**mdinファイルパラメータ整理**

・imin: エネルギー極小化計算の可否

・irest: rstファイルを読み込むかどうか

・ntx: 座標、速度の読み込み指定

・ ntwx: 指定したステップ数に応じて、mdcrdファイルに書き出す

・nstlim: 普通のMDであればシミュレーション全体のステップ数(レプリカ交換の場合は, 交換ステップ数)

* dt: 計算の時間幅
* tempi: 初期温度

・temp0: 熱浴温度

・ntt: 熱浴種類の指定

・tautap: 熱浴の温度に達するまでの時間

・ig: 疑似乱数発生器のシード

・ntc, ntf: SHAKEが結合長の制約を実行するためのフラグ

・cut: 非結合相互作用の計算の、カットオフ距離の指定

・rgbmax: 有効ボルン半径を最大どのくらい取るか

・ntb: 周期的境界条件の設定の有無

・igb: 使用するGB法

・saltcon: 塩濃度（モル濃度）

・nrespa: 力場の低周波成分を評価する頻度を減らすことをユーザーに許可する

・tol: SHAKEで座標をリセットするための相対的な幾何学的許容範囲

・nscm: 指定したステップごとに平行移動と回転の重心運動を除去する

・gamma:\_ln: 衝突頻度

・ntwr: 指定したステップ数ごとに、restartファイルを書き出す

・ioutfm: 座標と速度軌道ファイルの形式

・ntpr: 指定したステップ数ごとに、outファイルを書き出す

・numexchg: レプリカ交換の試行回数

**cshファイルパラメータ整理**

・n\_cpu: 駆動させているCPU数

・n\_rep: レプリカの数

・-machinefile: ホスト

・-np:

・-ng:

・-groupfile:

レプリカ交換を行うかどうかのフラグはgroupfile.txt内に書かれています

("-rem"というフラグ).

このフラグは1でレプリカ交換を行い, 0で行わないという意味です.

また, レプリカ交換を行う場合のシミュレーション時間の長さは

nstlim\*numexchangeになります.

この点は通常のMDと大きく異なるところなので, 覚えておいてください.