

cosgene 機能追加
(GAUSS の温度制御での温度補正機能)
設計書

2018 年 2 月 5 日

目次

1. GAUSS の温度制御での温度補正機能	3
1. 1. 目的	3
1. 2. COMBINE 法相互作用エネルギー計算と出力機能の追加 (cosgene)	3
1. 3. 温度補正のログ情報	3
1. 4. 温度補正機能テスト結果	4

1. GAUSS の温度制御での温度補正機能

1. 1. 目的

GAUSS の束縛法による温度制御はフィードバック制御を持たないため、温度が低温側に徐々にドリフトし、長時間の MD では目的の温度を保てない可能性がある。

本現象を回避するため、GAUSS の温度制御に対し MD のループ間隔を指定して速度スケールリングを行う機能を追加する。

1. 2. COMBINE 法相互作用エネルギー計算と出力機能の追加 (cosgene)

制御ファイルの MD フェーズで GAUSS の束縛法に対する速度スケールリングの間隔を指定する。

スケールリング間隔が 0 の場合は、スケールリングは行わないこととする。

具体的な指定方法は以下の通りで、デフォルトではスケールリングは行わない。

MD フェーズオプション

#	項目	キーワード	型	内容
1	速度スケールリング間隔	SCLUPD	整数型	GAUSS の束縛法での速度スケールリング間隔 (0)

1. 3. 温度補正のログ情報

MD 条件のパラメータ表示時に速度スケールリングの間隔を表示する。

```
1) GENERAL PARAMETERS
CONTINUOUS JOB : false
RESTART       : false
CPU LIMIT (S) : 36000000.0000000
LOOP LIMIT    : 1000
TIME LIMIT (PSEC): 10000000.0000000
TIME STEP (FSEC): 0.500000000000000
UPDATE        : 20
MONITORING LOG : 10
LOG FORMAT    : detail
STOP CENTER   : adjust none
ENSEMBLE      : canonical
INTEGRATION   : velocity-verlet
CANONICAL MD
(GAUSSIAN CONSTRAINT METHOD)
SCALING INTERVAL : 1
TEMPERATURE (K) : 300.0000000000000
INITIAL VELOCITY: gaussian
TEMPERATURE (K) : 300.0000000000000
```

“SPLUPD=1”を指定時の cosgene のログ

```
INTEGRATION : velocity-verlet
CANONICAL MD
(GAUSSIAN CONSTRAINT METHOD)
NO SCALING TEMPERATURE
TEMPERATURE (K) : 300.0000000000000
```

“SPLUPD=0”を指定時の cosgnee のログ

1. 4. 温度補正機能テスト結果

ALA*8 の系で 10000 ステップの MD を実行し、スケーリングなしと毎ステップのスケーリングを行った場合の温度と速度の推移を計測した。

各ステップでスケーリングを行った場合は温度のドリフトが発生しないことが確認でき (fig 1. 4. 1)、また、MD 開始から 2140 ステップまでのポテンシャルエネルギーは 7 桁のレベルで一致することが確認できた (fig 1. 4. 2)。

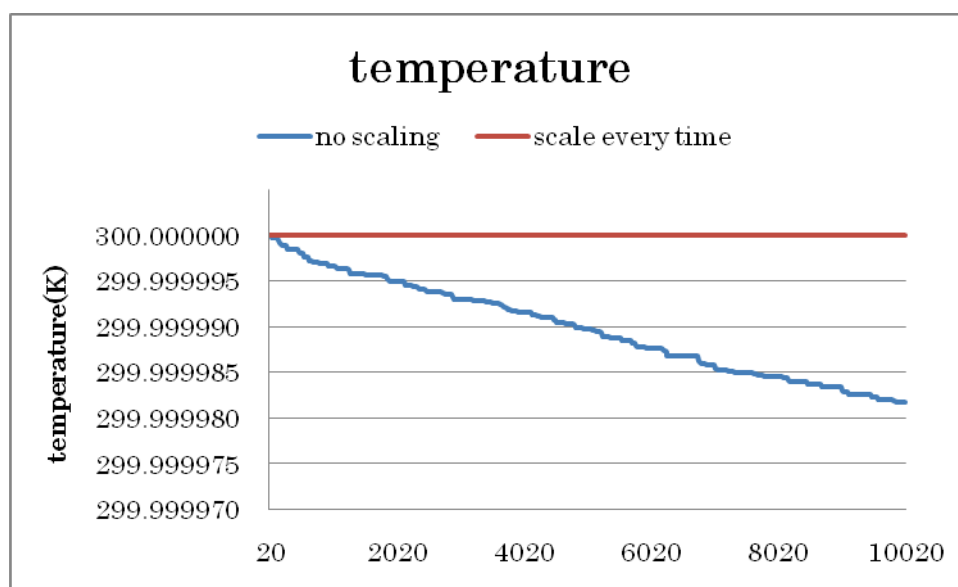


fig 1. 4. 1 10, 000 ステップの温度の推移 (赤が毎ステップスケーリング)

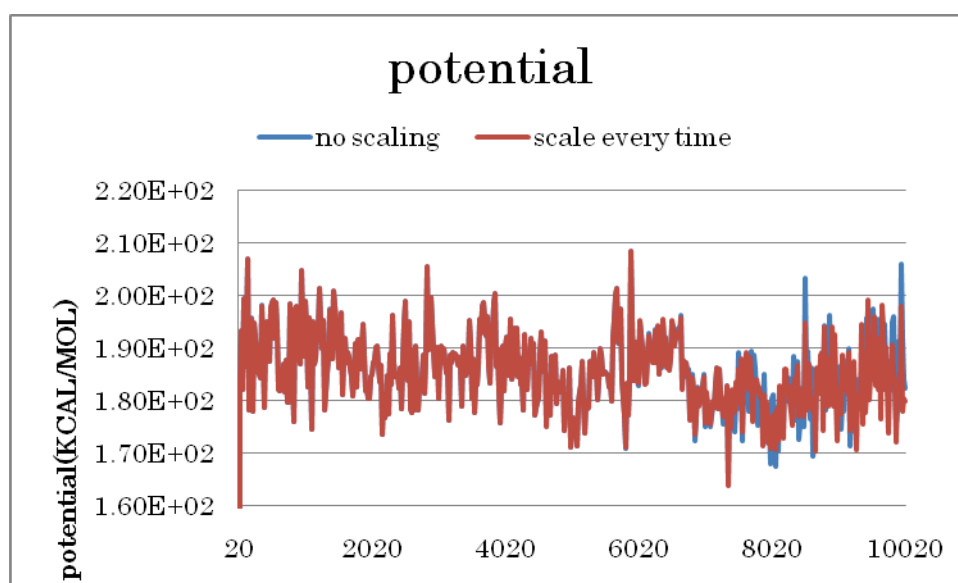


fig 1. 4. 2 10, 000 ステップのポテンシャルエネルギーの推移 (赤が毎ステップスケーリング)