

AMBER入門

コンフレックス株式会社

はじめに

- ・ AMBERとは

Assisted Model Building and Energy Refinement

注) 論文等で、以下の2つの意味で「AMBER」という単語が用いられている

1. 分子動力学計算プログラム・パッケージ
2. 力場パラメーター・セット

情報源

- ・ Webページ

<https://ambermd.org/>

https://www.conflex.co.jp/prod_amber.html

- ・ マニュアル

<https://ambermd.org/Manuals.php>

- ・ チュートリアル

<https://ambermd.org/tutorials/>

本日の講習会は、このチュートリアルを元にし、いくつか項目を加えた上で行います。

Amber Jupyter紹介

- ・ Webベースのノートブック（ブラウザー上で動作）
- ・ ほぼ全てのAMBERコマンドを実行可能
- ・ 通常のシステム・コマンドも実行可能
- ・ 分子やグラフの表示
- ・ 作業の流れをドキュメント化できる（再利用）

サーバー設定

- ・ サーバー設定：.bash_profileに追加済み
- ・ PythonとAmberの環境を設定

```
source /home1/share/anaconda3/3.7/etc/profile.d/conda.sh
```

```
conda activate base
```

```
source /home1/share/AmberTools/amber22/amber.sh
```

Jupyterの起動

- ・ Amberの環境設定が必要

例)

```
source $HOME/Amber/amber22/amber.sh
```

- ・ 下記コマンドを入力するとJupyterが起動

```
amber.jupyter notebook
```

- ・ ブラウザーにJupyterトップページが開く
- ・ Windowsの場合、WSLで起動して別途ブラウザを起動

```
amber.jupyter notebook --no-browser
```

リモートサーバーとの接続

- ・ ローカルのマシンからsshポートフォワーディング

```
ssh -L localhost:8000:localhost:8000 ユーザー名@ff
```

- ・ サーバー側でJupyter notebookを起動

```
jupyter notebook --no-browser --port=8000
```

- ・ ブラウザーを起動し、localhost:8000に接続

パスワード：conflex

- ・ ユーザー1 :

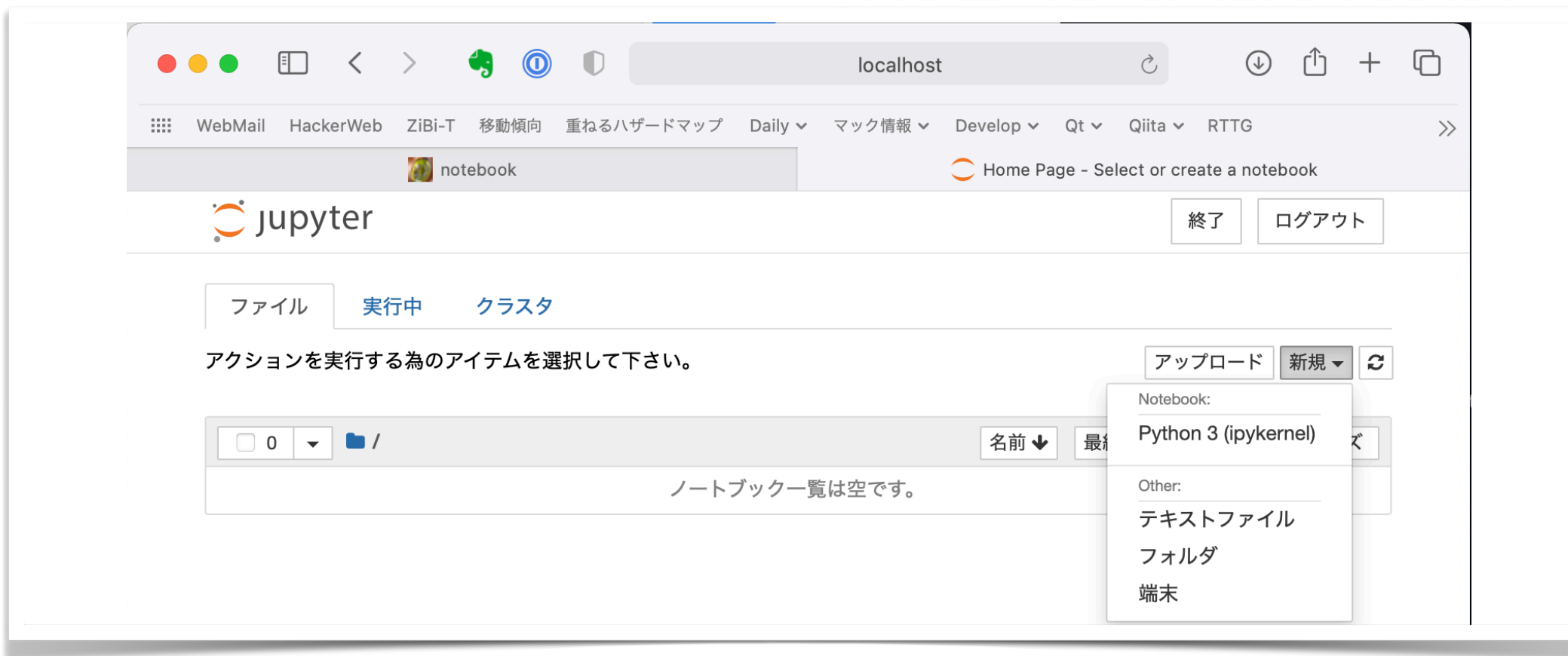
```
ssh -L localhost:8001:localhost:8001 ulef1016@ff
```

```
jupyter notebook --no-browser --port=8001
```

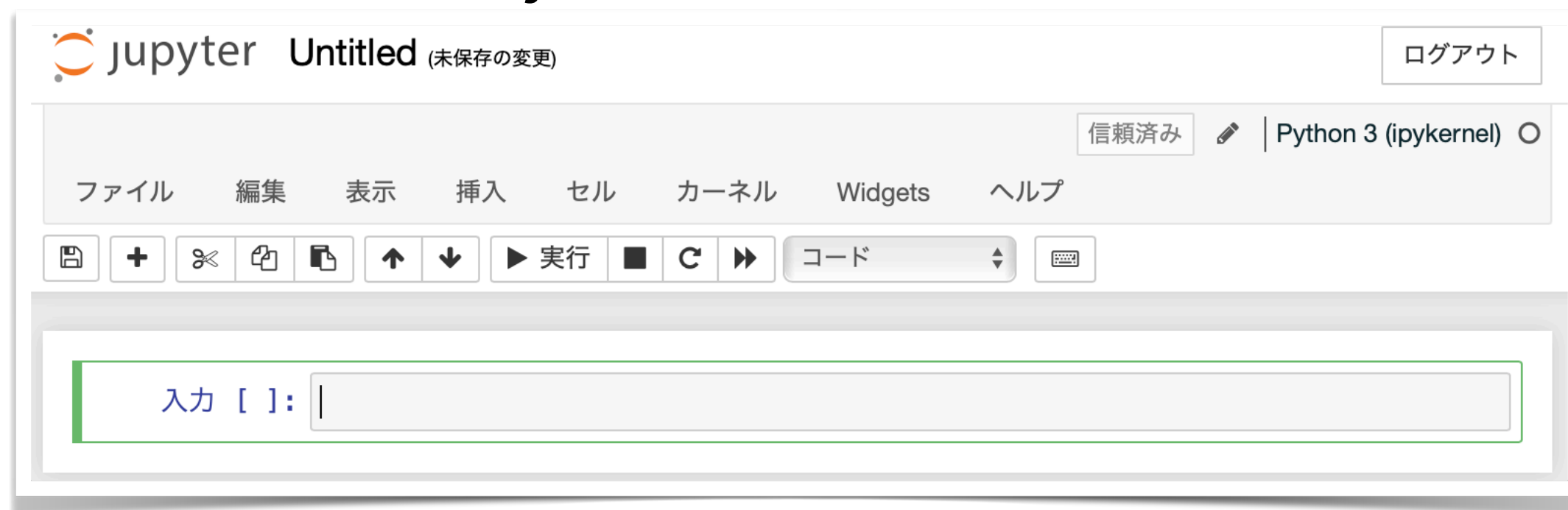
- ・ ユーザー2 :

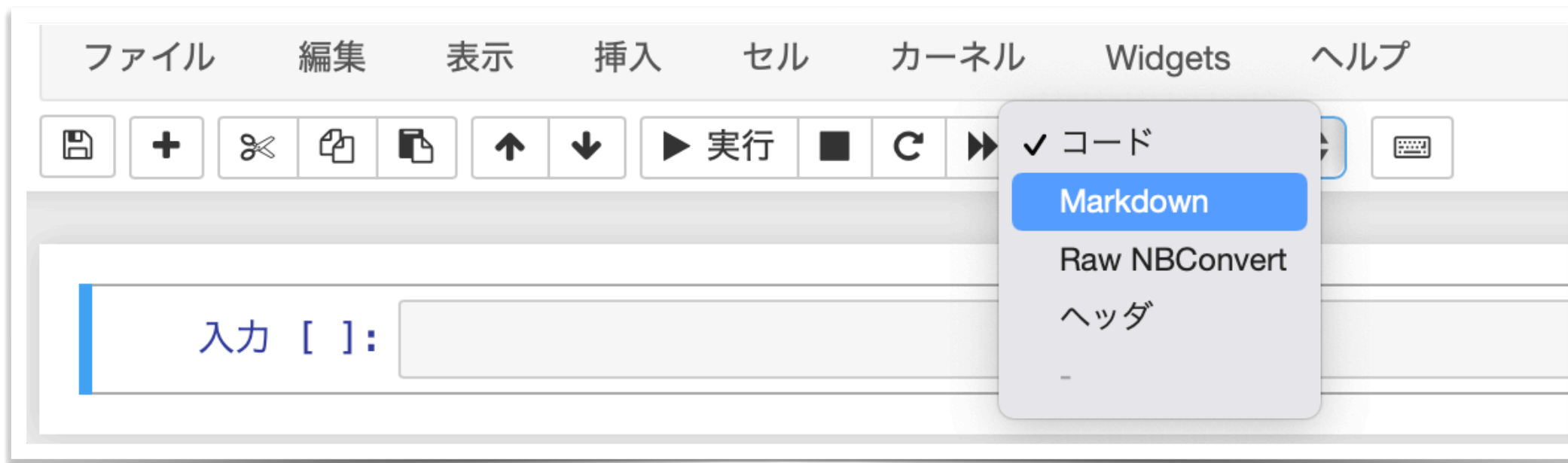
```
ssh -L localhost:8002:localhost:8002 ulef1017@ff
```

```
jupyter notebook --no-browser --port=8002
```

Python3が利用できる





Markdown形式のテキストを入力できる

```
# <center> AMBER Tutorial </center>
# <center> Interactive data analysis with Jupyter notebook </center>
### <center> By K. Ohta, CONFLEX Corp. </center>
```

入力後、Shift + Enterキーで実行

AMBER Tutorial

Interactive data analysis with Jupyter notebook

By K. Ohta, CONFLEX Corp.

AMBER力場

```

$$|
V_{AMBER}=\sum_i^{n_{bonds}}b_i(r_i-r_{i,eq})^2
+\sum_i^{n_{angles}}a_i(\theta_i-\theta_{i,eq})^2 \ \ \
+\sum_i^{n_{dihedrals}}\sum_n^{n_{i,max}}\frac{V_{i,n}}{2}
[1+\cos(n\phi_i-\gamma_{i,n})] \ \ \
+\sum_{i<j}^{n_{atoms}}(\frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}}-\frac{B_{ij}}{r_{ij}^6})
+\sum_{i<j}^{n_{atoms}}\frac{q_iq_j}{4\pi\epsilon_0r_{ij}} \ \ \
$$

```

数式入力

AMBER力場

$$\begin{aligned}
 V_{AMBER} = & \sum_i^{n_{bonds}} b_i (r_i - r_{i,eq})^2 + \sum_i^{n_{angles}} a_i (\theta_i - \theta_{i,eq})^2 \\
 & + \sum_i^{n_{dihedrals}} \sum_n^{n_{i,max}} \frac{V_{i,n}}{2} [1 + \cos(n\phi_i - \gamma_{i,n})] \\
 & + \sum_{i<j}^{n_{atoms}} \left(\frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} \right) + \sum_{i<j}^{n_{atoms}} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}
 \end{aligned}$$

Linuxのコマンド

- ・ ファイルのリスト表示 (list)

ls

- ・ ディレクトリーの移動 (change directory)

cd

- ・ 現在位置の確認 (print working directory)

pwd

- ・ ディレクトリーの作成 (make directory)

mkdir

Linuxのコマンド2

- ・ ファイルのコピー (copy)

cp ファイル名 コピー先名

- ・ ファイルの移動 (move) ファイル名の変更にも使用

mv ファイル名 新しい場所

- ・ ファイルやディレクトリーの削除 (remove)

rm ファイル名, **rm -r** ディレクトリー名

- ・ ファイルの内容表示 (more, less)

cat ファイル名

- ・ 「Tutorial」 ディレクトリーの作成

```
mkdir Tutorial
```

- ・ 補完機能

「TAB」 キーを押すとファイル名が補完される

cd T (ここで「TAB」 キーを押すとTutorialまで補完される)

↓

```
cd Tutorial
```

- ・ 複数候補がある場合、リスト表示される

構造ファイルの作成

- ・ トポロジーファイル：parm7

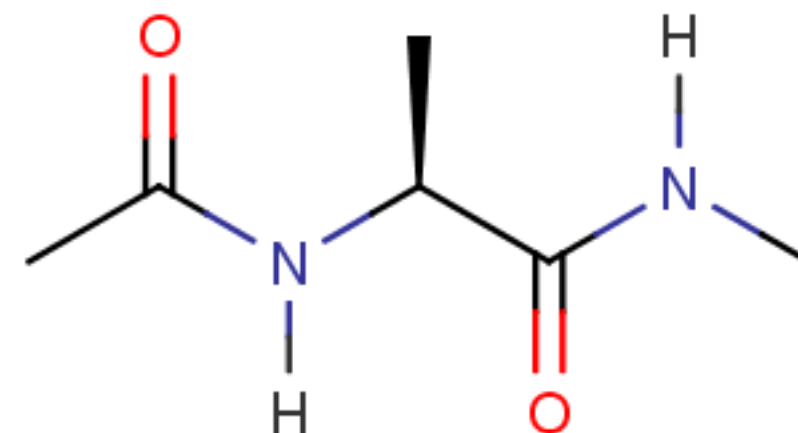
系に含まれる分子の構造パラメーターとトポロジーが記述されている

- ・ 座標ファイル：rst7

系の分子の初期座標が記述されている

- ・ 使用プログラム：LEaP (xleap, tleap)

上記2ファイルを出力する

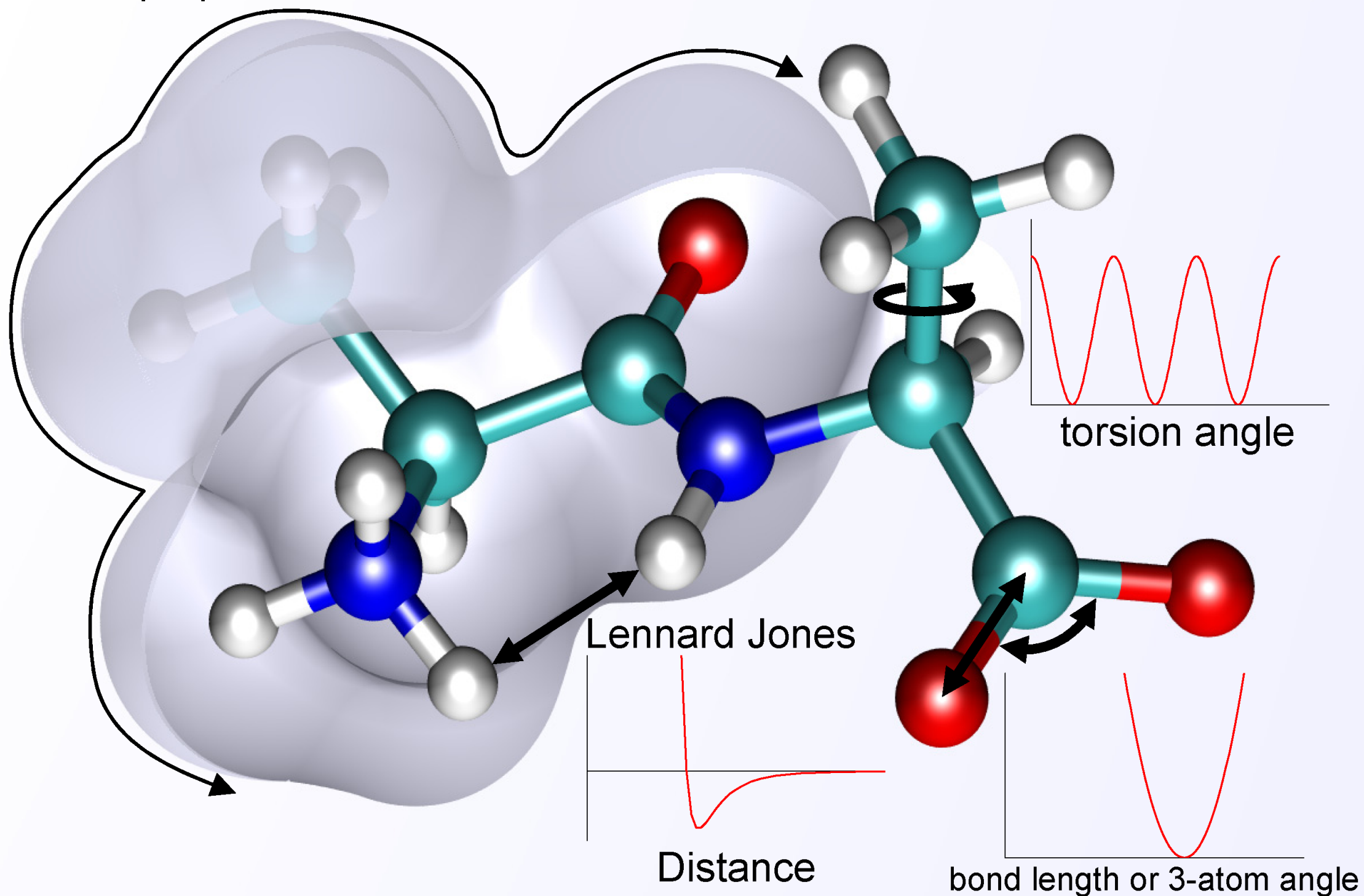


AMBER力場

$$\begin{aligned}
 V_{\text{AMBER}} = & \sum_i^{n_{\text{bonds}}} b_i \left(r_i - r_{i,\text{eq}} \right)^2 + \sum_i^{n_{\text{angles}}} a_i \left(\theta_i - \theta_{i,\text{eq}} \right)^2 \\
 & + \sum_i^{n_{\text{dihedrals}}} \sum_n^{n_{i,\text{max}}} \frac{V_{i,n}}{2} \left[1 + \cos \left(n\phi_i - \gamma_{i,n} \right) \right] \\
 & + \sum_{i < j}^{n_{\text{atoms}}} \left(\frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} \right) + \sum_{i < j}^{n_{\text{atoms}}} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}
 \end{aligned}$$

Continuum solvent model

Hydrophobic effect is roughly proportional to surface area



Jupyterで操作開始

```
import pytraj as pt # トラジェクトリーモジュール
```

```
import numpy as np # 数値計算モジュール
```

```
%matplotlib inline # プロットモジュール
```

```
from matplotlib import pyplot as plt
```

tleapの実行方法

- ・ 全てのコマンドを記述したファイルを作成 (tleap.in)

```
%%file tleap.in      # ターミナル操作の場合は、この行は不要

source leaprc.protein.ff19SB

source leaprc.water.opc

diala = sequence { ACE ALA NME }

solvateOct diala OPCBOX 10.0

saveAmberParm diala diala.parm7 diala.rst7

quit
```

- ・ 実行

```
!tleap -f tleap.in
```

LEaPのコマンド

- ・タンパク質用のパラメーターセットをロード

```
source leaprc.protein.ff19SB
```

- ・アラニン・ジペプチドの作成：LEaPの「sequence」コマンドを利用

```
diala = sequence { ACE ALA NME }
```

- ・アラニンのN末端をアセチル基（ACE）でC末端をN-メチルアミド（NME）で保護した構造が作成される
- ・構造は、変数「diala」に入る
- ・さらにLEaPの「solvateOct」コマンドで系を溶媒和

```
source leaprc.water.opc
```

```
solvatebox diala OPCBOX 10.0 # 溶質dialaの周りに厚み10Åで水が付加（水ボックスの大きさが10Åではない）
```

- ・分子動力学計算用のファイルの保存
- ・「saveamberparm」コマンドでparm7およびrst7ファイルを保存

```
saveamberparm diala diala.parm7 diala.rst7
```

分子グラフィック (参考)

- ・ NGLViewを利用

未インストールの場合、ターミナルで以下を入力：

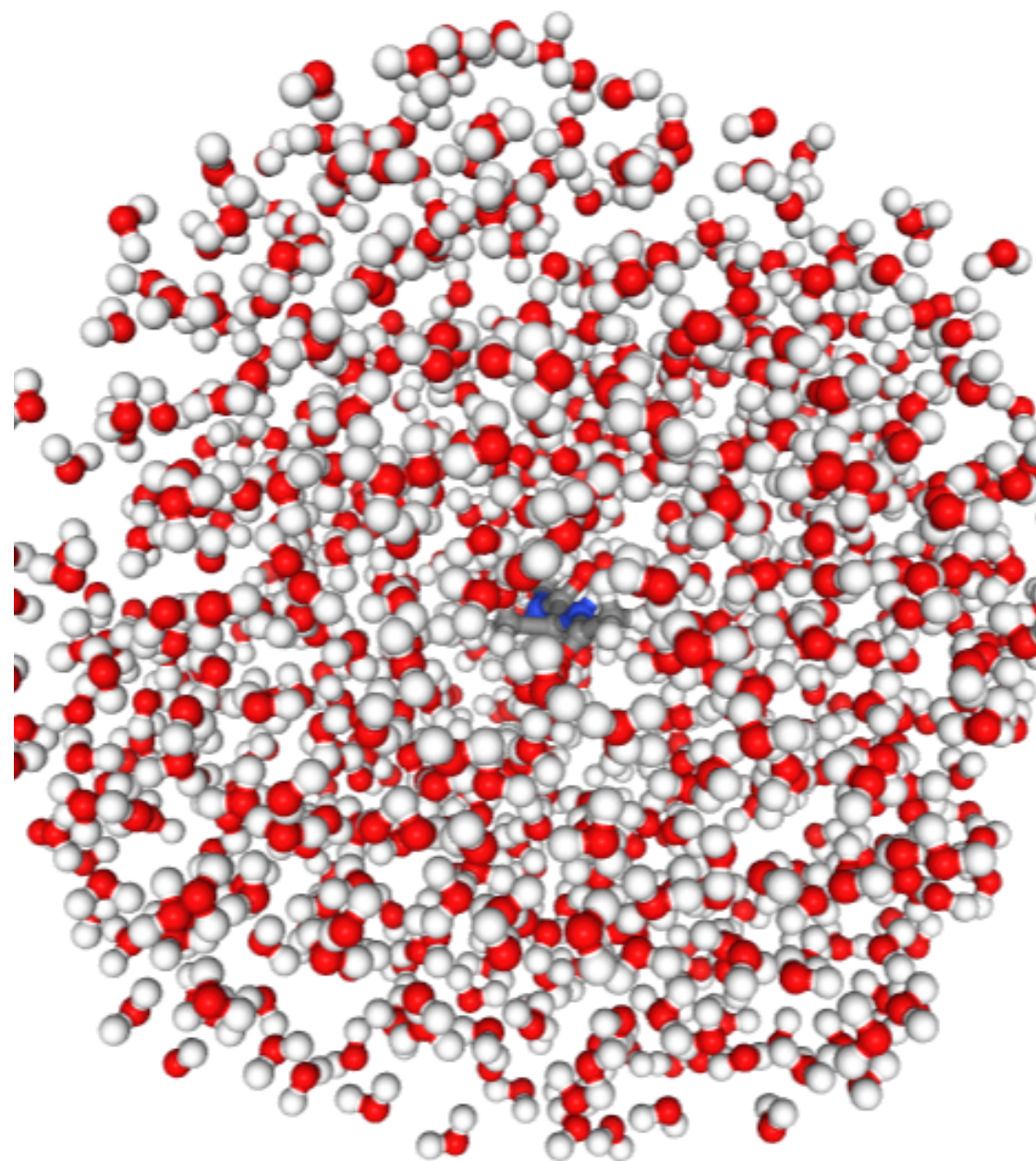
```
amber.conda install nglview -c conda-forge
```

- ・ PyTrajに読み込み、表示

```
traj = pt.load('rst7', top='parm7')
```

```
view = nv.show_pytraj(traj)
```

```
view
```

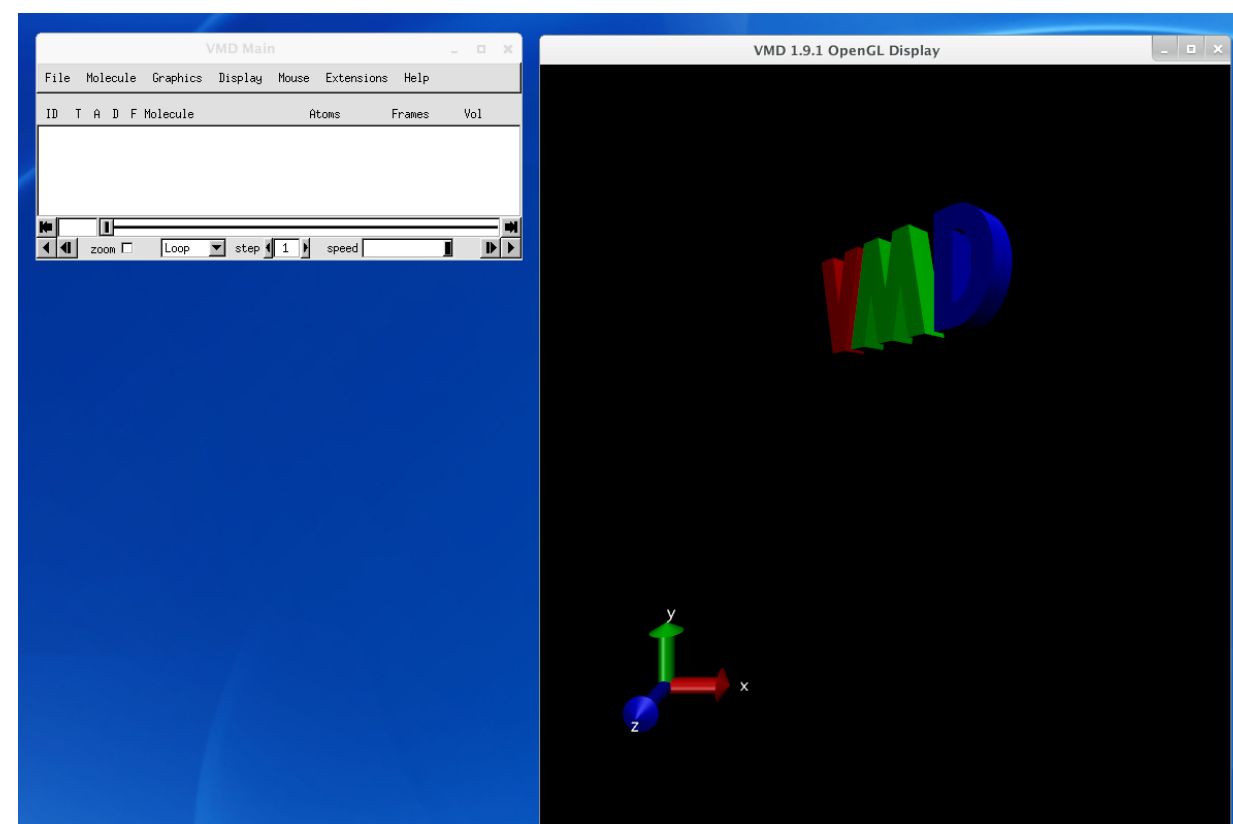


分子グラフィック (VMD)

- ・ 起動後は、右図
- ・ File -> New Moleculeを選択
- ・ 「Browse」 ボタンをクリック後
「parm7」 ファイルを指定し、
「Load」 をクリック

(この時点では、何も表示されない)

- ・ さらに「Browse」で
「03_Prod.nc」を指定し
「Load」をクリック

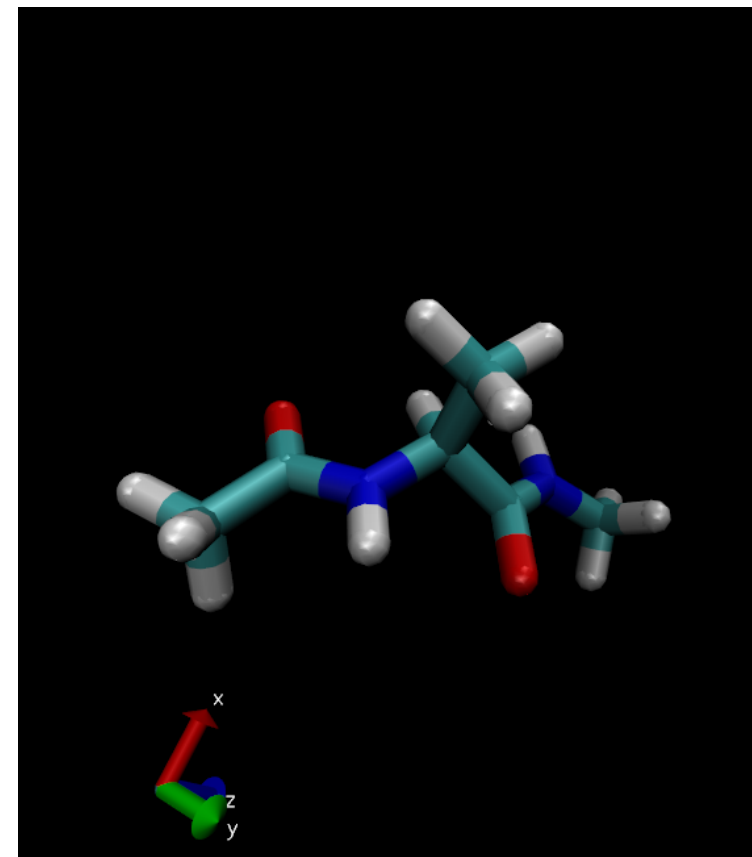
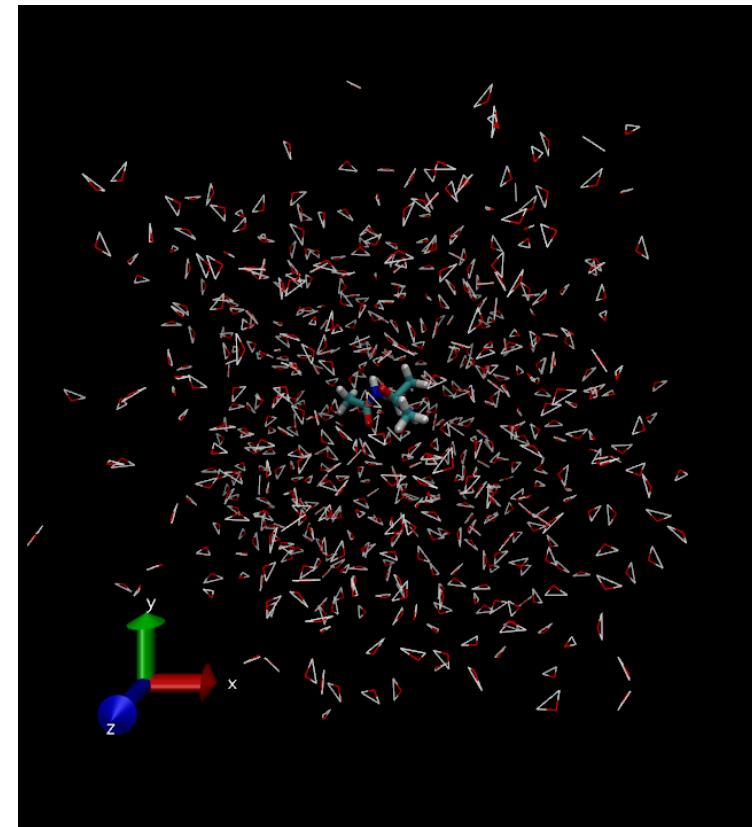


- ・ 「VMD」がncファイルを読めない場合は
変換が必要

```
cpptraj -p parm7 -y 03_Prod.nc -x 03_Prod.crd
```

- ・ 「Graphical Representations」 ウィンドウで様々な表示調整が可能
- ・ ウィンドウが表示されていなければ、Graphics -> Representationsを選択
- ・ アラニン・ジペプチドだけを表示するため、「Selected Atoms」を「all not water」に修正
- ・ 「Drawing Method」メニューで表示方法を変更可能（図はLicorice）
- ・ 以下のチュートリアル等を参照：

<http://ambermd.org/tutorials/VMD.php>



MD計算の設定ファイル

- ・ 動力学計算を行うには、トポロジーと座標ファイルの他に、設定が書かれた入力ファイルが必要

1. 構造最適化
2. 定積 (NVT) 0K~300Kまで20psで昇温
3. 定圧 (NPT) 300K・1気圧条件下で、60psサンプリング

MD計算結果の解析

- ・ Amberには、解析用のツールも含まれています