・メモ：avalonへのopenmmインストール（備忘録）

OpenMM7.7.0をAnaconda2022以降のcondaでインストールしようとすると長時間待たされた挙句にエラーが出ます。

エラー回避する方法としては、pythonのバージョンを下げた(3.6)仮想環境においてOpenMMの数世代前のバージョンをインストールします。

メモ：python3.5はparmedがインストールできません。

インストール手順

・Anaconda3をインストール

・conda create -n py3.6 python=3.6でpython3.6の仮想環境を作成

・conda activate py3.6で仮想環境に入る

・conda install -c omnia openmm=7.4.0でOpenMM ver.7.4.0をインストールする

incropenMMのインストールのための追加手順

parmed, mdtrajのバージョンも下げる必要があります。

・conda install -c conda-forge parmed=3.2.0

・scipyも入れる必要があります。

conda install scipy

・mdtrajを修正してインストールします。

tar -xzvf mdtraj-1.2.0.tar.gz

vi mdtraj-1.2.0/mdtraj/formats/xtc.pyx

cd mdtraj-1.2.0

python setup.py install

（mdtraj 1.9.8は入らないので、mdtraj1.2.0を入れます。）

.bashrcにPYTHONPATHを設定します。

・ERmodディレクトリの用意

mkdir ERmod

cd ERmod/

$ERMOD\_PATH/share/ermod/tools/gromacs/gen\_structure -t ../SYS/topol.top

solute名を入力

ERmod/soln, refsが出来る

solnが溶液系, refsが参照溶媒系のermod計算ディレクトリ

・エネルギー再計算と再重み付け計算手順

OpenMMマニュアルP.37にもある通り、incropenmmで計算した状態は、溶質原子のCore-Ghost部分間の長距離相互作用部分について正しく考慮されていません。そのため、正しいエネルギーE\_exactとincropenmm計算のエネルギーE\_ghostの間に差があり、ERmodで自由エネルギー計算する場合にのボルツマン因子を計算して、状態の再重み付けを行わなければなりません。以下でその手順について説明していきます。

まず、PX\_XXX/script/にrerun\_B0.py, rerun\_S0B0.py, rerun\_S0.py, rerun\_ghost.pyを置きます。これらは、OpenMMマニュアルのP.38「正しい系のエネルギー*E*(*X*)の計算方法」のところにあるE1, E2, E3, E\_OpenMMをそれぞれ計算するスクリプトです。

また、inpdir/に「check」のような適当な名前のディレクトリを作り、そこにnpt\_B0.inp, npt\_S0.inp, npt\_S0B0.inp, npt\_ghost.inpを作ってください。npt\_ghost.inpについては、サンプリング計算(inpdir/sample1/npt\_ghost.inp)からそのままコピーしてください。他のnpt\_XX.inpに関しては、以下のようにパラメータを変更してください。

(共通): ghost\_particles =False

npt\_XX.inp: forcefield = topol\_XX.top

(XX=B0, S0, S0B0)

これらのインプットファイルはマニュアルP.38「正しい系のエネルギー*E*(*X*)の計算方法」の図にある、「B(ghost)部分の非結合相互作用の強さを全て0にしたtopology」,「S(solvent)部分の非結合相互作用の強さを全て0にしたtopology」,「BとS部分の非結合相互作用の強さを全て0にしたtopology」でエネルギー再計算を行うためのインプットファイルです。

topol\_XX.topおよびそれに対応する.itpファイルの作り方は、マニュアルP.39以降にあるように元のtopologyをコピーして、0にしたい原子種について新しい原子名をつけ、(最後に0をつける)εとqという相互作用パラメータを全て0にすることで作成します。

inpdir/checkとtopol\_XX.top, .itpファイルが作成できたらスクリプトを実行します。

使い方は以下のように、作成したinpdir/checkの名前と、エネルギー再計算したいトラジェクトリnpt$index.xtcのインデックス, G P U番号$gpuindexを指定して

python script/rerun\_XX.py check $index $gpuindex

で実行します。エネルギー計算結果はDAT/という名前のディレクトリに書き出されるため、あらかじめmkdir DAT/を行っておいてください。

各エネルギーがDAT/に書き出された後は、それを用いてマニュアルP.38にある「真のエネルギーE\_exact」を計算し、「incropenmmで計算したエネルギーE\_ghost」との差をとり、のボルツマン因子を計算します。これを行うスクリプトがmake\_SysWghts.pyです。これをPX\_XXX/scriptに置き、

python script/make\_SysWghts.py $i

と実行することでDAT/md${i}\_XX.datからを計算してが

DAT/SysWght$iという名前のファイルに書き出されます。逆温度βは系によって変わるため、スクリプト内のtemperature = 423.0の値を適切な値に変更してください。書き出されたDAT/SysWght$iがERmod計算に必要になります。

・エネルギーの再重み付けを考慮したERmod計算方法

OpenMMマニュアルP.44〜46,「ERmodでreweighting計算を行う方法」に手順があります。その際、上で作成したDAT/SysWght$iが必要となります。

・incrementel chemical potentialをERmodで計算する場合のrefs系の取扱い

OpenMMマニュアルP.35~37にあるように、chain increment法ではモノマー単位溶媒和自由エネルギーであるincremental chemical potentialをERmodで計算します。例えば、重合度100のPE(polyethylene)を溶質分子と見做したとき、50番目のモノマー単位溶媒和自由エネルギーを計算するためには

PE\_50をERmod溶液系(soln), PE\_49をERmod参照溶媒系(refs)としてincropenmmでMD計算を行い、エネルギー再重み付けを行ってermodを実行してERmod/soln,refsにエネルギー分布およびエネルギー相関行列を書き出す必要があります。soln系の計算は通常のermodコマンドを用いて実行できます。一方のrefs系の計算は特殊です。通常のermodのrefs計算では、「溶質のみの系のトラジェクトリ」と「溶媒のみの系のトラジェクトリ」の2つを用意して、溶質分子を溶媒のみの系にrandom insertionしてエネルギー分布およびエネルギー相関行列を計算するのですが、incropenmm計算で計算したrefs系（上の例だとPE\_49）のトラジェクトリは*i=*50番目のモノマーが溶質で、それと周囲の溶媒分子が互いに相互作用しないで同時に存在している状態になっており、このトラジェクトリですでに「溶質の溶媒分子系へのrandom insertion」が実現しています。そのため、溶液系(soln)のermodでおよびエネルギー相関行列を計算することができます。通常のermodでは原子同士の重なり合いがあるとエネルギーεが大きいところにヒストグラムが出るとエラーを吐く仕様になっているのですが、refs系では溶質と溶媒の相互作用がないので原子同士の重なりがあります。そのため、エネルギーεが大きいところにヒストグラムが出てしまい、エラーとなって強制終了してしまいます。このエラーを吐く仕様をoffにした修正ermodをインストールしてermod計算を行う必要があります。SltInfo, MDinfoの作り方、refs系の計算の詳細に関しましては、OpenMmマニュアルP.45~49をご覧ください。

・構造について平均化したERmod計算（$index平均）

OpenMMマニュアルP.49「複数構造を平均化して平均溶媒和自由エネルギーを計算する方法」にある通り、高分子溶融系のMDでサンプリングした構造から自由エネルギーを評価するとき、複数の初期構造から平衡化を行ってサンプリングした結果を全て平均化して自由エネルギーを計算するということがよく行われます。これは、緩和時間と現在の計算機の性能の関係から、高分子の全原子MDで平衡化した構造が強い初期構造依存性を持ってしまうという事実があるからです。ひとつの初期構造を平衡化したものでは、自由エネルギー計算を行うのに十分なサンプリングを取ってくることができません。この問題を解決するために、いくつかの独立な初期構造の平衡化計算を並行して行い、それぞれのサンプリング結果を平均化することで自由エネルギー計算のサンプリング効率を良くしようという手順がよく用いられます。エネルギー表示法(ERmod)では、ERmod/soln, refsに書き出されたエネルギー分布およびエネルギー相関行列、重み関数(NPT計算でセル体積Vがゆらぐ部分の寄与を反映したもの。)について、$indexについて平均化することで構造平均溶媒和自由エネルギーを計算できます。

そのためにはまず、各$indexについてERmod計算を再重み付けして計算する必要があります。たとえば以下のように、$indexの名前をつけたディレクトリ内でermod計算を行っていきます。