
	set bondmode and
	select LIG
	wireframe 0.2
	spacefill off
	backbone off
	ribbon off

Ligand -Spacefill	リガンド分子を球表示します。
	set bondmode and
	select LIG
	wireframe off
	spacefill on
	backbone off
	ribbon off
Ligand -Ball & Stick	リガンド分子を球とスティックで表示します。
	set bondmode and
	select LIG
	wireframe 0.2
	spacefill 0.5
	backbone off
	ribbon off
Ligand Neighbor-Wireframe	リガンドから 5Å以内のタンパク質分子側鎖をワイ
	ヤーフレーム表示します。
	set bondmode and
	select within(5.0,LIG) & protein & sidechain
	wireframe on
	spacefill off
	backbone off
	ribbon off
Ligand Neighbor -Stick	リガンドから 5A以内のタンパク質分子側鎖をステ
	ィック表示します。
	set bondmode and
	select within(5.0,LIG) & protein & sidechain
	wireframe 0.2
	spacefill off
	backbone off
	ribbon off
Ligand Neighbor -Spacefill	リガンドから 5A以内のタンパク質分子側鎖を球表
	示します。
	set bondmode and
	select within(5.0,LIG) & protein & sidechain
	wireframe off
	spacefill on

	backbone off
	ribbon off
Ligand Neighbor -Ball & Stick	リガンドから 5Å以内のタンパク質分子側鎖を球と
	スティックで表示します。
	set bondmode and
	select within(5.0,LIG) & protein & sidechain
	wireframe 0.2
	spacefill 0.5
	backbone off
	ribbon off
Ligand Neighbor -off	リガンドから 5Å以内のタンパク質分子側鎖の表示
	を消します。
	set bondmode and
	select within(5.0,LIG) & protein & sidechain
	wireframe off
	spacefill off
	backbone off
	ribbon off
Ligand Hbond-Dashed Line	リガンドに端点を持つ水素結合を破線で表示しま
	す。
	set bondmode or
	select LIG
	hbond on
Ligand Hbond-Stick	リガンドに端点を持つ水素結合をスティックで表示
	します。
	set bondmode or
	select LIG
	hbond 0.2
Ligand Hbond-off	リガンドに端点を持つ水素結合の表示を消します。
	set bondmode or
	select LIG
	hbond off
Solvent-Wireframe	溶媒をワイヤーフレームで表示します。
	set bondmode or
	select SOL
	· 0

	spacefill off
	backbone off
	ribbon off
Solvent-off	溶媒の表示を消します。
	set bondmode or
	select SOL
	wireframe off
	spacefill off
	backbone off
	ribbon off

4.4.7. Open Trajectory ダイアログの Filter について

Open Trajectory ダイアログの Filter 欄は、select コマンドの引数と同じ書式(原子表現) で読み込む原子を設定できます。ただし、select コマンドで使用できる以下のキーワードは 利用できないように制限されます。

- bonded (共有結合を持つ原子)
- helix (ヘリックス構造領域)
- sheet (シート構造領域
- turn (ターン構造領域)
- within (原子群からの距離指定)

4.5. 2次構造の表示



[File]-[Open]-[DSSP] において、DSSP(2次構造)ファイルを選択して2D表示します。



DSSP(2次構造)ファイルで指定した同じ色で、対応する3D構造をすべての時間で表示します。

4.6. 水素結合の表示



[File]-[Open]-[H-bond] を選択すると、下図の[Open H-bond]画面が出ます。

<u>*</u>	Open H-bond	×
H-bond C:\t	index file (.ndx): mp\lec_gromacs\hbond.ndx	Browse
H-bond map file (.xpm): C:\tmp\lec_gromacs\hbmap.xpm		Browse
		OK Cancel

ここで、GROMACSのg_hbond コマンドでユーザが出力しておいた水素結合情報の2つのファイルを指定して[OK]をクリックします。

水素結合情報の2つのファイル
.ndx ファイルは、水素結合のインデックスファイルです。
.xpm ファイルは、インデックスファイルの複数の水素結合の時間変化(ON-OFF)情報ファイルです(H-bond Existense map)。





上図のように、H-bond Existense map と連動して指定時間での水素結合を3D表示します。

4.7. 画像出力



[File]-[Save]-[PNG, JPEG] を選択すると、3 D表示画面を PNG ファイルや JPEG ファイ ルに出力できます。

5. jV 機能の制限

■ コマンドの制限

本アプリケーションでは jV バージョン 4.3.1 が提供しているコマンドのうち、下記のコマ ンドは使用できません。

- anim コマンド
- animframe コマンド
- animmode コマンド
- animrange コマンド
- animselect $\neg \neg \checkmark ee$
- animspeed $\neg \neg \checkmark \lor$
- animstep $\neg \neg \checkmark \lor$
- colorvertex コマンド
- display コマンド
- displayvertex $\exists \forall \lor \lor$
- fit コマンド
- fselect コマンド
- load コマンド
- pause コマンド
- pdbj_describe コマンド
- pdbj_execute $\exists \forall \forall \forall \forall$
- reset line_width $\exists \forall \lor \lor$
- reset point_size コマンド
- reset polyline_width $\exists \forall \forall \forall \forall$
- reset transparency コマンド
- reset line_transparency $\exists \forall \forall \forall \forall$
- reset quad_transparency $\exists \forall \lor \lor$
- reset polyline_transparency $\exists \forall \lor \lor$
- save pdb コマンド
- save script コマンド
- selectvertex $\exists \forall \lor \lor$
- set efsite_url $\exists \forall \vee ee$
- set ext_site_url コマンド

- set line_width $\exists \forall \lor \lor$
- set loadcenter $\exists \forall \vee ee$
- set pdbml_noatom_url コマンド
- set pdbml_extatom_url $\exists \forall \forall \forall$
- set pdbml_plus_url $\exists \forall \forall \forall \forall$
- set point_size $\exists \forall \lor \lor$
- ・ set polyline_width コマンド
- set stereo コマンド
- set transparency コマンド
- set point_transparency $\neg \neg \checkmark \lor$
- set line_transparency $\exists \forall \forall \forall \forall$
- set quad_transparency $\exists \forall \lor \lor$
- set polyline_transparency $\exists \forall \lor \lor$
- show efsite_url $\exists \forall \lor \lor$
- show ext_site_url コマンド
- show godata コマンド
- show pdbml_url コマンド
- show site $\neg \neg \checkmark ee$
- show pdbj コマンド
- stereo コマンド
- write pdb コマンド
- write script $\exists \forall \lor \lor$
- zap コマンド

■ 原子表現の制限

jV バージョン 4.3.1 が提供している原子表現のうち、PDBj 表現 (pdbj:プレフィクスを用い る表現) は本アプリケーションでは使用できません。