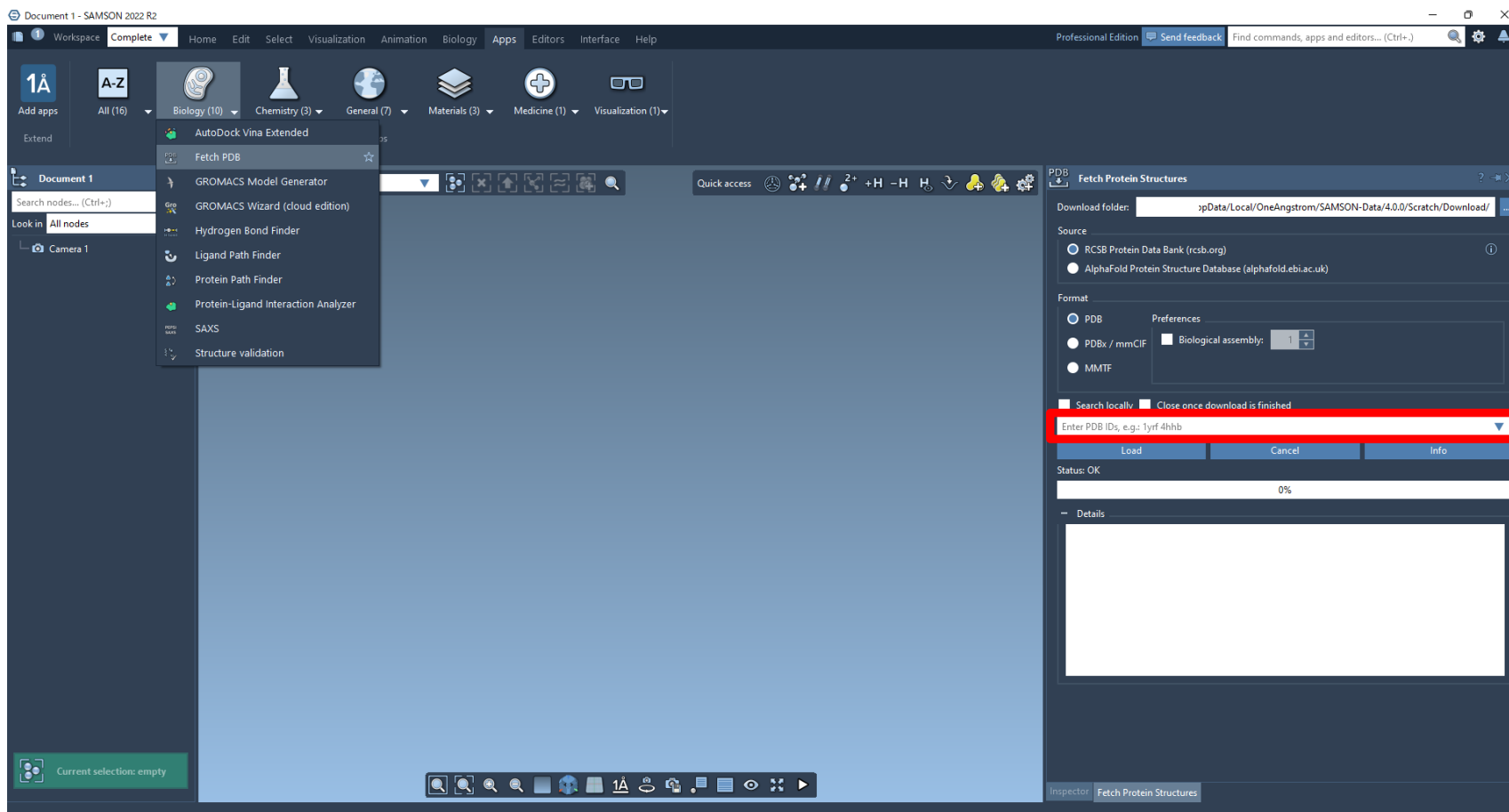
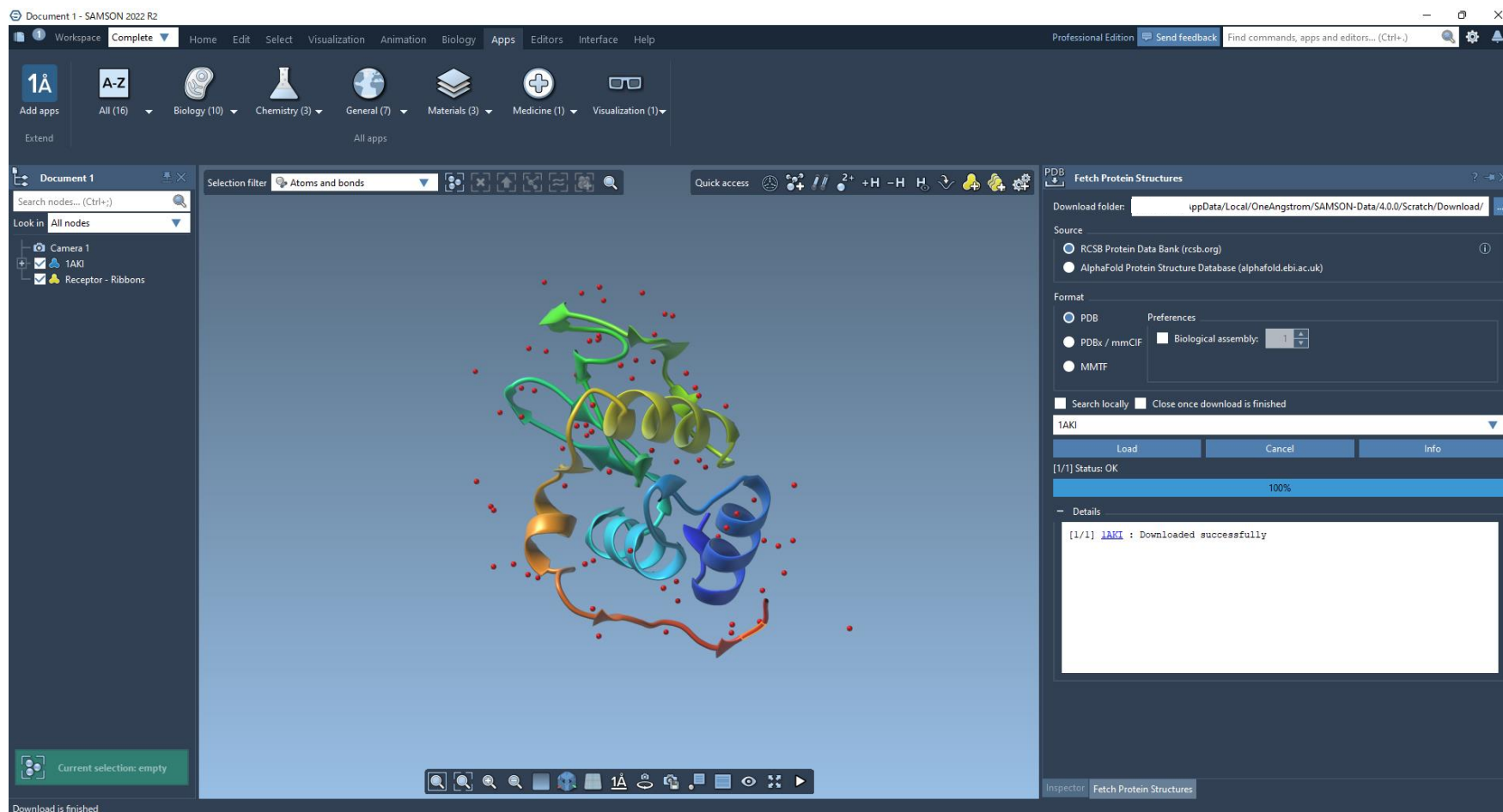


# GROMACS Wizardによる 分子動力学シミュレーション

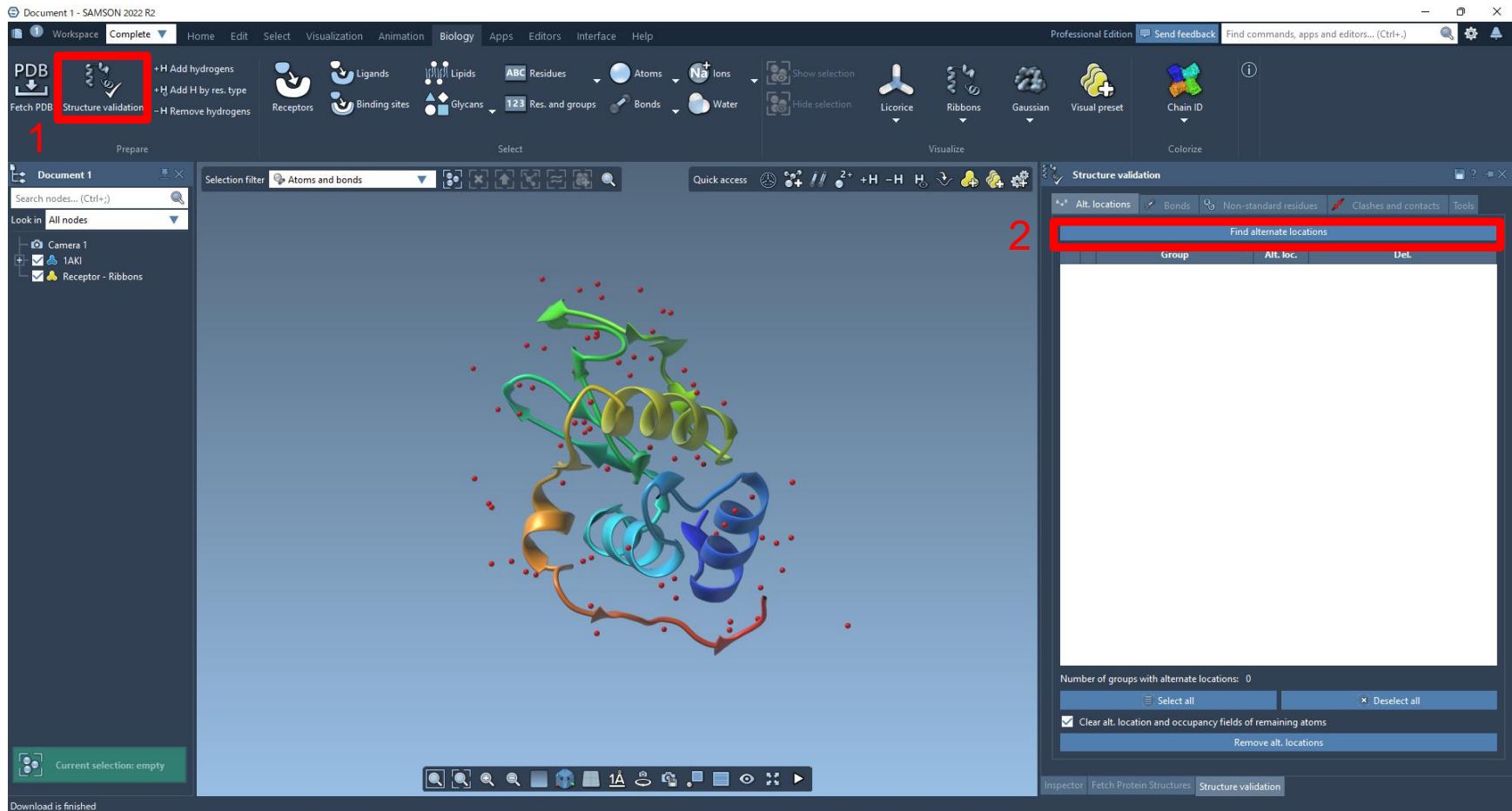
フィルジェン株式会社 バイオインフォマティクス部  
(biosupport@filgen.jp)



Fetch PDBツールでPDB IDを指定し、PDBから直接、立体構造データをインポートします。



1AKI（卵白由来リゾチーム）の立体構造データがインポートされました。



Structure validationツールにより、解析を行う上で問題となる立体構造データ中の箇所を抽出します。

Find alternate locationをクリックすると、当該箇所が下に表示されます。

# 水分子の除去

The screenshot displays the SAMSON 2022 R2 software interface. The top menu bar includes 'Biology', 'Apps', 'Editors', 'Interface', and 'Help'. The 'Biology' menu is open, and the 'Water' option is highlighted with a red box. The main 3D view shows a protein structure with orange spheres representing water molecules. The left sidebar lists nodes, with 'Current selection: 78 nodes' indicated. The right sidebar shows the 'Structure validation' panel with a table for 'Find alternate locations'.

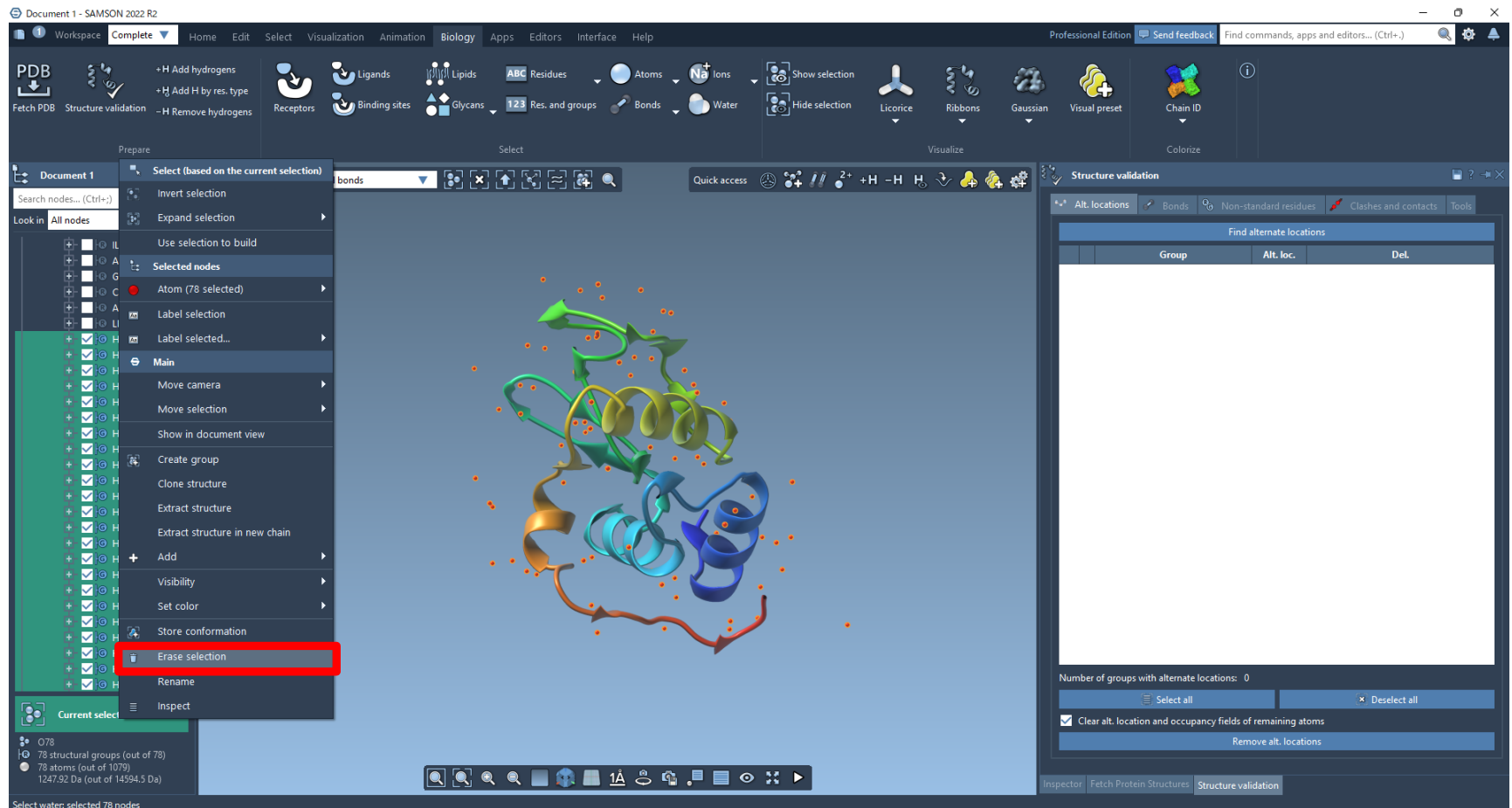
Group	Alt. loc.	Del.
-------	-----------	------

Number of groups with alternate locations: 0

☒ Clear alt. location and occupancy fields of remaining atoms

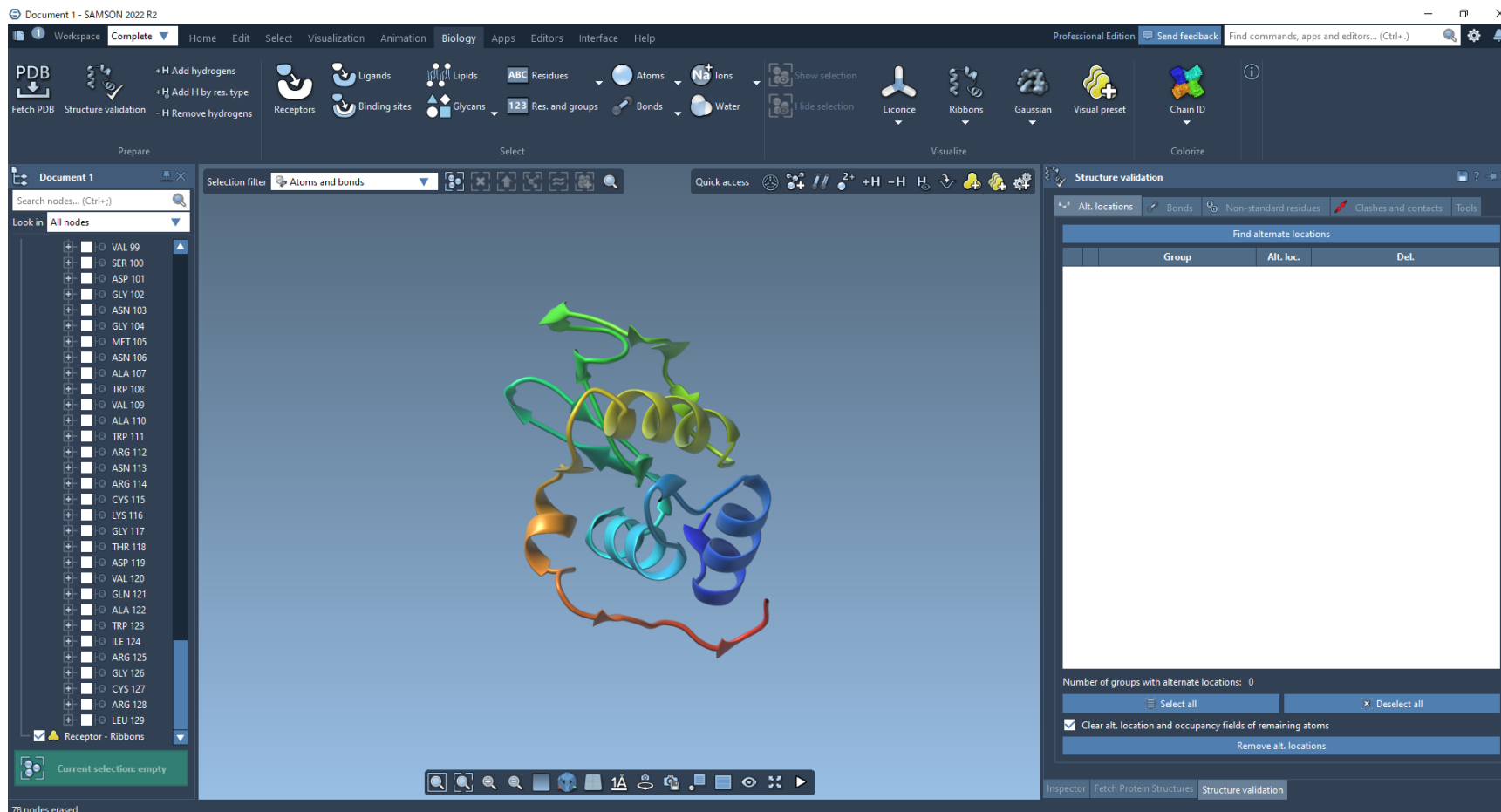
Biology メニュー中の“Water”をクリックすると、データ中のすべての水分子が選択されます。

# 水分子の除去



右クリックのメニューの中から、Erase selectionを選択し、選択中の水分子を除去します。

# 水分子の除去



水分子が除去されました。

活性部位周辺の水分子は消去せずに残しておくような方法も存在します。

# GROMACS Wizardの起動

The screenshot shows the SAMSON 2022 R2 software interface. The 'Biology' menu is open, and 'GROMACS Wizard (cloud edition)' is highlighted with a red box. The main window displays a 3D ribbon model of a protein structure. The right sidebar shows the 'GROMACS Wizard (Cloud edition)' panel with various configuration options for simulation setup, including force field, water model, and periodic box settings.

GROMACS Wizardを起動します。



# データ出力先の指定

Document 1 - SAMSON 2022 R2

Workspace Complete Home Edit Select Visualization Animation Biology Apps Editors Interface Help

1Å Add apps All (16) Biology (10) Chemistry (3) General (7) Materials (3) Medicine (1) Visualization (1)

Extend

Document 1

Search nodes... (Ctrl+)

Look in All nodes

- VAL 99
- SER 100
- ASP 101
- GLY 102
- ASN 103
- GLY 104
- MET 105
- ASN 106
- ALA 107
- TRP 108
- VAL 109
- ALA 110
- TRP 111
- ARG 112
- ASN 113
- ARG 114
- CYS 115
- LYS 116
- GLY 117
- THR 118
- ASP 119
- VAL 120
- GLN 121
- ALA 122
- TRP 123
- ILE 124
- ARG 125
- GLY 126
- CYS 127
- ARG 128
- LEU 129

Receptor - Ribbons

Current selection: empty

Quick access

GROMACS Wizard (Cloud edition)

Results folder: C:/Users/.../C:/Documents/SAMSONdemo

1 - Prepare 2 - Minimize 3 - Equilibrate (NVT) 4 - Equilibrate (NPT) 5 - Simulate

Model

Force field: amber03

Include topology files (itp): Click Edit to add itp files

Water model: tip3p

☒ Ignore existing hydrogen atoms (recommended)

Periodic box

Unit cell: Cubic

Compute fitted box ☒ Show box

Box lengths: 0.000 nm

☒ Add solvent

☒ Neutralize system

Total charge: 0.000

Positive ions: Ca

Negative ions: Cl

☐ Add additional ions

Positive ions: 0

Negative ions: 0

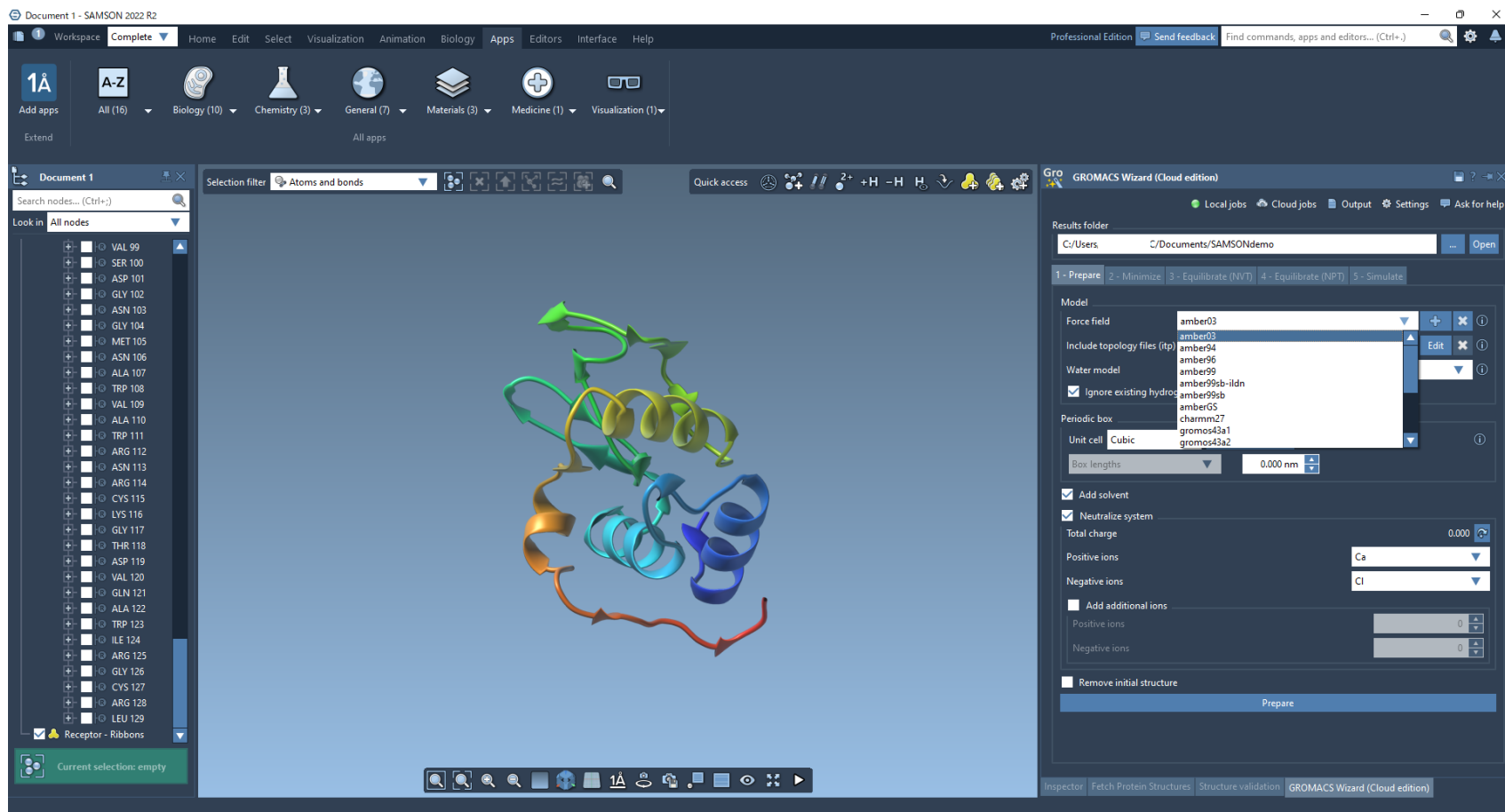
☐ Remove initial structure

Prepare

Inspector Fetch Protein Structures Structure validation GROMACS Wizard (Cloud edition)

まずは、結果の保存先フォルダーを指定します。

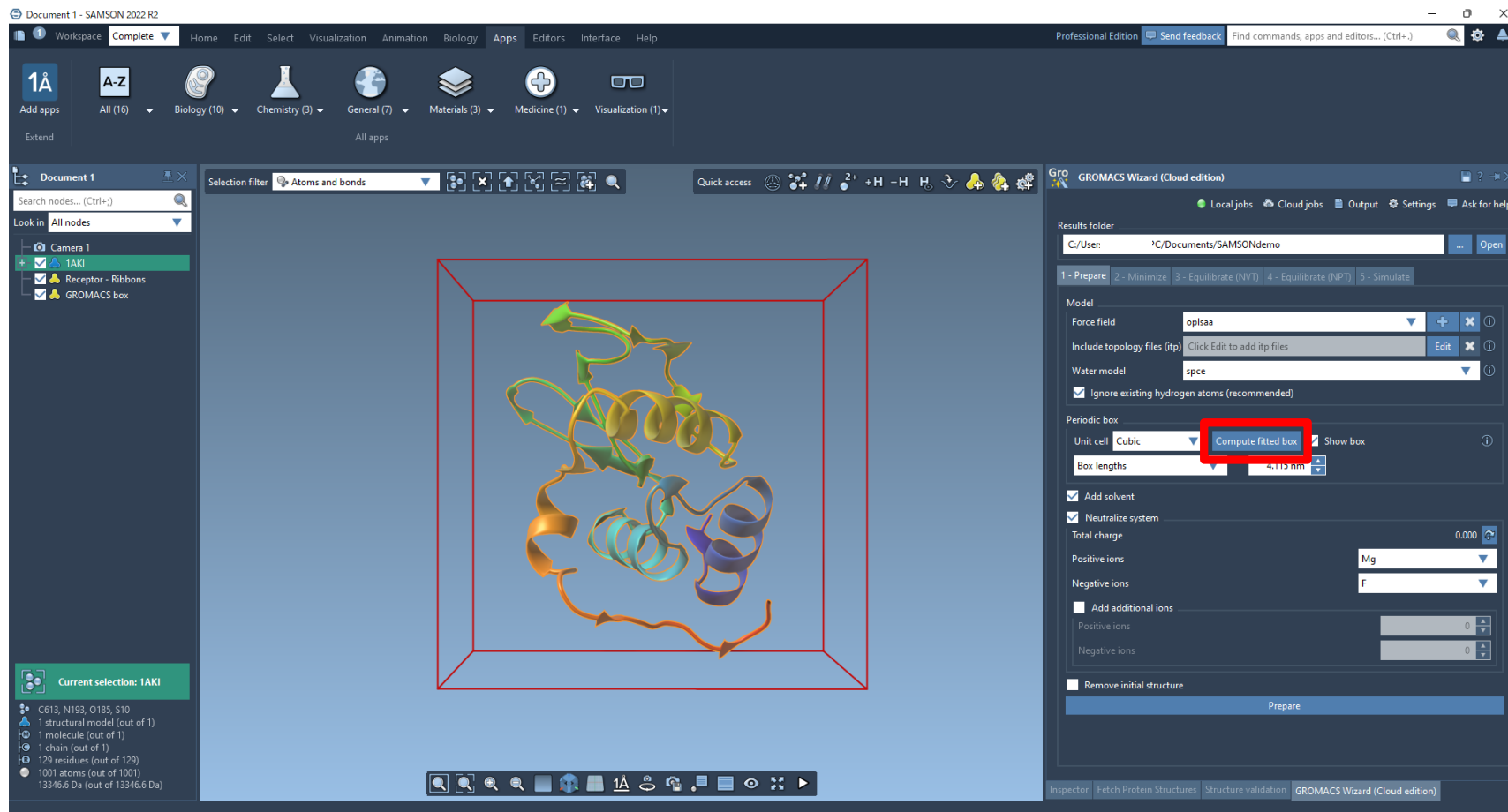
# 力場・水モデルの指定



力場、水モデルを選択します。必要に応じて、トポロジーファイルもここで指定します。

力場はデフォルトで用意されているものの他、ユーザー自身が用意したものも指定できます。

# 周期境界ボックスの指定

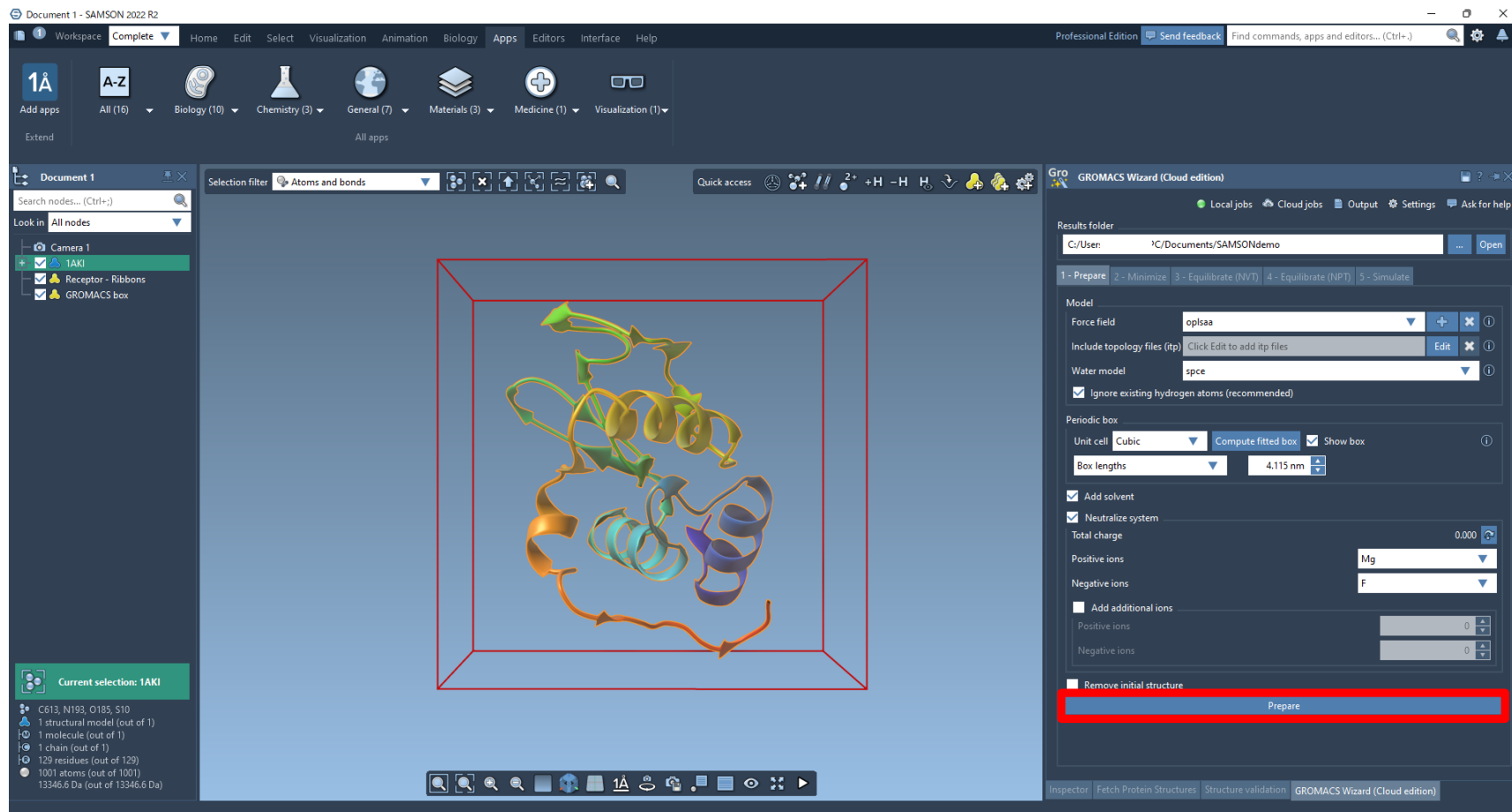


分子を選択した状態で、Compute fitted boxをクリックすると、周期境界ボックスが設定されます。

ボックスの形状・サイズは調整可能です。

# カウンターイオン等の設定

その他必要に応じて、系に水分子を追加するかどうかや、系の電荷を中和するイオン種類を選択します。



**Prepareをクリックします。**

Document 1 - SAMSON 2022 R2

Workspace Complete Home Edit Select Visualization Animation Biology Apps Editors Interface Help

Professional Edition Send feedback Find commands, apps and editors... (Ctrl+)

1Å Add apps All (16) Biology (10) Chemistry (3) General (7) Materials (3) Medicine (1) Visualization (1) Extend All apps

Document 1 Search nodes... (Ctrl+;) Look in All nodes

Selection filter Atoms and bonds

Quick access

Gro GROMACS Wizard (Cloud edition)

Local jobs Cloud jobs Output Settings Ask for help

Results folder C:/Users/ll/Documents/SAMSONdemo Open

1 - Prepare 2 - Minimize 3 - Equilibrate (NVT) 4 - Equilibrate (NPT) 5 - Simulate

Model

Force field oplsaa

Include topology files (itp) Click Edit to add itp files Edit

Water model spce

☒ Ignore existing hydrogen atoms (recommended)

Periodic box

Unit cell Cubic Compute fitted box Show box

Box lengths 7.215 nm

☒ Add solvent

☒ Neutralize system

Total charge 8.000

Positive ions Mg

Negative ions F

☐ Add additional ions

Positive ions 0

Negative ions 0

☐ Remove initial structure

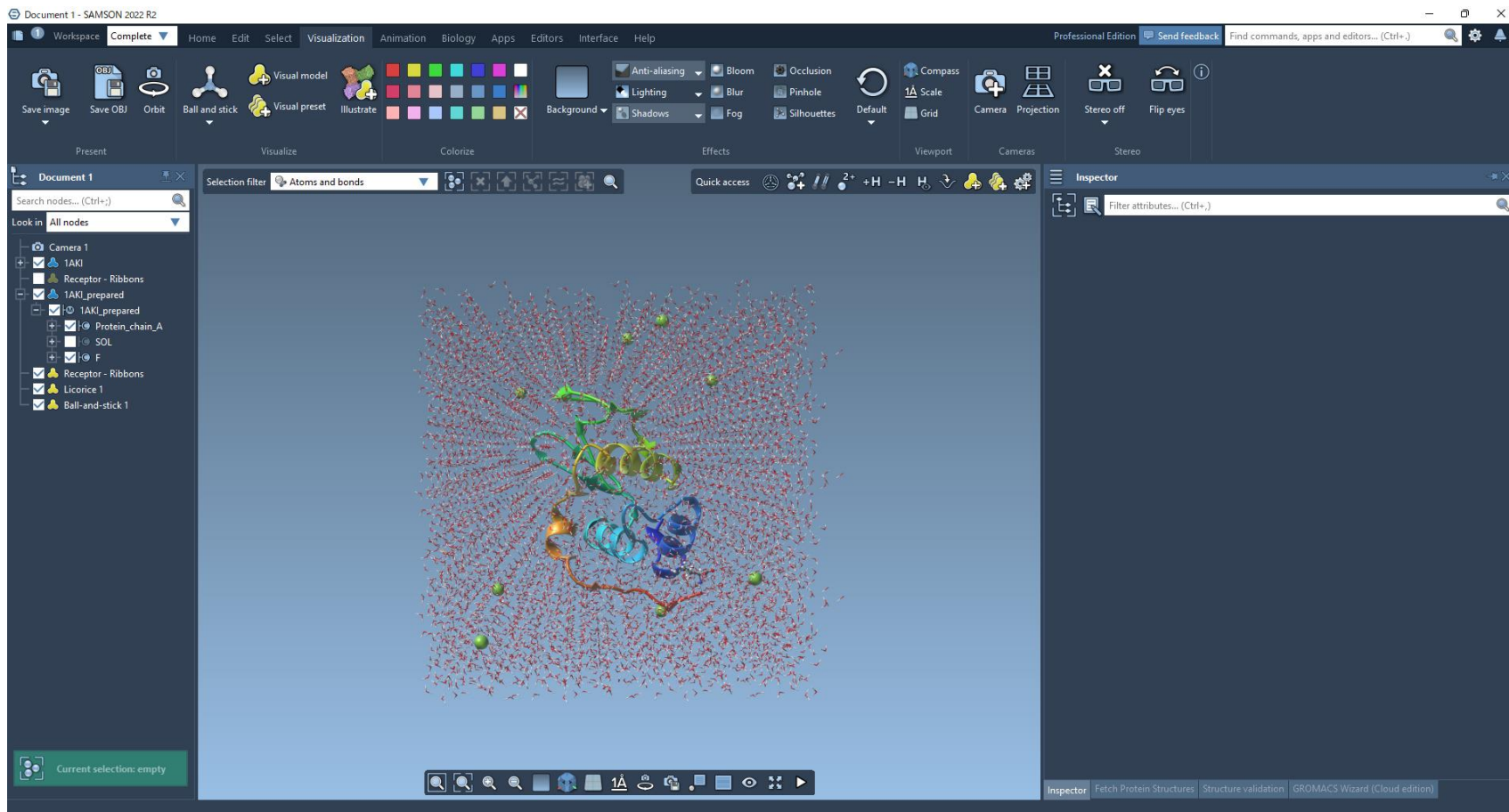
Prepare

Inspector Fetch Protein Structures Structure validation GROMACS Wizard (Cloud edition)

Current selection: 1AKI

- C613, N193, O185, S10
- 1 structural model (out of 2)
- 1 molecule (out of 2)
- 1 chain (out of 4)
- 129 residues (out of 259)
- 1001 atoms (out of 23846)
- 13346.6 Da (out of 153178 Da)
- Formal charge: 0 (out of -8)

モデルが作成されました。



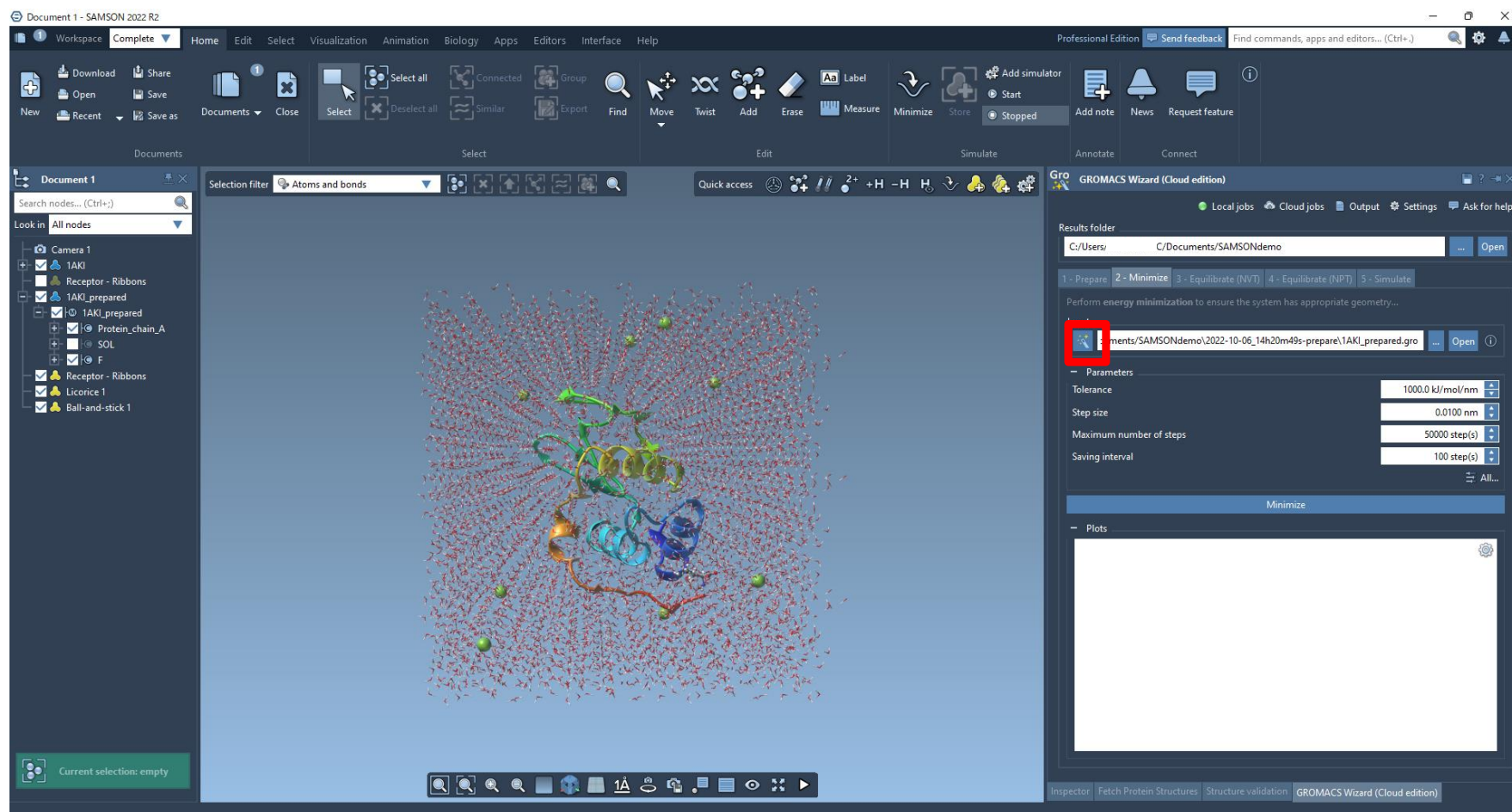
水分子やイオンの表示モデルおよびサイズは都度変更可能です。







# 溶媒付加済みデータの指定



.groファイルを選択します。

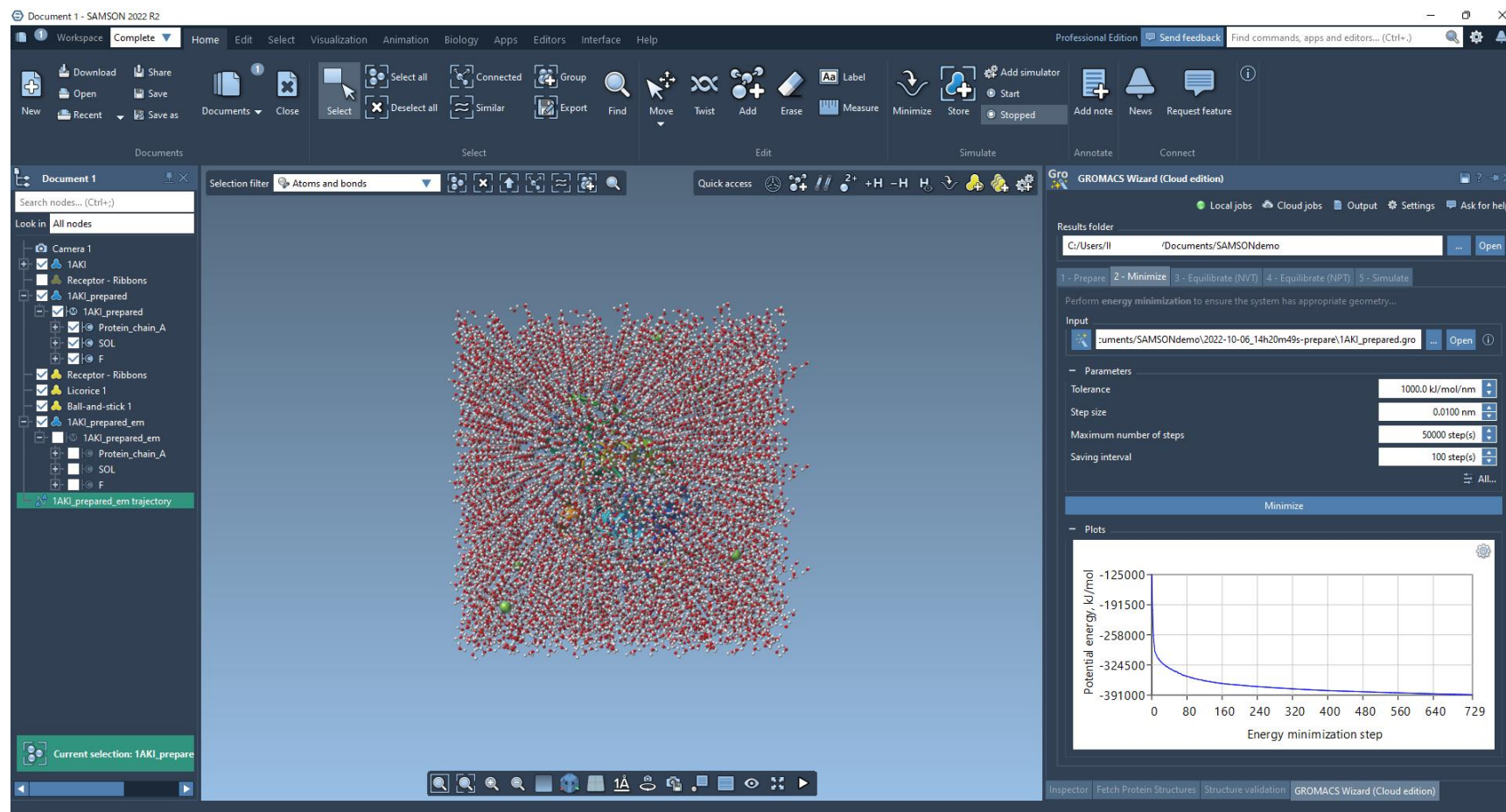
前ステップで生成したファイルをそのまま使用する場合は、ワンクリックで読み込みができます。

# パラメータの指定

The screenshot displays the SAMSON 2022 R2 software interface. The top menu bar includes Workspace, Complete, Home, Edit, Select, Visualization, Animation, Biology, Apps, Editors, Interface, and Help. The left sidebar shows a tree view of the document structure. The main 3D view displays a protein structure (1AKI) in a water box. The right sidebar contains the GROMACS Wizard (Cloud edition) panel. This panel includes a Results folder section, a progress bar with steps 1-5, a file selection area with a red box highlighting the selected file, a Parameters section with input fields for Tolerance, Step size, Maximum number of steps, and Saving interval, and a Plots section.

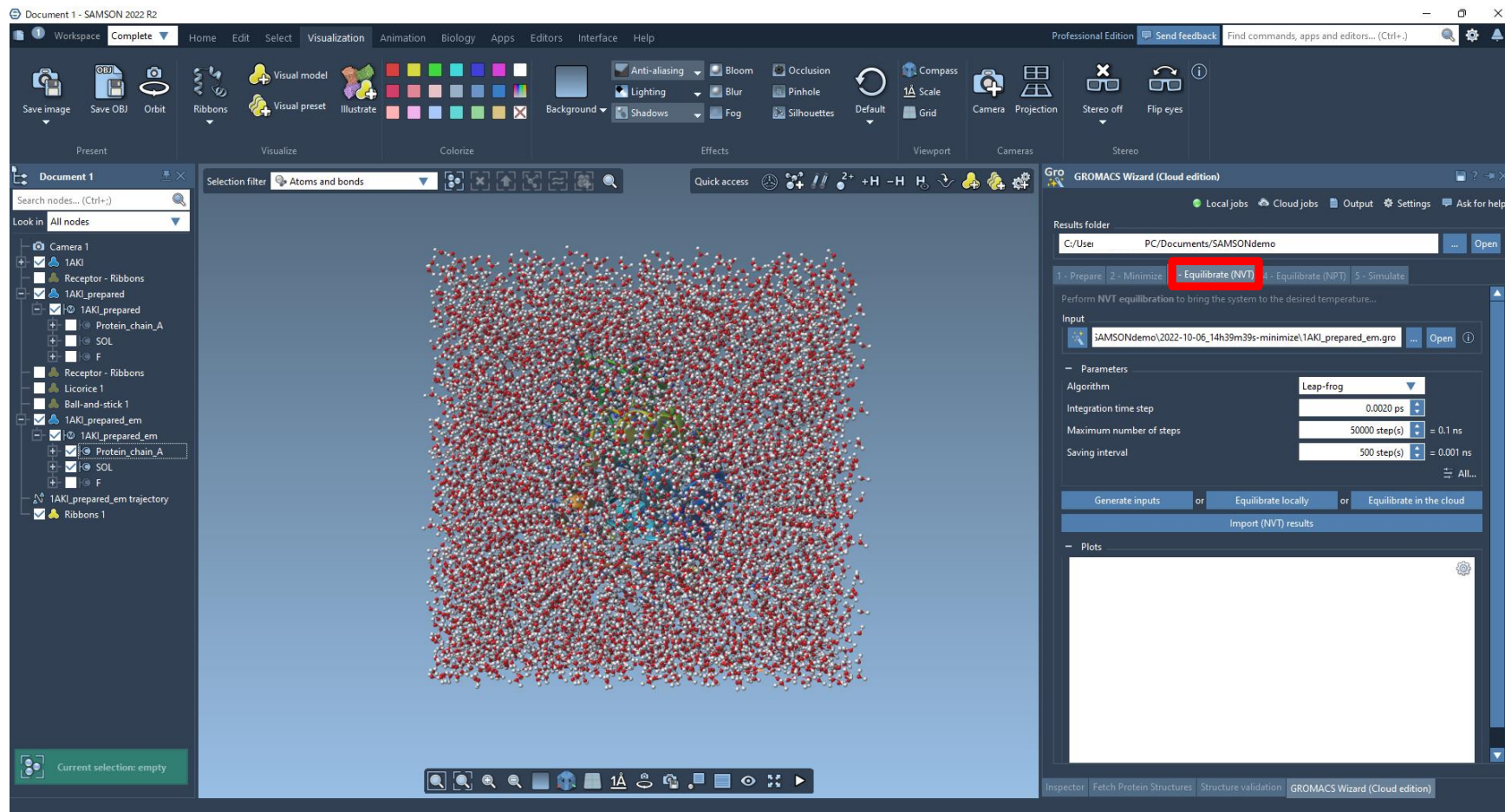
パラメータを設定し、Minimizeをクリックします。

必要に応じて、現在の画面で表示されている4つのパラメータ以外のパラメータを設定することも可能です。



計算結果が表示されます。

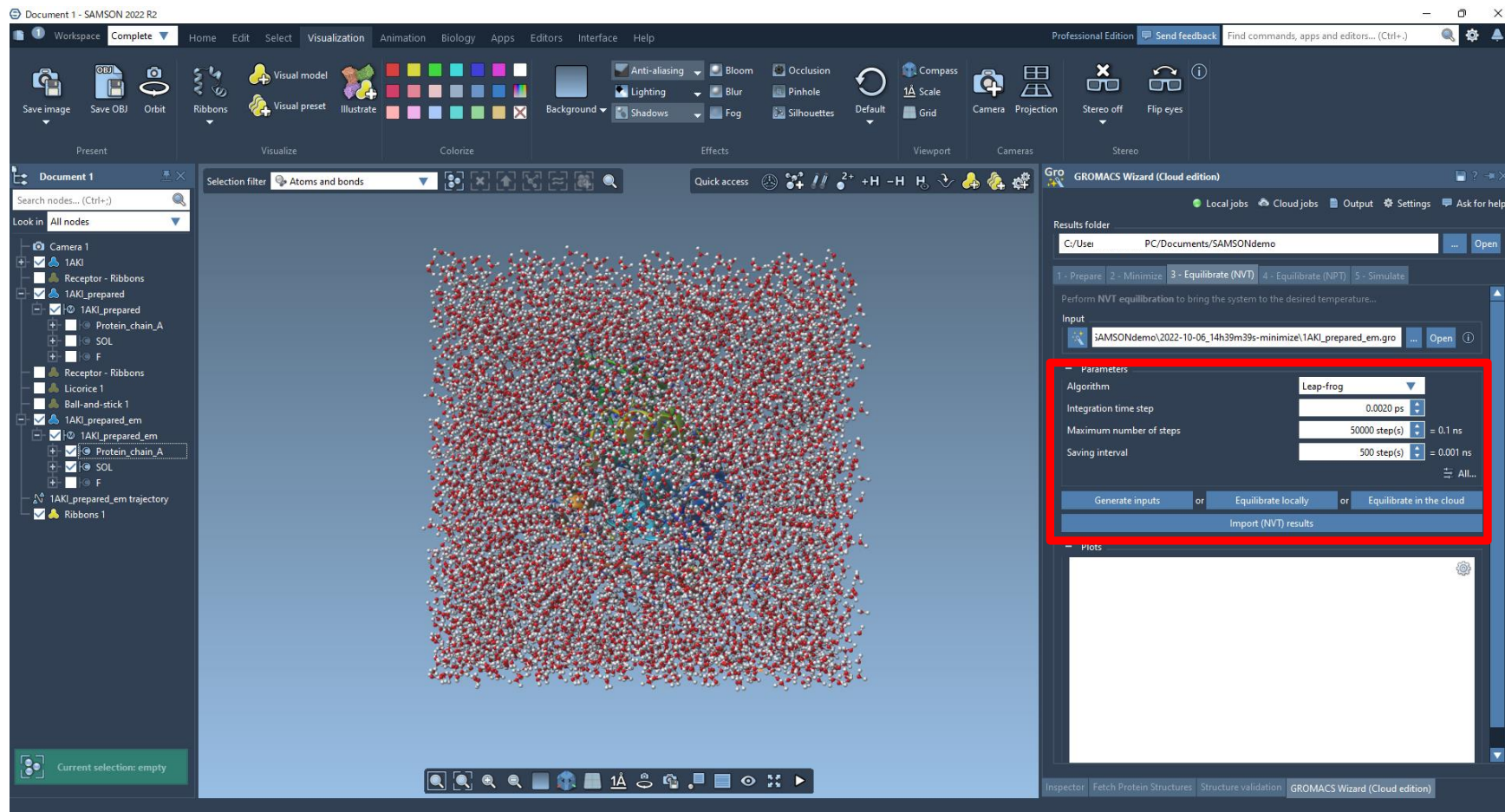




Equilibrate (NVT) タブに移動し、minimize後の.groファイルを選択します。

前ステップで生成したファイルをそのまま使用の場合は、ワンクリックで読み込みができます。

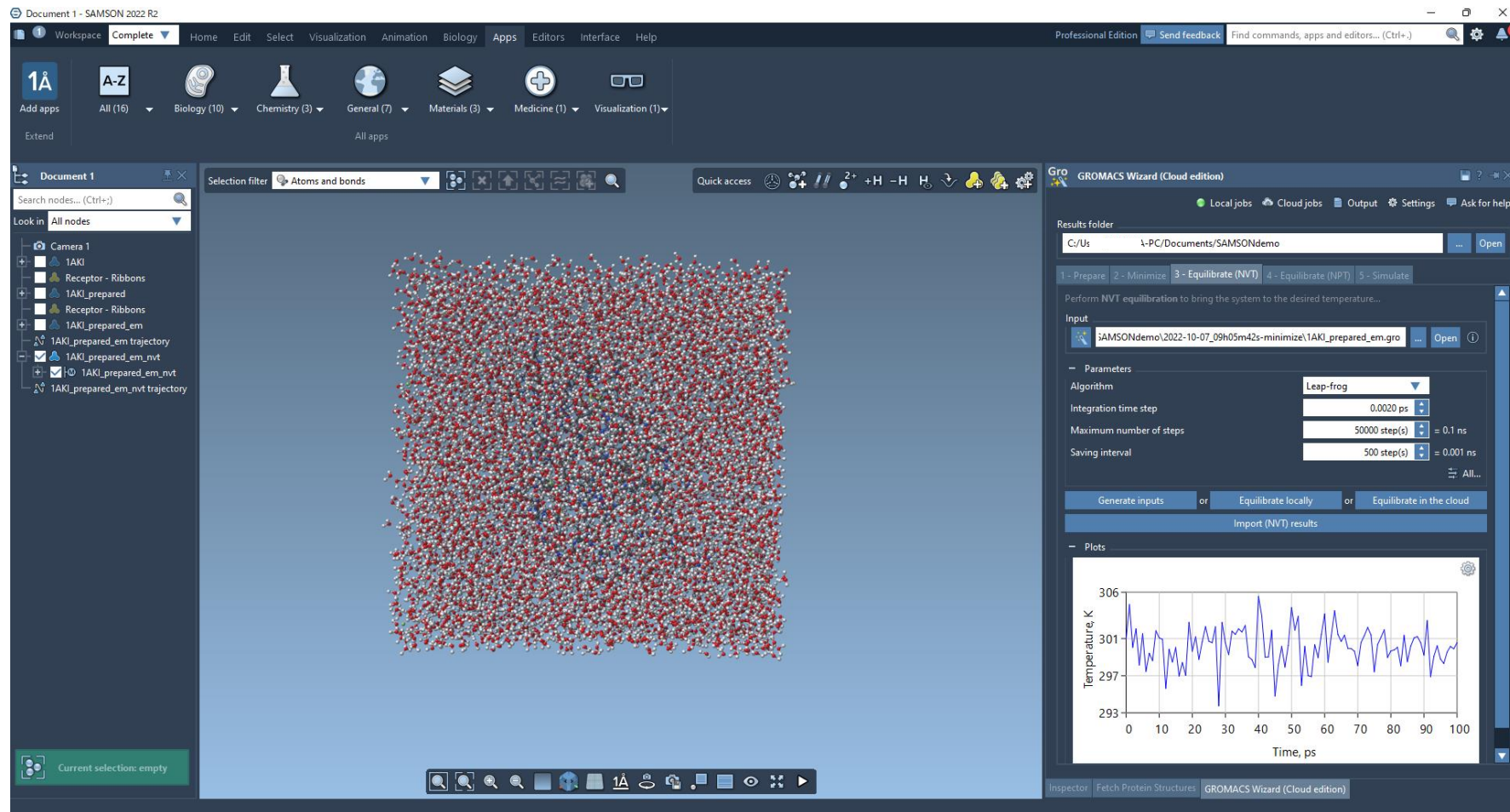
# パラメーターの指定



パラメータを設定し、計算を実行します。

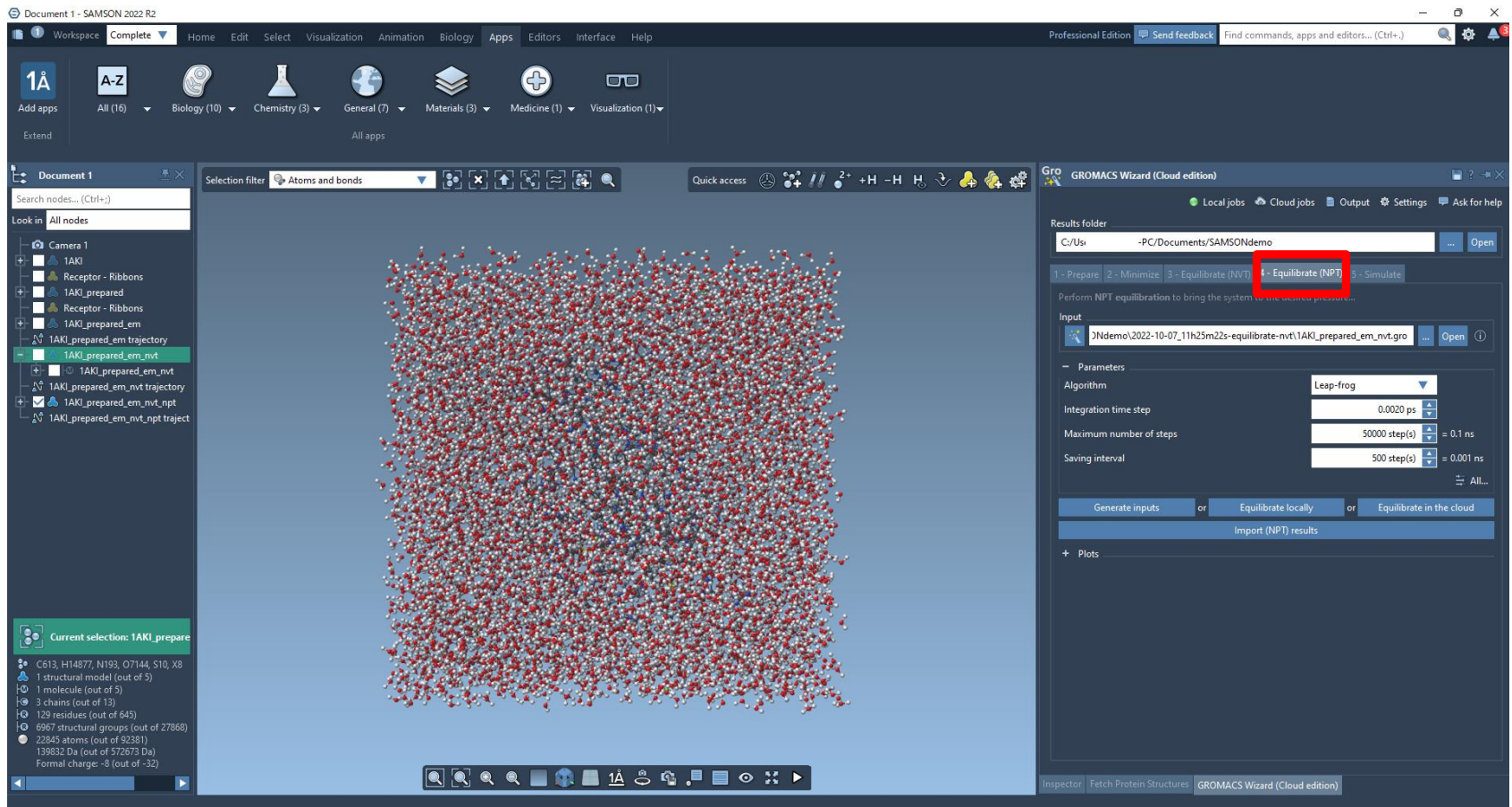
ローカル環境での計算およびクラウドでの計算を選択できます。

# 結果の表示



計算結果が表示されます。





Equilibrate (NPT) タブに移動し、NVT平衡化後の.groファイルを選択します。

前ステップで生成したファイルをそのまま使用の場合は、ワンクリックで読み込みができます。

# パラメータの指定

The screenshot displays the SAMSON 2022 R2 software interface. The main window shows a 3D visualization of a molecular system, likely a protein-ligand complex, with atoms represented as spheres. The left sidebar contains a tree view of the document structure, including various trajectories and models. The right sidebar features the 'GROMACS Wizard (Cloud edition)' window, which is used for configuring simulation parameters. The 'Parameters' section is highlighted with a red box, showing the following settings:

- Algorithm: Leap-frog
- Integration time step: 0.0020 ps
- Maximum number of steps: 50000 step(s) = 0.1 ns
- Saving interval: 500 step(s) = 0.001 ns

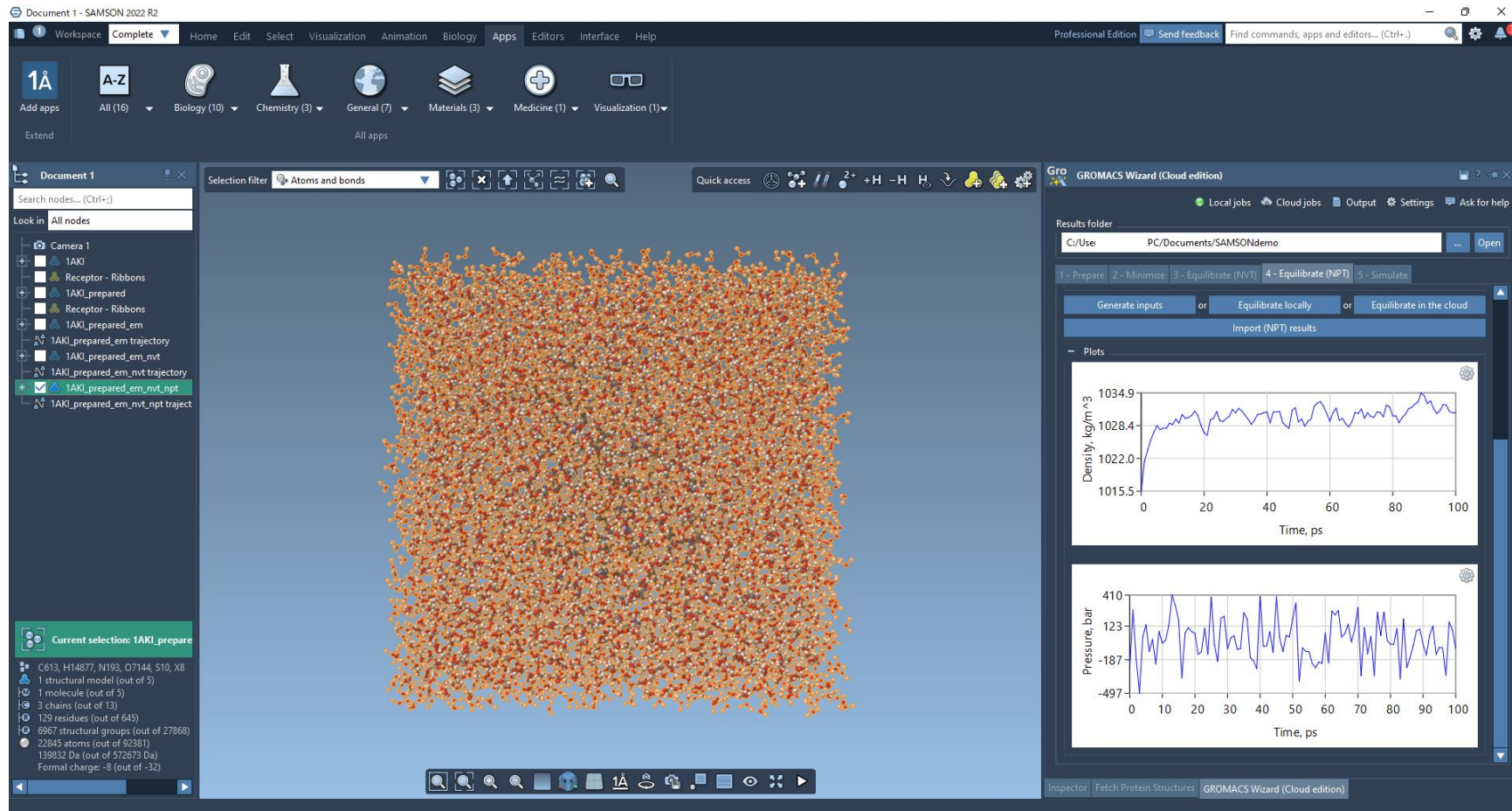
Below the parameters, there are buttons for 'Generate inputs', 'Equilibrate locally', and 'Equilibrate in the cloud'. The 'Equilibrate in the cloud' button is highlighted with a red box.

パラメータを設定し、計算を実行します。

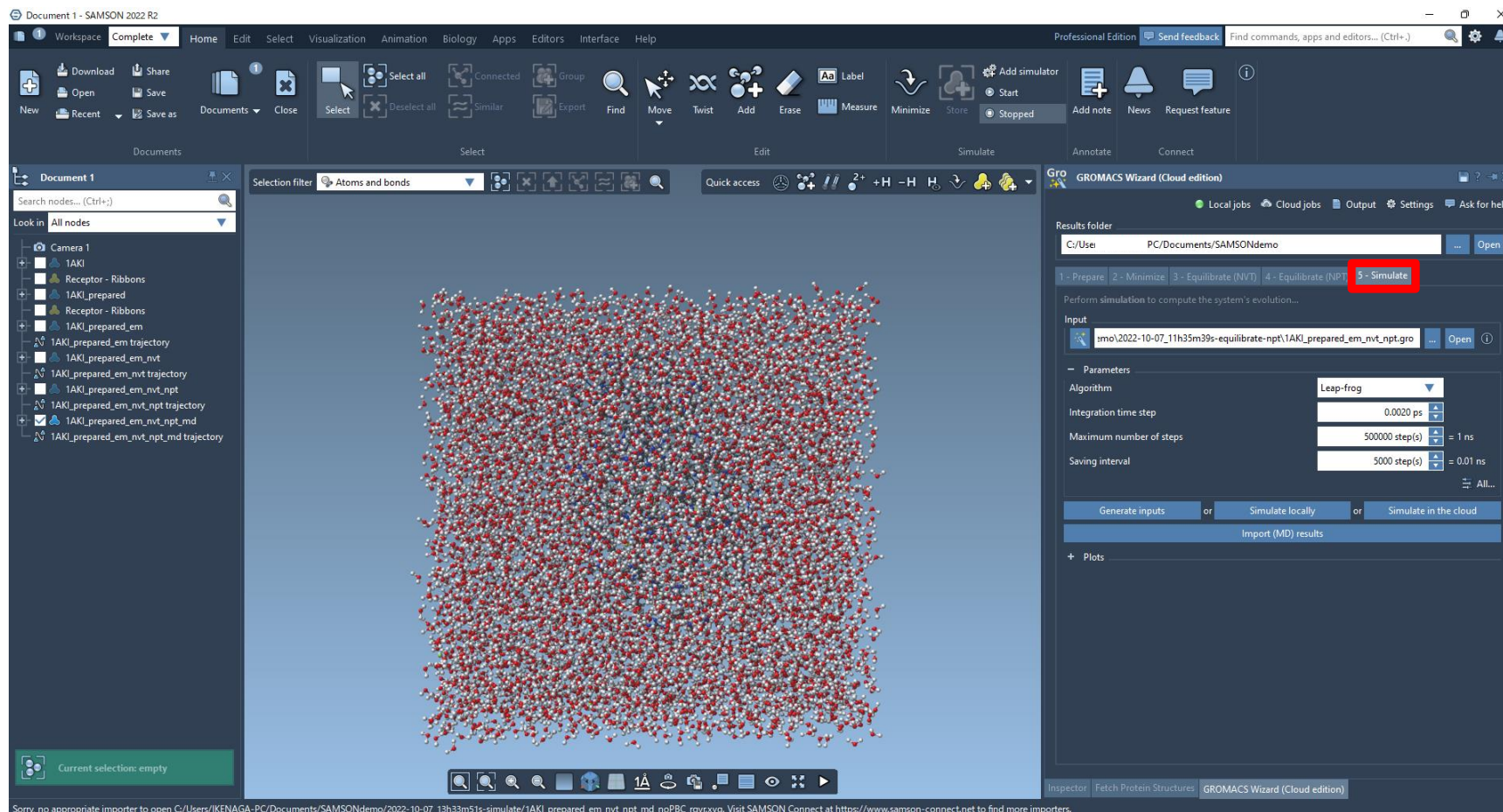
ローカル環境での計算およびクラウドでの計算を選択できます。



# 結果の表示



計算結果が表示されます。



**Simulate タブに移動し、NPT平衡化後の.groファイルを選択します。**

**前ステップで生成したファイルをそのまま使用する場合は、ワンクリックで読み込みができます。**

# パラメーターの指定

Document 1 - SAMSON 2022 R2

Workspace Complete Home Edit Select Visualization Animation Biology Apps Editors Interface Help

Professional Edition Send feedback Find commands, apps and editors... (Ctrl+.)

New Download Open Recent Save Save as Documents Close Select Select all Select Deselect all Similar Export Find Move Twist Add Erase Measure Minimize Store Add simulator Start Add note News Request feature Annotate Connect

Document 1

Search nodes... (Ctrl+.)

Look in All nodes

Selection filter Atoms and bonds

Quick access

GROMACS Wizard (Cloud edition)

Results folder C:/Users/PC/Documents/SAMSONdemo Open

1 - Prepare 2 - Minimize 3 - Equilibrate (NVT) 4 - Equilibrate (NPT) 5 - Simulate

Perform simulation to compute the system's evolution...

Input emn\2022-10-07\_11h35m39s-equilibrate-npt\1AKI\_prepared\_em\_nvt\_npt.gro Open

Parameters

Algorithm Leap-frog

Integration time step 0.0020 ps

Maximum number of steps 500000 step(s) = 1 ns

Saving interval 5000 step(s) = 0.01 ns

Generate inputs or Simulate locally or Simulate in the cloud

Import (MD) results

Plots

Inspector Fetch Protein Structures GROMACS Wizard (Cloud edition)

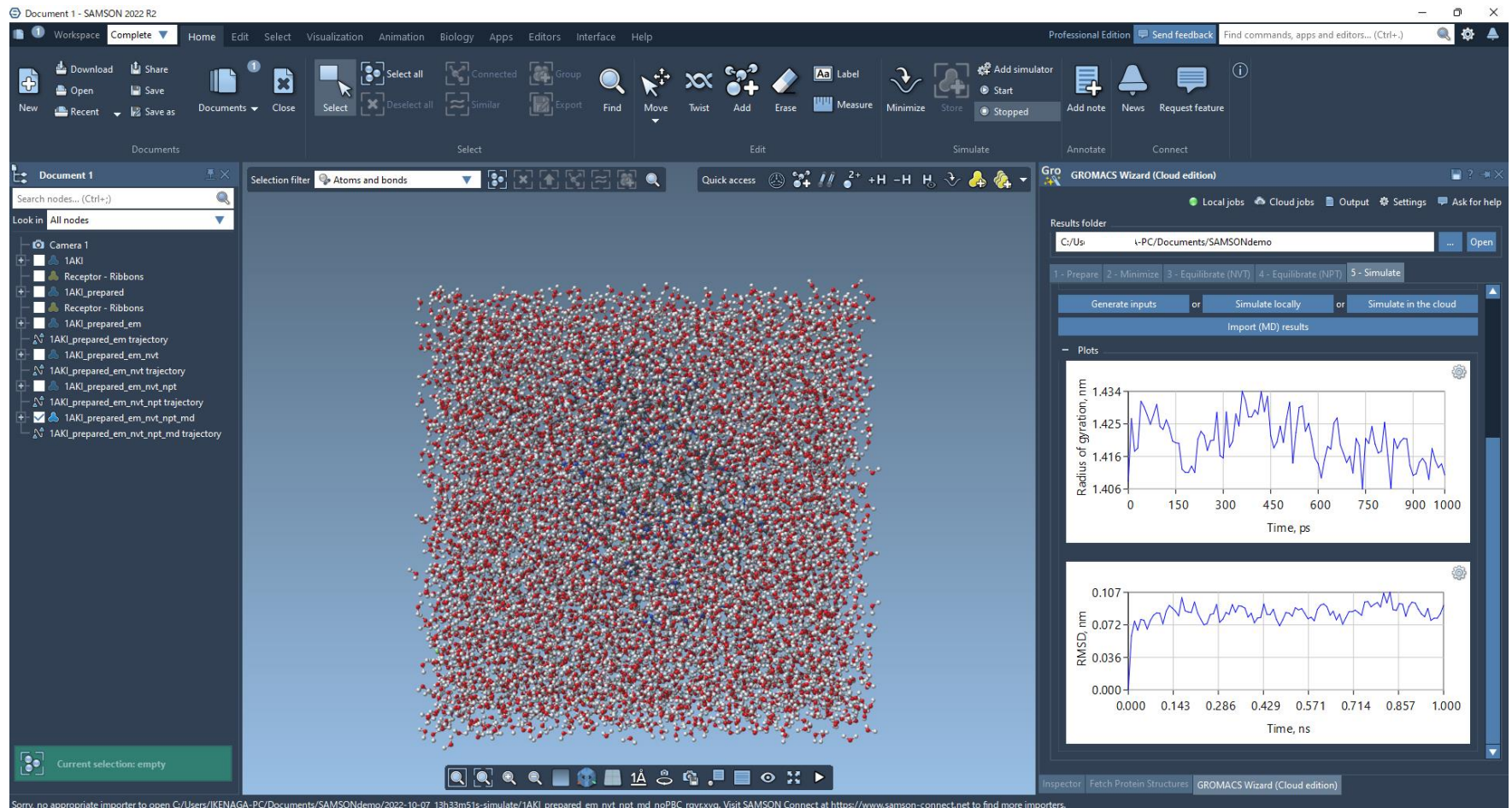
Sorry, no appropriate importer to open C:/Users/KENAGA-PC/Documents/SAMSONdemo/2022-10-07\_11h35m39s-simulate/1AKI\_prepared\_em\_nvt\_npt\_md\_noPBC\_rgxyzvg. Visit SAMSON Connect at <https://www.samson-connect.net> to find more importers.

パラメータを設定し、計算を実行します。

ローカル環境での計算およびクラウドでの計算を選択できます。



# 結果の表示



計算結果が表示されます。

各種シミュレーション結果が指定したフォルダーに保存される他、トラジェクトリーをソフトウェア上に表示させることもできます。トラジェクトリーはムービーやOBJ型式でも出力可能です

お問い合わせ先：フィルジェン株式会社  
TEL: 052-624-4388 (9:00～18 : 00)  
FAX: 052-624-4389  
E-mail: [biosupport@filgen.jp](mailto:biosupport@filgen.jp)