

第12回CMSI神戸ハンズオン: MODYLAS講習会

CMSI重点研究員
安藤 嘉倫
名古屋大学 工学研究科

2014/01/20 於FOCUS

自己紹介

名前：安藤 嘉倫

経歴：出身 岐阜県

博士(工学)学位 慶應義塾大学 泰岡 顕治 教授
 分子科学研究所 専門研究員
 名古屋大学 工学研究科 研究員

↓ NAREGI
 ↓ 次世代スパコン「ナノ統合」
 ↓ CMSI

専門：分子動力学計算（研究対象：脂質膜、細胞膜、ウイルス）
 高並列のMDプログラム開発

趣味：Jリーグ観戦、山登り、読書

目次

自己紹介

第一部 13:00-14:00

分子動力学法概要説明、研究事例の紹介

Nano-Ignition概要説明

MODYLAS概要説明

第二部 14:00-16:00

Nano-Ignition実習

MODYLAS実習

結果の表示

分子動力学法(1) 概要

(Molecular dynamics, MD)

基礎方程式：
 ニュートンの運動方程式

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i$$

$i = 1, \dots, N$

→
 数値積分

速度ベルレ法 $\xrightarrow{\text{一般化}}$ RESPA法

$$\mathbf{v}_i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\mathbf{F}_i(\Delta t)}{m_i}$$

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right)$$

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i \left(t + \frac{\Delta t}{2} \right) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\mathbf{F}_i(t + \Delta t)}{m_i}$$

繰返し

\mathbf{r}_i : 原子座標

\mathbf{F}_i : 原子に作用する力

m_i : 原子質量

N : 系に含まれる原子数 $O(10^4-10^7)$

\mathbf{v}_i : 原子の速度

Δt : 時間刻み幅 $O(10^{-15})$ sec

3N 個の自由度についての二階常微分方程式。初期条件 $\mathbf{r}_i(0), \mathbf{v}_i(0)$ 。

100 ns のMD計算 = 10^8 回の反復

分子動力学法(2) 原子間相互作用

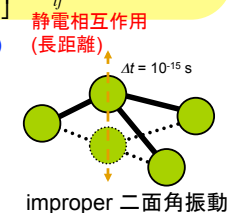
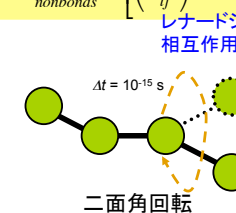
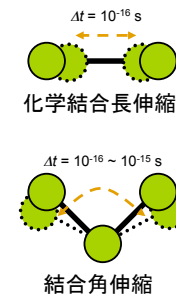
古典近似された力場関数 (例: CHARMM)

$$\mathbf{F}_i = - \frac{\partial U_{tot}}{\partial \mathbf{r}_i}$$

$$U_{tot} = \sum_{bonds} K_b (b - b_0)^2 + \sum_{angles} K_\theta (\theta - \theta_0)^2 + \sum_{ub} K_{ub} (s - s_0)^2$$

$$+ \sum_{dihedrals} K_\phi [1 + \cos(n\phi - \delta)] + \sum_{impropers} K_\psi (\psi - \psi_0)^2$$

$$+ \sum_{nonbonds} \epsilon_{ij} \left[\left(\frac{R_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{R_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$



レナードジョーンズ相互作用 (近距離)
 静電相互作用 (長距離)

しばしば結合長伸縮、結合角伸縮などの速い運動の自由度に距離拘束条件を導入 (SHAKE/RATTLE/ROLL法)
 → より大きな Δt を使用でき、計算可能時間長さが延びる

分子動力学法(3) 代表的な汎用ポテンシャル

力場名称	主な開発者	MDソフトウェア	タイプ
CHARMM	M. Karplus, A.D. Mackerell Jr., J. Klauda	CHARMM	All-atom
GROMOS	H.J.C. Berendsen, W.F. van Gunsteren	GROMACS	United-atom
AMBER/OPLS	P.A. Kollman, W.L. Jorgensen	AMBER	All/United-atom

例) メチル基 -CH₃

All-atom United-atom

用いる力場およびAA/UAは、要求する計算精度に応じてユーザーが選ぶ

分子動力学法(4) 数値積分

古典的な方法: **ベルレ法**

$$\left. \begin{aligned} r_i(t+\Delta t) &= r_i(t) + \frac{\Delta t}{1!} v_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2!} \frac{F_i(t)}{m} + \dots \\ r_i(t-\Delta t) &= r_i(t) - \frac{\Delta t}{1!} v_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2!} \frac{F_i(t)}{m} + \dots \end{aligned} \right\} \begin{aligned} & r(t+\Delta t), r(t-\Delta t) \text{ についての} \\ & \text{テーラー展開} \\ & \dot{r}_i(t) = v_i(t), \quad \ddot{r}_i(t) = \frac{F_i(t)}{m} \end{aligned}$$

→ $r_i(t+\Delta t) \approx 2r_i(t) - r_i(t-\Delta t) + \Delta t^2 \frac{F_i(t)}{m}$

ハミルトニアン保存性, 時間反転性を備える。
ただしミクロカノニカル(NVE)アンサンブルのみ適用可能。

現代的方法: **時間発展演算子による方法 (RESPA)**

時間発展演算子 (L: リウビル演算子)

$$\Gamma(t+\Delta t) = \exp(iL\Delta t)\Gamma(t) \rightarrow v_i\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right) = v_i(t) + \frac{\Delta t}{2} \frac{F_i(t)}{m}$$

$$\Gamma(t) = (\mathbf{r}^N(t), \mathbf{v}^N(t)) \quad \text{位相空間上の点}$$

$$r_i(t+\Delta t) = r_i(t) + \Delta t v_i\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$v_i(t+\Delta t) = v_i\left(t+\frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{\Delta t}{2} \frac{F_i(t+\Delta t)}{m}$$

3段階の更新 [速度ベルレ法]

NVT, NPT アンサンブルにも適用可能

$$\exp(iL\Delta t) \approx \exp\left(iL_2 \frac{\Delta t}{2}\right) \exp(iL_1 \Delta t) \exp\left(iL_2 \frac{\Delta t}{2}\right)$$

$$iL_1 = \sum_{i=1}^N v_i \cdot \nabla_{r_i} \quad iL_2 = \sum_{i=1}^N \left[\frac{F_i}{m_i} \right] \cdot \nabla_{v_i}$$

分子動力学法(5) 熱力学量の計算

MD 計算の結果, 座標 r_i および速度 v_i から下記の熱力学量が時間平均として計算される。

内部エネルギー $U = \left\langle \sum_i u_i \right\rangle + \left\langle \sum_i \frac{1}{2} m v_i^2 \right\rangle$ u_i : 原子 i に作用するポテンシャルエネルギー

エネルギー等分配則

$$\sum_i \frac{1}{2} m v_i^2 = \frac{f}{2} k_B T$$

ビリアル定理

温度 $T = \left\langle \frac{\sum_i m v_i^2}{f k_B} \right\rangle$ 圧力 $P = \frac{1}{3V} \left\langle \sum_i m v_i^2 + \sum_i r_i \cdot F_i \right\rangle$

f : 自由度 (拘束条件無では $f=3N$)

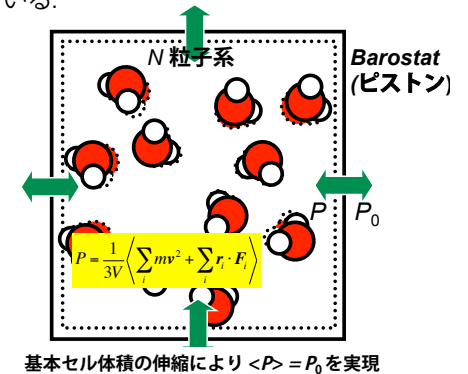
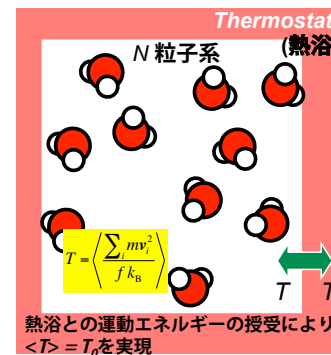
自由エネルギーおよびエントロピーについては座標 r_i および速度 v_i から直接計算することはできない。状態数のカウントができないため。

分子動力学法(6) 温度・圧力の制御

比較対象となる実験は、温度・圧力を一定に制御した条件下で行なわれる。よって観測量 $\langle A \rangle$ は NPT アンサンブルでのアンサンブル平均値。

$$\langle A \rangle_{N,P,T} = \frac{\int A(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N, V) \exp[-\beta(H(\mathbf{r}^N, \mathbf{p}^N) + PV)] d\mathbf{r}^N d\mathbf{p}^N dV}{Q_{N,P,T}}$$

MD計算では**拡張系の方法**により温度・圧力を制御し、統計力学的に正しい NPT アンサンブルを発生させている。



分子動力学法(7) 拡張系の方法

Andersen (1980) : P NPH アンサンブル
 Parrinello and Rahman (1980) : $P_{\alpha\beta}$
 能勢 (1984) and Hoover (1985) : T NVT アンサンブル
 およびこれらを組み合わせた NPT アンサンブル.

拡張系のハミルトニアン

$$H' = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i V^{2/3} s^2} + U(V^{1/3} \mathbf{q}^N) + \frac{p_s^2}{2Q} + g k_B T_0 \ln s + \frac{p_V^2}{2V} + P_0 V$$

粒子系 熱浴 圧力浴

現実系 仮想系

$$t = \int_0^t \frac{dt'}{s}$$

$$p_i = \frac{p_i'}{V^{1/3} s}$$

$$Y = \int \dots \int dp_s ds dp_v dV dp^{1N} dq^N f_0(q^N, p^{1N}, V, p_v, s, p_s)$$

$$= \int \dots \int dp_s ds dp_v dV dp^{1N} dq^N \delta[H'(q^N, p^{1N}, V, p_v, s, p_s) - E']$$

系全体: ミクロカノニカル分布関数

$$= \text{const.} \times \int dV dp^N dr^N \exp \left[-\frac{3N+1}{g} \frac{1}{k_B T_0} \left(\sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + U(r^N) + P_0 V \right) \right]$$

$g=3N+1$ にとる

$\propto Q(N, P, T)$ 注目する粒子系は等温等圧アンサンブルの分配関数に従う

分子動力学法(8) 自由エネルギーの計算法

状態A,B間の自由エネルギー差を求めるための、さまざまな方法論が提案され(続け)ている。以下代表的なもの:

- 熱力学的積分法
- 摂動法
- 粒子挿入法

$$\Delta G_{AB} = G_B - G_A = \int_0^1 \left\langle \frac{\partial G(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle_{\lambda=\lambda'} d\lambda$$

反応座標 λ を (1) 溶質-溶媒間相互作用のスケール因子, (2) 重心間距離, とした場合を MODYLAS に実装.

一方, 非物理的サンプリングと再重法により分布関数を直接求める方法が提案されている。以下代表的なもの:

- アンブレラサンプリング
- マルチカノニカル法
- レプリカ交換法

→ REM (名大 榮)

MODYLAS
とも連携

最近では, MD計算とエネルギー表示の分布関数理論を併用した方法が提案されている。 → ERmod (京大 松林)

目次

自己紹介

第一部 13:00-14:00

分子動力学法概要説明、研究事例の紹介

Nano-Ignition概要説明

MODYLAS概要説明

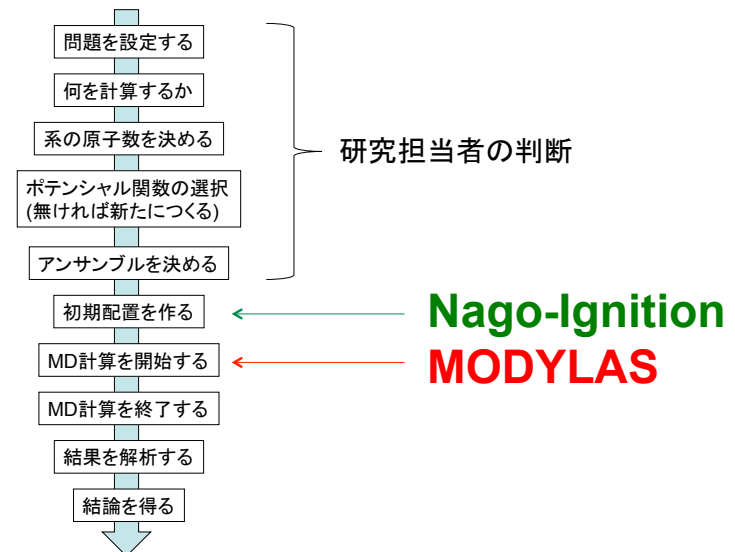
第二部 14:00-16:00

Nano-Ignition実習

MODYLAS実習

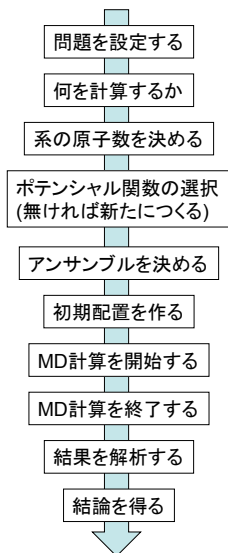
結果の表示

分子動力学法による研究の手順

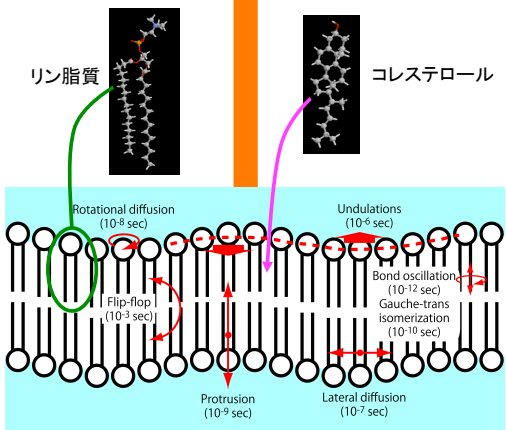


分子動力学法による研究事例

研究例 1



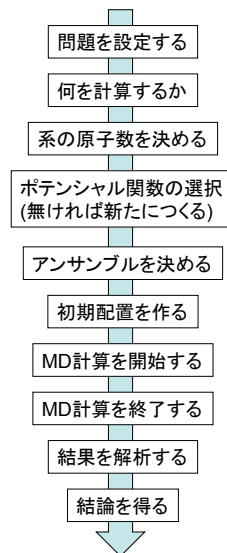
脂質二重層膜へのコレステロール添加による物性変化



Y. Andoh et al., Biochim. Biophys. Acta Biomembr. 1828, 1259 (2013).

分子動力学法による研究事例

研究例 1



脂質二重層膜へのコレステロール添加による物性変化

コレステロール濃度に依存した脂質二重層膜物性全般

膜単層当たり64個の脂質分子 + 水分子 (約3万原子)

全原子力場CHARMM (ver.36), TIP3P

異方的NPTアンサンブル

二重層膜状に脂質を配置し上下に水相を配置

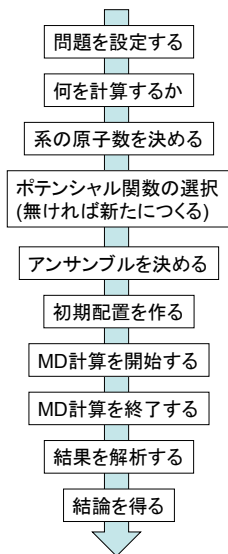
十分な統計を得るために熱平衡状態にて 100 ns の MD 計算

膜面積, オーダーパラメーター, 拡散係数, など

コレステロールの添加により膜が秩序化, 流動性低下

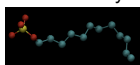
分子動力学法による研究事例

研究例 2

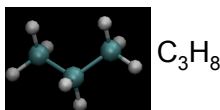
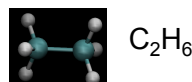
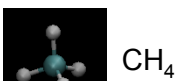
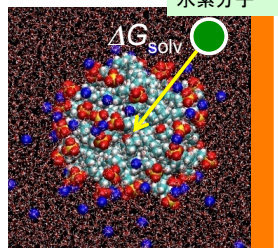


SDSミセルへの炭化水素分子 (メタン, エタン, ...) の可溶性

界面活性剤
Sodium Dodecyl Sulfate



疎水性炭化水素分子

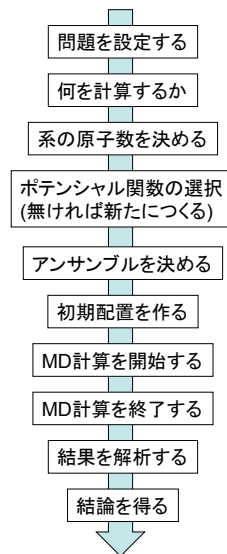


⋮

K. Fujimoto et al., J. Chem. Phys., 133, 074511 (2010).

分子動力学法による研究事例

研究例 2



SDSミセルへの炭化水素分子 (メタン, エタン, ...) の可溶性

可溶性自由エネルギー ΔG_{solv} (熱力学的積分法により)

60個のSDS分子 + 水分子 (約2万原子)

全原子力場CHARMM

等方的NPTアンサンブル

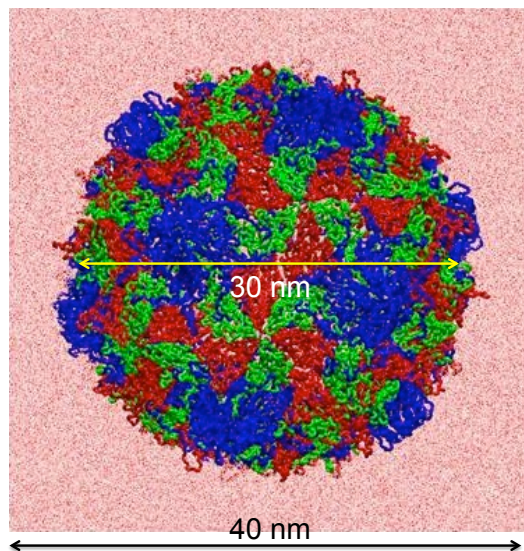
ミセル状にSDSを配置し周囲にNa⁺および水を配置.

反応座標 λ に沿って $\langle \partial G / \partial \lambda \rangle$ を複数点計算.
 λ はメタンと周囲との相互作用を調整するパラメーター (0 → 1 へと徐々に変化)

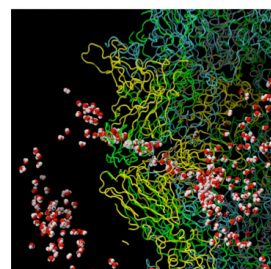
$\Delta G_{solv} = \int \langle \partial G / \partial \lambda \rangle d\lambda$ を計算

炭素数の増加にともない $|\Delta G_{solv}|$ が増加

研究事例(3) 大規模系の計算 - ポリオウィルス



- ✓系の構成
 - ・カプシドタンパク質
 - ・カウンターイオン
 - ・水
- 計6,480,326 原子
- ✓京コンピュータ
- 4096 ~ 8192 ノード



カプシド殻の水分子透過

目次

自己紹介

第一部 13:00-14:00

分子動力学法概要説明、研究事例の紹介

Nano-Ignition概要説明

MODYLAS概要説明

第二部 14:00-16:00

Nano-Ignition実習

MODYLAS実習

結果の表示

Nano-Ignition 著作権者および開発協力者

著作権者

バージョン2.0.0以降の著作権者

名古屋大学

岡崎 進 教授*

山田 篤志 助教*

分子科学研究所

水谷 文保 技術班長*

岩橋 建輔 技術職員*

東京大学

常行 真司 教授

合田 義弘 助教

*バージョン2.0.0未満の著作権者

開発協力者

名古屋大学

安藤 嘉倫

立命館大学

藤本 和士 助教

分子科学研究所

石村 和也

豊田中央研究所

生田 靖弘

愛媛大学

宮田 竜彦 助教

鳥取大学

吉本 芳英 准教授

Nano-Ignitionの概要・ライセンス

・分子や結晶を扱う科学技術計算ソフトウェア (MODYLAS, RSDFT/TAPP, など) のための入力支援ソフトウェア

・NAREGI プロジェクトにおいて開発 (旧名 INGENNAS)

・使用言語
C言語 (並列化なし)

・ www.nano-ignition.ims.ac.jp においてソース公開
最新版 2.2.15

・ライセンス
ユーザー登録制、再配布禁止、文献引用 (詳細はHPを参照)

Nano-Ignition ダウンロード

ユーザー登録、のちログイン

タイトル	バージョン	ファイル
Source	2.2.9	ignition-2.2.9.tar.gz
Source	2.2.10	ignition-2.2.10.tar.gz
Source	2.2.11	ignition-2.2.11.tar.gz
Windows	2.2.12	Ignition-2.2.12.exe
Source	2.2.12	ignition-2.2.12.tar.gz
Source	2.2.13	ignition-2.2.13.tar.gz
Windows	2.2.13	Ignition-2.2.13.exe
Windows	2.2.14	Ignition-2.2.14.exe
Source	2.2.14	ignition-2.2.14.tar.gz

*今回はこれをインストール済み

Windows用バイナリ

ソースコード+マニュアル

Nano-Ignition フォルダ構成

>tar xvfz ignition-2.2.15.tar.gz

ignition-2.2.15/

- configure /./configureスクリプト
- ignition/ /ソースフォルダ (*.c, *.h)
- document/ /マニュアル
- template/ /アウトプット用テンプレート
- addhydrogen/ /水素原子付加プログラムのソースコード
- solvent/ /溶媒付加プログラムのソースコード
- copyMolecule/ /分子複製プログラムのソースコード
- ⋮

Nano-Ignition コンパイル

*今回はコンパイル済みのWindows用バイナリを使用

解凍先フォルダへ移動

>cd ignition-2.2.15

コンパイル環境の設定

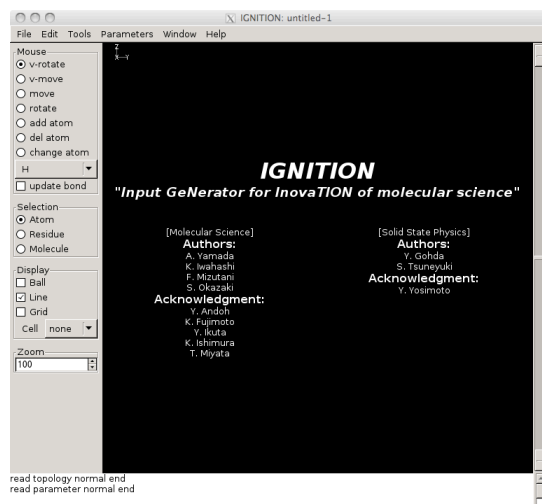
>./configure

コンパイル

>make

起動

>./ignition/ignition



Nano-Ignition I/O構成

分子座標
.pdb



CHARMM
トポロジーファイル



例) top_all22_prot.rtf

CHARMM
パラメーターファイル



例) par_all22_prot.prm

Nano-Ignition

可能な操作

- ・入力された分子の3D表示
- ・カ場パラメータの割り当て
- ・距離拘束条件の指定
- ・基本セルサイズの設定
- ・カ場パラメータの変更
- ・水素原子付加
- ・水溶媒付加
- ・分子の削除, 挿入, 置換
- ・分子の複製, 移動
- ・化学結合の追加
- など (マニュアル参照)

ピンク: 今回の実習でふれる部分

MODYLAS用
計算条件ファイル
.mddef



座標情報ファイル
.mdxyz



カ場情報ファイル
.mdff



Nano-Ignition 使い方(1)

カ場 (トポロジー, パラメーター) の設定 *今回はDL済みのものを使用

以下サイトより, 最新のCAHRMMカ場ファイルをダウンロード:
http://mackerell.umaryland.edu/CHARMM_ff_params.html

CHARMM FF Params

Additive Force Field Files:

Toppar files with the C37 release of CHARMM. These include the C36 additive protein, nucleic acid, lipid, and carbohydrate releases as well as the CGenFF files as of July 2012. Note that the toppar files are now in a new format that allows them to be read individually such that different parts of the force field (eg. proteins and nucleic acids) can be accessed without creating toppar files that contain both the protein and nucleic acid parameters. Note that this includes a toppar stream file for water and ions that must be explicitly read as water and the ions are no longer included in the biomolecular or CGenFF toppar files. See 00toppar_file_format.txt, included in the .tgz file, for details including an example on how to read the files into CHARMM.

Note that the replacement of toppar_c36_aug12.tgz with toppar_c36_dec13.tgz involved a change in the ordering of atoms in selected residues and an update of the carbohydrate parameters.

→ 「toppar_c36_dec13.tgz」をDL

Nano-Ignition 使い方(1)

カ場 (トポロジー, パラメーター) の設定 今回の講習会では設定済み

①「Preference」を押す

②「config」を押し, DLLした「top_all22_prot.rtf」, 「par_all22_prot.prm」を選ぶ

③「save」を押し設定を保存する

「config」を押すことで「save」がactivateされる

Nano-Ignition 使い方(2)

分子情報 (.pdb) の入力

①「import」を押す

②入力したい .pdb を選ぶ

③「開く」を押す

Nano-Ignition 使い方(2)

分子情報 (.pdb) の入力

例)
 pyp111s.pdb
 PYPタンパク質分子 1個
 カウンターイオンNa⁺ 6個
 水分子 5870個

今回の講習会では, 水溶液の配置, カウンターイオンの配置は省略.

Nano-Ignition 使い方(3)

力場パラメータ値の割り当て, および確認

①「Assign」を押す

先に設定した
 ・top_all22_prot.rtf
 ・par_all22_prot.prm
 より力場パラメータ値が読み込まれる。

$$U_{\text{tot}} = \sum_{\text{bonds}} K_b (b - b_0)^2 + \sum_{\text{angles}} K_\theta (\theta - \theta_0)^2 + \sum_{\text{ub}} K_{\text{ub}} (s - s_0)^2 + \sum_{\text{dihedrals}} K_\psi [1 + \cos(n\phi - \delta)] + \sum_{\text{impropers}} K_\psi (\psi - \psi_0)^2 + \sum_{\text{nonbonds}} \left[\epsilon_{ij} \left(\frac{R_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{R_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

Nano-Ignition 使い方(3)

力場パラメータ値の割り当て, および確認

②「Change parameter」を押す

パラメータの種類
 割り振られたパラメータ

系の構成

③パラメータ値を確認。
 全てのタグで「unknown=0」でなければならない

ID	atom	resid	atom2	resid2	basis	b ₀	k _b	θ ₀	k _θ	s ₀	k _s	φ ₀	δ	n	k _ψ	ψ ₀	ε _{ij}	q _i	q _j	constr.	id	param	
0	N	MET	CA	MET	1	1.401	1480	200.00	none	list	set												
1	CA	MET	HA	MET	1	0.800	1080	330.00	shake	list	set												
2	CA	MET	CB	MET	1	1.503	1.538	222.00	none	list	set												
3	CA	MET	C	MET	1	1.548	1.460	295.00	shake	list	set												
4	CB	MET	HB1	MET	1	1.112	1.111	309.00	shake	list	set												
5	CB	MET	HB2	MET	1	1.111	1.111	309.00	shake	list	set												
6	CB	MET	CG	MET	1	1.951	1.930	222.00	none	list	set												
7	CG	MET	HG1	MET	1	1.111	1.111	309.00	shake	list	set												
8	CG	MET	HG2	MET	1	1.111	1.111	309.00	shake	list	set												
9	CG	MET	SD	MET	1	1.807	1.818	198.00	none	list	set												
10	SD	MET	CE	MET	1	1.800	1.816	240.00	none	list	set												
11	CE	MET	HE1	MET	1	1.111	1.111	322.00	shake	list	set												
12	CE	MET	HE2	MET	1	1.111	1.111	322.00	shake	list	set												
13	CE	MET	HE3	MET	1	1.111	1.111	322.00	shake	list	set												
14	C	MET	O	MET	1	1.252	1.230	620.00	none	list	set												
15	N	GLU	HN	GLU	0	0.907	0.997	440.00	shake	list	set												
16	N	GLU	CA	GLU	1	1.454	1.420	200.00	none	list	set												
17	CA	GLU	HA	GLU	1	0.900	1.080	330.00	shake	list	set												
18	CA	GLU	CB	GLU	1	1.995	1.938	222.00	none	list	set												

Nano-Ignition 使い方(4)

基本セルサイズの設定

①「Change cell」を押す

②セルサイズを入力する
 (原点が基本セル中心)

③「change cell」を押す

座標原点は基本セルの中心に置く

「Cell」→「line」で box が表示される

Parameter	Value
x-bottom	-29.942000
x-top	30.002000
y-bottom	-29.935000
y-top	29.922000
z-bottom	-30.004000
z-top	29.911000

Nano-Ignition 使い方(5)

距離拘束条件 (SHAKE) の設定

②「Parameters」→「Assign」を再び押す

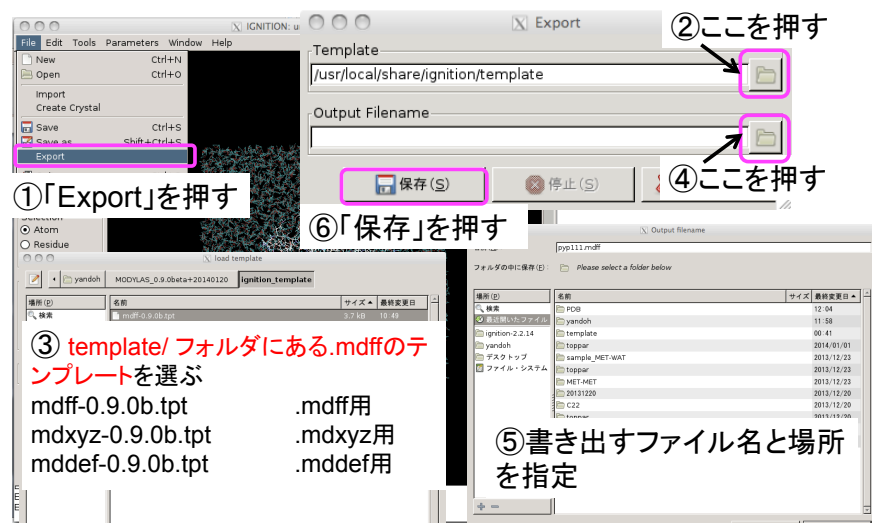
①「shake」→「hydrogen」を選ぶ

③該当化学結合について「constr.」=「shake」と変わったことを確認

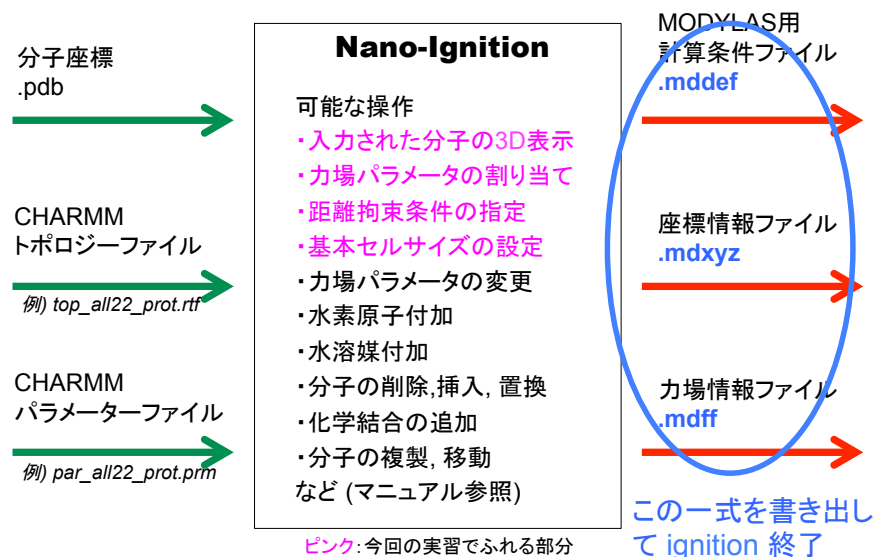
ID	atom1	resid1	atom2	resid2	b	b ₀	k _b	constr.	id	param	
0	N	MET	CA	MET	1	1.401	1480	200.00	none	list	set
1	CA	MET	HA	MET	1	0.800	1080	330.00	shake	list	set
2	CA	MET	CB	MET	1	1.503	1.538	222.00	none	list	set
3	CA	MET	C	MET	1	1.548	1.460	295.00	shake	list	set
4	CB	MET	HB1	MET	1	1.112	1.111	309.00	shake	list	set
5	CB	MET	HB2	MET	1	1.111	1.111	309.00	shake	list	set
6	CB	MET	CG	MET	1	1.951	1.930	222.00	none	list	set
7	CG	MET	HG1	MET	1	1.111	1.111	309.00	shake	list	set
8	CG	MET	HG2	MET	1	1.111	1.111	309.00	shake	list	set
9	CG	MET	SD	MET	1	1.807	1.818	198.00	none	list	set
10	SD	MET	CE	MET	1	1.800	1.816	240.00	none	list	set
11	CE	MET	HE1	MET	1	1.111	1.111	322.00	shake	list	set
12	CE	MET	HE2	MET	1	1.111	1.111	322.00	shake	list	set
13	CE	MET	HE3	MET	1	1.111	1.111	322.00	shake	list	set
14	C	MET	O	MET	1	1.252	1.230	620.00	none	list	set
15	N	GLU	HN	GLU	0	0.907	0.997	440.00	shake	list	set
16	N	GLU	CA	GLU	1	1.454	1.420	200.00	none	list	set
17	CA	GLU	HA	GLU	1	0.900	1.080	330.00	shake	list	set
18	CA	GLU	CB	GLU	1	1.995	1.938	222.00	none	list	set

Nano-Ignition 使い方(6)

MODYLAS用インプットの書き出し (.mdff を例に)



Nano-Ignition I/O構成



目次

自己紹介

第一部 13:00-14:00

分子動力学法概要説明、研究事例の紹介

Nano-Ignition概要説明

MODYLAS概要説明

第二部 14:00-16:00

Nano-Ignition実習

MODYLAS実習

結果の表示

MODYLAS開発の背景

MD計算による分子科学分野でのサイエンス研究における要件

- 様々な相互作用の計算
 - 分子内相互作用 結合伸縮, 変角, 二面角回転, など
 - 分子間相互作用・近距離 Lennard-Jones 相互作用
 - 分子間相互作用・長距離 静電相互作用 → **カットオフ無しの厳密な計算**
- 周期境界条件 (無限系)
 - ・高速多重展開法 (FMM)
 - ・PME法
- 統計力学的アンサンブル
 - NVT アンサンブル (温度一定)
 - NPT アンサンブル (温度, 圧力一定)
- 大規模系への対応
 - 高い単ノード演算性能
 - 高いノード間並列化性能 } 両立
- 距離拘束の動力学
 - SHAKE/RATTLE/ROLL法
 - **1step ミリ秒オーダーの計算速度**
- 数値積分法
 - RESPA
 - 自由エネルギー計算
 - 熱力学的積分法

「京」での運用を前提にこれらの要件を満たすよう開発

MODYLAS 著作権者および開発協力者

著作権者

名古屋大学
岡崎 進 教授
吉井 範行 特任准教授
山田 篤志 助教
安藤 嘉倫 研究員
小嶋 秀和
立命館大学
藤本 和士 助教
分子科学研究所
水谷 文保 技術班長
岩橋 建輔 技術職員

開発協力者

理研 AICS
南 一生
黒田明義
富士通
市川真一
小松秀美
石附 茂
武田康宏
福島正雄
金沢大学
長尾 秀実 教授
川口 一朋 助教

アドバイスいただいた方々： 高橋 大介 [FFTe] (筑波大), 泰岡 顕治 (慶大), 成見 哲 (電通大), 川井 敦 (K&F Res.), 渡辺 宙志 (東大), 篠田 渉 (名大) [敬称略]

MODYLASの概要

MODYLAS: MOlecular DYnamics simulation software for LARge Systems

計算アルゴリズム	分子動力学法
言語	Fortran (77と90の混成)
対応コンパイラー	frtpx (Fujitsu), ifort (intel), pgf90 (PGI)
並列化方法	MPI/OpenMP ハイブリッド, SIMD
対応力場	CHARMM with CMAP, AMBER/OPLS
アンサンブル	NVE, NVT (能勢-Hoover法), 等方的NPT (能勢-Anderson法) 異方的 NPT (能勢-Parinello-Rahman法)
数値積分	RESPA
拘束力学	SHAKE/ROLL, RATTLE/ROLL [pSHAKEを実装]
長距離相互作用計算	高速多重極展開法 (FMM), Particle Mesh Ewald (PME) 法

現在 <http://www.modylas.org/> においてバイナリおよびドキュメントを公開中

ライセンス

- ・ユーザー登録制
 - ・再配布(バイナリ)禁止
 - ・文献引用 [J. Chem. Theory Comp., 9, 3201-3209 (2013)]
- 詳細は www.modylas.org のダウンロードページに記載



現在のライセンス(2013/9/24版)はバイナリ配布用。
ソース配布開始以降はライセンスを刷新。

- ・再配布(ソース, バイナリ)禁止
- ・ベンチマーク結果を著作権者の許可無く公開禁止
- ・ソース変更, 改良点は著作権者にフィードバック, などを追加。

MODYLAS ダウンロード

MODYLAS MOlecular DYnamics software for LARge System

MODYLAS

MODYLAS is free.

COMMENT: work on the K-Computer

If you agree [see here](#), please write your email address to send a URL for download, and then post.

Your personal information listed out below will be used to send MODYLAS news and report activity.

For use of MODYLAS, please cite the following:

MODYLAS: A Highly Parallelized General Purpose Molecular Dynamics Simulation Program in MPI/Serial/Post-Gradient-Free Parallel Processing Algorithms, J. Chem. Theory Comp. 9, 3201-3209 (2013).
Keisuke Aoki, Yutaka Yamada, Naonori Kawai, Kazumasa Kawaguchi, Hiromi Nagao, Yumiko Iwata, Yusuke Takeda, and Masaru Fukuda.

進出人: modylas-admin@draco.ims.ac.jp
件名: Download link for <http://www.modylas.org/>
宛先: yoshimichi.andoh@apchem.nagoya-u.ac.jp

Dear visitor,

Thank you for your interest.
Please use the following link to download the files:
<http://www.modylas.org/node/19/download/a233f49281a202d6de3ca1a9ccfd2538>

This link will be accessible until Wed, 01/22/2014 - 13:31. If you need access after the link expires, don't hesitate to revisit the download page on <http://www.modylas.org/>

登録後このようなメールが送られてくるので、リンク先からダウンロード

MODYLAS フォルダ構成

```
>tar xvfz MODYLAS_0.9.0beta.tar.gz
```

MODYLAS_0.9.0beta/

LICENSE.pdf	ソフトウェアライセンス文章
source/	ソースフォルダ (*.f) → 現在は空
binary/	コンパイル済みバイナリ
sample/	サンプルインプット
document/	マニュアル
converter/	I/Oファイルの変換プログラム (ascii/binary)

今回の講習会ではMODYLAS_0.9.0beta/をベースにFOCUSのシステムC用の変更, およびIGNITION 関連の変更を加えたものを使用.

[MODYLAS_0.9.0beta+20140120/](#)

MODYLAS コンパイル

*今回はコンパイル済みのシステムC用バイナリを使用

解凍先フォルダへ移動

```
>cd MODYLAS_0.9.0beta/source/
```

コンパイル環境の設定

```
>./configure --with-kind-of-fortran-compiler=FC
```

コンパイル

```
>make
```

FC=(K|FX10|INTEL|PGI)

```
./src/modylas
```

が生成

K : 京コンピューター } 推奨

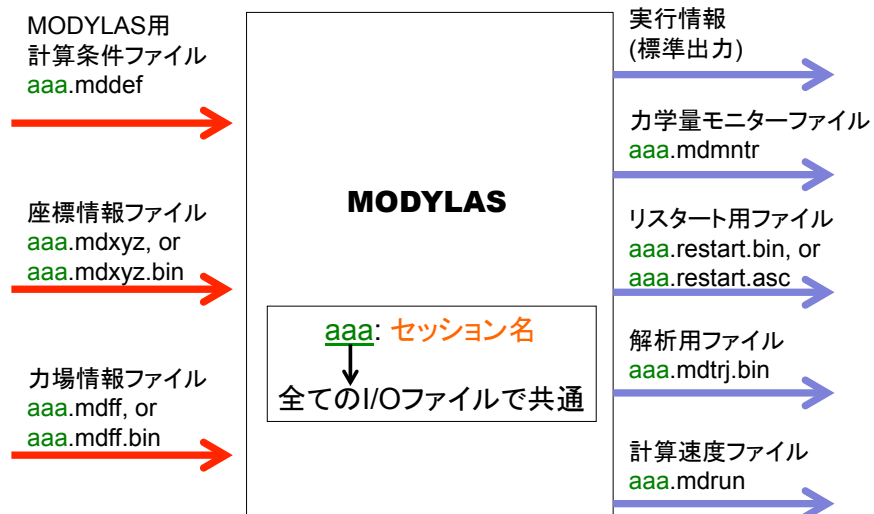
FX10 : FX10

INTEL : インテルコンパイラー

PGI : PGIコンパイラー } 次に推奨

MODYLAS I/O構成

.bin はバイナリ



MODYLAS 実行方法

実行形式:

```
./modylas セッション名
```

インプットー式のあるフォルダへ移動

```
>cd water/
```

実行モジュールのリンク

```
>ln -s ../../binary/sysC/modylas ./
```

並列実行

```
>mpirun -np 8 ./modylas water
```

MODYLAS 入出力ファイルの書式

アスキーファイル

- ・タグ形式 `<xxxx> </xxxx>`
`xxxx` には所定の**キーワード**が入る
 タグの入れ子構造も可 `<xxxx> <yyyy> ... </yyyy> </xxxx>`
- ・変数名 = 値
- ・「#」以降は読み込まれない (コメント扱い)

```

例) mdef
<output>
  <trajectory> start=0 interval=10000 </trajectory> # mdtrj.bin
  <restart> start=0 interval=10000 </restart> # restart
  <monitor> start=0 interval=1 </monitor> # mdmntr
</output>
    
```

10000ステップごと mdtrj.bin を書き出し
 10000ステップごと mdxyz.bin を書き出し
 1ステップごと mdmntr を書き出し

バイナリファイルは unformatted

- ・mdxyz.bin, restart.bin は同じデータ量, 同じ書き出し順

MODYLAS入力ファイル(1) mdef

セッション名.mdef 計算条件を記したファイル

主なタグキーワード

名称	説明	主な下層タグおよび変数
<output>	出力	<monitor>, <trajectory>, <restart>, ascii
<condition>	MD計算条件	<respa>, dt, steps, ensemble, temperature, pressure
<mpi>	MPI並列条件	division, nxdiv, nydiv, nzdiv
<shake>	SHAKE法の条件	shake_tolerance
<thermostat>	熱浴	tau_Q
<barostat>	圧力浴	tau_Q, tau_W
<periodic>	LJ, クーロン相互作用条件	<force>, <pme>, <cmm>, cutoff, LJcorrection, type, ncell, alpha, nfft, umax, sterm

MODYLAS入力ファイル(2) mdxyz

セッション名.mdxyz 座標および速度、セルサイズ、熱浴情報、圧力浴情報を記したファイル

主なタグキーワード

名称	説明	主な下層タグおよび変数
<atom>	原子トラジェクトリ r_i, v_i	<monitor>, <trajectory>, <restart>
<thermostat>	熱浴トラジェクトリ	tau_Q
<barostat>	圧力浴トラジェクトリ	tau_Q, tau_W
<periodic>	基本セル情報, セル運動量	<cell>, <length>, <angle>, <vboxg>, x, y, z, alpha, beta, gamma

セッション名.mdxyz.bin 上記のバイナリファイル

MODYLAS入力ファイル(3) mdff

セッション名.mdff カ場パラメーター、拘束条件、セグメント情報を記したファイル

主なタグキーワード

名称	説明	主な下層タグおよび変数
<forcefield>	カ場の種類	type, CMAPversion
<atom>	計算系の構成	<molecule>
<molecules>	分子種ごとのカ場パラメータ	<molecule>, <mass>, <shake pair>, <charge>, <coulomb void pair>, <epsilon>, <r>, <lj void pair>, <lj special pair>, <bond>, <angle>, <ub>, <dihedral>, <torsion>, <CMAP>, <segments>, nmolecule, natom, nvoidpair_coulomb, nvoidpair_lj, nbond, nangle, nub, ndihedral, nitorsion, ncmmap, nsegment

セッション名.mdff.bin 上記のバイナリファイル

入力ファイルのバイナリ化

計算系の原子数が大きくなると .mdxyz, .mdff ファイルの読み込みに時間を要するようになる。

これを回避するために

.mdxyz → .mdxyz.bin
.mdff → .mdff.bin

へと一度に変換するプログラムが用意されている。

source/src/modylas-text2bin (modylasコンパイルとともに生成)

今回の実習では、コンパイル済みバイナリを converter/input/bin/modylas-text2bin に設置。

【使い方】

>converter/input/bin/modylas-text2bin セッション名
(.mddef, .mdff, .mdxyzの存在が前提)

MODYLAS出力ファイル(1) 標準出力

今回の講習会では「stdout.jobID」

```
nprocs=      8
nomp =       1
MODYLAS version=1.0.0
No input version number
-> Oldest input version 0.9.0 was used
Warning: input version differs from MODYLAS version
Input version=0.9.0
natom=     13284
mdxyz.bin read end successfully!
npara=      3
input,nvoid= 6
input,nljsp= 0
input,nclsp= 0
mdff.bin read end successfully!
LJ correction term is off
PME is selected
mddef read end successfully!
MPI auto division
nxddiv,nydiv,nzdiv= 2 2 2
No position constrain

##### PSHAKE info. #####
Pshake applied: 1 / 1

*****
Modylas normally ended!
*****
```

プロセス数およびスレッド数

系の原子数

LJとクーロン計算の情報

プロセスの 3D 配置
(x, y, z方向に2づつ合計8プロセス)

正常終了 (ensemble=optでは無出力)

0.9.0bでのバグ(修正予定)

MODYLAS出力ファイル(2) mdmnr

セッション名.mdmnr 力学量モニターファイル

例) 構造最適化

```
## water_opt.mdmnr -- monitor variables output from MD calculation by modylas
#
# datas below are formatted as:
# step time Hamiltonian potential-E kinetic-E total energy temperature volume
# pressure box-length(x) box-length(y) box-length(z)
# [m] [sec] [J/cell] [J/cell] [J/cell] [J/cell] [K] [m3] [Pa]
#
# 1 1.000000000000E-15 8.634745670798E-15 8.634745670798E-15 0.000000000000E+00 8.634745670798E-15
0.000000000000E+00 1.406080000000E-25 0.000000000000E+00 5.200000000000E-09 5.200000000000E-09
5.200000000000E-09
# 2 2.000000000000E-15 1.449528625793E-15 1.449528625793E-15 0.000000000000E+00 1.449528625793E-15
0.000000000000E+00 1.406080000000E-25 0.000000000000E+00 5.200000000000E-09 5.200000000000E-09
5.200000000000E-09
```

左から、
ステップ数, 経過時間, ハミルトニアン, ポテンシャルエネルギー, 運動エネルギー, 内部エネルギー,
温度, 体積, 圧力, x 方向セル長さ, y 方向セル長さ, z 方向セル長さ
単位は、

n/a., sec, J/cell, J/cell, J/cell, J/cell, K, m³, Pa, m, m, m

・gnuplotで直接 plot できる書式

> plot 'water_opt.mdmnr' u 1:4 w l ステップ数:ポテンシャルエネルギー

MODYLAS出力ファイル(3) restart

セッション名.restart.bin リスタート用ファイル (バイナリ)

セッション名.restart.asc リスタート用ファイル (アスキー)

(.asc は mddef の <output> ascii=yes </output> でのみ生成)

リスタートの方法 (バイナリ):

```
>cp a00.mddef a01.mddef
>ln -s a00.restart.bin a01.mdxyz.bin
>ln -s a00.mdff a01.mdff
>./modylas a01
```

こちらを推奨

リスタートの方法 (アスキー):

```
>cp a00.mddef a01.mddef
>ln -s a00.restart.asc a01.mdxyz
>ln -s a00.mdff a01.mdff
>./modylas a01
```

MODYLAS出力ファイル(4) mdtrj.bin

セッション名.mdtrj.bin 解析用トラジェクトリーファイル

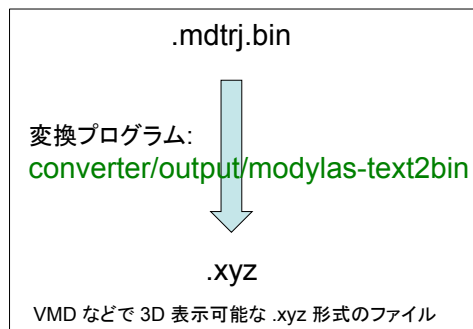
$$\langle A \rangle_{N,P,T} = \frac{\int A(r^N, p^N, V) \exp[-\beta(H(r^N, p^N) + PV)] dr^N dp^N dV}{Q_{N,P,T}}$$

MD 計算では物理量 A をアンサンブル平均として計算 (実際には時間平均に近似) \rightarrow $r^N(t), p^N(t)$ の十分な統計量が必要

.mddef

```
<trajectory>
  start=0 interval=100
</trajectory>
<condition>
  dt=1.0e-15
  steps=10000
</condition>
```

$\Delta t=1fs$ として計10000ステップのMD.
100ステップごとmdtrj.binへ書き出し



MODYLAS出力ファイル(5) mdrun

セッション名.mdrun 計算速度ファイル

```
## water_opt.mdrun -- run time information of MD calculation by modylas
#
step:          100
CPU time:      59.000000 [sec]
for MD:        57.767149 [sec]
time/step:     0.577671 [sec/step]
```

現在のステップ数
I/O 含むプログラム全体の経過時間
MDループに要した時間
1ステップあたり要した時間

この値から mddef で設定したステップ数に要する時間を推定し, 実行シェルの elapse 値の参考にする。

I/Oファイルの書式の詳細

・以下にタグおよび変数の意味, および変数の単位を記載.

レファレンスマニュアル:

document/manual/MODYLAS_ReferenceManual_0.9.0beta.pdf

9. [付録] 入力キーワード・オプション一覧

9.1 計算キーワード(.mddef)

9.2 力場(.mdff)

9.3 初期座標・速度(.mdxyz)

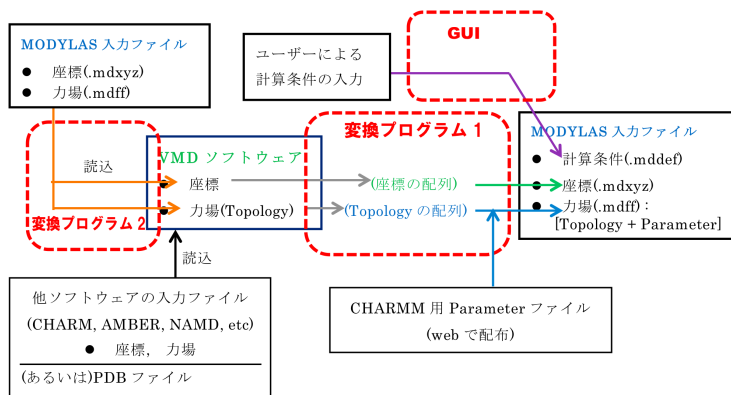
・今後のインプットバージョン (現 0.9.0) のアップデートによりタグ名, 変数名に変更あり. 旧式のインプット形式との互換性は維持.

他ソフトとの連携(1)

- 連携済み
1. レプリカ交換MD **REM+MODYLAS**
・効率的な構造サンプリング 名大・榮 (岡本)
 2. エネルギー表示法 **ERmod+MODYLAS**
・分布関数理論に基づいた自由エネルギー計算 京大・松林
- 連携開始
3. QM/MM **IMOMM+MODYLAS**
・量子化学計算との組み合わせ 京大・北浦, IMS・石村
- 以下, 連携予定
4. 粗視化MD
・粗視化モデルの大規模計算 名大・篠田
 5. 経路積分MD
・量子化された原子核 原研・志賀

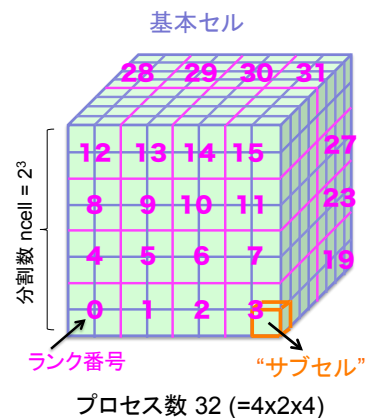
他ソフトとの連携(2)

VMD を介して、他の MD ソフトインプットとの相互変換ツールを準備中.



プログラムの並列化方法

・3次元の領域分割



MPI

領域分割された空間を各プロセスが担当
基本的には 1 プロセス = 1 計算ノード
3次元トラスネットワークに最適化した通信

OpenMP

doループの演算をスレッド並列
主要部については全てディレクティブを挿入

SIMD

最深doループ内演算をSIMD化
ただしコンパイラーによる自動SIMD化

MODYLAS 実行制限

MODYLAS (2013/9/24公開版) には、主に並列化方法からの要請により、以下の実行制限があります

緑字は .mddff での変数名

✓ MPIとOpenMPのハイブリッド並列を前提

1サブセル/プロセス

- ・プロセス数は8以上かつ2のべき乗 $NPROCS \geq 2^n$ ($3 \leq n \leq 3m$)
- ・スレッド数は8 (今回の実習では1) $OMP_NUM_THREADS=8$

✓ 周期境界条件下でのMD計算を前提

✓ 基本セルは立方体かつ [各辺の分割数 ncell] = 2^m (m≥3)

✓ [分割されたサブセルの一边長さ] > [カットオフ半径 cutoff]/2

✓ [PME法のグリッド点数 nfft1, nfft2, nfft3]=2^k3^m5ⁿ, かつ各方向についてプロセスあたりのグリッド数一定.

✓ FMM法の階層数は 3~6 : 2³ ≤ [各辺の分割数 ncell] ≤ 2⁶

(プロセス数, セル分割数ともに 2べきx3べきへの対応版を順次公開予定)

Nano-Ignition/MODYLAS 質問先

Nano-Ignition:

分子科学研究所 計算科学研究センター 岩橋

MODYLAS:

Web ページ上のフォーラムへ投稿

<http://www.modylas.org/forum>

MateriApp のページも参照:

<http://ma.cms-initiative.jp/ja/listapps/modylas/modylas>

目次

自己紹介

第一部 13:00-14:00

分子動力学法概要説明、研究事例の紹介

Nano-Ignition概要説明

MODYLAS概要説明

第一部終了

第二部 14:00-16:00

Nano-Ignition実習

MODYLAS実習

結果の表示

Nano-Ignition実習

ssh接続ソフト : PuTTY、TeraTerm ないし cygwin での ssh コマンド
ファイル転送ソフト: winscp ないし cygwin での scp コマンド

1) 実習用サンプルデータ式の取得

受講者用アカウント/パスワードを使ってフロントエンドサーバー I001.j-focus.jp
ないし I002.j-focus.jp へログイン。

`/home1/gles/share/MODYLAS_0.9.0beta+20140120.tar.gz`

をホームディレクトリにコピーし、解凍する。

`>tar xvfz MODYLAS_0.9.0beta+20140120.tar.gz`

解凍先の「sample/」「ignition_template/」「document/」フォルダを手元の
WindowsPC にダウンロード

2) Nano-Ignition の起動

デスクトップの「Nano-Ignition」をダブルクリック

「Preference」の topology と parameter 欄の「config」ボタンを押して対象ファイルの存在
を確認したのち「save」のこと。

Nano-Ignition実習

課題その1

`sample/water/`

に用意された water.pdb (水分子のみの系) からMODYLAS
用インプット .mdff, .mdxyz を作成する。

ただし以下の条件を満たすものとする:
基本セル形状 一辺 52.0Å の立方体
距離拘束条件 O-H, O-H, H-H に設定

TIP3P
剛体モデル



生成されたファイルの内容が `sample/water/` 以下の
`water_opt.mdff`, `water_opt.mdxyz`
と同一であることを確認する。

今回の講習会では出力のテンプレートはダウンロードした「ignition_template/」以下を使用のこと。
(ver.2-2-14でのバグ. 2-2-15ではtemplate/を修正済み)

Nano-Ignition実習

作業イメージ①

Nano-Ignition実習

作業イメージ②

「shake」→
「hydrogen」を選ぶ

「bond」タグの「constr.」が
「none」→「shake」へ変更され
たことを確認

TIP3Pモデル

対象ボンド:
OH2-H1
OH2-H2
H1-H2

0.9572Å
104.52 deg.

Nano-Ignition実習

作業イメージ③

「angle」タグを開き、H1-H2 への
距離拘束条件導入により不要に
なった H1-OH2-H2 結合角のポ
テンシャルを delete する

Nano-Ignition実習

作業イメージ④

今回の講習会では出力のテンプレートはダウンロードした
「ignition_template/」以下を使用のこと。

テンプレート「mdff-0.9.0b.tpt」を選択

ファイル名「water.mdff」
を指定

Nano-Ignition実習

課題その2

[sample/pyp111s/](#)

に用意された pyp111s.pdb (PYP+Na⁺イオン+水の系) から
MODYLAS 用インプット .mdff, .mdxyz を作成する。

ただし以下の条件を満たすものとする:

- 基本セル形状 一辺 59.944 Å の立方体
- 距離拘束条件 タンパク質分子の X-H 結合および
水分子の O-H, O-H, H-H に設定

生成されたファイルの内容が [sample/pyp111s/](#) 以下の
pyp111s.mdff, pyp111s.mdxyz
と同一であることを確認する。

目次

自己紹介

第一部 13:00-14:00

分子動力学法概要説明、研究事例の紹介

Nano-Ignition概要説明

MODYLAS概要説明

第二部 14:00-16:00

Nano-Ignition実習

MODYLAS実習

結果の表示

MODYLAS 実習

前提: pgiコンパイラ環境の設定

```
> source /home1/share/pgi_11.10/linux86-64/11.10/mpi2.sh
```

• 課題その1

sample/water/

に用意されたMODYLAS用インプットを使って、

- ・構造最適化 (ポテンシャルエネルギー最小化)
- ・NVT アンサンブルでの計算
- ・NPT アンサンブルでの計算
- ・MD 計算結果の可視化 [gnuplot, VMD*1を使用]

の一連を、チュートリアル資料

[document/tutorial/MODYLAS_Tutorial_0.9.0beta.pdf](http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/document/tutorial/MODYLAS_Tutorial_0.9.0beta.pdf)

の「3. サンプル1:水」に沿って行なう。

(ただし使用可能ノード数が16しかないため講習者が交互に使用できるよう steps の値は500以内としてください)

*1 Humphrey, W., Dalke, A. and Schulten, K., "VMD - Visual Molecular Dynamics", J. Molec. Graphics, 1996, vol. 14, pp. 33-38. <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/> よりダウンロード可能。今回の講習会ではダウンロード+インストール済み。

MODYLAS 実習 課題その1

・構造最適化 (ポテンシャルエネルギー最小化)

MD 計算で最初に構造最適化を行なう理由:

一般に作成した人工的な初期構造には原子間の重なりなどによって原子に作用する力が過度に大きな箇所が散在し、そのままだと数値積分しないし SHAKE が発散して計算が流れないため。

```
mddef での関連する箇所: <condition>
                             dt=1.0e-15      時間刻みΔt (使用せず)
                             steps=100      ステップ数
                             ensemble=opt    opt: 構造最適化
                             <optimize>
                             step_length=0.20 原子の移動幅
                             </optimize>
                             </condition>
```

MODYLAS 実習 課題その1

・構造最適化 (ポテンシャルエネルギー最小化)

MODYLASの実行方法

1) 実行バイナリのリンク

```
>ln -s .././binary/sysC/modylas ./
```

2) システムCへジョブ投入

```
>bsub < R08x01.sh   ジョブ投入 (< が必須)
>bjobs              ジョブ状態を確認
```

実行シェルのサンプル R08x01.sh:

```
#!/bin/bash
#BSUB -q c24n16 → 講習会専用キュー名 (必須)
#BSUB -n 8
#BSUB -R "span[ptile=8]"
#BSUB -J test_pgi
#BSUB -o stdout.%J
#BSUB -e stderr.%J
export LSF_PJL_TYPE=pgimpich2
source /home1/share/pgi_11.10/linux86-64/11.10/mpi2.sh
export OMP_NUM_THREADS=1
export PARALLEL=1

mpirun.lsf ./modylas water_opt セッション名
```

R08x01.shを別名コピーした上で、ここを変更し続く計算を実行のこと

MODYLAS 実習 課題その1

・NVT アンサンブルでの計算

構造最適化の終了した座標に対し、設定温度に対応する初期速度をマクスウェル・ボルツマン分布に従って与え、温度一定条件下で系を平衡化

```
<condition>
dt=1.0e-15          時間刻みΔt
steps=500           ステップ数
ensemble=nvt        nvt : NVT
maxwell_velocities=yes 初期速度設定
temperature=298.150000 設定温度
</condition>
<thermostat>
tau_Q=0.50000e-12  熱浴(粒子系)の時定数
</thermostat>
```

mddef での関連する箇所:

MODYLAS 実習 課題その1

・NVT アンサンブルでの計算

1) インプット一式の作成

```
>cp water.mddef_for_nvt water_nvt.mddef
>ln -s water_opt.mdff water_nvt.mdff
>ln -s water_opt.restart.bin water_nvt.mdxyz.bin
```

2) システムCへジョブ投入

```
>bsub < R08x01_nvt.sh ジョブ投入
>bjobs ジョブ状態を確認
```

MODYLAS 実習 課題その1

・NPT アンサンブルでの計算

$$P = \frac{1}{3V} \left\langle \sum_i m v_i^2 + \sum_i r_i \cdot F_i \right\rangle$$

温度・圧力一定条件下で系を平衡化。温度が落ち着く前にNPT一定計算を行なうと、基本セルが大きく揺らぎ、計算が発散したり分子構造ないし分子集合体構造が壊れる場合があるので注意 (タンパク系, 脂質膜系など)。

```
<condition>
dt=1.0e-15          時間刻みΔt
steps=500           ステップ数
ensemble=npt_a      npt : NPT
temperature=298.150000 設定温度
pressure=101325.0   設定圧力
</condition>
<thermostat>
tau_Q=0.50000e-12  熱浴(粒子系)の時定数
</thermostat>
<barostat>
tau_Q=0.5000e-12  熱浴(セル)の時定数
tau_W=1.0000e-12  圧力浴の時定数
</barostat>
```

mddef での関連する箇所:

MODYLAS 実習 課題その1

・NPT アンサンブルでの計算

1) インプット一式の作成

```
>cp water.mddef_for_npt water_npt.mddef
>ln -s water_opt.mdff water_npt.mdff
>ln -s water_nvt.restart.bin water_npt.mdxyz.bin
```

2) システムCへジョブ投入

```
>bsub < R08x01_npt.sh ジョブ投入
>bjobs ジョブ状態を確認
```

MODYLAS 実習 課題その1

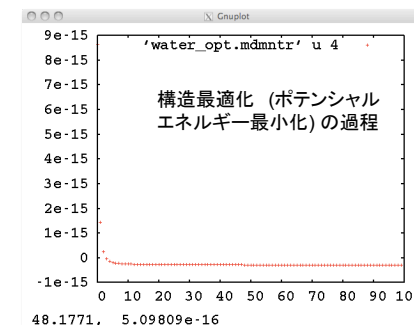
・MD 計算結果の可視化

本日の実習環境下では計算結果ファイルを各自のPCにダウンロードする必要があります。

1) mdmntrの可視化

- ・gnuplotを起動
- ・ファイルを選択
- ・プロット

```
>plot 'water_opt.mdmntr' u 4
```



MODYLAS 実習 課題その1

・MD 計算結果の可視化

2) 計算された原子の軌跡の可視化

・.mdtrj.bin を .xyz に変換

```
>../../converter/output/bin/modylas-mdtrj2xyz water_opt
```

How many atoms to display?

(if negative value is given, the all atoms is used)

-1 表示する原子範囲. 全原子を表示したい場合には-1.

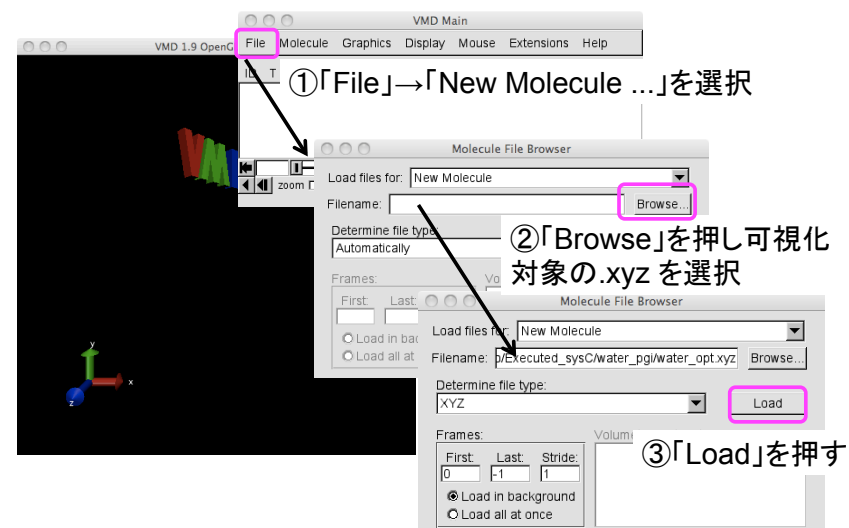
How many interval steps to display?

1 合計 steps/interval 個のトラジェクトリの出カインターバル

・生成された.xyzをダウンロードし, Windows上で VMD を起動

・ファイルを選択し load する

VMD の基本操作



VMD の基本操作

分子の表示方法を変えたいときは「Graphics」→「Representations...」を選択

④このボタンを押すと動画として再生される

「Drawing Method」→「VDW」などを選ぶ

より詳細はVMDのマニュアルを参照

MODYLAS 実習

課題その2

[sample/pyp111s/](#)

に用意されたMODYLAS用インプットー式を使って、

- ・構造最適化 (ポテンシャルエネルギー最小化)
- ・NVT アンサンブルでの計算
- ・NPT アンサンブルでの計算
- ・MD 計算結果の可視化

の一連を行なう。

基本操作は課題その1と同じですが、計算の内容は自由に設定ください。

(ただし使用可能ノード数が16しかないため講習者が交互に使用できるよう steps の値は500以内としてください)

目次

自己紹介

第一部 13:00-14:00

分子動力学法概要説明、研究事例の紹介

Nano-Ignition概要説明

MODYLAS概要説明

第二部 14:00-16:00

Nano-Ignition実習

MODYLAS実習

結果の表示

第二部終了