

peachgk_md Ver. 2.142 入力ファイルマニュアル（暫定版）

菊川豪太
東北大学流体科学研究所

1. peachgk.ini

peachgk_md を制御する最も重要なファイルであり、このファイルの各パラメータを変更すれば様々な機能を使用することができる。以下では各パラメータについて説明するが、各行は、

[パラメータ名] [値 1] [値 2] …

という構造をしている。規定のパラメータ名以外は認識しないので、コメントを挿入することは差し支えない。逆に、ファイルに存在しているパラメータを削除してしまうとプログラムが誤作動する可能性があるため、修正の必要がない、もしくは使用しない場合でもそのまま残しておくこと。

また、ファイルの一行目は peachgk.ini のバージョン情報を示しているが、この行を変更するとエラーストップするので修正しないこと。

以下、修正頻度が高い、もしくは重要性の高いパラメータについては**太字**で示した。

…peachgk.ini…

MD control script for peachgk Ver.5.6 '15.03.28

入出力ファイル名の設定項目

#input&output file name

iuwtopname	H2O_topOB.dat	水分子モデルの topology 情報のファイル名（実行ディレクトリに必須）
iuparavdwnname	para_vdw_s.dat	vdW (Lennard-Jones) 相互作用パラメータリストのファイル名（実行ディレクトリに必須）
iuparabondname	para_bond.dat	共有結合相互作用パラメータリストのファイル名（実行ディレクトリに必須）
iuparaconstname	para_const.dat	剛体拘束を行うペアリストのファイル名（実行ディレクトリに必須）
iuparacstmnbnname	para_cstmnbn.dat	カスタムポテンシャル関数のパラメータファイル名（カスタム関数を利用する場合(ifcstmnbn)は必要）
iuaddtopname	add_top.dat	付加的な topology 情報を入力する場合(ifrdaddtop)のパラメータファイル名
iustrmvelname	out_strmvel.dat	巨視的流速を入力する場合(ifstrmvel)のデータファイル名

iuposresname	sta_peachgk-2.0.dat	位置拘束を利用する場合(ifposres)の基準座標に関するデータファイル名（フォーマットは下のリスタートファイルと同じ）
iostarecname	sta_peachgk-2.0.dat	MD 計算のリスタートファイル
ousumname	out_sum.dat	MD 計算の計算条件をまとめたファイル名
ouenename	out_ene.dat .true.	エネルギー情報の出力ファイル名．最後のカラムのスイッチで実際に情報を出力するか制御できる（以下同様）．
ouposname	out_pos.dat .true.	各原子の座標情報の出力ファイル名
ouvelname	out_vel.dat .true.	各原子の速度情報の出力ファイル名
outhename	out_the.dat .true.	Nosé-Hoover 熱浴に関する情報の出力ファイル名
oubarname	out_bar.dat .true.	圧力浴に関する情報の出力ファイル名
ouprename	out_pre.dat .true.	圧力データの出力ファイル名
outhcname	out_thc.dat	局所領域での温度制御において情報出力する場合(ifouthc)の出力ファイル名
oupdbname	out_pdb.pdb	PDB ファイルを出力する場合(ifoutpdb)の出力ファイル名

分子種、分子数に関する設定項目

#number of particle

peachgk_md では、分子種を大きく polyatomic, water, monatomic という 3 タイプにカテゴリー分けしている．水や単原子分子の計算は後者 2 つのタイプを使うとより簡単に MD 計算することが可能である．逆に、水を polyatomic タイプとして扱うことも原理的にはできる．

#number and type of each poly type

Format:

npolymoletyp No. npoly_mole npoly_atom iucorname iutopname createcor

!!! set the polytyp for createcor after the polytyp for rdstarec

!!! set "setcharge" to set partial charge value from cor file

!!! set "localfix" to fix the atom position (iflocalfix must be ON)

!!! set "localfixz" to fix the atom z position only (iflocalfixz must be ON)

Followed by index of atom to fix, and z position to fix.

```
# !!! set "localfixzg" to fix the COM of molecule z position only
#           (iflocalfixzg must be ON) Followed by z position to fix.
# !!! set "localheat" and the following real value to keep the temperature
#           to the target value (iflocalheat must be ON)
# !!! set "posres" to impose position restraint (mole.) (ifposres must be ON)
# !!! set "posresatm" to impose position restraint (atom) (ifposres must be ON)
#           Following the "posresatm", number of atoms for restraint,
#           indexes of atom for restraint are aligned.
#           Above posres schemes can be used with specifying the constraint
#           direction like posresx or posresatmy.
#           Do not use "posres" or "posresatm" together with direction-specifying
#           options like "posresx". "posres" means constraint for all directions.
# !!! set "potbias" to impose the bias potential (mole.) (ifpotbias must be ON)
# !!! set "potbiasatm" to impose the bias potential (atom) (ifpotbias must be ON)
#           Following the "potbiasatm", number of atoms exerted by the potential,
#           indexes of atom are aligned.
# !!! set "pdbresname" and the following word (within 4 character)
#           to specify the "resname" in PDB format
# !!! set "centerfix" to fix barycentric velocity of each molecular speices
#           (ifcenterfix_poly, _water, or _ma must be ON
#           and ifcenterfix_all must be OFF)
# !!! set "localvel*" with the direction-specifying letter x, y, or z in '*'
#           or combinations of these options (localvelx and localvely, etc.)
#           followed by a velocity value (in m/s unit)
#           (iflocalvel must be .true. and centerfix of the atom must be .false.)
npolytyp      2                                polyatomic タイプの分子種の数
npolymoletyp   1      5      24 C7H15OH_cor.dat C7H15OH_top.dat .true.
npolymoletyp   2      5      18 C5H11OH_cor.dat C5H11OH_top.dat .true.
↑各 polyatomic タイプの分子種・分子数の定義 (この例では2種類). 左から[通し番号][分子数][1
つの分子に含まれる原子数][coordinate ファイル名][topology ファイル名][初期座標を生成するか
どうかのスイッチ]となっており, ここまでは必須の入力項目. その他付加的なパラメータにつ
いては上記コメント行を参照.
#npolymoletyp   3      5      18 C5H11OH_cor.dat C5H11OH_top.dat .true. setcharge
pdbresname PENO
#npolymoletyp   4      5      18 C5H11OH_cor.dat C5H11OH_top.dat .true. localheat
300.0 posres pdbresname PENO
```

```
#npolymoletyp      4      5      18 C5H11OH_cor.dat C5H11OH_top.dat .true. localheat
300.0 posresx posresz pdbresname PENO
#npolymoletyp      5      5      56 C18H37S_cor.dat C18H37S_cor.dat .true. posresatm 1 1
pdbresname ODTI
#npolymoletyp      6      5      56 C18H37S_cor.dat C18H37S_cor.dat .true. localfixz 2
20.0e-10 pdbresname ODTI[
```

↑付加的なパラメータ含む場合をコメント行に例示している.

#number of water molecule

nwater **10** **.true.**

water タイプの分子数. 最後のカラムは
初期座標を生成するかどうかのスイッ
チ

#number and type of each monatomic molecule

Format:

nmatomtyp No. nmatomtyp monoatmtyp createcor

!!! set the matyp for createcor after the matyp for rdstarec

nmatyp **2** monatomic タイプの分子種

nmatomtyp **1** **5** **NA** **.true.**

nmatomtyp **2** **5** **CL** **.true.**

↑各 monatomic タイプの分子種・分子数の定義(この例では2種類). 左から[通し番号][原子数][原子種の識別子][初期座標を生成するかどうかのスイッチ]となっており, ここまでは必須の入力項目. その他付加的なパラメータについては上述コメント行を参照.

#nmatomtyp 3 5 AU **.true.** localfix pdbresname GOLD

#nmatomtyp 4 5 PT **.true.** localheat 300.0 pdbresname PLAT

#nmatomtyp 5 1 FT **.false.** potbias pdbresname FE3P

#nmatomtyp 6 5 AU **.true.** localfixz 20.0e-10 pdbresname GOLD

↑付加的なパラメータ含む場合をコメント行に例示している.

#parameter of initial configuration for createcor

Format:

maxpo No. xmax ymax zmax and some other parameters

maxw No. xmax ymax zmax and some other parameters (No. = 1)

maxma No. xmax ymax zmax and some other parameters

初期座標を生成する場合 (リスタートファイルから読み込まず) のみ必要な設定項目

maxpo	1	1	1	5	
maxpo	2	1	1	5	
#maxpo	3	1	1	5	90.0

maxw	1	1	1	10
------	---	---	---	----

maxma	1	1	1	5
maxma	2	1	1	5

↑2 カラム目の各タイプの通し番号は上のブロックの分子種の設定 (nmatomtyp など) で用いた通し番号に対応している. 以下, 左から createcor.F90 で用いられる変数[xmaxpo][ymaxpo][zmaxpo] (polyatomic タイプの場合) に対応しているが, [xmaxpo]×[ymaxpo]×[zmaxpo]の値が各分子種の分子数と一致している必要がある. その他付加的なパラメータを追加し, createcor.F90 で使用することも可能.

MD アンサンブル, ステップ数に関する設定項目

#parameter of MD stages

mdcont_stage parameters

#	md_0k	0[K] NVT (clear distortion)
#	md_h	gradual heating NVT (v-scale)
#	md_t	target temperature NVT (v-scale)
#	md_mtk	NPT constant MD (MTK eq.)
#	md_nhc	NVT constant MD (NHC eq.)
#	md_nve	NVE constant MD
#	md_hrf	heat flux calculation in NVE MD (transflux.ini is needed)
#	md_ems	energy minimization by steepest descent (SD) method

maxnstep	60000	全 MD ステップ数
----------	-------	------------

nstage	5	全 MD ステージ数
--------	---	------------

↑peachgk_md では MD の全 MD ステップを複数のステージに分割できる. 各ステージでは異なるアンサンブル, アルゴリズムを用いることが可能 (例えば NVT の後に NPT など). 全ステージの合計ステップ数が上記 maxnstep である.

nstep_stage	1	1000	次の行とセット. 第 2 カラムは通し番号
mdcont_stage	1	md_0k	1000 ステップの 0 K 温度制御 MD を実行 (いわゆる徐冷法, quenched dynamics)

nstep_stage	2	29000	
mdcont_stage	2	md_t	29000 ステップの定温 MD (速度スケールリング) を実行
nstep_stage	3	10000	
mdcont_stage	3	md_mtk	10000 ステップの NPT アンサンブル MD (Martyna-Tobias-Klein 運動方程式) を実行
nstep_stage	4	10000	
mdcont_stage	4	md_nhc	10000 ステップの NVT アンサンブル MD (Nosé-Hoover chain 法) を実行
nstep_stage	5	10000	
mdcont_stage	5	md_nve	10000 ステップの NVE アンサンブル MD を実行

↑その他選択可能な MD アルゴリズムについては上記コメントを参照

nstep_maxwell	-1		Maxwell-Boltzmann の速度分布を与えるステップ. -1 とすると該当するステップが存在しないので, 適用されない.
nstep_expand	-1		計算セルサイズの拡張/縮小を行うステップ. -1 とすると適用されない.

MD 計算セルサイズに関する設定項目

#cell dimensions (cel is prior to ratio)

xcel	49.748536d-10	x 方向セル長 (単位 [m])
ycel	49.748536d-10	y 方向セル長 (単位 [m])
zcel	49.748536d-10	z 方向セル長 (単位 [m])
yratio	1.0d0	ycel/xcel の比を与える. 上記 ycel を指定せずこのパラメータを指定するところちらが採用される.
zratio	1.0d0	zcel/xcel の比を与える. 上記 zcel を指定せずこのパラメータを指定するところちらが採用される.
r_expand	1.111111d0	セルサイズを拡張/縮小する際の拡大比を指定する (体積ベース).

MD 計算に関する重要な設定項目

#some important parameters

ifstarec .false.

MD 計算を前回のリスタートファイルの状態からスタートする.

ifcreatecor .true.

MD 計算を新しく初期座標を生成してスタートする. createcor.F90 に座標生成の方法をコーディングすること.

↑なお, ifstarec と ifcreatecor は共に.true.とすることも可能. 例えば, 一部の分子種はリスタートファイルから, その他の分子種の座標だけ新しく生成したいという場合に便利.

ifrdaddtop .false.

付加的な topology 情報を入力するかどうかのフラグ. luaddtopname で指定される入力スクリプトが必要となる.

ifcenterfix_all .true.

系全体の並進運動量を 0 にする (毎ステップ修正). このフラグが ON になっていると下記 3 つのフラグは無視される.

ifcenterfix_poly .true.

polyatomic タイプ全体の並進運動量を 0 にする.

ifcenterfix_water .true.

water タイプ全体の並進運動量を 0 にする.

ifcenterfix_ma .true.

monatomic タイプ全体の並進運動量を 0 にする.

#PDB output

ifoutpdb .true.

PDB フォーマットファイルを出力

nstep_pdbout 0

何ステップ目の座標情報を使って PDB ファイルを生成するかを指定 (0 ステップ目は MD 計算ループ前なので, 初期座標の確認に使用できる)

MD 計算の時間積分法に関する設定項目

#time step and MTS parameters

MTS flags

```
#      long-force      long
#      med-force      med      ! Don't use this flag!
#      short-force     short
```

peachgk_md では、時間積分法として r-RESPA 法を採用しているが、現在のバージョンでは long timescale および short timescale のみサポートしている。

```
dt_long_cal      1.0d-15
```

時間積分法の (long timescale の) タイムステップ (単位 [sec])

```
nstep_short      5
```

r-RESPA の inner loop の回数 (short timescale). この例では, short timescale のタイムステップは $1.0 \times 10^{-15} / 5 = 0.2$ [fs]となる.

From Ver.1.74, do not use mts_med !!!

if you do not want to calculate certain interaction, just comment out,

then parallel computations become faster.

以下の設定では、各相互作用をどの timescale (short もしくは long) で計算するかを指定する。コメントアウトすると、その相互作用の計算をスキップするので注意すること。並列計算時には不要な相互作用の計算をコメントアウトすることで、プロセス間通信量を低減できる。

mts_bond	short	結合伸縮
mts_angl	short	結合変角
mts_anglub	short	Urey-Bradley 結合変角 (CHARMM)
mts_tors	short	ねじれ角 (periodic タイプ)
mts_torsrb	short	ねじれ角 (Ryckaert-Bellman タイプ)
mts_torsim	short	ねじれ角 (improper)
mts_vdw	long	LJ ポテンシャル
mts_cwr	long	Coulomb ポテンシャル (実空間寄与)
mts_cwk	long	Coulomb ポテンシャル (波数空間寄与)
mts_vdw14	long	1-4 LJ ポテンシャル
mts_elc14	long	1-4 Coulomb ポテンシャル
#mts_mor	long	Morse ポテンシャル
#mts_sh	long	Spohr & Heinzinger ポテンシャル
#mts_rfh	short	Rustad, Felmy, and Hay ポテンシャル
#mts_dou	long	Dou ポテンシャル
#mts_cstmnb	long	カスタムポテンシャル関数
mts_cnpvw	long	壁面圧力制御

mts_posres	short	位置拘束力（調和バネ）
mts_potbias	long	バイアスポテンシャル

初期配置の構造を緩和する際、原子間の距離が近い場合極めて強い力が働くが、その場合でも移動距離を抑制することで MD 計算が発散しないようにするアルゴリズム

iflimitmove	.false.	距離抑制の MD を使用するフラグ
limitdist	0.1d-10	各ステップでの原子の最大移動距離 (単位 [m])

拡張系 MD 法に関する設定項目

#Nose-Hoover chain and MTK eq. and higher order integration

for Nose-Hoover chain

mchain	3	Nosé-Hoover chain 法の chain 数
tfreq	1.0d+13	Nosé-Hoover 法の熱浴の時定数 (単位 [sec ⁻¹])
text	300.0d0	Nosé-Hoover 法の目標温度 (単位 [K])

↑Nosé-Hoover 法が安定しない場合は tfreq を調整するとよい。上記パラメータは NVT アンサンブル (md_nhc) だけでなく、NPT アンサンブル (md_mtk) にも影響する。

for Andersen (Hoover type) barostat

vfreq	0.2d+12	圧力制御における圧力浴の時定数 (単位 [sec ⁻¹])
pext	0.1d6	圧力制御の目標圧力 (単位 [Pa])
ifpatmcont	.true.	原子圧力による圧力制御
ifpmolcont	.false.	分子圧力による圧力制御

↑現バージョンでは等方的圧力制御のみに対応している。Andersen 圧力制御が安定しない場合は tfreq を調整するとよい。ifpatmcont と ifpmolcont はどちらかを ON にすること。

for higher order Trotter expansion

next	1	トロッター展開による拡張系法の繰り返し数
nyosh	3	吉田-鈴木法の展開オーダー (1, 3, 5 に対応)

↑数字が大きい方が高精度だが、通常はデフォルト値でよい。

その他 MD 法に関する設定項目

#some MD flags

ifrattle	.true.	SHAKE/RATTLE 法を使用
ifewald	.false.	Coulomb 相互作用計算に Ewald 法（スタンダード）を使用
ifspme	.true.	Coulomb 相互作用計算に SPME 法を使用
iffennell	.false.	Coulomb 相互作用計算に Fennell 法（修正 Wolf 法）を使用

↑上記 3 つのパラメータの内、どれかを ON にする必要がある。ただし、Makefile 中で、FFLAGS2 = -D_LJ_ONLY を有効にしてコンパイルした場合（電荷を含まない系）、全て OFF にできる。この場合、Ewald 法をスキップするので、MD 計算が高速化される。

ifljari	.true.	異なる種類の原子間に作用する LJ 相互作用パラメータ (σ) の決定に算術平均をデフォルトとする。
ifljgeo	.false.	異なる種類の原子間に作用する LJ 相互作用パラメータ (σ) の決定に幾何平均をデフォルトとする。

↑ σ パラメータの計算は、para_vdw_s.dat に記載された A (arithmetic) および G (geometric) で制御されるが、A と G の組み合わせ (A-A や G-G ではなく) に対し上記パラメータの方針が適用される。なお、 ϵ パラメータについては全て幾何平均で算出される。

iflocalheat	.false.	速度スケーリングによる温度制御の際に、各分子種別に温度制御を適用する。
ifregionheat	.false.	部分領域に速度スケーリングを適用する。同時に tempcont.ini が必要。
ifregionhf	.false.	部分領域に熱流束制御 (Jund & Jullien 法) を課す。同時に hfcont.ini が必要。
ifreglange	.false.	部分領域に Langevin 熱浴を適用する。同時に langecont.ini が必要。
iftratom	.true.	上記、部分領域に対する温度スケーリングや熱流束制御を原子ごとに課す (.T.) か分子ごと (並進重心速度) に課す (.F.) かを設定。剛体拘束を含む分子に原

ifoutthc	.false.	子ベースの制御を行うと拘束条件を満たさなくなるので注意. 部分領域制御（速度スケーリング, Langevin 熱浴）において, 1 ステップでやりとりする熱エネルギー量を出力（ファイル名は <code>outhcname</code> パラメータで変更できる）
iflocalfix	.false.	特定の原子, 分子種の位置を固定（温度 0 にする）
iflocalfixz	.false.	特定の原子, 分子種の z 座標を固定
iflocalfixzg	.false.	特定分子種の重心の z 座標を固定
ifposres	.false.	特定の原子, 分子種の位置を拘束（調和バネで空間に固定）
ifpotbias	.false.	バイアスポテンシャルを適用. 同時に <code>potbias.ini</code> が必要.
iflocalvel	.false.	特定の原子, 分子種に強制的な速度を与える.
ifstrmvel	.false.	外部ファイルから巨視的流速の情報を読み込み, 温度や熱流束の算出に反映する. 入力ファイルは, <code>process_data/lvs_vel/</code> のコードを用いて MD の後処理として計算することもできる. (入力ファイル名は <code>iustrmvelname</code> パラメータで変更できる)

↑上記パラメータの多くは, 前述の `#number of particle` の設定（分子種や分子数の設定）と連動するので, そちらも参照のこと.

!!!! if you use NPT dynamics, you must choose ifcalpre mole or ifcalpre atom !!!

ifcalpre mole	.true.	分子圧力を計算する.
ifcalpre atom	.true.	原子圧力を計算する.
ifnetqcorr	.true.	系の全電荷が 0 でない場合の圧力補正を計算する.

↑圧力制御を行う場合（`md_mtk`）は, 対応する圧力の計算を必ず行うこと.

pressure calculation of L-J long-range correction

ifcalljlong .false.

圧力に対する LJ のカットオフ補正を行う。ただし、限られた状況にしか対応していないので（水の場合のみ）、注意して使用すること。

solvetyp OB

カットオフ補正の対象となる溶媒（の O 原子）記号

nsolve 10

溶媒分子の数

parameter for ewald method

alpha 2.9202899d9

Ewald 法の α パラメータ（単位 $[\text{m}^{-1}]$ ）

kmax 8

Ewald 法（スタンダード）波数空間の大きさ

rrcut 9.0d-10

Ewald 法の実空間計算のカットオフ（単位 $[\text{m}]$ ）

parameter for SPME method

#!/! FFT requires grid points are a multiple of 2,3,5

nfft1 50

SPME 法の charge grid 数（x 方向）

nfft2 50

SPME 法の charge grid 数（y 方向）

nfft3 50

SPME 法の charge grid 数（z 方向）

pme_order 6

SPME 法で使用する B-spline 関数のオーダー

↑charge grid の大きさはおよそ 1\AA になるようにグリッド数を調整すること

parameter for energy minimazation

d_rini 0.5d-10

最急降下法によるエネルギー最小化における原子の初期変位値（単位 $[\text{m}]$ ）

d_rmax 1.0d-10

最急降下法によるエネルギー最小化における原子の最大変位値（単位 $[\text{m}]$ ）

d_econv 1.0d-24

最急降下法によるエネルギー最小化におけるエネルギーの誤差収束値（単位 $[\text{J}]$ ）

d_rmsf 1.0d-13

最急降下法によるエネルギー最小化における自乗根平均力の誤差収束値（単位 $[\text{J}]$ ）

位 [N])

other MD parameters

rcut	12.0d-10	LJ 相互作用のカットオフ距離 (単位 [m])
ifcellindex	.true.	セルインデックス法を使用
ifbook	.true.	ブックキーピング (帳簿) 法を使用
rcut_book	14.0d-10	ブックキーピングのカットオフ距離 (単位 [m]) rcut および rrcut より大きい値にする必要がある.
nstep_book	50	ブックキーピングリストの更新ステップ間隔

↑特に理由がなければ ifbook と ifcellindex は共に ON にしておくこと. セルインデックスが使用できない計算系サイズであれば, 自動的に OFF になる. rcut_book や nstep_book は NVE 計算などから判断してきちんと設定すること.

tcont_poly	300.0d0	速度スケーリングにおける制御温度 (polyatomic type, 単位 [K])
tcont_water	300.0d0	速度スケーリングにおける制御温度 (water type, 単位 [K])
tcont_ma	300.0d0	速度スケーリングにおける制御温度 (monatomic type, 単位 [K])
tcont_poly_ini	0.0d0	昇温 (降温) MD 計算 (md_h) における初期温度 (polyatomic type, 単位 [K])
tcont_water_ini	0.0d0	昇温 (降温) MD 計算 (md_h) における初期温度 (water type, 単位 [K])
tcont_ma_ini	0.0d0	昇温 (降温) MD 計算 (md_h) における初期温度 (monatomic type, 単位 [K])

↑iflocalheat を有効にしない場合は, tcont_poly が全体の制御温度として採用される. md_h の MD 計算を行った場合は, 初期温度 tcont_*_ini から当該ステップ数をかけて tcont_*まで徐々に温度を変化 (上昇, 下降) させる.

tcontinterval	100	速度スケーリングベースの温度制御の制御ステップ間隔
----------------------	------------	---------------------------

outinterval	100	各種データの出カステップ間隔
pressinterval	100	圧力データの出カステップ間隔
heatfinterval	100	熱流束，運動量流束データの出カステップ間隔
recinterval	1000	リスタートファイルの出カステップ間隔．リスタートファイルは上書きされる．また MD 計算終了時にも出力される．
oatmtyp	OB	水分子モデルの O 原子記号（デフォルトは SPC/E モデル）
hatmtyp	HB	水分子モデルの H 原子記号
randseed	555	乱数の種
compfact	1.00d0	初期配置に使用されるパラメータ
eps_rattle	1.0e-7	SHAKE/RATTLE 法の収束条件
#Spline interpolation for ewald real space calculation		
nspltbl	1100	Ewald 法に使用される補誤差関数を補間して代替するスプライン関数テーブルのサンプル数

↑テーブルのサンプル数は多ければ精度が向上するが，メモリアクセスが遅くなるため計算時間がかかる．各ユーザーが使用するシステムで最適化することが望ましいが，推奨値として， $(\text{rrcut} [\text{\AA}] + 2) * 100$ 程度とっておけば，精度としては十分である．

各種相互作用のカットオフ設定

Cutoff setting for special interaction functions

#Morse cutoff

rcutmor	12.0d-10	Morse ポテンシャルのカットオフ距離 (単位 [m])
ifcellindex_mor	.false.	Morse ポテンシャルにセルインデックス法を使用

ifbookmor	.false.	Morse ポテンシャルにブックキーピング法を使用
rcut_bookmor	14.0d-10	Morse ポテンシャルに対するブックキーピングのカットオフ距離 (単位 [m])
nstep_bookmor	50	Morse ポテンシャルに対するブックキーピングリストの更新ステップ間隔

以下, 各相互作用ポテンシャルに対し同様の設定が繰り返すため, 省略する.

:

#RP-VW cutoff

仮想壁を用いた壁面垂直方向圧力制御に関する設定 (アルゴリズムに関する詳細は省略)

ifcnp	.false.	壁面垂直圧力制御を使用
rcutrpvw	12.0d-10	仮想壁と物理系の間の相互作用カットオフ距離 (単位 [m])
#ifcellindex_rpvw	.false.	! **dummy** flag for cell index (RP-VW)
ifbookrpvw	.false.	仮想壁と物理系の間の相互作用にブックキーピング法を使用
rcut_bookrpvw	14.0d-10	ブックキーピングのカットオフ距離 (単位 [m])
nstep_bookrpvw	50	ブックキーピングリストの更新ステップ間隔

カスタムポテンシャル関数に関する設定

#CUSTOM NB interaction flags

ifcstmnb	.false.	カスタムポテンシャル関数を使用
ifcellindex_cstmnb	.false.	セルインデックス法を使用
ifbookcstmnb	.false.	ブックキーピング法を使用

↑その他詳細なパラメータは, 各カスタムポテンシャル関数の para_cstmnb.dat で定義する.

END

…peachgk.ini ここまで…

2. 分子モデル関連ファイル

2.1. para_bond.dat

2.2. para_vdw_s.dat

2.3. para_const.dat

2.4. トポロジーファイル (*_top.dat)

2.5. 分子座標ファイル (*_cor.dat)

更新予定