作成：2017 年 12 月 27 日
改定：2023 年 08 月 31 日

YASARA　分子動力学計算チュートリアル

（株）アフィニティサイエンス

概要：YASARA Structure(Version 23.5.19)による分子動力学計算（Molecular Dynamics simulation）をチュートリアル形式で説明する。本チュートリアルでは、アルツハイマー病の発症に関与すると考えられるアミロイドβタンパクの産生および凝集性を決定する酵素β-site APP cleaving enzyme 1（BACE1）の複合体構造（PDB ID:5I3V）を用いる。

1. はじめに

本チュートリアルでは、ソフトウェア付属の基本的な MD 計算・解析用マクロファイルを利用する方法について紹介する。

1.1 ハードウェア性能の確認（任意）

YASARA での分子動力学計算（MD 計算）を行うにあたり使用マシンの計算速度を知りたい場合、マクロを用いてハードウェア性能を確認することができる。

「Option」→「Macro&Muvie」→「Play macro」から「md_runbenchmark.mcr」を実行する。表示される画面から、左側の DHFR（dihydrofolate reductase、ジヒドロ葉酸還元酵素）のの構造を選択する（右側のウイルス（STMV）の構造は高速システム向け)。するとシミュレーション計算が行われ、画面に結果が表示される。

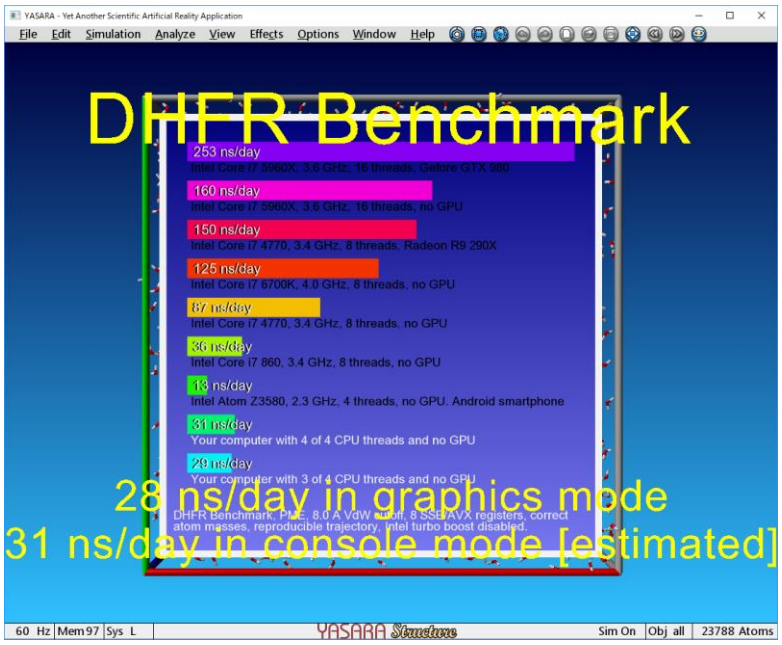

figure 1-1 md_runbenchmark.mcr 実行結果

棒グラフの上から 7 つ（黒字部分）は参考データとなっており、その下の「Your computer with～」と記載されている部分にシミュレーションの結果が表示される。ベンチマークの指標として、1 日あたりに実行可能なシミュレーション時間（単位：ns/day）が出力される。確認ができたら、YASARA（GUI）の画面を一度閉じて次の操作に進む。

2. 準備

2.1 作業ディレクトリの作成と YASARA（GUI）の起動

ドッキングを実施するにあたり入出力ファイルを格納するディレクトリ（フォルダ）を新規に作成する（Windows ではエクスプローラ、Linux では mkdir コマンド等を使用）。作成場所やファイル名は任意で問題ないが、YASARA 上で表示が乱れるため、日本語を含まない方が好ましい。

例

(Windows)　C:¥Users¥username¥Desktop¥YASARA_DATA¥tuto_md

(Linux)　/home/username/YASARA_DATA/tuto_md

その後、YASARA（GUI）を起動する。

「Options」→「Working directory」を選択し、先ほど作成したディレクトリを指定し作業ディレクトリを設定する。

（ここで設定したディレクトリはカレントディレクトリとなる。）

2.2 PDB ダウンロードと構造表示

「File」→「Load」→「PDB file from Internet」を選択し、「5I3V」を入力、OK ボタンをクリックして PDB ファイルをダウンロードすると、画面上にタンパク 3D 構造が表示される。

※インターネット未接続の場合、PDB ファイルを別途入手し、「File」→「Load」→「PDB file」等から構造を読み込む。

「View」→「Style scene」またはファンクションキーで分子の表示方法を変えることができる。本チュートリアルでは、「Ribbon」（F6 キー）に設定している。

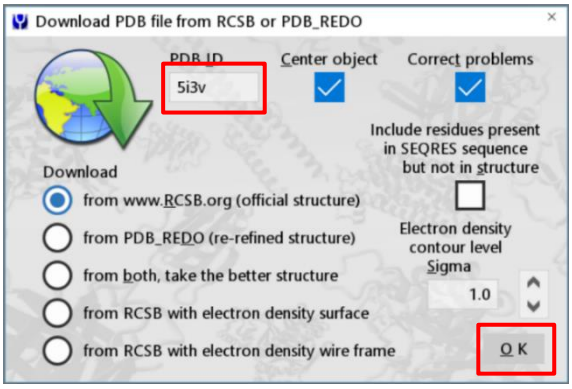

figure 2-1　PDF ファイルのダウンロード

2.3 前処理（不要分子削除・分子名変更）

不要分子削除

メニュー「Edit」→「Delete」→「Molecule」を選択し、計算の妨げとなる不要な分子などを取り除く。

選択画面が表示されるので、Sequence リストの 1 番目（酵素）と 3 番目（リガンド分子）の分子を残し、その他の不要分子を選択して OK をクリックする。（Ctrl キー＋クリックで複数選択が可能）

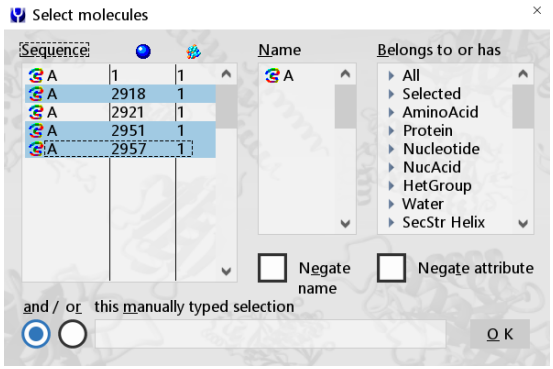

figure 2-2　Delete の実行

または、画面右側 HUD から Molecule を個別に右クリックして「Delete」を実行するなどして不要分子を削除してもよい。

分子名変更

画面右側 HUD の Name 列「5i3v」をクリックすると、その下に構成分子（Molecule）がリスト表示される。Molecule 名("Mol"に続く部分)がデフォルトではすべて"A"になっているため、それぞれの Molecule を右クリックして「Name」を選択し、重複しない名前に適宜変更する。本チュートリアルではレセプター（上の Mol A）に"R"、リガンド（下の Mol A）に"L"と設定した。名前はアルファベット 4 文字以内で変更可能（大文字・小文字別）。

※この操作は必須ではないが、重複がない分子名に変更しておいた方が、後ほど解析用のマクロを実行する際にリガンド分子を指定しやすくなる。

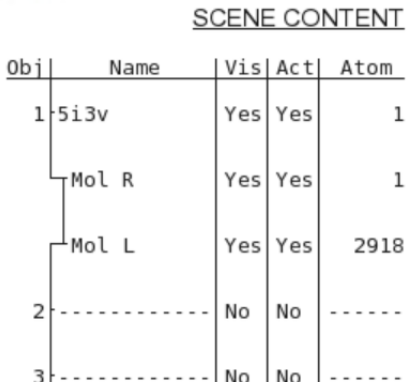

figure 2-3　Molecule 名の変更例

2.4 ファイルの保存

マクロを用いて MD 計算を行う場合に対応しているファイルは、PDB 形式、YASARA Object 形式、YASARA Scene 形式の 3 種類である。本チュートリアルでは PDB 形式で保存する。メニューの「File」→「Save as」から「PDB file」を選択し、オブジェクト「5i3v」をクリックして任意のファイル名で作業ディレクトリに保存する（例：YourStructure.pdb）。

【Tips】ファイル形式と SimCELL 設定

今回使用する分子のように単一の Object のみで構成されていて、かつ分子全体の計算を行いたい場合には、PDB または YASARA Object 形式が望ましい（マクロファイルにより構造全体に SimCell が自動設定される）。

一方、YASARA Scene 形式では複数の Object を保存できるため、リガンドとレセプターが別の Object の場合や、simulation cell（SimCELL）を自身で設定したい場合などに利用する。なお、YASARA Scene 形式ファイルを使用する場合は、自身で Clean 処理と SimCELL の設定を行った上で保存する必要がある（マクロファイルによる自動設定が行われないため）。

3. 実行

3.1 GUI からマクロを実行する方法

3.1.1 力場・計算条件等の設定

付属のマクロファイル（md_run.mcr）を編集することで、力場や計算条件を変更できる。簡単に変更できるパラメータには、pH、溶液中のイオンの組成と濃度（イオン強度）、温度、圧力制御、トラジェクトリのフォーマット、セルのサイズ・形状・境界、シミュレーション速度、シミュレーション時間、スナップショットの間隔、力場、particle-mesh Ewald 法の適用の有無、ファンデルワールス力のカットオフ値、溶質の拡散の扱いに関する設定がある。

*シミュレーション速度（slow, normal, fast）の詳細については 5.1. その他 MD 計算を行う際のヒント を参照。

付属のマクロファイルをそのまま使用してもよいが、ここではチュートリアル用に以下のパラメータを調整したマクロファイルを作成する。

・変更内容

①　シミュレーション時間→1 ns、②スピードモード→fast

1) マクロファイルの複製

インストールフォルダ内に保存されているマクロファイル md_run.mcr（インストールフォルダ> yasara > mcr > md_run.mcr）をコピーし、適当なフォルダ（作業ディレクトリなど）にペーストする。

2) マクロファイルの表示

複製したマクロファイルをテキストエディタで開く。（Windows であればメモ帳など）

「＃」で始まる行はコメントとなっており、処理は実行されない。マクロファイルの冒頭部分には概要が記載されている。その下の「=」行で挟まれている部分がパラメータセクションとなっているので、計算条件などを変更する場合はここの内容を書き換える。

3) 条件設定の変更

マクロファイル冒頭にあるパラメータセクション「# ==== ~」行の下の部分に次の 2 行を追記し、シミュレーション時間（単位：ps）とスピードモードを指定する。この設定では、1 ns、fast モードをそれぞれ指定している。

```
duration=1000
speed='fast'
```

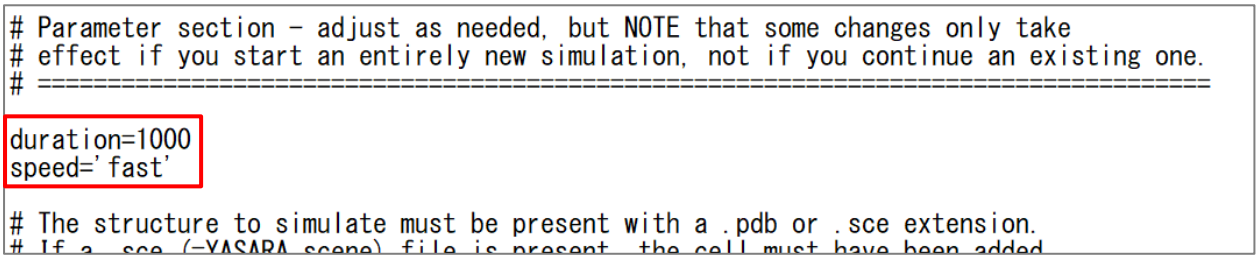

figure 3-1　マクロファイルの編集例

（パラメータセクション内では各項目で条件などを変更することができるが、シミュレーション時間（duration）とスピードモードに関しては、各項目よりも前に指定すればそちらが優先されるようになっているので、前半部分に追記するだけでよい。）

4) マクロファイルの保存

編集したファイルを上書き保存し、作業を終了する。（テキストファイルとして保存してしまった場合は、ファイル名を編集して拡張子を「.mcr」に変更すればよい。）

編集済マクロファイルはファイル名を変更しておくとよい。（例 md_run_tuto.mcr）

3.1.2 ターゲット設定

「Options」→「Macro&Movie」→「Set target」で、ターゲットを設定する。

作業ディレクトリから手順 2.4 で保存した構造ファイル（例：YourStructure.pdb）を選択し、右側の Remove…オプションの「file extension」にチェックを入れて拡張子を除外して指定する。

3.1.3 MD 計算実行

「Options」→「Macro&Muvie」→「Play macro」から手順 3.1.1 で保存したマクロファイル（例 md_run_tuto.mcr）を選んで「OK」をクリックすると、MD 計算が開始される。

構造の Clean 処理や力場の設定、水分子の発生などは自動的に行われる（自動的な水素の付加や原子の削除などを行いたくない場合には、residue 名を変更して試してみるとよい）。

デフォルトの設定でマクロを実行する場合、シミュレーション時間（duration）が決められていないため、「Simulation」→「Simulator」→「Pause in」で計算時間を指定するか、「Simulation」→「Simulator」→「Off」でシミュレーションを停止させるまでは計算を続ける。再開するにはもう一度マクロを実行させればよい。

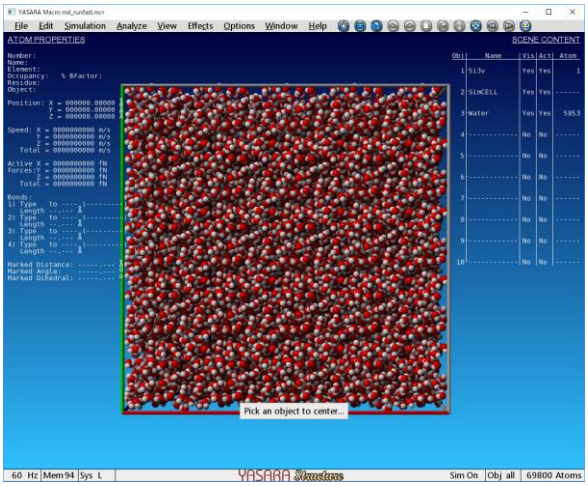

figure 3-1　MD 計算実行中画面

＜Ctrl＋I キー＞ を押すと画面右側の HUD（head up display）が切り替わり、「SIMULATION PARAMETERS」が表示される。ここからシミュレーション中の各種パラメータを確認することができる。

シミュレーションが終了して分子の動きが停止したら、手順 4 の解析へ進む。

3.2 コマンドラインからマクロを実行する方法

Windows であればコマンドプロンプト（Win キー+R キーでファイル名を指定して実行ダイアログを開き、名前に cmd を入力し OK ボタンをクリックすることで起動可）、Linux であればターミナルプログラム（gnome-terminal など）を開き、次の手順に従いコマンドを入力、Enter キーを押すことで実行することができる。ファイルの指定は相対パスでもよいため、作業ディレクトリ（カレントディレクトリ）に必要なファイルを保存しておけばそのパスを、また、環境変数 Path（Windows）または PATH（Linux）に YASARA 実行ファイルのディレクトリパスを追加すれば、そちらのパスもそれぞれ省略できる。

① YASARA インストールディレクトリ内の YASARA 実行ファイルを指定。
　スペースを空け、テキストモード用オプション（-txt）を指定。
② スペースを空け、先ほど編集したマクロファイルを指定。（付属のマクロを使用する場合は、YASARA インストールディレクトリ内の mcr ディレクトリに格納されているマクロを指定。）
③ スペースを空け、最後に MacroTarget を指定。
　（全体をダブルクォーテーション（"）で囲み、ターゲットをシングルクォーテーション（'）で囲む）。

実行例（絶対パス使用）

(Windows) C:¥Users¥username¥Desktop¥yasara¥YASARA.exe -txt
　　C:¥Users¥username¥Desktop¥YASARA_DATA¥tuto_md¥ md_run_tuto.mcr
　　"MacroTarget='C:¥Users¥username¥Desktop¥YASARA_DATA¥tuto_md¥YourStructure'"
(Linux)　/home/username/yasara/yasara -txt /home/username/YASARA_DATA/tuto_md /md_run_tuto.mcr
　　"MacroTarget='/home/username/YASARA_DATA/tuto_md/YourStructure'"

実行例（環境変数 Path/Path および相対パス使用）

(Windows) YASARA.exe -txt md_run_tuto.mcr "MacroTarget=' YourStructure'"
(Linux)　yasara -txt md_run_tuto.mcr "MacroTarget=' YourStructure'"

実行例（環境変数 Path/Path および相対パス、付属マクロ（未改変）とコマンド引数による変数使用）

(Windows) YASARA.exe -txt md_run.mcr "MacroTarget='YourStructure'" "speed='fast'" "duration=1000"
(Linux)　yasara -txt md_run.mcr "MacroTarget='YourStructure'" "speed='fast'" "duration=1000"

4. マクロによる結果の解析

分子動力学計算用の主な解析用付属マクロファイルを紹介する。

※いずれのマクロもターゲット設定が必要なので、シミュレーション後に YASARA を起動し直した場合などは再度マクロターゲットを指定（手順 3.1.2. を参照）する。（シミュレーション終了後引き続き実行する場合は不要）

4.1 md_play.mcr

各スナップショットの構造を可視化できる。メニューから「Options」→「Play macro」を選択し、YASARA インストールディレクトリ> mcr 内に保存されている「md_play.mcr」を選択して実行する。

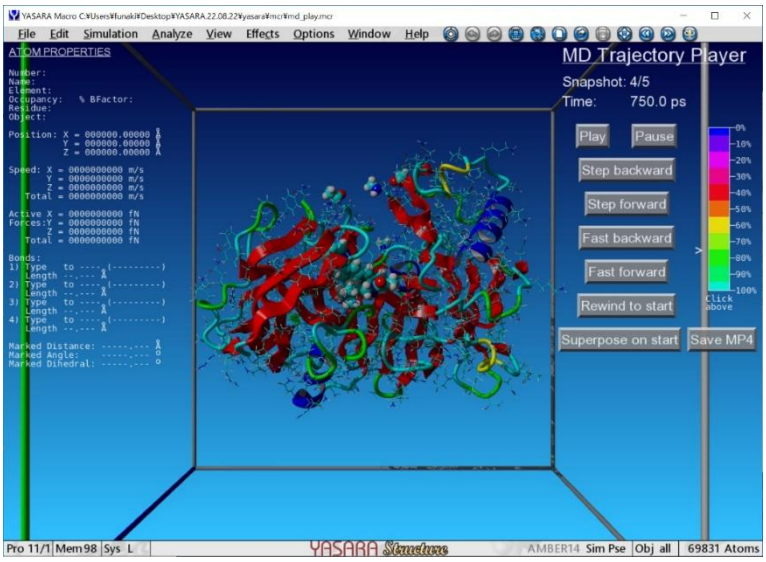

figure 4-1　md_play.mcr 実行画面

マクロを実行すると、スナップショットの構造が連側的に表示される。画面右側のボタンを操作し、スナップショットを進めたり戻したりすることができる。一番下にある「superpose on start」ボタンを押すと、構造の重ね合わせを行うことができる。

4.2 md_analyze.mcr

基本的な解析用マクロファイル。実行すると詳細な解析レポートが出力される。本チュートリアルで使用したようなタンパク質―リガンド複合体などの場合は、マクロ内でリガンドを指定することができ、解析に反映される。リガンドの設定方法は以下の通り。

1) マクロファイルの複製

インストールフォルダ内に保存されているマクロファイル md_analyze.mcr（インストールフォルダ> yasara > mcr > md_run.mcr）をコピーし、適当なフォルダ（作業ディレクトリなど）にペーストする。

2) マクロファイルの表示

複製したマクロファイルをテキストエディタで開く。（Windows であればメモ帳など）

「#」で始まる行はコメントとなっており、処理は実行されない。マクロファイルの冒頭部分には概要が記載されている。その下の「=」行で挟まれている部分がパラメータセクションとなっているので、ここの内容を変更する。

3) リガンドの指定

「# Ligand atom selection for RMSD analysis」と記載されている部分に入力例などが記されている。その下の行、デフォルトでは「ligandsel=''」となっている部分にリガンドを指定する。本チュートリアルではリガンド分子名が「Mol L」（手順 2.3. にて変更済）なので、「ligandsel='Mol L'」に書き換える。

```
# Ligand atom selection for RMSD analysis
ligandsel='Mol L'                    # Default: Identify the ligand automatically
#ligandsel='Res ATP 501 Mol A' # Example: Select residue ATP 501 in molecule A as ligand
#ligandsel='Atom Zn'           # Example: Select Zinc ion as ligand
# Select solute residues as ligand to analyze e.g. protein domain movement or protein-prote
#ligandsel='Mol A'             # Example: Select protein Mol A of an oligomeric solute as l
#ligandsel='Res 1-50'          # Example: Select solute protein residue 1 to 50 as ligand
```

4) マクロファイルの保存

編集したファイルを上書き保存し、作業を終了する。(テキストファイルとして保存してしまった場合は、ファイル名を編集して拡張子を「.mcr」に変更すればよい。)

ファイル名を適宜変更しておく（任意)。(例 md_analyze_tuto.mcr)

マクロファイルの準備ができたら、メニューから「Options」→「Macro & Movie」→「Play macro」をクリックし、上記の編集済みマクロファイル（例 md_analyze_tuto.mcr）を選択して実行する。手順 4.1. 実行後で Play macro が選択できない場合は、「Options」→「Macro & Movie」→「Stop」を選択して実行中のマクロを停止してから実行する。

解析が終了すると、ウェブブラウザに HTML 形式の解析レポート（(MacroTarget)_report.html）が表示される。レポートの内容は以下の通り。

項目名	内容
1. About the simulation	シミュレーションの条件、作業ディレクトリなどの基本情報
2. Analyses inside the simulation cell	シミュレーションセル内部の解析内容 平均溶質構造、溶質エネルギー最小構造等
3. Analyses outside the simulation	シミュレーションセル外部の解析内容 溶質の回転半径等
4. Analyses performed with respect to the starting structure	初期構造からの平均二乗偏差（RMSD）
5. Solute residue RMSF	各アミノ酸残基の初期構造からの変動（平均 RMSF）
6. Dynamic Cross-Correlation Matrix	動的相関行列の説明
7. Additional files	作成ファイルの説明

他に、作業ディレクトリに以下のファイルが作成される。なお、HTML 形式のレポート内やユーザーマニュアルの以下のページから各ファイルの詳細を確認できる。

（Recipes - Perform complex tasks ＞ Run a molecular dynamics simulation ＞ Analyzing a trajectory）

・出力ファイル一覧

ファイル名	内容
(MacroTarget)_report.html	ウェブブラウザで表示される HTML 形式の解析レポート
(MacroTarget)_analysis.tab	全ての解析結果の一覧表
(MacroTarget).sce	開始時の溶質とシミュレーションセルを含む構造ファイル
(MacroTarget)_water.sce	開始時の水を含めた全オブジェクトを含む構造ファイル
(MacroTarget)_last.pdb	終了時の溶質の構造ファイル
(MacroTarget)_last.sce	終了時の全オブジェクトを含む構造ファイル
(MacroTarget)_average.pdb	時間平均構造ファイル
(MacroTarget)_energymin.pdb	溶質のエネルギー最小構造ファイル
(MacroTarget)_energymin.sce	溶媒を含む溶質のエネルギー最小構造ファイル
(MacroTarget)_rmsf.tab	各原子の RMSF 一覧表
(MacroTarget)_rmsfres.tab	各残基の RMSF 一覧表
(MacroTarget)_dccm.tab	動的関数行列の表
(MacroTarget)_dccm.sce	動的関数行列を可視化したファイル
(MacroTarget)_dccm.yob	動的関数行列に基づき相関を表示した構造ファイル
(MacroTarget)_plotres_secstr(MolX).tab	タンパク質の二次構造の時間推移を残基ごとに示した表
(MacroTarget)_plotres_con(MolX).tab	タンパク質の各残基の接触数の時間推移を示した表
(MacroTarget)_plotres_ligresint(MolX).tab	タンパク質の各残基とリガンドとの相互作用の時間推移を示した表
(MacroTarget)_plotatom_ligatomint(MolX).tab	リガンドの各原子とタンパク質との相互作用の時間推移を示した表

4.3 md_analyzebindenergy.mcr

シミュレーション中のリガンドの結合エネルギーを解析できる。デフォルトでは Obj1 がレセプター、Obj2 がリガンドとして設定されているので、これと異なる場合はマクロファイルを書き換える必要がある。本チュートリアルで使用した構造は、Obj1 内にレセプター分子（Mol R）とリガンド分子（Mol L）が存在している状態なので、この内容に変更する。設定方法は以下の通り。

1) 2) マクロファイルの複製・表示

上記（手順 4.2.）と同様の手順でマクロファイル（md_analyzebindenergy.mcr）を複製して開く。

3) レセプター・リガンドの指定

「# Set the object numbers of receptor and ligand for binding energy calculation.」から始まるブロックの入力内容を書き換える。まず、本チュートリアルで使用した構造ではリガンドは Obj1 に属するので、「ligobj=2」の記載を「ligobj=1」に変更する。今回のようにレセプターとリガンドが同一オブジェクト内に存在する場合は、さらに「ligres=''」部分にリガンドの残基名や分子名などを入力して指定する。今回はリガンド分子名を指定して「ligres='Mol L'」に書き換える。（残基名などで指定してもよい。詳細はマクロ内に記載されている入力例を参照。）

```
# Set the object numbers of receptor and ligand for binding energy calculation.
# If the ligand is not in a separate object, set ligobj also to 1 and specify
# the ligand residue with 'ligres' further below:
recobj=1
ligobj=1
# If the ligand is part of the receptor object, specify its residue ID(s),
# e.g. ligres='ATP 301' for a single residue ATP, ligres='ATP 301 Mol A' if the ligand ATP 301 is
# present multiple times in an oligomer to choose only the one in molecule A, or
# ligres='Thr 32-Ala 35' for a peptide, or ligres='Mol C' if the ligand has a unique molecule name C.
ligres='Mol L'
```

4) マクロファイルの保存

上記（手順 4.2.）を参照。

マクロファイルの準備ができたら、メニューから「Options」→「Macro & Movie」→「Play macro」をクリックし、上記の編集済みマクロファイルを選択して実行する。解析が終了すると、作業ディレクトリ内に結果ファイル「(MacroTarget)_bindenergy.tab」が作成され、結合エネルギーの推移や平均値などを確認できる。

※md_run.mcr 実行後、続けて GUI から md_analyzebindenergy.mcr を実行する場合、MD 計算実行時の Pressure control の設定が優先され、「Not enough HOH solvent molecules～」というエラーが発生する場合がある。この場合、メニューから「Simulation」→「Pressure control」→「Disable pressure control」を選択して圧力設定を無効にし、再度実行する。

5. 補足

5.1 その他 MD 計算を行う際のヒント

➢ シミュレーション速度モード（slow、normal、fast）の違いについて

YASARA 付属の MD 計算用マクロファイル（md_run.mcr）では、シミュレーション速度モードを変数「speed」を用いて、「slow」、「normal」、「fast」の 3 段階から選択できる。各モードでスナップショットの保存間隔とタイムステップの設定値が異なる。また、「fast」の場合は、水素原子との結合長と結合角に制限がかけられる。

・シミュレーション速度モードとマクロ内変数

変数名	説明	**slow**	**normal**	**fast**
saveinterval	スナップショットの保存間隔（fs）	100000	100000	250000
tslist	タイムステップ	2,1.0	2,1.25	2,2.5

タイムステップ（MD 計算の時間刻み）は、マクロ内で YASARA のコマンド「TimeStep」により設定される。マクロ内部で変数「tslist」が用いられており、コマンド「TimeStep (tslist)」として処理される（例えば、シミュレーション速度を「normal」に設定した場合、デフォルトで「tslist=2,1.25」と設定されているため、コマンド「TimeStep 2,1.25」が実行され、タイムステップは 2*1.25 fs に設定される）。

タイムステップは、分子間力と分子内力の計算時間間隔を指定している。例えば、「2*1.25 fs timestep」の場合、分子内力は 1.25 fs ごと、分子間力は 2*1.25 = 2.5 fs（分子内力の倍数で指定）ごとに計算され、2.5 fs がシミュレーションステップの 1 単位となる。

タイムステップを大きくするほどシミュレーションは高速になるが、安定したシミュレーションを行うことができる最大のタイムステップは約 2*1.5 fs であり、マクロのデフォルト設定である「normal」では安全をとって 2*1.25 fs に設定されている。

シミュレーション速度を「fast」に設定した場合は、水素原子との結合長と結合角を拘束（※）することで、最大 2*2.5 fs のタイムステップが可能になっている。「fast」タイムステップ由来のエラーが生じた場合、tslist を直接編集し、2*2 等の値を試してみる。

(※コマンド「FixBond all,Element H」、「FixHydAngle all」が実行される。コマンドの詳細はユーザーマニュアルを参照。)

その他タイムステップの詳細については、ユーザーマニュアル（Commands - Tell YASARA what to do > Simulation - Simulate the soup > Simulation parameters - Choose your favorite ingredients > TimeStep - Set simulation timestep）を参照。

5.2 参考情報の紹介

・YASARA ユーザーマニュアル（Help > Show user manual）の、以下のページに分子動力学計算に関する内容が記載されている。（Recipes - Perform complex tasks > Run a molecular dynamics simulation）

・マクロファイルを使用せずに、YASARA 操作画面からシミュレーションを実行する方法もある。詳しくはヘルプムービー（Help > Play help movie）の「3.3. Accurate simulations in water」を参照。

5.3 分子動力学計算関連の付属マクロファイル

・計算用マクロファイル

ファイル名	機能
md_run.mcr	基本的な MD 計算用マクロ スピードを 3 モード（Fast/Normal/Slow）より選択可能 （ デフォルトは normal ）
md_runfast.mcr	「md_run.mcr」を fast モードで実行
md_runmembrane.mcr	膜タンパク質のシミュレーション用マクロ スピードを 3 モード（Fast/Normal/Slow）より選択可能 （ デフォルトは normal ）
md_runmembranefast.mcr	「md_runmembrfast.mcr」を fast モードで実行
md_refine.mcr	500ps の MD 計算による構造リファイン用マクロ（Ref. Proteins 57,678-683）
md_runsteered.mcr	Ligand を結合部位から分離させるための加速度を任意の値に設定してシミュレーションを実行
md_runbenchmark.mcr	DHFR または STMV ベンチマークを実行し、MD 計算の性能評価を行うマクロ
md_library.mcr	MD 計算（e.g. md_runmembrane.mcr）で使用される関数等を提供するライブラリ

・解析用マクロファイル

ファイル名	機能
md_play.mcr	基本的な MD 計算可視化用マクロ MD シミュレーション結果を動画再生しながら相互作用などを確認できる
md_analyze.mcr	MD シミュレーションのトラジェクトリ解析を自動化するマクロ html 形式のレポートや平均溶質構造、溶質エネルギー最小構造などが出力される
md_analyzebindenergy.mcr	Object 1 をレセプターObject 2 をリガンドとして結合エネルギーを算出できる。対象 Object はマクロ内変数により変更可能
md_analyzesecstr.mcr	各アミノ酸残基における二次構造の時系列テーブルを表示する
md_analyzeres.mcr	各アミノ酸残基における初期構造からの変化を表にする（平均 RMSF と平均 RMSD）
md_analyzemul.mcr	時間ごとのエネルギーとその各成分、初期構造と比較した RMSD、平均構造と比較した RMSD が表として出力される
md_analyzeblock.mcr	トラジェクトリを任意の個数のブロックに分割し、それぞれのブロックにおいて analyze する
md_convert.mcr	MD トラジェクトリファイルの変換用マクロ （YASARA SIM、PDB、GROMACS XTC、AMBER MDCrd ファイル形式に対応）

以上