

平成27年5月25日 @CMSI神戸

FMOチュートリアル

講師:

Dmitri G. Fedorov(産総研)、北浦和夫(神戸大)、川島雪生
(理研AICS)

プログラム:

- 13:00-14:00 GAMESSによるFMO計算について(Fedorov)
- 14:00-14:30 入力データ作成と計算結果について (Fedorov)
(休憩／コーヒースタンド)
- 14:40-15:30 FMO計算支援プログラム"fu"の使い方 (北浦)
- 15:30-17:00 FMO計算の実習 (Fedorov、北浦、川島)
- 17:00-17:30 質疑・応答 (Fedorov、北浦、川島)

配布のUSBから、

1. fu-18May2015-exe フォルダ
 2. FUDATASETフォルダ
 3. FMOtutorial-25May2015フォルダ
- を、C:¥ドライブにコピーしてください

FMOチュートリアル

FMO計算支援プログラム"fu"の使い方

(神戸大学・システム情報学研究科 北浦和夫)

1. GAMESS-FMO計算支援ソフトウェア "FU" の使い方
 - ・ FUについて
 - ・ fumodel(分子構造モデリングソフト)の使い方
 - ・ gamess-user(入力データ作成支援スクリプト)の使い方
 - ・ fuplot(計算結果可視化スクリプト)の使い方
2. FMO計算実習

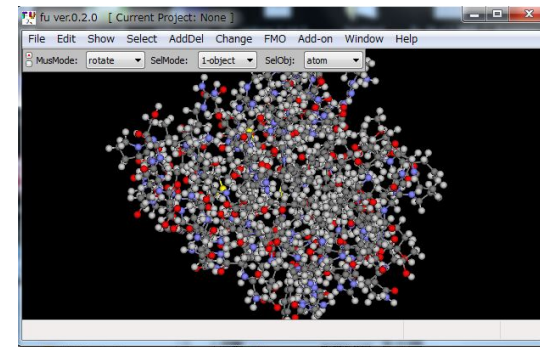
FUについて

- ▶ FUは、**fumodel**(分子モデリングソフト)をメインプログラムとして、**gamess-user**(入力データ作成支援)や**fuplot**(計算結果可視化ソフト)などのadd-onプログラムからなる
- ▶ プログラミング言語はPythonで、GUIはwxPythonで作成。
- ▶ **オープンソースソフトウェア**として公開(BSD2ライセンス)
- ▶ **大幅なカスタマイズ**が可能 → 研究目的にあわせた設定
- ▶ 100%Pythonで書かれているので**改変・機能追加が容易**
→ 各自、各グループの**独自版の開発が容易**

fumodel(ver.0.2)の操作の基本

(詳しくは「fuプログラム使用説明書」をご覧ください)

▶ 操作の基本



(原子の選択と操作)

本ソフトウェアは、基本的に、選択状態(Menu:"**Select**"、またはマウス操作)にした原子(集団)を対象に各種操作を行う。選択された原子がない場合は、全原子を対象とする。

(原子の表示と非表示)

原子(集団)の表示・非表示(Menu:"**Show**")が設定できる。表示状態にある原子集団のみを各種操作の対象とする。

▶ マウス操作

(回転、併進、ズーム)

①原子上以外の点からマウスを左ドラッグすると、表示物を回転(併進、拡大)する。

②MusMode boxで、"rotate","translate","zoom"などを切り替える。"zoom"はマウスのホイールでも操作できる。

(関連)表示物をスクリーンサイズにフィットするように拡大・縮小するには、**"f"**キーを押下、または、メニューから"Show"-**"Fit to screen"**を実行する。

(選択状態の設定と解除)

選択状態は、原子またはその集団(対象物)に対して設定・解除する。選択状態にある原子は、選択色(defaultは緑色)で表示される。

- ①原子上で左クリック(LClick)すると対象物が選択状態になる。
(関連)対象物として、"atom", "residue", "chain", "group", "fragment"を設定できる(menu"Select"- "Object"または SelObject boxで切り替える)。
- ②選択中の原子を左Clickすると、その原子(対象物)が選択解除される。
- ③原子がないところで左ダブルClickすると全選択対象物が選択解除される。

(選択対象物と選択数)

- ①対象物として、"atom", "residue", "chain", "group", "fragment"が設定できる。これらの切り替えは、メインウィンドウのSelObject boxか、または、Menuの"Select"-Object"で行う。
- ②選択数は、メインウィンドウのSelMode boxで、"1-object", '2-objects', '3-objects', '4-objects', 'unlimited'のいずれかを選択する。
- ③対象物が原子の場合、選択数'1-object'で原子をLClickすると原子名、'1-objects'で2原子をLClickするとそれらの原子間距離、'3-objects'で3原子をLClickすると1-2-3(クリックの順番)の角度がStatusbarに表示される。

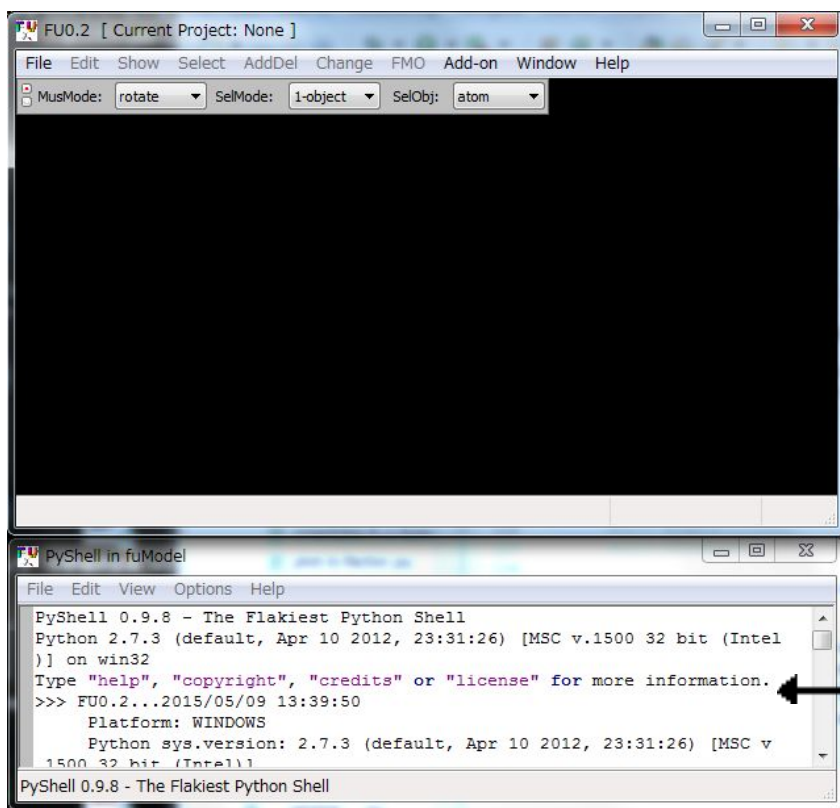
(マウスの特定操作モード)

マウスを右clickすると現れるpopupで特定操作モードに切り替える。通常モードに復帰するには“ESC”キーを押下する。

- ①“Show Distance”モード: Menuの“Show”-“Distance”のonと同じ。
- ②“Sphere/Box Selection”モード: 原子上からマウスの左ボタンを押しながらDrugすると、その原子を中心とする球内の対象物が選択状態になる。原子上以外の点からDrugすると、矩形内の対象物が選択状態になる。
- ③“Make bond”モード: このモードで2原子を選択すると、選択された原子間に結合を作る。結合している2原子を選択状態にして、キー“0”を押下すると結合を消去する。“1”, “2”, “3”を入力するとそれぞれ1, 2, 3重結合になる(“4”はアロマトイクボンド。ただし、現バージョンは手抜きコードなのでうまく描けない)。
- ④“Section”モード: マウスのホイールを回転させて、画面手前の原子から奥に向かって非表示にする。このモードから抜けると、非表示原子が選択状態になる。メニュー“Window”-“Open CtrlWin”の“Section”と同じ。
- ⑤“Change geometry”モード: このモードで、選択された原子・原子集団を移動させると原子の座標(構造)が変る。
- ⑥“Cancel”: 特殊モードを解除する(“ESC”キー押下と同じ)。

fumodel の使い方の概要

1. fu.exeを起動する



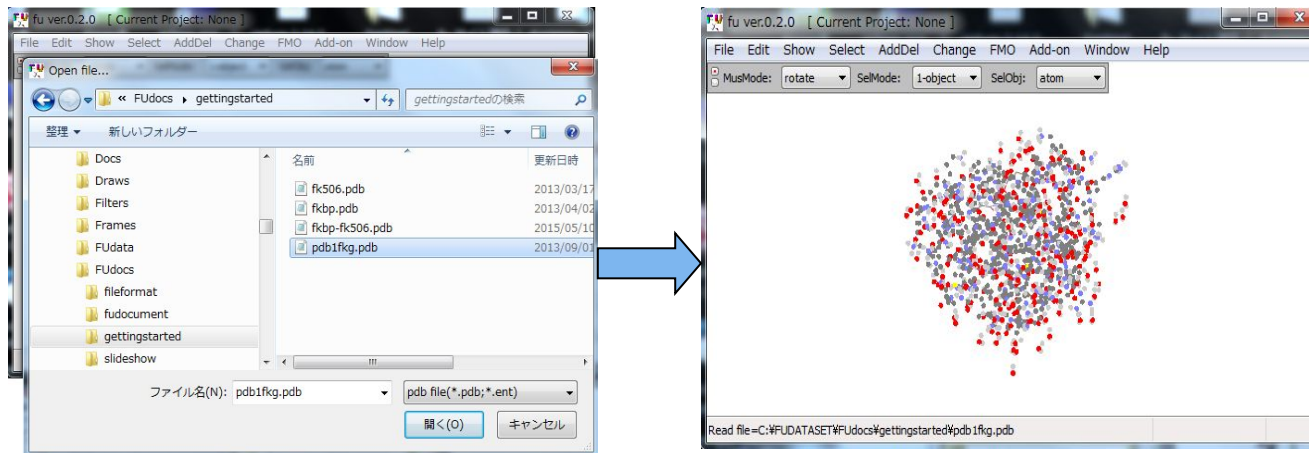
fumodelのメインパネル

- ・メニュー/widgets入力
- ・マウス/キーボード入力
- ・分子モデル表示

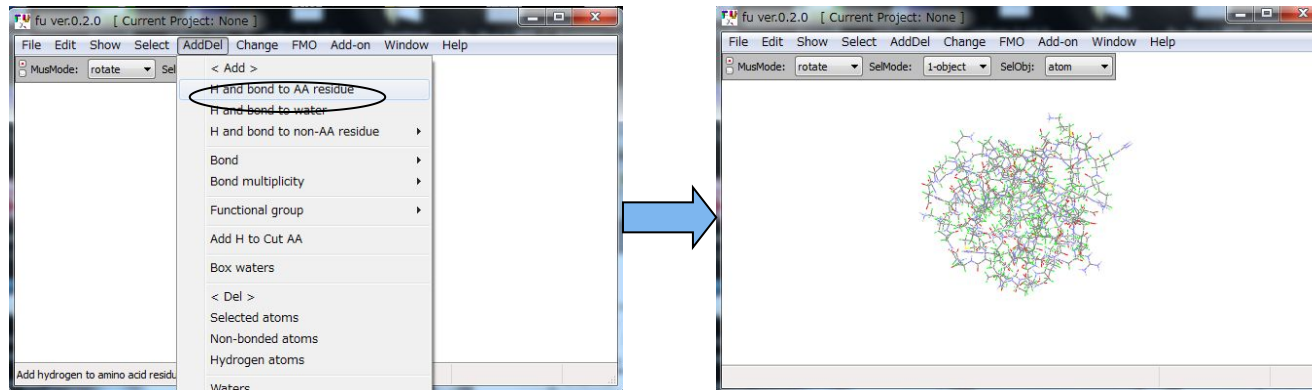
PyShellコンソール

- ・メッセージの表示
- ・pythonプログラムの実行

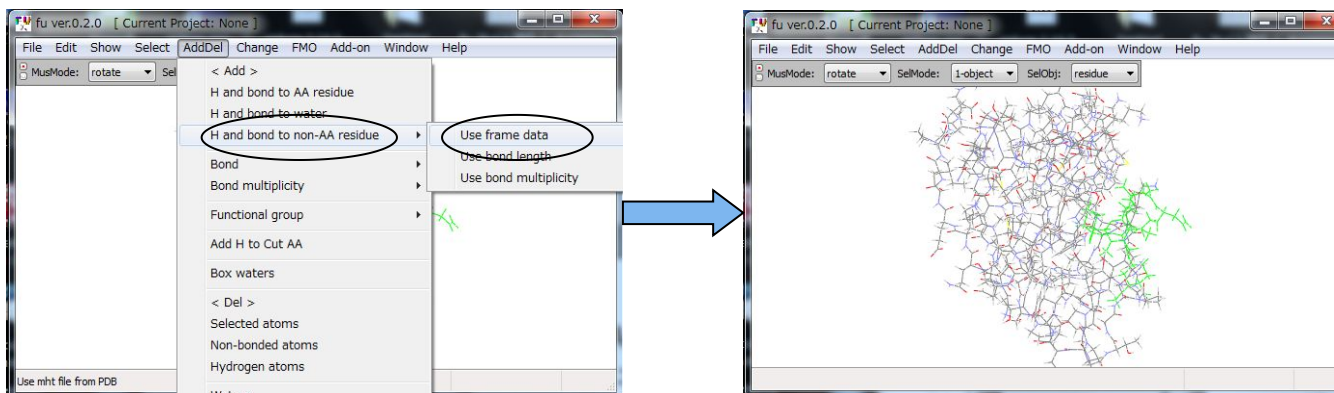
2. 'File' - 'Open' メニューで 'pdb1fkf.pdb' ファイル (FKBPタンパク質とFK506リガンドの複合体の構造データ) を開く。



3. 'AddDel (Del)' - 'Waters' メニューを実行して水分子を削除してから、"AddDel (Add)' - 'H and bond to AA residue' を実行し、アミノ酸残基に水素原子を付加する

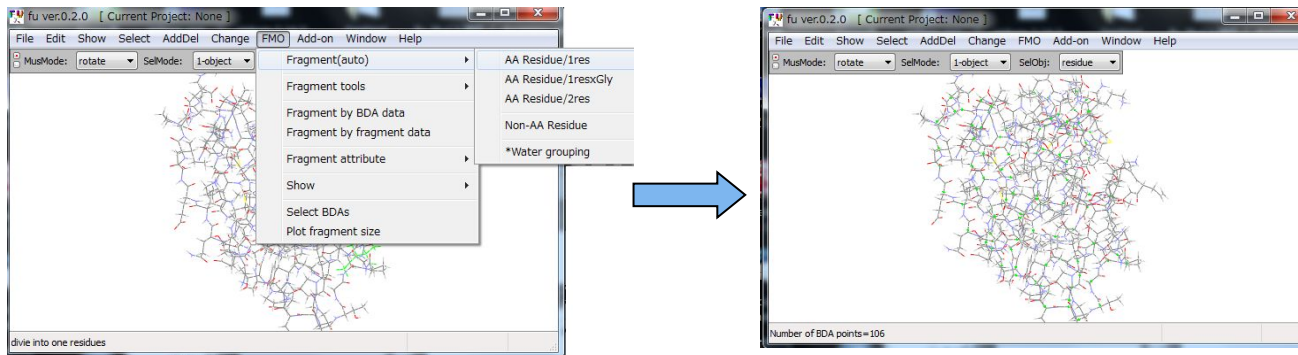


4. 'Add' - 'H to non-AA residue' - 'Use frame data'
メニューを実行してfk506分子に水素原子を付加する。
(Frameデータは、PDBのftpサイトから自動的にダウンロードされる)

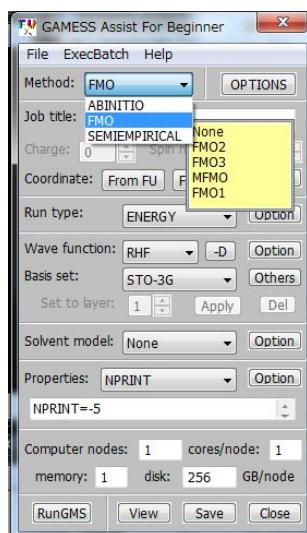


5. 原子の無い位置で左ダブルクリックして選択を解除する

6. 'FMO' - 'Fragmentation(auto)' - 'AA Residue/1res'
メニューを実行してポリペプチドを 1残基/1フラグメントに分割する。この例ではリガンドは分割しない。



7. 'Add-on' - 'gamess-user.py' メニューを実行して
"GAMESS Assist For Beginner" パネルを開く



8. "Method"などを選択して、パネルの下方にある
"Save"ボタンを押すと、 FMO計算の入力データファイル
が作成される。

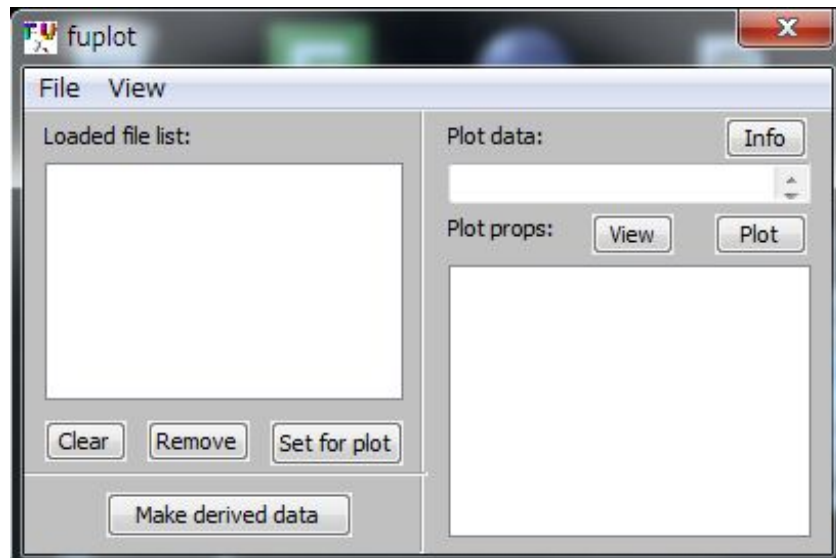
9. "RunGMS"ボタンを押して、GAMESS計算を行う。

fuplot の使い方の概要

(詳しくは、[fuplotスクリプトの使い方]参照)

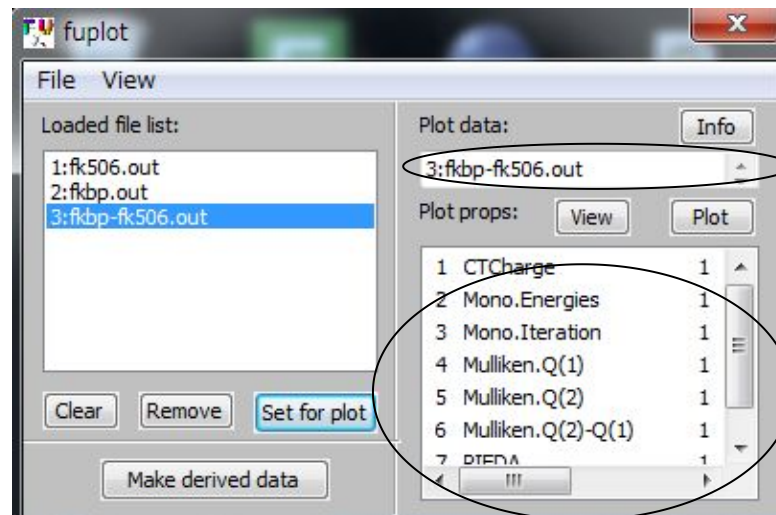
このプログラムはGAMESSのアウトプットを読み込んでグラフにする。

1. fumodelのメニュー” Add-on”-”fuplot.py”を実行する



- ・左側:読み込んだfileの表示とplotするファイルの選択
- ・右側:plotに選択されたファイルから読み取ったpropertyの表示・選択とplotの実行

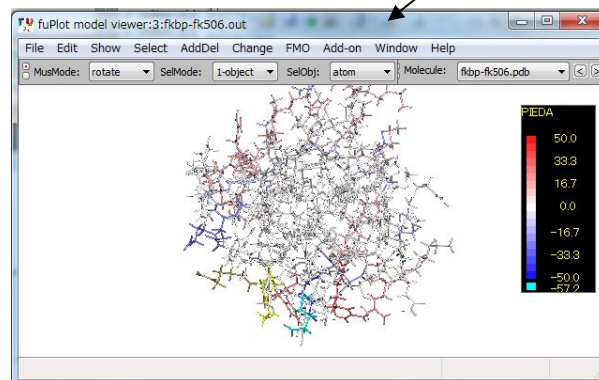
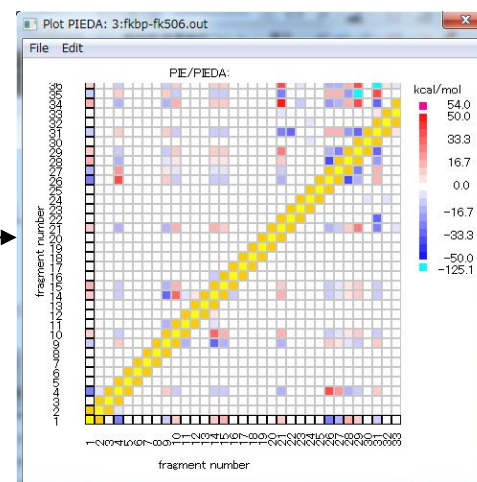
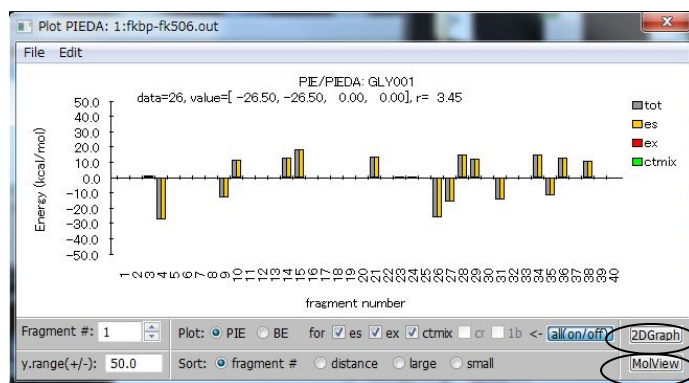
2. 'File' - 'Open output file' メニューを実行する。
3. "Set for plot" ボタンを押す



選択されたファイル
(データ)

Plotできるpropertyの
リスト

4. “PIEDA”を選んで“Plot”ボタンを押すと “Plot PIEDA”
パネル（PIEDAを選択した場合）が開く。“Plot PIEDA”
パネルの右下にある“2DGraph”ボタンを押すと2Dグラフ、
“MolView”ボタンを押すとfumodelのメインウィンドウに
PIEDA値（tot）がカラースケールで表示される。



FMO計算実習内容

(実習で用いるデータファイルは"FMOfutorial-25May2015"ディレクトリにある)

配布のFMOチュートリアルテキストに従って、次の計算実習を行う。

1. FMO-RHF/STO-3Gの1点計算
2. FMO-DFT/STO-3Gの1点計算
3. FMO-MP2/STO-3Gの1点計算
4. FMO-RHF/STO-3Gでの構造最適化計算
5. FMO-RHF-D/STO-3Gの構造最適化計算
6. RHF/STO-3G(ab initio MO)の1点計算
7. FMO-RHF/PCM/STO-3G計算
8. 水和モデルの作成とマルチレーヤFMO計算