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ので，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）

**iuparavdwname 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）

iuparacstmnbname para\_cstmnb.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(ifcstmnb)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(ifoutthc)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 contraint 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 distorsion)

# 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\_htf 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ちらが採用される．

r\_expand 1.1111111d0 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．Iuaddtopname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1.0×10-15 / 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\_ewr long Coulombポテンシャル（実空間寄与）

mts\_ewk 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．

**iftcratom .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．

ifoutthc .false. 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outthcname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potbias.ini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，process\_data/lvs\_vel/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iustrmvelname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 ifcalpremole or ifcalpreatom !!!

**ifcalpremole .true.** 分子圧力を計算する．

**ifcalpreatom .true.** 原子圧力を計算する．

ifnetqcorrp .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 [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 [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法で使用されるB-spline関数のオーダー

↑charge gridの大きさはおおよそ1Å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 [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 [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 [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 [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** 各種データの出力ステップ間隔

**pressinterval 100** 圧力データの出力ステップ間隔

heatfinterval 100 熱流束，運動量流束データの出力ステップ間隔

**recinterval 1000** リスタートファイルの出力ステップ間隔．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，(rrcut [Å]+ 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

### Cufoff 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