

Packmol 실행 및 입력 파일 구성 요약 문서

Packmol 실행 및 입력 파일 구성 요약 문서

1. Packmol 실행 방법 (CLI)

```
packmol < packmol.inp
```

▶ 성공 시 출력 예시:

```
-----  
Success!  
Final objective function value: .22503E-01  
Maximum violation of target distance: 0.000000  
Maximum violation of the constraints: .78985E-02  
-----
```

- **target distance violation:** 분자간 가정 거리 조건 위반 정도 (권장: 공간사건 0.01 이하)
- **constraints violation:** 위치 조건 위반 정도 (권장: 0.01 이하)

▶ check 키워드:

- "조건이 통과할 수 있는가?" 를 검사하고, 실제 packing은 수행하지 않는 단계 테스트 보조 목적

2. Packmol "Killed" 메시지 해결

- 이 메시지는 **머리 최대 할당 시 발생**
- 해결: `sizes.i` 파일의 `maxatom` 값 감소 후 `make` 로 다시 컴파일

3. 기본 입력 구조 (Basic Input Structure)

```
tolerance 2.0  
output test.pdb  
filetype pdb  
structure water.pdb  
  number 2000  
  inside cube 0. 0. 0. 40.  
end structure
```

- 해야 하는 최소 입력: `tolerance` , `output` , `structure` block
- 여러 구조 중첩: `structure ... end structure` 보드 복잡 가능

4. 체적 용조 (공간 제약) 조건 종류

종류	기능
<code>fixed</code>	해당 목적을 경우의 위치/회전 정확 지정
<code>inside cube</code> / <code>outside cube</code>	정육면체 내/밖에 목적 분자 할당
<code>inside box</code> / <code>outside box</code>	직육면체 내/밖에 목적 할당
<code>inside sphere</code> / <code>outside sphere</code>	구 내/밖에 위치
<code>inside ellipsoid</code> / <code>outside ellipsoid</code>	다치체 형상 내/밖
<code>above plane</code> / <code>below plane</code>	지정 평면의 위/아래
<code>inside cylinder</code> / <code>outside cylinder</code>	지정 총 내/밖
<code>constrain_rotation</code>	목적의 회전 범위 제약
<code>over xygauss</code> / <code>below xygauss</code>	가운시안 표면의 위/아래 위치

5. Periodic Boundary Conditions (PBC)

Packmol v20.15.0 이상 지원

활용 방법:

```

pbc 30.0 30.0 60.0
→ x: 0~30, y: 0~30, z: 0~60 바운드로 지정

```

```

pbc -15.0 -15.0 -30.0 15.0 15.0 60.0
→ 최소 ~ 최대 정확 지점 지정

```

- `fixed` 물자를 제외한 목적들에 적용됨

6. Radius 정의 (Atomic Radii)

- 기본: 가정 거리(`tolerance`) → 하나의 원자 반지름 = `tolerance / 2`
- 특정 원자가 다른 형식을 가지는 경우:

```

radius 1.5 ← 목적 모든 원자
atoms 1 2
radius 1.5 ← 특정 원자만
end atoms

```

- 반지름이 클수록 packing 난이도 증가

7. solvate.tcl 스크립트 (자동 용매 추가)

```

solvate.tcl PROTEIN.pdb
→ packmol_input.inp 생성 후:
packmol < packmol_input.inp

```

- 단백질을 물 + Na⁺/Cl⁻ (0.16M)로 자동 용매화

고급 사용 예:

```
solvate.tcl structure.pdb -shell 15. -charge +5 -density 1.0 -i pack.inp -o solvated.pdb
```

옵션	설명
<code>-shell 15.</code>	용매 가방 15 앙스크림
<code>-charge +5</code>	전체 전하가 +5인 경우 자동 중화
<code>-density 1.0</code>	무객 무가 정의
<code>-i</code> , <code>-o</code>	Packmol 입력/출력 파일 이름

필요하면 그룹 구조가 담겨지는 예제 `packmol.inp` 파일 설정을 개요 만들어 드릴 수 있습니다.

1. Packmol 실행 방법 (CLI)

```
packmol < packmol.inp
```

▶ 성공 시 출력 예시:

```
-----  
Success!  
Final objective function value: .22503E-01  
Maximum violation of target distance: 0.000000  
Maximum violation of the constraints: .78985E-02  
-----
```

- **target distance violation:** 분자간 가정 거리 조건 위반 정도 (권장: 공간사건 0.01 이하)
- **constraints violation:** 위치 조건 위반 정도 (권장: 0.01 이하)

▶ check 키워드:

- "건조가 통과할 수 있는가?" 를 검사하고, 실제 packing은 수행하지 않는 **단계 테스트 보조 목적**

2. Packmol "Killed" 메시지 해결

- 이 메시지는 **머리 최대 할당 시 발생**
- 해결: `sizes.i` 파일의 `maxatom` 값 감소 후 `make` 로 다시 컴파일

3. 기본 입력 구조 (Basic Input Structure)

```
tolerance 2.0  
output test.pdb  
filetype pdb  
structure water.pdb  
number 2000
```

```
inside cube 0. 0. 0. 40.
end structure
```

- 해야 하는 최소 입력: `tolerance` , `output` , `structure` block
- 여러 구조 중첩: `structure ... end structure` 보드 복잡 가능

4. 체적 용조 (공간 제약) 조건 종류

종류	기능
<code>fixed</code>	해당 목적을 경우의 위치/회전 정확 지정
<code>inside cube</code> / <code>outside cube</code>	정용면체 내/밖에 목적 분자 할당
<code>inside box</code> / <code>outside box</code>	직용면체 내/밖에 목적 할당
<code>inside sphere</code> / <code>outside sphere</code>	구 내/밖에 위치
<code>inside ellipsoid</code> / <code>outside ellipsoid</code>	다치적 형상 내/밖
<code>above plane</code> / <code>below plane</code>	지정 평면의 위/아래
<code>inside cylinder</code> / <code>outside cylinder</code>	지정 총 내/밖
<code>constrain_rotation</code>	목적의 회전 범위 제약
<code>over xygauss</code> / <code>below xygauss</code>	가운시안 표면의 위/아래 위치

5. Periodic Boundary Conditions (PBC)

Packmol v20.15.0 이상 지원

활용 방법:

```
pbc 30.0 30.0 60.0
→ x: 0~30, y: 0~30, z: 0~60 바운드로 지정
```

```
pbc -15.0 -15.0 -30.0 15.0 15.0 60.0
→ 최소 ~ 최대 정확 지점 지정
```

- `fixed` 물자를 제외한 목적들에 적용됨

6. Radius 정의 (Atomic Radii)

- 기본: 가정 거리(`tolerance`) → 하나의 원자 반지름 = `tolerance / 2`
- 특정 원자가 다른 형식을 가지는 경우:

```
radius 1.5 ← 목적 모든 원자
atoms 1 2
radius 1.5 ← 특정 원자만
end atoms
```

- 반지름이 클수록 packing 난이도 증가

7. solvate.tcl 스크립트 (자동 용매 추가)

```
solvate.tcl PROTEIN.pdb  
→ packmol_input.inp 생성 후:  
packmol < packmol_input.inp
```

- 단백질을 물 + Na⁺/Cl⁻ (0.16M)로 자동 용매화

고급 사용 예:

```
solvate.tcl structure.pdb -shell 15. -charge +5 -density 1.0 -i pack.inp -o solvated.pdb
```

옵션	설명
-shell 15.	용매 가방 15 앙스트롬
-charge +5	전체 전하가 +5인 경우 자동 중화
-density 1.0	무객 무가 정의
-i , -o	Packmol 입력/출력 파일 이름

필요하면 그룹 구조가 담겨지는 예제 `packmol.inp` 파일 설정을 개요 만들어 드릴 수 있습니다.