Chain increment free-energy計算用のOpenMM利用方法

本稿は、Chain increment free-energy計算用に開発したOpenMMを利用する方法を解説したものです。OpenMM-setpus.tar.gzを解凍、シェルスクリプトを走らせることで環境を構築することができます。

(推奨環境：Linux, 外部ネットワークと接続可能であること, OpenCLに対応していること)

最初にOpenMM-setpus.tar.gzの中身を説明します。

・OpenMM-setups.tar.gz

setups/

└─Anaconda3-2019.10-Linux-x86\_64.sh

└─example

└─mdtraj-mod

└─myopenmm

└─ermod-0.3.2-widom

└─setup.sh

1. Anaconda3-2019.10-Linux-x86\_64.sh

Linux,x86\_64アーキテクチャのAnaconda3インストーラ。

OpenMMその他のサードパーティライブラリをインストールできる。

2. example

Chain increment計算のインプットファイル群。

例としてPolyethylene溶融系が入っている。

3. mdtraj-mod

OpenMMと連携するmdtrajを一部修正したもの。

xtcファイルの座標の桁落ちを防ぐ。

4. myopenmm

Chain increment計算を行うためのモジュール。

5. ermod-0.3.2-widom

ghost系のトラジェクトリからrefs系のermod計算を行うための修正ERmodソースディレクトリ。

6. setup.sh

Anaconda3, openmm, mdtraj-mod, myopenmm, ermod-widomをインストールするためのスクリプト。

環境設定方法

1. OpenMM-setpus.tar.gzを解凍

tar –xzvf OpenMM-setpus.tar.gz

cd setups/

2. setup.shを実行,anaconda3, conda, OpenMM, mdtraj, myopenmm, ermod-widomをインストール。

bash setup.sh

which pythonなどのコマンドでanacondaの方のpythonにPATHが通っていることを確認してください。通っていなければ手動でPATHを通してください。以上で基本的な環境が整います。OpenMM等はcondaを用いてインストール作業を行うため、外部ネットワークと繋がった環境で実行することが必要となります。

利用方法

最初にPE100/の中身を説明します。

PE100：polyethylene（重合度N=100）100分子溶融系のサンプルディレクトリ

└─ MELT\_049/ 49番目以降の高分子モノマーが溶媒と相互作用しない系

└─ MELT\_050/ 50番目以降の高分子モノマーが溶媒と相互作用しない系

└─ inpdir/ OpenMMの計算条件インプットファイル群を格納するディレクトリ

MELT\_049,050/

└─ ERmod ERmod計算を行うディレクトリ

└─ MD/ トラジェクトリとログファイルを書き出すディレクトリ

└─ OUT/ ジョブ結果を書き出すディレクトリ

└─ SYS/ 系の構造情報インプットを格納するディレクトリ

└─ systemX.gro 系の初期構造ファイル

└─ PE100.itp PE(N=100)1分子のitpファイル

└─ topol.top 系のトポロジーファイル

└─ script/ mdrunを行うpythonスクリプト等を格納するディレクトリ

└─ min.py エネルギー最小化を行うスクリプト

└─ sample\_nvt.py NVTアンサンブルによる計算を行うスクリプト

└─ sample.py NPTアンサンブルによる計算を行うスクリプト

└─ system.ndx ghost粒子を指定するファイル(MELT\_100には不要)

└─ Ito,Octopus/mdrun0X.sh ジョブスクリプト(Ito,Octopus用)

└─ Ito,Octopus/runX.sh mdrun0X.shをsubmitするスクリプト

inpdir/

└─ stageX/ X番目のステップの計算条件ファイルを格納したディレクトリ

└─ npt(or nvt or min).inp ghost計算を行わない系(MELT\_100)のインプットファイル

└─ npt(or nvt or min)\_ghost.inp ghost計算を行う系(MELT\_099等)のインプットファイル

ジョブ投入方法

MELT\_XXXという名前のディレクトリに移動、Ito,OctopusディレクトリにあるrunX.shとmdrun\_0X.shをMELT\_XXXにコピーし、runX.shを実行することでmdrun\_0X.shを投入します。

ジョブスクリプトは九州大学スパコンItoと大阪大学スパコン Octopus用のものを用意しています。

cd PE050/

cd MELT\_XXX

cp {Ito or Octopus}/\*.sh .

bash runX.sh

run0.sh → run1.sh → run2.sh → run3.sh → run4.sh → run5.shの順でジョブを実行します。

MELT\_050のrun5.shが終了するとMELT\_050/にERmod\_XXXX/solnが、

MELT\_049のrun5.shが終了するとMELT\_050/にERmod\_XXXX/refsがそれぞれ作成されるはずです。