

## ○目的

- ・ 計算速度は度外視して、手軽に ab initio QM/MM-MD 計算を可能にする

## ○プログラムの仕様と使用方法

### ・ 基本仕様

#### - 機能概要

- QM/MM-MD 計算の QM 計算に対し、オリジナルの Sander モジュールが扱えるのは、PM3 や AM1 といった semi-empirical QM 計算のみである。そこで、その QM 計算を外部呼び出しによって Gaussian03 が代わりに行うことにより、ab initio QM 計算が可能に、つまり ab initio QM/MM-MD 計算が可能になる。ここで、上記の外部呼び出しの役割を担うものが、われわれが開発してきた、Sander と Gaussian03 間においてデータのやりとりをする機能をもつ手続き群（これを、まとめて Gaussian Interface と呼んでいる）である。

#### - 機能構成

- 設定ファイルに基づいて、G03 用インプットファイルの作成とその実行
- G03 の結果から、エネルギーと QM 原子ならびに MM 原子にかかる力のピックアップ  
アップ
- G03 において求めることができる電荷の取り出し
- デバッグや後の使用のために必要ならば、G03 の結果データの保存

- ハードウェア構成（確認しているもの）
  - 32bit アーキテクチャでの Intel CPU と Intel Fortran ver. 9.1
- 運用の前提条件
  - Amber9 ならびに Gaussian03 が使える環境にあること
  - G03 ユーティリティライブラリ util.a が存在し、それがリンク可能であること
- その他
  - G03 の処理がボトルネックだが、並列計算は丸め誤差によってトラジェクトリが不安定になるために避けたほうがいい

- **機能仕様**

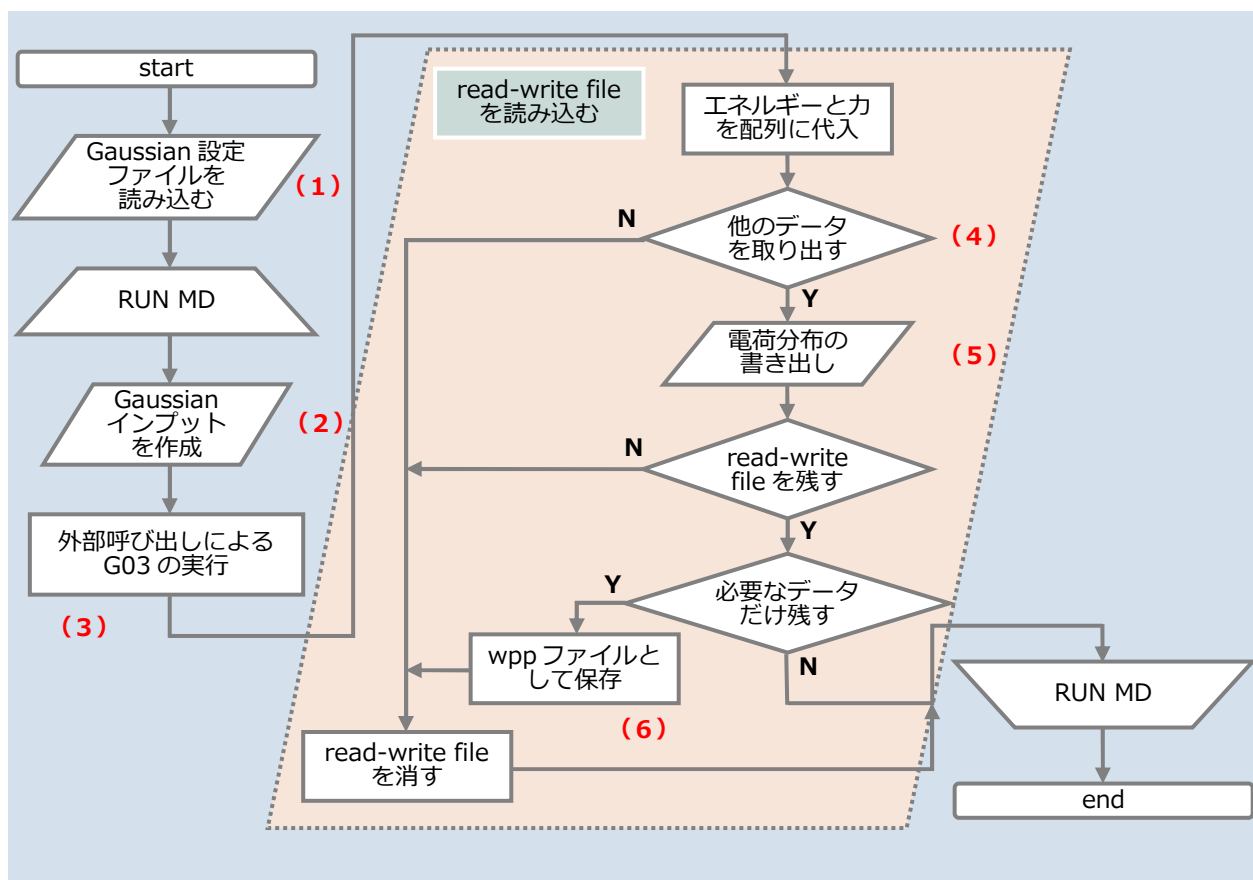
- プログラムの動作
  - ユーザーによる設定（Gaussian 設定ファイル）
    - ◇ G03 インプットファイルのためのヘッダー指定部（必須）
      - e.g.

```
%nosave
%mem=512MB
%rwf=/work/yamada/GAUSCR/MeOH-d256.equ.rwf
pop=(mk,dipole)
#p RHF/3-21G nosymm scf=tight

HF/MM-MD calculation ... MeOH in water ... For Equilibration

0 1
```
    - ◇ インターフェイス自体の機能のキーワード指定部
      - 詳細は、使用方法の項で説明する

## ➤ フローチャート



### ◇ フローチャート内の項目の説明

- (1) あらかじめ用意しておいた Gaussian 設定ファイルを読み込み、  
Gaussian インプットファイルを作る準備と、インターフェイス内で  
使用するフラグの設定を行う
- (2) (1) で準備したもの（ヘッダー部分）と、QM 座標と MM 座標とそ  
の電荷を用いて Gaussian インプットファイルを作る。そのファイル  
名は、gaussian.(HOSTNAME)-(PID).tmpin である。デフォルトで  
は、実行後に消去するが、残しておくこともできる。
- (3) G03 をシステムコール（外部呼び出し）で実行する。ここで、G03

実行時にエラーが出たとき、Sanderが止まるようにしている。また、アウトプットファイルを残しておくこともできる。

- (4) インターフェイス自体の機能として、G03 による計算結果のデータで、エネルギーと力以外のものをどう処理するかを指定できる。その指定には、何もしないか、または、MD ステップ何回ごとに 1 回データを残すかを選ぶことができる。
- (5) G03 による計算結果から、QM 分子の電荷分布を取り出す。それを書き込むファイル名はユーザーが指定できるが、デフォルトでは、gd-charge.(HOSTNAME)-(PID).wpp である。ただし、必要に応じて、Gaussian 設定ファイルのヘッダー指定部に、pop キーワードを入れる必要があることを忘れてはいけない。
- (6) G03 による計算結果が入っている read-write file をそのまま残しておく、巨大なディスク容量が必要となるので、計算結果を解析するための最小限のデータだけを取り出し、別名で保存する。そのファイル名は、オリジナルの read-write file の拡張子を取り除いた部分を、RWF name とすると、(RWF name).(PID)-(# of MD step).wpp である。

- **詳細仕様**

- Gaussian Interface 全体を通じてのプログラミングポリシー

- オリジナルの Sander ソースコードの変更は可能な限り最小限にして、Gaussian Interface のなかでできることは、そのなかで行う（Amber の新しい Version に対して、組み込みが楽になるのでは？という考えから）
- できるだけ Module 構文を使う（コンパイルの順序によってどうしても Module にできないものなどを除いて）
- 変数に値を代入するときは、可能な限り引数として扱う

## ・ 使用方法

- 用意しておくファイル

- Gaussian 設定ファイル（この例では、ファイル名を gsetting とする）

◇ e.g.

```
&gauss
  NS_TIMING=0,
  ifdebug=0,
  ipack_rwf=0,
  kind_chg=0
  isave_orb=0
  fn_chg=charg-mulliken.equ
/
--header
%nosave
%mem=512MB
%rwf=/work/yamada/GAUSCR/MeOH-d256.equ.rwf
pop=(mk,dipole)
#p RHF/3-21G nosymm scf=tight

HF/MM-MD calculation ... MeOH in water ... For Equilibration

0 1

EOF

*** contents of gsetting ***
```

◇ インターフェイス自体のキーワードの説明

- ns\_timing : G03 の計算結果から、エネルギーと力以外のデータを取り出す、または残すタイミングの指定
    - = 0 : データを取り出さない・残さない
    - = 1 : 毎回、データを取り出す・残す
    - = N : MD ステップ N 回ごとに 1 回、データを取り出す・残す
  - kind\_chg : G03 の計算結果のデータのうち、ns\_timing で定めたタイミングで、どの種類の電荷分布を取り出すかの指定
    - = 0 : 何もしない
    - = 1 : Mulliken charges を取り出す
    - = 2 : Potential-derived charges を取り出す
    - = 3 : Atoms In Molecule による電荷を取り出す
    - = 4 : NPA による電荷を取り出す
- 註) 2 以上のとき、pop キーワードなどが G03 インプットのルートセクションに必要
- fn\_chg : QM の電荷分布をプリントするファイル名の指定
    - 指定しないとき、自動的にデフォルトのファイル名が作られる
  - keep\_out : ns\_timing で定めたタイミングで、G03 アウトプットファイルをどのように処理するかの指定

= -1 : アウトプットファイルを残さない (ただし、エラーは判断する)

= 0 : エラーが生じたときのみ、アウトプットファイルを残す

= 1 : アウトプットファイルを残す

= 2 : ns\_timing によらず、全ステップのアウトプットファイルを残す

註) アウトプットファイルが作られる場所は、環境変数

GAUSS\_SCRDIR に指定されているディレクトリである

- keep\_inp : ns\_timing で定めたタイミングで、G03 インプットファイルをどのように処理するかの指定

= 0 : インプットファイルを残さない

= 1 : インプットファイルを残す

= 2 : ns\_timing によらず、全ステップのインプットファイルを残す

- ifdebug : デバッグプリント

= 0 : 何もしない

= 1 : 詳細な情報をプリントアウトする

- ipack\_rwf: G03の計算結果が入っている read-write file を、ns\_timing で定めたタイミングで、チェックや解析に必要最小限のデータだけを取り出して、別名で保存するかの指定

= 0 : 何もしない

= 1 : QM 座標、MM 座標とその電荷、それぞれにかかる力と系のエネ

ルギーと QM に割り当てられる電荷分布を保存する

- isave\_orb : ipack\_rwf において保存される情報に MO と重なり積分を追加するかどうかの指定
  - = 0 : 追加しない
  - = 1 : 追加する
- keep\_rwf: G03 の計算結果が入っている read-write file を、ns\_timing で定めたタイミングで、そのまま残しておくかどうかの指定
  - = 0 : 残さない
  - = 1 : read-write file をそのままのかたちで残す

➤ G03 実行スクリプト (パスが通っているところに置いておく)

◇ スクリプト g03b



```

#!/bin/bash -f

INP=$1
JRUNFLAG=$2
KEEPFLAG=$3
UNAME=`whoami`
HOSTNM=`hostname`
DATE=$(date +%F-%T)
TEMP=gaussian-${UNAME}_${HOSTNM}.${DATE}.out
OUTN=gaussian-${UNAME}_${HOSTNM}.${PPID}.out
LIMB=10000000

if [ -d "$GAUSS_SCR" ]; then
    DIR=$GAUSS_SCR
else
    DIR=$PWD
fi

if [ -z "$GOUT" ]; then
    OUT=${DIR}/$OUTN
else
    OUT=$GOUT
fi

if [ "$JRUNFLAG" != "-1" ]; then
    if [ "$KEEPFLAG" == "1" ]; then
        if [ -e $OUT ]; then
            LIST=$(ls -l $OUT)
            if [ ${LIST[4]} -ge $LIMB ]; then
                NUM=0
                while true; do
                    NUM=$((NUM + 1))
                    OUT2=${OUT%.*}-${NUM}.${OUT##*.}
                    if [ -e $OUT2 ]; then
                        unset LIST
                        LIST=$(ls -l $OUT2)
                        if [ ${LIST[4]} -ge $LIMB ]; then
                            unset OUT2
                            continue
                        fi
                    fi
                    break
                fi
                break
            done
            unset OUT
            OUT=${OUT2}
        fi
    fi
fi

g03 < $INP 1> ${DIR}/$TEMP 2>&1
if [ $? -eq 1 ]; then
    #- Error termination
    echo "Gaussian Failed! " ${DIR}/$TEMP
    exit 1
    elif [ "$KEEPFLAG" == "1" ]; then
    #- Normal termination
    #-- Keep OUTPUT File
    $(cat ${DIR}/$TEMP >> $OUT)
    echo "*** END OUTPUT -- " >> $OUT
    echo " " >> $OUT
    fi
    #- Normal termination
    #-- Delete OUTPUT File
    $(rm -f ${DIR}/$TEMP)
else
    g03 < $INP > /dev/null 2>&1
    if [ $? -eq 1 ]; then
    #-- Error termination
    echo "Gaussian Failed! "
    exit 1
    fi
fi
exit 0

```

- MD 計算の実行

➤ e.g. 実行スクリプトの例

```
#!/bin/csh -f
set JN=$1
set DIR=$2
set CWD=`pwd`
#setenv PRTGVAL internal
#setenv G03 g03b
setenv GAUSS_SCR /work/yamada/GAUSCR
#setenv GOUT gau.out

cp -f gsetting $JN.inp ${JN}.parm ${JN}.intcrd $DIR
chdir $DIR
time /home3/yamada/amber9-wpp/exe/sander.t2 -i ${JN}.inp -o
${JN}-md.out -p ${JN}.parm -r ${JN}-md.rst -c ${JN}.intcrd -x
${JN}-md.crd -gin gsetting >& ${JN}-md.log
chdir $CWD
exit 0
```