



Reference manual

RISMiCal-dev

Last update

January 20, 2024

Index

基本的な利用法	3
実行コマンド	3
外部プログラムとの連成	3
インプットリファレンス	4
RISM NAMELIST	4
RISMSOLVENT NAMELIST	6
VSYM NAMELIST	6
DRISM NAMELIST	6
CHARGEUPOPT NAMELIST	7
MDIIS NAMELIST	7
GRID1D NAMELIST	7
GRID3D NAMELIST	7
VDATA DATALIST	8
UDATA DATALIST	8
RISMSOLUTION NAMELIST	9
CURISM NAMELIST	10

基本的な利用法

RISMiCal パッケージには、純溶媒系、溶質溶媒系(1D)、溶質溶媒系(3D)の3つの基本プログラムが含まれる。溶質溶媒系の計算を行うには純溶媒系の計算で得られる溶媒感受率データが必要となる。そのため、計算手順としてはまず純溶媒系の計算を行い、そのあと溶質溶媒系の計算を行うことになる。

実行コマンド

実行バイナリは `rismical.x` である。また、実行に先立って、環境変数 `RISMICALHOME` を設定しておく必要がある。`RISMICALHOME` は `RISMiCal` パッケージフォルダを指定する。コマンドは

```
> rismical.x [system] [inputfile.inp]
```

である。ここで

`system` : 次の文字列から選ぶ。

vv 純溶媒系、 1d 溶質溶媒系(1D)、 3d 溶質溶媒系(3D)

`inputfile.inp` : インプットファイル名。拡張子は `.inp` とする

外部プログラムとの連成

`RISMiCal` では、量子化学計算プログラムや MD プログラムとの連成（に使える）機能が組み込まれている。（あとで追記）

インプットリファレンス

RISM namelist

closure	<p>クロージャーの指定 【文字列】</p> <p>KH … Kovalenko-Hirata closure (default)</p> <p>HNC … Hypernetted-chain closure</p> <p>MSA … Mean spherical approximation</p>
itrmax	<p>反復最大回数 【整数】 (default=1000)</p>
conv	<p>収束判定値 【実数】 (default=1.d-8)</p>
chargeup	<p>チャージングアルゴリズム利用の有無 【文字列】</p> <p>on … チャージング実行(default)</p> <p>off … チャージングしない</p>
iguess	<p>guess の指定 【整数】</p> <p>0… 静電ポテンシャルを用いる(default)</p> <p>1… 外部ファイルを読む (ファイルは guessfile で指定)</p>
guessfile	<p>guess の外部ファイルの指定 【文字列】</p> <p>default は inputname.tuv</p>
alp1d, alp3d	<p>ダンピングファクター 【実数】 (default=1.5 for 1D, 1.0 for 3D)</p>
grid	<p>グリッドの指定 【文字列】</p> <p>For 1D-RISM</p> <p>FINE $N = 8192$, $\Delta r = 0.025 \text{ \AA}$</p> <p>LFINE $N = 16384$, $\Delta r = 0.025 \text{ \AA}$</p> <p>STANDARD $N = 4096$, $\Delta r = 0.05 \text{ \AA}$ (default)</p> <p>LSTANDARD $N = 8192$, $\Delta r = 0.05 \text{ \AA}$</p> <p>TEST $N = 2048$, $\Delta r = 0.1 \text{ \AA}$</p> <p>LTEST $N = 4096$, $\Delta r = 0.1 \text{ \AA}$</p> <p>USER ユーザー指定(namelist GRID1D)</p> <p>For 3D-RISM</p> <p>FINE $N = 256$, $\Delta r = 0.25 \text{ \AA}$</p> <p>LFINE $N = 512$, $\Delta r = 0.25 \text{ \AA}$</p> <p>STANDARD $N = 128$, $\Delta r = 0.5 \text{ \AA}$ (default)</p> <p>LSTANDARD $N = 256$, $\Delta r = 0.5 \text{ \AA}$</p> <p>TEST $N = 64$, $\Delta r = 1.0 \text{ \AA}$</p> <p>LTEST $N = 128$, $\Delta r = 1.0 \text{ \AA}$</p> <p>USER ユーザー指定(namelist GRID3D)</p>

iolist	<p>出力データ指定【文字列】</p> <p>For solvent-solvent system</p> <p>g … 動径分布関数(.gvv)</p> <p>h … フーリエ空間全相関関数(.hvk)</p> <p>u … 相互作用ポテンシャル(.uvv)</p> <p>c … 直接相関関数(.cvv)</p> <p>t … 間接相関関数(.tvv)</p> <p>x … 溶媒感受率(.xvk)</p> <p>For 1D solute-solvent system</p> <p>g … 動径分布関数(.guv)</p> <p>u … 相互作用ポテンシャル(.uuu)</p> <p>c … 直接相関関数(.cuv)</p> <p>t … 間接相関関数(.tuv)</p> <p>k … フーリエ空間直接相関関数(.cuvk)</p> <p>For 3D solute-solvent system</p> <p>g … 空間分布関数(.guv)</p> <p>u … 相互作用ポテンシャル(.uuu)</p> <p>v … 静電場(.vuv)</p> <p>c … 直接相関関数(.cuv)</p> <p>t … 間接相関関数(.tuv)</p> <p>h … フーリエ空間全相関関数(.huvk)</p> <p>q … 溶媒電荷密度分布(.qv)</p>
--------	--

RISMSOLVENT namelist

solvent	溶媒データ指定【文字列・配列】 いくつかのプリセット溶媒を指定可能 TIP3P … TIP3P モデル水 USER … ユーザー指定。データリスト VDATA で指定。
numspc	溶媒成分数【整数】(default=1)
temp	温度【実数】(default=298) 単位は [K]
dens	密度【実数・配列】(default=55) 単位は [M]

VSYM namelist

3D-RISM のみ有効

nvuniq	対称性ユニークな溶媒原子数【整数】
iuniqlabel	対称性指定ラベル【整数・配列】 溶媒サイトに対して対称性ユニークかどうかを指定。 正の整数=対称性ユニークなサイト 負の整数=対称性で重複するサイト。重複先にマイナスをつけて指定

例. 水の場合

```
$end
$vsym nvuniq=2,iuniqlabel(1)=1,2,-2 $end
```

対称性ユニークなのは、O と H の 2 つ (nvuniq=2)

3 つ目の原子、すなわち 2 つ目の H は 2 つ目の原子と対称性で重複

DRISM namelist

vv 計算のみ有効

idrism	Dielectric consistent RISM の有効化スイッチ【整数】 0 …DRISM しない(default) 1 …DRISM する
delec	比誘電率【実数】(default=78.5)

CHARGEUPOPT namelist

chgstep	チャージングのステップ幅【実数】(default=0.1) $0 < \text{chgstep} \leq 1$
chgconv	チャージング時の収束判定値【実数】(default=conv*1000)

MDIIS namelist

nsub	サブスペース数【整数】(default=10)
dumpmax	ダンピングファクター最大値【実数】(default=0.8)
dumpmin	ダンピングファクター最小値【実数】(default=0.1)
dumpnume	ダンピングファクター調整パラメタ【実数】(default=0.1)

GRID1D namelist

ngrid	1D 計算用グリッド数【整数】
rdelta	1D 計算用グリッド幅【実数】 単位 [Å]

GRID3D namelist

ngrid3d	3D 計算用グリッド数【整数】
rdelta3d	3D 計算用グリッド幅【実数】 単位 [Å]

VDATA datalist

行	フォーマット	記述
1	I A	溶媒サイト数(n1) 溶媒名(v1)
2～(n1+1)	A 6F	サイト名 σ [Å] ϵ [J/mol] q[e] x[Å] y[Å] z[Å]

溶媒種が複数の場合、上記を繰り返す

例

```

$VDATA
3 tip3p
O 3.150d0 636.0d0 -0.8340d0 0.0000000 0.0000000 0.0000000
H 0.400d0 192.5d0 0.4170d0 0.0000000 0.7566950 0.5858800
H 0.400d0 192.5d0 0.4170d0 0.0000000 -0.7566950 0.5858800
1 sodium_ion
Na 3.328d0 11.59d0 1.0000d0 0.0000000 0.0000000 0.0000000
1 chloride_ion
Cl 4.401d0 418.4d0 -1.0000d0 0.0000000 0.0000000 0.0000000
$END

```

UDATA datalist

行	フォーマット	記述
1	I A	溶質サイト数(n1) 溶質名(v1)
2～(n1+1)	A 6F	サイト名 σ [Å] ϵ [J/mol] q[e] x[Å] y[Å] z[Å]

例

```

$UDATA
3 tip3p
O 3.150d0 636.0d0 -0.8340d0 0.0000000 0.0000000 0.0000000
H 0.400d0 192.5d0 0.4170d0 0.0000000 0.7566950 0.5858800
H 0.400d0 192.5d0 0.4170d0 0.0000000 -0.7566950 0.5858800
$END

```


RISMSOLUTION namelist

solute	溶質データの指定方法【文字列】 udata … UDATA で指定(default) それ以外 … 外部ファイルで指定 (solutexyz, soluteesp, solutelj)
solutexyz	溶質の原子座標ファイル【文字列】 default=inputfile.xyz
soluteesp	溶質の有効電荷・静電ポテンシャルファイル【文字列】 default=inputfile.esp
solutelj	溶質の LJ ポテンシャル指定【文字列】 builtin …パッケージに用意されたパラメタからアサイン(ljparam で指定) (default) その他 …外部ファイル名 (default は inputfile.lj)
solvent	溶媒感受率データファール指定【文字列】
ljparam	パラメタファイル名【文字列】 mm2.prm … mm2 パラメータセット(default) tiny.prm … Tinker の最小パラメータセット
esptype	静電ポテンシャルタイプ【文字列】 PC …有効電荷から計算 MAP …静電ポテンシャルマップを読み込む

CURISM namelist

cuda	CUDA 版外部 3D-RISM プログラム使用の有無 【論理】 true … 外部 3D-RISM プログラムを実行 false… 内蔵 3D-RISM プログラムを実行(default)
cupath	CUDA 版 3D-RISM 実行ファイルのあるフォルダパス 【文字列】
ma	Modified Anderson 法で用いるサブスペース数 【整数】 default=2
param1	Modified Anderson 法で用いる収束ミキシングパラメータの最大値 【実数】 default=0.6 値は $\text{param2} < \text{param1} < 1.0$
param2	Modified Anderson 法で用いる収束ミキシングパラメータの最小値 【実数】 default=0.2 値は $0.0 < \text{param2} < \text{param1}$