

弾性ネットワークモデルによる基準振動解析ソフト PDBETA の使い方

早稲田大学 輪湖 博

I. 弾性ネットワークモデルによる基準振動解析

1. 基準振動解析法

エネルギー極小構造のまわりのポテンシャル面を多次元の放物面で近似できるとしたとき、その系の揺らぎは、さまざまな周波数の単振動モードに分解できる。そして現実の揺らぎは、それら振動モードの重ね合わせとして近似できるとして解析する手法。

2. 計算方法

①**独立変数**： 化学結合のまわりの回転角（二面角）。

共有結合長、結合角を固定して扱う。そのため、芳香環など環状構造は原則的に剛体として扱う。例外として、S-S 結合や核酸の糖環の 1 つの共有結合は非共有結合とみなし（ただし、結合長、結合角が標準値になるよう制約を課している）、変形できるようにしている。

②**ポテンシャル形**：

弾性ネットワークモデルでは、原子の種類に関係なく、すべて同じ関数形、同じパラメータ値

を用いる。 $K \exp\left(-\frac{(d_{ij}^{PDB})^2}{a^2}\right)(d_{ij} - d_{ij}^{PDB})^2$ d_{ij} は原子 i と j の距離（変数）で、 d_{ij}^{PDB} が

PDB データの立体構造での距離。バネ定数にあたる係数は距離の増大とともに減衰する。 K 、 a は適当に決めた定数。PDBETA では、利用者が、 K 、 a の値を自由に設定できる。

③**エネルギー極小化**：

正統な基準振動解析では、PDB の立体構造に対してエネルギー極小化を行うことが必要であるが、弾性ネットワークモデルでは PDB の立体構造が上記ポテンシャル関数の極小値となっているので、必要ない。この点が、計算の高速化に大きく寄与している。

3. 得られる情報

時間平均 (EXCEL 等で結果を読み込んでグラフ化する)

- ・ 原子の揺らぎの大きさ。
- ・ 2 つの原子の揺らぎの相関。
- ・ 二面角の揺らぎの大きさ。
- ・ 2 つの二面角の揺らぎの相関。

各モードについて

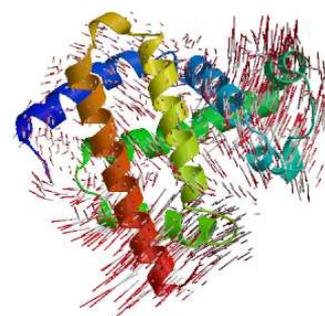
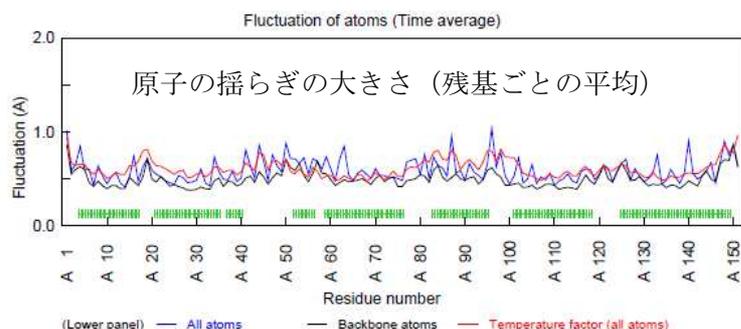
- ・ 原子の変位ベクトル。
- ・ 2 つの原子の変位ベクトルの内積。

- ・二面角の揺らぎ。

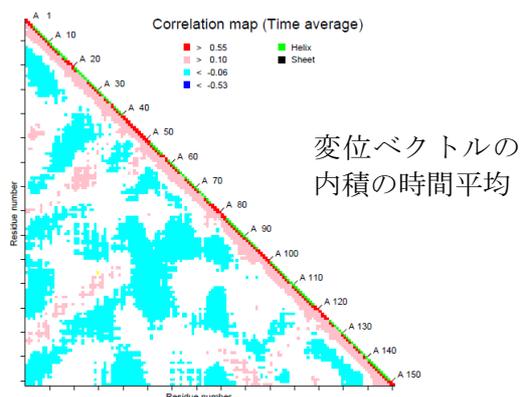
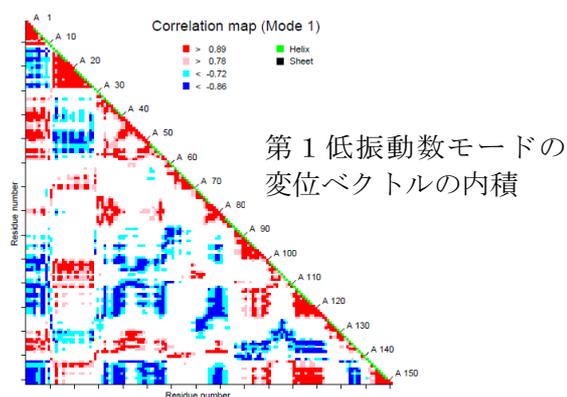
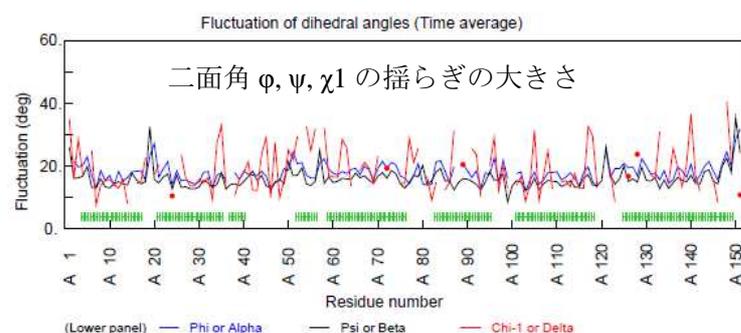
立体構造ビューワー jV、Jmol を使って揺らぎを見る。

- ・原子の揺らぎのアニメーション
- ・原子の変位ベクトル図

【例】 1a6m myoglobin



第2低振動数モードの変位ベクトル



4. 基準振動解析データベース ProMode-Elastic

- ・データベース ProMode-Elastic

http://promode.pdbj.org/promode_elastic/

- ・ソフト PDBETA (Windows 版のみ) のダウンロード

上記サイトの中のリンク [Download of software](#) へアクセスする。

II. 実習

0. 準備

0.1 弾性ネットワークモデルによる基準振動解析ソフト PDB η のダウンロード

ProMode-Elastic のトップページ (http://promode.pdbj.org/promode_elastic/; 日本語ページと英語ページがある) で

- ① ソフトウェアのダウンロード (あるいは [Download of Software](#)) をクリック
 - ② [受諾します](#) (あるいは [I agree to the above conditions](#)) ボタンをクリック
 - ③ Windows 用実行ファイル (Windows executable) [Window PDBETA v1.01](#) をクリックして、PDBETA-v1.01.zip を適当なフォルダーにダウンロードし、解凍する。
PDBETA-v1.01 というフォルダーができる。
 - ④ DSSP サイトへのリンク <http://swift.cmbi.ru.nl/gv/dssp/> へアクセスし、実行ファイル (DSSPCMBI.EXE) をダウンロードする (オプション)
<http://swift.cmbi.ru.nl/gv/dssp/> にアクセス
[Miscellaneous](#) ⇒ [Distribution](#) ⇒ [DSSP old](#) ⇒ [Windows executable](#)
- ③で出来たフォルダーPDBETA-v1.01/bin に DSSPCMBI.EXE を置く。

0.2 ビューワーjV のダウンロード

PDBj のトップページ (http://www.pdbj.org/index_j.html) 左側のメニューから
サービス&ソフトウェア ⇒ jV: Graphic Viewer ⇒ ダウンロード・インストール
⇒ [バイナリファイル](#) をクリックして条件承諾確認のページへ。
○Accept をクリックした後、[next](#) をクリックして、ダウンロードページへ。
jV4.0 以上のどれかを適当なフォルダーにダウンロードして、解凍する。

0.3 PDB データのダウンロード

PDBj のトップページ (http://www.pdbj.org/index_j.html) 本文内の「検索」の窓に PDB のエントリーコードを入力する。

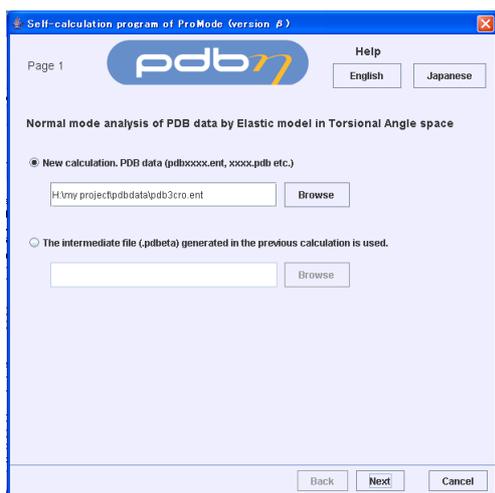
今回は、DNA を含む、比較的小さい系を例として用いる： [3CRO](#) と入力して[検索](#)ボタンをクリック。表の最初の行、[PDB ファイルのダウンロード](#)ボタンをクリックして PDB データを適当なフォルダーにダウンロードする。

1. PDBη の操作方法

1.0 アプリケーションの起動

(1) PDBETA-v1.01 にある PDBETA_W.jar(あるいはPDBETA_W.bat)をダブルクリックしてPDBηを起動する。 ⇒ Page 1 が表示される。

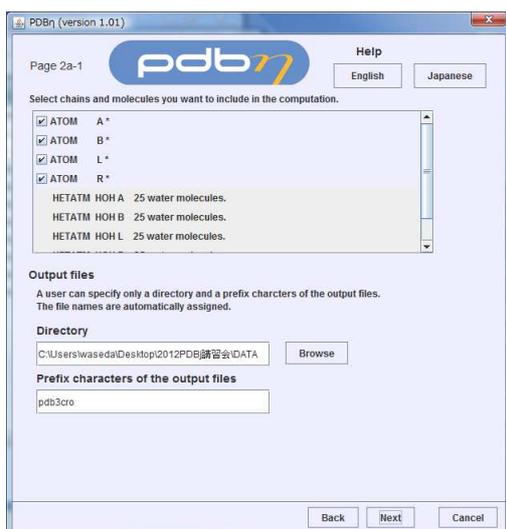
1.1 Page 1



- (1) PDB データ (新規計算)、あるいは中間ファイル (再計算) のファイル名の入力
- ① PDB データ (新規計算) を入力データとする場合
- 1) ○New calculation のラジオボタンを選択する。
 - 2) ファイル名を入力する。あるいは、**Browse** ボタンを押してファイルを選択する。
- ② 中間ファイル (再計算) の場合は○The intermediate file (.PDBeta) のラジオボタンを選択して、前回の計算で出力された中間ファイルの名前 (識別子.PDBeta) を入力する。

(2) Next ボタンをクリックして次のページへ (①の場合、Page 2a-1 へ。②の場合、Page 2b-1 へ進む)。本講習会では、②の場合は省略する。

1.2a-1 Page 2a- 1



- (1) 計算に取り入れる鎖の選択
- ① 計算に取り入れる鎖やヘテロ分子のチェックボックスをクリックして選択する。

デフォルトでは、PDB で ATOM のヘッダーをもつタンパク質、DNA、RNA が選択されている。鎖の途中に HETATM のヘッダーをもつ残基等が含まれる場合、デフォルトでは選択されていないので注意が必要である。

- (2) 出力ファイルの出力先ディレクトリーの入力

① ディレクトリー名を入力、あるいは **Browse** ボタンを押してディレクトリーを選択する。デフォルトは、

PDB データのあるディレクトリー。

- (3) ファイル名の接頭文字列の入力

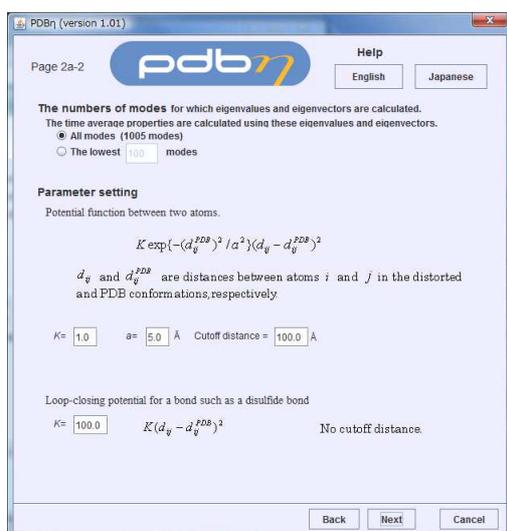
① 出力ファイルに付けるファイル名の接頭文字列を入力する (ファイル名として使用できる任意

の文字列)。すべての出力ファイル名はこの文字列から始まり、PDBη が定義する識別子が付けられる。デフォルトは、PDB データのファイル名。

(4) Next ボタンをクリックして次のページ (Page 2a-2) へ

*** PDB データを読み込み、分子構造記述データを構築します。しばらくお待ちください。***

1.2a-2 Page 2a-2



必要なパラメータを設定します。

しかし、ここではデフォルト値をそのまま使うことにし、(3) へ進みます。

(1) 考慮するモード数の指定

① すべてのモードを考慮する場合 (デフォルト)、
○All modes のラジオボタンをクリックする。

() 内にモードの総数が表示される。

② 指定した数の最低振動モードだけで時間平均を求める場合 (計算時間の短縮となる)。

○The lowest modes のラジオボタンをクリックし、考慮するモード数をボックスに入力する。モード数のデフォルト値は、100。

(2) ポテンシャル関数に関わるパラメータ値の入力

本計算では以下のポテンシャル関数が使われている。

$$K \exp\left(-\frac{(d_{ij}^{PDB})^2}{a^2}\right)(d_{ij} - d_{ij}^{PDB})^2$$

① K 、 a 、カットオフ距離の値を入力する。カットオフ距離を指定すると、 d_{ij}^{PDB} の値がその値より大きい原子ペア i, j に対してはポテンシャルを計算しない。

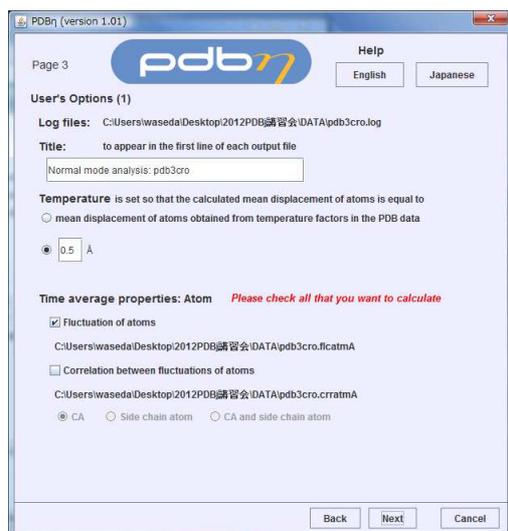
デフォルトは、 $K=1.0$ 、 $a=5.0 \text{ \AA}$ 、カットオフ距離 = 100.0 \AA 。

② S-S 結合に対する K を設定する。ただし、ポテンシャル関数は $K(d_{ij} - d_{ij}^{PDB})^2$ 。

K の値を入力する。デフォルトは、 $K=100.0$

(3) Next ボタンをクリックして次のページ (Page 3) へ

1.3 Page 3



デフォルトを使うこととし、(4)に進む。

(1) 各出力ファイルの冒頭に出力する表題の入力

① 表題を入力。任意の文字列。

(2) 温度を設定する

といっても、弾性ネットワークモデルでは温度が設定できないので、基準振動の振幅を設定する。次の①あるいは②のどちらか一方のラジオボタンをクリックして選択する。デフォルトは②。

① PDB データの温度因子から得られる全原子の揺らぎの平均と、基準振動解析計算で得られた全原子の揺らぎの平均が一致するように温度（振幅）を設定する。両者を比較するには都合がよいが、一般に非常に大きな振幅となる。

② 基準振動解析計算で得られた全原子の揺らぎの平均値を指定する。ただし、0.0 が入力された場合、①と同じとなる。ラジオボタンをクリックし、平均値を入力する。デフォルトは 0.5 Å。

(3) 計算する物理量に関するオプション (1)

① 原子揺らぎの時間平均。 Fluctuation of atoms

原子揺らぎの時間平均を計算したい場合、チェックボックスをクリックする。

② 原子揺らぎの相関の時間平均。 Correlation between fluctuations of atoms

原子揺らぎの相関の時間平均を計算したい場合、チェックボックスをクリックする。

このとき、相関を計算したい原子の種類を指定する（すべての原子ペアを考慮すると、膨大な数となるため）。次の3つの中から一つを、ラジオボタンをクリックして選択する。デフォルトは CA。

CA	Cα 原子
Side chain atom	側鎖の代表原子
CA and side chain atom	Cα 原子および側鎖の代表原子

(4) Next ボタンをクリックして次のページ (Page 4) へ

1.4 Page 4



デフォルトを使うこととし、(2)に進む。

(1) 計算する物理量に関するオプション (2)

① 二面角揺らぎの時間平均。

二面角揺らぎの時間平均を計算したい場合、
 Fluctuation of dihedral angles のチェックボックスをクリックする。

② 二面角揺らぎの相関の時間平均。

二面角揺らぎの相関の時間平均を計算したい場合、
 Correlation between fluctuations of dihedral angles のチェ

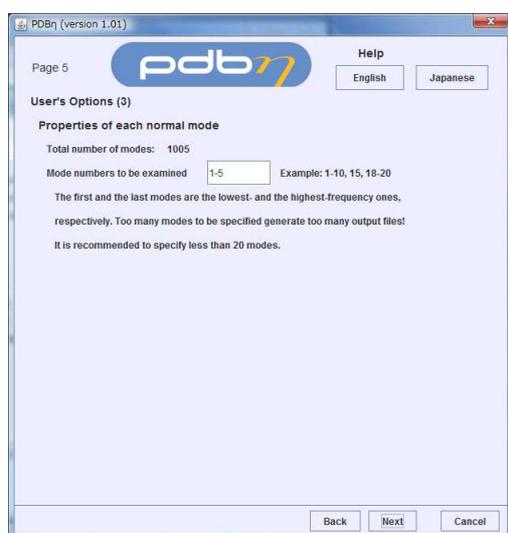
ックボックスをクリックする。

このとき、相関を計算したい二面角の種類を指定する (すべての二面角ペアを考慮すると、膨大な数となるため)。次の4つの中から一つを、ラジオボタンをクリックして選択する。デフォルトは Psi。

Psi	主鎖二面角 ϕ
Side chain dihedral angle	側鎖の代表二面角
Psi and Phi	主鎖二面角 ϕ と ϕ
Psi and side chain dihedral angle	主鎖二面角 ϕ および側鎖の代表二面角

(2) Next ボタンをクリックして次のページ (Page 5) へ

1.5 Page 5



デフォルトを使うこととし、(2)に進む。

(1) 計算する物理量に関するオプション (3)

個々の基準振動モードに対する計算に関するオプション。

① 物理量を計算するモード番号の指定。

物理量を計算するモード番号を入力する。参考として、モード総数が表示される。

あまり大きな値を入れると、計算時間がかかるだけでなく、膨大な量のデータが出力されるので注意が必要である。デフォルトは、1-5。

(2) Next ボタンをクリックして次のページ (Page 6) へ

1.6 Page 6



デフォルトを使うこととし、(2)に進む。

(1) 計算する物理量に関するオプション (4)

計算したい物理量をクリックして選択する。

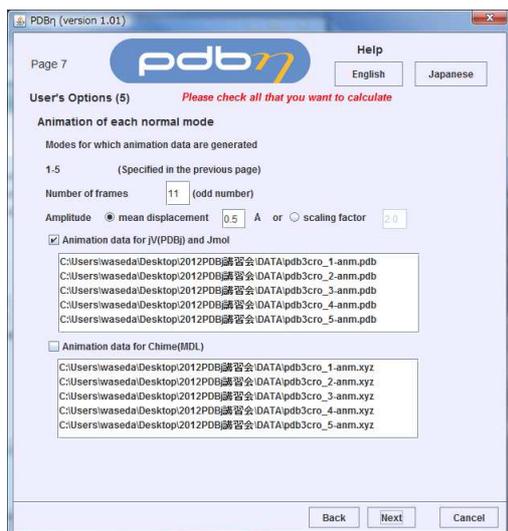
- ① 原子の揺らぎ Fluctuation of atoms
- ② 二面角の揺らぎ Fluctuation of dihedral angles

それぞれ、ボックス内に出力ファイル名が表示される。

(2) Next ボタンをクリックして次のページ (Page 7)

へ

1.7 Page 7



デフォルトを使うこととし、(2)に進む。

(1) アニメーションに関するオプション

① アニメーションに関するパラメータの入力。

1) アニメーションのフレーム数を入力する。

デフォルトは、11。

2) アニメーションにおける振動の振幅を指定する。

揺らぎの平均値(デフォルトで、0.5Å)、あるいは計算値に対する倍率で指定する。

Page 3 で指定した振幅では、アニメーションにした場合、動きが小さくてよくわからないことがある。そこ

で、動きを少し誇張してわかりやすくしたい場合、振幅を大きく設定する。

② アニメーションを表示するソフトの選択

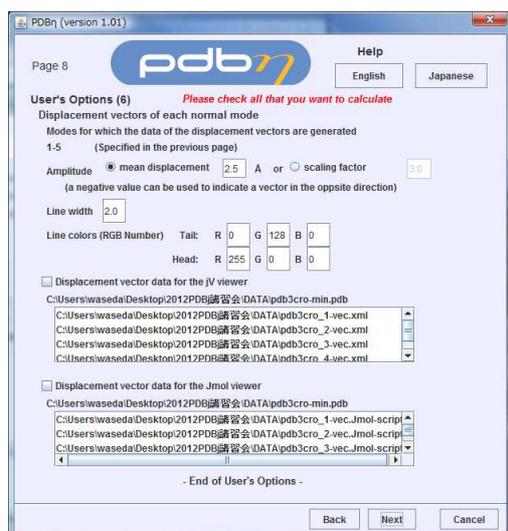
1) jV(PDBj) あるいは Jmol の場合は、 Animation data for jV(PDBj) and Jmol を選択。

2) Chime の場合は、 Animation data for Chime(MDL)を選択。

それぞれ、ボックス内に出力ファイル名が表示される。

(2) Next ボタンをクリックして次のページ (Page 8) へ

1.8 Page 8



デフォルトを使うこととし、(2)に進む。

(1) jV(PDBj)あるいはJmolで表示する変位ベクトルに関するオプション

① 変位ベクトルの倍率

変位ベクトルの平均値(デフォルトで、2.5Å)、あるいは計算値に対する倍率で指定する。

Page 3 で指定した振幅では、長さが短くてよくわからないことがある。そこで、少し誇張してわかりやすい長さに設定する。

なお、負の値を入力すると、変位ベクトルは逆向きとなる。

② 描画する変位ベクトルの線の太さを入力する。デフォルトは、2.0。

③ 描画する変位ベクトルの線の色を RGB の値で指定する。

ベクトルの根元部分と先端部分で色を変えることができる。(変位ベクトルは、矢印ではなく、単に線分で表示しているので、その向きを色で区別している)。デフォルトは、根元部分 R = 0、G = 128、B = 0、先端部分 R = 255、G = 0、B = 0

④ jV(PDBj)で表示する変位ベクトル用のデータを出力したい場合、Displacement vector data for the jV viewer のチェックボックスを、Jmol用のデータを出力したい場合、Displacement vector data for the Jmol viewer のチェックボックスをクリックして選択する。

(2) Next ボタンをクリックして次のページ (Page 9) へ

1.9 Page 9



(1) 計算の実行。

Execute ボタンをクリックする。

表示が更新され、計算の途中経過がボックスに表示される。計算が終了すると、次のページ (Page 10) へと進む。

エラーが発生した場合は、その旨表示される。

計算実行中!! しばらくお待ちください。

1.10 Page 10



(1) アプリケーションの終了。

Finish ボタンをクリックし、ジョブを終了する。

2. 出力ファイル

ファイル内部の書式等、詳細はPDBetaのHelpをご覧ください。

以下のxxxxはPDBetaでユーザーが指定した接頭文字列を表します。

⇒ EXCELとあるのは、EXCELなどで読み込み、グラフとして表示してください。

xxxx.flcatmA	原子のゆらぎ	⇒ EXCEL
xxxx.crratmA	原子のゆらぎの相関	⇒ EXCEL
xxxx.flcangA	二面角のゆらぎ	⇒ EXCEL
xxxx.crrangA	二面角のゆらぎの相関	⇒ EXCEL
xxxx_n.flcatmE	第n番目のモードに対する原子のゆらぎ	⇒ EXCEL
xxxx_n.flcangE	第n番目のモードに対する二面角のゆらぎ	⇒ EXCEL
xxxx_n-anm.pdb	第n番目のモードに対するjVおよびJmol用のアニメーション・データ	
xxxx_n-anm.xyz	第n番目のモードに対するChime用のアニメーション・データ	
xxxx_n-vec.xml	第n番目のモードに対する変位ベクトル図用データ (jV用)	
xxxx_n-vec.Jmol-script	第n番目のモードに対する変位ベクトル図用データ (Jmol用)	

以下は計算に関する情報データで、通常は関係ない

xxxx-min.pdb	計算した鎖、分子だけを含むPDBデータ
xxxx.log	基準振動計算のログ
xxxx_mol.log	PDBデータから分子構造記述データを作成したときのログ
xxxx-note.txt	設定したパラメータ、オプションなどの記録
xxxx.pdbeta	再計算用の中間ファイル (バイナリーファイル)
xxxx.mol	PDBデータから作成した分子構造記述データ
xxxx.dssp	DSSP (二次構造の同定) の出力結果 (DSSPを組み込んでいる場合のみ)

3. 結果のjVでの表示

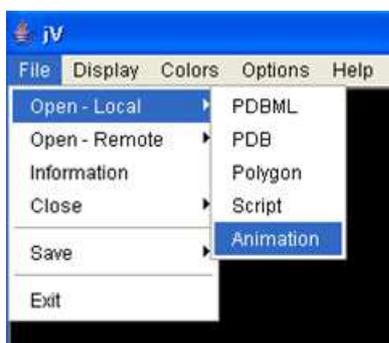
ダウンロードした jV を起動する (jv4_0_signed.jar をダブルクリック)。

3.1 アニメーション

モード番号 n の基準振動の jV 用のアニメーション・データ xxxx_n-anm.pdb を使う。jmol でも使うことができる。xxxx_n-anm.pdb には PDB データと同じ様式で、アニメーションのフレーム数 n_f に相当するだけの立体構造データがそれぞれ、MODEL 行と ENDMDL 行に挟まれて出力されている。

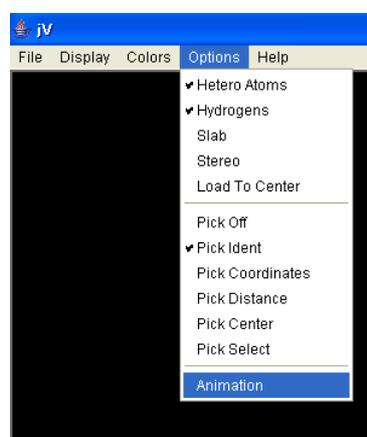
① xxxx_n-anm.pdb ファイルを読み込む。

[File] → [Open-Local] → [Animation]



② アニメーションをスタートさせる。

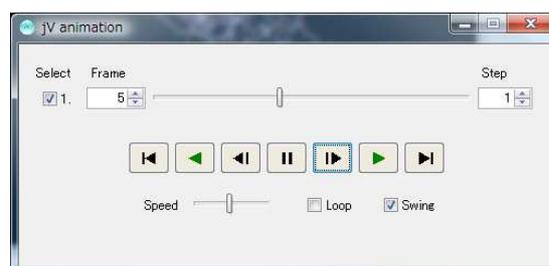
[Options] → [Animation]



③ アニメーションの操作パネルが現れるので、

swing にチェックを入れ、再生ボタン▶をクリックする。

swing にチェックを入れることで、データ内の立体構造が 1, 2, ..., n_f-1 , n_f , n_f-1 , ..., 2, 1 の順に表示され、これが繰り返される。ここで n_f は、データ内に含まれる立体構造の総数である。



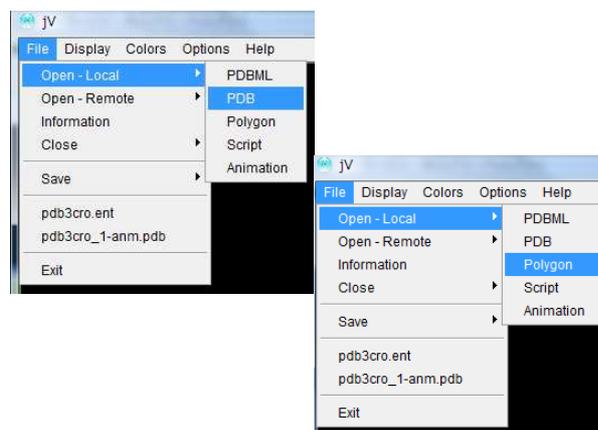
3.2 変位ベクトルを描画する

① jV を起動し、対応する PDB データを読み込む。

[File] → [Open-Local] → [PDB]

② 変位ベクトル描画用ファイル xxxx_n-vec.xml を読み込む。

[File] → [Open-Local] → [Polygon]



②の操作を繰り返して、複数のモードの変位ベクトル描画用ファイルを読み込むことができる。複数のモードの変位ベクトルを読み込んだ場合、モードごとに表示・非表示を後から指定できる。

(注意) PDB データの構造と変位ベクトルとは同じ座標系になくてはならない。①、②の操作中、画面に表示された構造や変位ベクトルに対して、回転、並進、拡大・縮小といった操作をすると、両者の構造間にずれが生じる。ちょっとしたマウス操作で、思いもかけずこうした操作を行ってしまうことがあるので注意する必要がある。

jV の使い方

マウスの基本操作

X 軸 (左右方向軸)、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、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

メニュー操作

File Display Colors Options Help

コマンド操作

select コマンドで一群の原子を選択し、選択した原子群に操作を加える、のが基本操作。

select 原子表現

原子表現： 基本表現は [残基 ID][:鎖 ID][.原子名] あるいは グループ名
論理値演算子である 'and'、'or'、'not'、そして括弧を使った表現ができる。

例： select 10-20,25-35 残基番号 10-20、25-35 の原子
 select *:A and mainchain A 鎖の主鎖原子すべて
 select *.CA and not PRO PRO を除くすべてのアミノ酸残基の C α 原子
 select (helix,sheet) and hydrophobic α -helix あるいは β -sheet に含まれる疎水性残基の原子

グループ名には、アミノ酸名 (ALA, GLY など)、アミノ酸の属性 (hydrophobic, polar, small など)、二次構造 (helix, sheet, turn など)、分子の種類 (protein, DNA, RNA, water, hetero など) がある。また、PDB データ内の原子の通し番号、MODEL-ENDMDL に対するモデル番号などを使って、atomno=342 とか、model=2 というような指定もすることができる。

select を宣言した後、さまざまな操作を指示する。

メニューの Display で分子の表示方法を指定する。コマンドでの指定もできる。

メニューの Colors で色を指定する。あるいは color コマンドで色を指定する。

color コマンドの例： color green あるいは color [10,225,100] (RGB での指定)

displayatom on/off 選択した原子群の表示/非表示 も便利なコマンドである。

詳しくは、PDBj のマニュアル http://www.pdbj.org/jv/manual/index_ja.html を参照。