

myPresto 5.0

- cosgene -

USER MANUAL

2018/01/12

本ドキュメントについて

本ドキュメントは、「**myPresto 5.0** USER MANUAL」の別冊です。コピーライト、プログラム使用許諾条件、著者および引用文献については、「**myPresto 5.0** USER MANUAL」の記述に準じます。

謝辞

本ソフトウェアの研究開発は、国立研究開発法人日本医療研究開発機構 (AMED) の援助によって行われました。ここに感謝の意を記します。

本ソフトウェアは、故・京極好正博士の始められた研究の中で開発されました。

目次

1. cosgene の概要	5
2. cosgene の機能	5
3. インストール方法と実行コマンド	6
3.1 インストール方法	6
3.2 実行コマンド	6
4. コントロールファイルの作成方法	7
4.1 EXE> INPUT グループ	9
4.2 EXE> MINimize グループ	16
4.3 EXE> MD グループ	33
4.4 EXE> OUTPUT グループ	60
4.5 EXE> END グループ	61
5. トrajジェクトリーの解析方法	62
5.1 ANALYSIS 実行方法	62
5.2 ANALYSIS 入力データの作成	62
5.2.1 コントロールファイルの構成	62
5.2.2. EXE> INPUT グループ	63
5.2.3. EXE> ANALysis グループ	67
5.3. ANALSYS 計算実行例	79
6. 参考文献	83
(付録 A) 入出力ファイル	91
A.1 構造探索エンジンの入出力ファイル	91
A.1.1 フェーズの説明	91
A.2 入力ファイル	92
A.2.1 制御ファイル	93
A.2.2 トポロジーファイル	111
A.2.3 座標ファイル	122
A.2.4 SHAKE ファイル	123
A.2.5 固定原子・自由原子指定ファイル	125
A.2.6 CAP 指定ファイル	127
A.2.7 拡張 CAP 指定ファイル	129

A. 2. 9 距離拘束ファイル.....	133
A. 2. 10 二面角拘束ファイル.....	135
A. 2. 11 モニター指定ファイル.....	137
A. 2. 12 系の重心合わせ指定用ファイル.....	139
A. 2. 13 系の GB/SA 及び ASA 用パラメーター指定ファイル.....	141
A. 2. 14 Umbrella 拘束ファイル.....	143
A. 2. 15 リスタートファイル.....	146
A. 2. 16 剛体モデルファイル.....	149
A. 3 出力ファイル	151
A. 3. 1 MIN エネルギートラジェクトリ	152
A. 3. 2 MD エネルギートラジェクトリ	154
A. 3. 3 モニター指定トラジェクトリ.....	156
A. 3. 4 総エネルギーデータ.....	158
A. 3. 5 座標トラジェクトリ.....	159
A. 3. 6 速度トラジェクトリ.....	161

1. cosgene の概要

cosgene は、COnformation SamplingG ENgine (分子構造探索エンジン)の略で、このエンジンは、マルチカノニカル分子動力学等、最新の機能を持つ分子動力学(MD)ツールによって、膜蛋白質や低分子化合物との複合体を含む生体高分子系に対して、高能率の構造探索や自由エネルギー計算、結合自由エネルギーの算出を行うためのものです。Smooth-reaction path generation (SRPG) 法が結合自由エネルギーの計算手法として利用できます。(Fukunishi, Y., Mikami, Y., Nakamura, H. (2003) J. Phys. Chem. B. 107, 13201-13210)

2. cosgene の機能

cosgene には、以下のような機能が実装されています。

cosgene の主な機能

機能分類	内容
エネルギー最小化	Steepest decent method, Steepest decent method with SHAKE, Conjugate gradient method
MD 計算	Micro-Canonical, Canonical, Force-biased Multi-Canonical
	Tsallis Dynamics
積分器	Leap-frog (Verlet), Velocity Verlet, RESPA
Thermostat	Hoover-Evans Gaussian constraint, Nose-Hoover
Barostat	Andersen, Parrinello-Rahman
長距離相互作用	Direct summation, Direct summation & Cutoff, Ewald, Particle Mesh Ewald, Fast Multipole Method
拘束法	SHAKE, RATTLE, Rigid-body, Position restraint, Distance restraint
境界条件	球・楕円体、周期境界条件

cosgene には、別に 2 つのバージョンがあります。通常の分子シミュレーションには、cosgene を用います。

cosgene	: 通常の分子シミュレーション用
cosgene_min_fixatom	: タンパク質中の化合物専用の高速構造最適化用
cosgene_multiPDB_Mol2	: 化合物専用の入出力が mol2 ファイル版

3. インストール方法と実行コマンド

cosgene は、tplgeneX や tplgeneL によって準備した分子の初期座標やトポロジーファイルなど、計算対象の系の分子情報を入力として、系のエネルギー最小化や MD 計算を行います。計算結果は、解析ツールを使用して解析することができます。

3.1 インストール方法

myPresto version 5.0 では、cosgene は、cosgene_pack.tar.gz というファイル名で配布しています。cosgene_pack には、tplgeneX、tplgeneL、Hgene、setwater、add_ion、SHAKEinp 等、cosgene の入力ファイル作成に必要なツール群も含まれています。

3.2 実行コマンド

初期座標やトポロジーファイル、計算条件などの分子情報は、コントロールファイルで指定します。cosgene はコントロールファイルを標準入力より読み込んで動作します。cosgene の実行は、次のコマンドを実行します。

```
% (path)/cosgene < control_file > output
```

(path)の部分は、cosgene への相対パス、もしくは、絶対パスを指定します。あらかじめ、cosgene へのパスを通してしている場合には、“(path)/”の部分の入力は不要です。コントロールファイルの作成方法は、次の章で説明します。

cosgene_pack のインストールプログラムを実行すると cosgene は、cosgene_pack/bin にインストールされます。例えば、cosgene_pack/work1 で作業をする場合には、その場所から bin/cosgene への相対パスを指定します。つまり、次のコマンドを実行します。

```
% ../bin/cosgene < control_file > output
```

4. コントロールファイルの作成方法

本章では、コントロールファイルの作成方法について説明します。

コントロールファイルは、以下のグループからなり、各グループは“QUIT”で終了します。

- EXE> INPUT グループ : 主な入力ファイル名を指定します。
- EXE> MINI グループ : エネルギー最小化のオプションを指定します。
- EXE> MD グループ : MD を行うためのオプションを指定します。
- EXE> OUTPUT グループ : 最終結果の出力を指定します。
- EXE> END : コントロールファイルの終わりを示します。

```
EXE> INPUT
      TOPOLOGY= FORM   NAMETO= thrp.tpl   ; トポロジーファイル
      COORDINA= PDB    NAMECO= thrp.pdb   ; 初期座標
      QUIT
EXE> MINI
      METHOD=  CONJ                ; 共役勾配法でエネルギー最小化を行う
      LOOPLI=  40      UPDATE=  20   ; 40 回計算し、20 回ごとに相互作用テーブルを更新する。
      CUTMET=  RESA    CUTLEN=  8.0D0 ; 相互作用 CUTOFF 長を 8Å とする。
      DIEFUN=  DIST    DIEVAL=  2.0D0 ; 距離依存誘電率を使用する。
      QUIT
EXE> OUTPUT
      COORDINATE= PDB  NAMECO=   thrp_mini.pdb ; PDB 書式の最終構造
      QUIT
EXE> END
```

エネルギー最小化のみを実行する場合のコントロールファイルの例

```

EXE> INPUT
      TOPOLOGY=  FORM      NAMETO=  serp. tpl   ; トポロジーファイル
      COORDINA=  PDB       NAMECO=  serp. pdb   ; 初期座標
      QUIT
EXE> MD
      LOOPLI=    20000      ; MD のステップ回数
      UPDATE=    20         ; 相互作用テーブルの更新頻度
      TIMEST=    0.5D0      ; 時間積分のタイムステップ
      METHOD=     CANONICAL   ; NVT カノニカル MD
      SETTEM=    300.0D0     ; 設定温度
      INITIA=    SET        STARTT=    300.0D0   ; 初期温度の設定
      RANDOM=    654321
      CUTMET=    RESA       CUTLEN=  10.0D0      ; エネルギーCUTOFF の指定
      DIEFUN=    CONS       DIEVAL=  1.0D0      ; 誘電率
      QUIT
EXE> OUTPUT
      COORDINATE= PDB       NAMECO=  serp_md_1p.pdb ; PDB 書式の最終構造
      QUIT
EXE> END

```

MD の場合のコントロールファイルの例

コントロールファイルの各コマンド説明

必須	◎
省略可	△
特定機能をユーザ指定するとき必須	○

4.1 EXE> INPUT グループ

INPUT グループでは、トポロジーファイル、初期座標、各種拘束・モニター対象の原子の指定などのために、それらの外部ファイルの指定を行います（各外部ファイルの書式は、巻末「A ファイル書式」を参照）。これら INPUT グループの入力は "EXE> MIN"、"EXE> MD" に共通で使用されます。

INPUT グループでの指定事項：

- (1) 系のトポロジーの指定
- (2) 系の座標の指定
- (3) SHAKE 対象原子と拘束距離の指定
- (4) 固定原子(fix atom)・自由原子の指定
- (5) CAP ポテンシャルの指定
- (6) 拡張 CAP ポテンシャルの指定
- (7) RMSD を計算するときの指定 (MIN、MD 使用時)
- (8) 位置拘束の指定
- (9) 原子間距離拘束の指定
- (10) 二面角拘束の指定
- (11) モニター対象の指定
- (12) 系の GB/SA 及び ASA 用パラメーターの指定
- (13) Umbrella 拘束の指定
- (14) 系の重心あわせの指定
- (15) QUIT

(1) 系のトポロジーの指定

TOPOLogy：トポロジーファイルの書式 (◎)

=NOREad；トポロジーファイル入力なし（デフォルト）

=FORMatted；書式つきアスキーファイル

=BINArY；バイナリーファイル

UNITTopology：トポロジーファイルの IO unit (△)

=10；（デフォルト）

NAMETOpology=(トポロジーファイル名、133 文字以内。TOPOLogy=[FORM|BINA]のとき)

(2) 系の座標の指定

COORDInate:PDB 書式 3 次元座標ファイルの書式 (◎)

=NOREad；座標入力なし（デフォルト）

=PDB；PDB ファイルフォーマット

=BINArY ; バイナリーファイル

UNITCOordinate : 座標ファイルの IO unit (△)

=11 ; (デフォルト)

NAMECOordinate=(座標ファイル名、133 文字以内。COORD=[PDB|BINA]のとき)

(3) SHAKE/RATTLE 対象原子と拘束距離の指定

SHAKE/RATTLE を使用する場合は、対象原子の原子番号と拘束距離をファイルで指定する方法と、それらの情報を自動的に作成する方法があります。ファイルには通常の 2 原子間の距離の拘束のほかに、3 原子による三角形 (CH_2 , H_2O) および 4 原子による四面体 (CH_3 , NH_3) のトポロジーでの距離の拘束を特別に指定することができます。SHAKE/RATTLE の自動作成は以下の方法で行われます。

(a) 水分子以外場合 (分子名が“WAT”でない場合)

水素でない原子に対し 1~3 つの水素原子が共有結合している場合に、これらの原子間距離を計算し、それぞれ 2~4 原子の SHAKE/RATTLE 情報として設定します。

(b) 水分子の場合 (分子名が“WAT”の場合)

プログラム内部に保持している水の結合距離を基に 3 原子の SHAKE/RATTLE 情報として設定します。

(3-1) SHAKE/RATTLE 情報入力指定

SETSHake : SHAKE/RATTLE を適用する原子を指定するファイルを読む (○)

=NOREad ; SHAKE/RATTLE を使用しない (デフォルト)

=READ ; SHAKE/RATTLE を使用する

=AUTO ; SHAKE/RATTLE 情報を自動作成する

UNITSHake:SHAKE 指定ファイルの IO Unit (△)

=12 ; (デフォルト)

NAMESHake=(SHAKE ファイル名、133 文字以内(△))

【注意】 SHAKE/RATTLE を使用する場合には、ほかに EXE> MD ないし EXE> MIN グループに“SHAKMethod= [HBON | ALLB]”を指定します。

【注意】 SHAKE/RATTLE は、適用範囲に制限があります。

SHAKE/RATTLE の適用範囲

		SHAKE	RATTLE
エネルギー最小化 (EXE> MIN)	最急降下法 (METHOD=STEEP)	○	×
	共役勾配法 (METHOD=CONJ)	×	×
MD 計算 (EXE> MD)	Leap Frog Verlet (INTEGR=LEAP)	○	×
	Velocity-Verlet (INTEGR=VELO)	×	○
	Multi Time Step (INTEGR=MTS)	×	×

(3-2) SHAKE/RATTLE 自動作成情報出力指定

SHAKE/RATTLE 情報を自動作成した場合、作成された情報をファイル出力することができます。出力されるファイルの書式は入力ファイルと同じです。

DBGSHA : SHAKE/RATTLE 自動作成情報出力指定 (△)

=NOWrite : ファイル出力しない (デフォルト)

=ASCII : ファイル出力する

UNITDS : SHAKE/RATTLE 自動作成情報ファイルの IO unit (△)

=84 : (デフォルト)

NAMEDS =(SHAKE/RATTLE 自動作成情報ファイル名、133 文字以内。)

(4) 固定原子(fix atom)・自由原子の指定

固定原子指定は、指定した原子を MIN/MD 計算の対象から外し力場を与える点として扱います。自由原子は通常の MIN/MD 計算の対象となる原子です。固定すべき原子番号を指定するか、または特定の中心と半径 R1, R2 を指定し、中心からの距離 R が $R1 < R < R2$ 内となる原子を指定することができます。そのための指定ファイルが必要です。同様に自由原子の指定が行われます。この指定がなければ、系の原子はすべて自由原子として扱われます。

SETVARIABLES=:固定原子・自由原子指定ファイルの書式 (△)

=NOREad ; 固定原子指定なし (デフォルト)

=READ ; 固定原子指定あり

UNITVARIABLES : 固定原子指定ファイルの IO unit (△)

=13 ; (デフォルト)

NAMEVARIABLES =(固定原子指定ファイル名、133 文字以内。)

(5) CAP ポテンシャルの指定

CAP ポテンシャルを適用する原子と CAP の中心の座標、半径・力の定数を指定します。CAP 指定ファイルに原子を指定、中心座標などは CAP 指定ファイルでもコントロールファイルでも指定できますが、コントロールファイルの入力が優先されます。

SETBOUNDARY : CAP ポテンシャルを適用する原子と CAP の半径・力の定数を指定 (○)

=NOREad ; CAP を使用しない (デフォルト)

=READ ; CAP を使用する

UNITBOUNDARY : CAP 指定ファイルの IO Unit (△)

=14 ; (デフォルト)

NAMEBOundary=(CAP 指定ファイルの名前、133 文字以内 (○))

【注意】 EXE> MD に “CALCAP=CALC” を加え、更に CAP パラメーターの指定を加えること。また、“STOPCE=[TRAN|BOTH]” を指定し、系の第 1 チェイン（先頭分子）を空間に固定することで CAP ポテンシャルが第 1 チェインから外れないようにするのが望ましい。

（６）拡張 CAP ポテンシャルの指定

拡張 CAP ポテンシャルを適用する原子と拘束範囲、力の定数を指定します。拘束範囲は球体および楕円体を指定できます。

SETExtendCap：拡張 CAP ポテンシャルを適用する原子と拘束範囲、力の係数を指定 (○)

=NOREad ; 拡張 CAP を使用しない (デフォルト)

=READ ; 拡張 CAP を使用する

UNITExtendCap：拡張 CAP 指定ファイルの IO Unit (△)

=23 ; (デフォルト)

NAMEExtendCap=(拡張 CAP 指定ファイルの名前、133 文字以内 (○))

【注意】 EXE> MD に “EXTCAP=CALC” を加えること。また、“STOPCE=[TRAN|BOTH]” を指定し、系の第 1 チェイン（先頭分子）を空間に固定することで CAP ポテンシャルが第 1 チェインから外れないようにするのが望ましい。

（７）RMSD を計算するときの指定 (MIN、MD 使用時)

REFC00rdinate：参照ファイル。基準となる PDB 書式の座標ファイル (○)

=NOREad ; 使用しない (デフォルト)

=PDB ; 使用する

UNITREFcoordi：参照ファイルの IO Unit (△)

=15 ; (デフォルト)

NAMEREFcoordi=(参照ファイルのファイル名、133 文字以内)

【注意】 RMSD 計算時には、EXE>MD ないし EXE>MIN に” BESTFit=YES” を加える。

（８）位置拘束の指定

位置拘束を使用するには、次の 2 つのファイルの準備が必要です。

- ・ 拘束の対象原子の指定と力の定数に関する情報を記載した拘束指定ファイル
- ・ 拘束する座標を記載した PDB 形式の参照ファイル

REFC00rdinate : 参照ファイル、RMSD の時と同じ (○)
 =NOREad ; 使用しない (デフォルト)
 =PDB ; 使用する
 UNITREFcoordi : 参照ファイルの IO Unit (△)
 =15 ; (デフォルト)
 NAMEREFcoordi=(参照ファイルのファイル名、133 文字以内 (○))
 POSITIonrestrain : 対象原子、力の定数などの指定 (○)
 =NOREad ; 使用しない (デフォルト)
 =READ ; 使用する
 UNITPOsition : 拘束対象指定ファイルの IO Unit
 =16 ; (デフォルト) (△)
 NAMEPOsition=(拘束指定ファイルの名前、133 文字以内(○))

【注意】更に、EXE> MIN ないし EXE> MD に” CALPSR=CALC” と位置拘束用パラメーターの指定が必要です。

(9) 原子間距離拘束の指定

原子間距離拘束指定ファイルを用意します。

DISTANcerestrain : 原子間距離拘束を用いる
 =NOREad ; 適用しない (デフォルト)
 =READ ; 適用する
 UNITDIstance : 距離指定ファイルの IO Unit
 =17 ; (デフォルト) (△)
 NAMEDIstance= (原子間距離拘束指定ファイルの名前、133 文字以内)

【注意】更に EXE> MIN ないし EXE> MD に” CALDSR= CALC” と拘束ポテンシャルの重みパラメーターが必要です。

(10) 二面角拘束の指定

二面角拘束指定ファイルを用意します。

DIHEDRalrestrain : 2 面角拘束を用いる
 =NOREad ; 適用しない (デフォルト)
 =READ ; 適用する

UNITDH : 2面角拘束指定ファイルの IO Unit

=18 ; (デフォルト) (△)

NAMEDH= (2面角拘束指定ファイルの名前、133文字以内)

【注意】更に EXE> MIN ないし EXE> MD に” CALDHR= CALC” と拘束ポテンシャルの重みパラメーターが必要です。

(1 1) モニター対象の指定

特定原子の座標、原子間距離、角度、二面角などを MD の実行中にリアルタイムでモニターし、ファイルに出力する。対象とする原子、原子の対を指定するファイルを準備する。

OUTMONitoritems : モニター情報指定ファイル

=NOREad ; 適用しない (デフォルト)

=READ ; 適用する。

UNITMO : モニター指定ファイルの IO Unit

=19 ; (デフォルト) (△)

NAMEMO= (モニター指定ファイルの名前、133文字以内 (○))

【注意】 EXE> MD に、下記事項を設定する。

OUTTRJ= n : 出力を n ステップ毎に行う

NAMETR= (モニター情報出力ファイル)

MNTRTR= [ASCI | BINArY] : 出力形式

(1 2) 系の GB/SA 及び ASA 用パラメーターの指定

ASAREA : GB/SA 及び ASA 用パラメーター指定ファイル (○)

=NOREad ; ファイル入力なし (デフォルト)

=READ ; ファイル入力

UNITSA : GB/SA 及び ASA 用パラメーターファイルの I/O unit (△)

=77 ; (デフォルト) (△)

NAMESA= (GB/SA 及び ASA 用パラメーター指定ファイルの名前、133文字以内 (○))

【注意】 GB/SA 及び ASA 用パラメーターファイルは、専用ツールによって生成できます。ファイルには各原子の半径や、atomic solvation parameterなどを指定します (指定方法は、

巻末「A ファイル書式」を参照)。

(1 3) Umbrella 拘束の指定

UMBREL : Umbrella 拘束ファイル (○)

=NOREad ; 適用しない (デフォルト)

=READ ; 適用する

UNITUI : Umbrella 拘束ファイルの I/O unit (△)

=22 ; (デフォルト) (△)

NAMEUI= (Umbrella 拘束ファイルの名前、133 文字以内 (○))

【注意】 Umbrella 拘束ファイルは、Filling Potential 法を適用した場合に使用します。
(指定方法は、巻末「A ファイル書式」を参照)。

(1 4) 系の重心あわせの指定

SETORIGIN : 系の重心を座標の原点に置く。

=NO ; 適用しない (デフォルト)

=YES ; 適用する

(1 5) QUIT

EXE>グループの入力の終わりを示す。

4.2 EXE> MINimize グループ

ここでは、エネルギー最小化に必要な、方法、収束条件、計算結果の出力、計算に用いるエネルギー項の指定、境界条件・拘束条件の指定を行います。

エネルギー計算に関する指定のほとんどは、EXE> MD グループと共通です。

MIN/MD 入力事項表

		MIN	MD
1	エネルギー最小化制御パラメーター (STEEP/CONJ 共通)	○	
1-1	最急降下法 (STEEP) での制御パラメーター	○	
1-2	共役勾配法 (CONJ) での制御パラメーター	○	
1-3	計算結果の出力指定 (STEEP/CONJ 共通)	○	
1	MD 制御パラメーター		○
1-1	計算上限の設定		○
1-2	MD のタイムステップとループ回数の指定		○
1-3	MD 計算の種類		○
1-4	拡張アンサンブル		○
1-5	温度設定		○
1-6	MD 計算条件		○
1-7	ジョブのリスタート設定		○
1-8	計算結果の出力指定		○
2	解析用データ出力 (エネルギー変化)	○	
2	解析用データ出力 (トラジェクトリー、パラメーター)		○
3	エネルギー計算に関する制御パラメーター	○	○
3-1	相互作用 CUTOFF の方法	○	○
3-2	相互作用計算のスイッチ	○	○
3-3	Filling Potential 法		○
4	拘束条件の指定	○	○
4-1	SHAKE/RATTLE の指定	○	○
4-2	剛体モデルの指定		○
5	PME, Ewald, FMM の指定	○	○
6	溶媒効果	○	○
7	境界条件	○	○
8	LIST	○	○
9	QUIT	○	○

(1) エネルギー最小化制御パラメーター(STEEP/CONJ 共通)

METHODofmini : エネルギー最小化の方法 (◎)

=STEEpest ; 最急降下法 (デフォルト)

=CONJugate ; 共役勾配法

CPUTIMelimit : CPU time の上限 (秒) (○)

=60.0 ; (デフォルト)

LOOPLimit : エネルギー最小化サイクル数。

0 のときは初期座標のエネルギー計算のみ行う。(○)

=0 ; (デフォルト)

UPDATEinterval : 座標情報の更新サイクル。(△)

1-5 相互作用エネルギーに CUTOFF が用いられている場合、相互作用テーブルの更新サイクルを指定する。周期境界条件の場合は、ユニットセルから飛び出した原子の座標をユニットセル内に補正する計算の更新サイクルを指定する。

=20 ; (デフォルト)

CONVGRadient : 収束判定条件。(△)

root mean square summation of force (R. M. S. F.) が指定の値より小さい場合、収束したと判定し計算を終了する。単位(kcal/mol/Å)。

=0.1 ; (デフォルト)

ISTEPLength : 最初のステップでの原子の移動距離 (初期座標との R. M. S. D. (Å))

=0.01 ; (デフォルト) (△)

(1-1) 最急降下法(STEEP)での制御パラメーター

最急降下法でのステップ長のパラメーターを設定します。

UPRATE : 前のステップでよりエネルギーの低い構造を得ることができていれば、ステップ長に UPRATE をかけて移動距離を伸ばす。

=1.2 ; (デフォルト)

DOWNRate : 前のステップでエネルギーが高くなっているなら、ステップ長に DOWNRATE をかけて移動距離を短くする。

=0.6 : ; (デフォルト)

(1-2) 共役勾配法(CONJ)での制御パラメーター

共役勾配法での探索パラメーターを設定します。

LINESeachlimit : Line search のループ回数。あまり小さくしないこと。

=10 ; (デフォルト)

CONVLInesearch : Line search の収束判定の閾値。

(DIRGRD / DIRGRS) $\leq$ CONVL に達すると収束したとみなす。

DIRGRD : Current Directional Derivative.

DIRGRS : Initial Directional Derivative.

=0.1 ; (デフォルト)

(1-3) 計算結果の出力指定 (STEEP/CONJ 共通)

MONITORinterval : 標準出力の出力サイクル

エネルギー、RMSD などの出力を行うサイクルを指定する。(△)

=10 ; (デフォルト)

LOGFOrmat : 標準出力の書式 (△)

=SHORT ; 1 行 80 文字以内の簡易出力 (デフォルト)

=DETAil ; 1 行 80 文字以内の詳細出力。各エネルギーを追加。

BESTFitmini : エネルギー最小化での、参照構造に対する系の第 1 チェインの RMSD の変化を標準出力する。参照構造は、EXE> INPUT フェーズにて "REFCOORD", "NAMERE" を指定する必要がある。(△)

=NO ; 計算しない (デフォルト)

=YES ; 計算する。

(2) 解析用データ出力 (エネルギー変化)

エネルギー最小化のステップ毎に、各エネルギーをファイルに出力します。

MIN エネルギートラジェクトリ

NAMEAN= (MIN エネルギートラジェクトリのファイルの名前)

UNITAN : MIN エネルギートラジェクトリのファイルの IO Unit

=30 ; (デフォルト)

【注意】 MIN エネルギートラジェクトリは、ステップごとに出力されます。

(3) エネルギー計算に関する制御パラメーター (STEEP/CONJ 共通)

(3-1) 相互作用 CUTOFF の方法

CUTMETHod : 相互作用 CUTOFF の方法

=RESC ; residue base cutoff (デフォルト)

残基の重心間の距離が、CUTOFF 長以下なら残基に含まれる全原子間の相互作用を計算する。

=ATOM ; atom base cutoff

原子重心間の距離が、CUTOFF 長以下なら原子間の相互作用を計算する。

=RESA ; residue base cutoff

残基に含まれる 2 原子間の最短の距離が、CUTOFF 長以下なら残基に含まれる全原子間の相互作用を計算する。

【注意】通常 (周期境界条件でない場合) は RESA が推奨される。周期境界条件では RESC が推奨される。

CUTLENgth : cutoff 長 (Å)

=8.0 ; (デフォルト)

DIEFUNction : 空間の比誘電率の形式

=CONS ; 誘電率は定数 (デフォルト)

=DIST ; 誘電率 ϵ は距離に比例する。 $\epsilon = \text{DIEVAL} * \text{距離}(\text{Å})$

DIEVALue : 空間の比誘電率

=1.0 ; (デフォルト)

【注意】"DIEFUN=CONS" の場合は、通常 "DIEVAL=1.0" を用いる。真空中で "DIEFUN=DIST" を指定の場合、DIEVAL は 1.0~4.0 程度の値とする。

USESPL ; スプライン補間の適用

=NO ; 適用しない (デフォルト)

=YES ; 適用する

CUT-ON ; スプライン補間開始距離

=6.0 ; (デフォルト)

【注意】入力トポロジーが CHARMM ポテンシャルの場合、CHARMM によるスプライン補間を適用する。

(3-2) 相互作用計算のスイッチ

特定の相互作用を計算する（しない）場合に、以下のスイッチを用います。

【注意】特に重要

・1-5 相互作用のスイッチでは、相互作用テーブルを用いる（CUTOFF を用いる）場合と相互作用テーブルを用いない場合で、van der Waals/静電相互作用/水素結合のエネルギー計算のスイッチを切り替える必要があります。

・拘束（CAP, position restraint など）を用いる場合、対応するエネルギー計算のスイッチを入れる必要があります。

(3-2-1) 1-2、1-3、1-4 相互作用のスイッチ

通常の MIN/MD 計算では、すべてデフォルト値を用います。極めてまれですが、特定の相互作用を計算したくない場合にのみ用います。

CALBONd : 1-2 相互作用の計算

=CALC ; 計算する（デフォルト）

=NOCALc ; 計算しない

CALANGLe : 1-3 相互作用の計算

=CALC ; 計算する（デフォルト）

=NOCALc ; 計算しない

CALTORSion : torsion 相互作用の計算

=CALC ; 計算する（デフォルト）

=NOCALc ; 計算しない

CALIMProper : improper torsion の計算

=CALC ; 計算する（デフォルト）

=NOCALc ; 計算しない

CALV14 : 1-4 van der Waals の計算

=CALC ; 計算する（デフォルト）

=NOCALc ; 計算しない

CALE14 : 1-4 静電相互作用の計算

=CALC ; 計算する（デフォルト）

=NOCALc ; 計算しない

(3-2-2) 1-5 相互作用計算のスイッチ

CUTOFF を用いる計算（相互作用テーブルを用いる計算）をする場合と、CUTOFF を用いないで全ての 1-5 相互作用を全原子対に対し計算（直接計算）する場合で、スイッチの指定を切り替えます。デフォルトでは、CUTOFF を用いる場合に設定されています。通常、1-5 van der

Waals, 1-5 静電相互作用、水素結合はすべて計算します (デフォルト)。極めてまれですが、特定の相互作用を計算したくないときにスイッチを切り替えてください。水素結合 (12-10 ポテンシャル) を含まない力場を用いる場合は、スイッチ CALHYD の値に関わらず水素結合は計算されません。PME 法および Ewald 法の使用時には、相互作用テーブルを使用してください。

相互作用テーブルを使用する (CUTOFF を用いる) 場合

以下の CALV15, CLAE15, CALHYD を=CALC に設定、CALV5N, CALE5N, CALH5N を=NOCALC に設定する。(デフォルト)

CALV15 : 1-5 van der Waals

=CALC ; 計算する (デフォルト)

=NOCALC ; 計算しない

CALE15 : 1-5 静電相互作用

=CALC ; 計算する (デフォルト) ※PME/FMM のとき必須

=NOCALC ; 計算しない

CALHYD : 水素結合

=CALC ; 計算する (デフォルト)

=NOCALC ; 計算しない

相互作用テーブルを使用しない場合

以上の CALV15, CLAE15, CALHYD を=NOCALC に設定、CALV5N, CALE5N, CALH5N を=CALC に設定する。

【注意】 この指定では、PME 法および Ewald 法、ソフトコアを用いた計算はできません。

CALV5N : 1-5 van der Waals

=NOCALC ; 1-5 van der Waals を直接計算しない (デフォルト)

=CALC ; 計算する

CALE5N : 1-5 静電相互作用

=NOCALC ; 1-5 静電相互作用を直接計算しない (デフォルト)

=CALC ; 計算する

CALH5N : 水素結合

=NOCALC ; 水素結合を直接計算しない (デフォルト)

=CALC ; 計算する

(3-2-3) 拘束ポテンシャル

拘束用ポテンシャルはデフォルトでは全て NOCALC (計算しない) にセットされています。CAP 拘束、position restraint, distance/angle/torsion restraint、van der Waals 反発項のソフトコア (soft repulsion) などを用いる場合、それぞれのエネルギー計算項を CALC に設定してください。さらに、通常これらのポテンシャルは対象原子の指定 (EXE>INPUT の章を参照) と、力の定数などのパラメーターを必要とするため各々のパラメーターも入力してください。

これらの拘束ポテンシャルはすべて、系全体のポテンシャルエネルギー項に加算されます。

CALPSR : position restraint

=NOCALC ; 計算しない (デフォルト)

=CALC ; 計算する

EXE>INPUT フェーズにて、以下を指定する。

POSITION=READ

NAMEPO= (position restraint 指定ファイル)

REFCOORD=PDB

NAMERE= (参照座標ファイル)

CALDSR : distance-restraint

=NOCALC ; 計算しない (デフォルト)

=CALC ; 計算する

EXE>INPUT フェーズにて、以下を指定する。

DISTANcerestrain =READ

NAMEDistance= (distance restraint 指定ファイル)

CALDHR : dihedral-restraint

=NOCALC ; 計算しない (デフォルト)

=CALC ; 計算する

EXE>INPUT フェーズにて、以下を指定する。

DIHEDRalrestrain =READ

NAMEDH= (dihedral restraint 指定ファイル)

CALREP : simple repulsion

=NOCALC ; 計算しない (デフォルト)

=CALC ; 計算する

CALCAP : CAP 拘束

=NOCALC ; 計算しない (デフォルト)

=CALC ; 計算する

EXE>INPUT フェーズにて、以下を指定する。

```

SETBOUndary =READ
NAMEBOundary = (CAP boundary 指定ファイル)
EXTCAP : 拡張 CAP 拘束
=NOCALc ; 計算しない (デフォルト)
=CALC ; 計算する
EXE>INPUT フェーズにて、以下を指定する。
SETEXC =READ
NAMEEC = (拡張 CAP 指定ファイル)

```

拘束ポテンシャルに必要なパラメーター

重み因子 : Position, Distance, Repulsion, Dihedral 拘束では、その拘束ポテンシャルの堅さは、温度、重みなどによって決められます。これらパラメーターは系を拘束すれば良い適当な堅さであれば十分なので、値に厳密にこだわる必要は通常はありません。

```

TEMPERature: 拘束に用いる温度 (K) (Position, Distance, Repulsion, Dihedral).
=300.0 ; (デフォルト) (△)
WETDSR : distance restraint の重み
=1.0 ; (デフォルト)
WETPSR : position restraint の重み
=5.0 ; (デフォルト)
WETDHR : dihedral restraint の重み
=10.0 ; (デフォルト)

```

Simple repulsion のパラメーター

```

WETREP : simple repulsion の重み
=1.0 ; (デフォルト)
REPSCALE : van der Waals 半径のスケール因子
=1.0 ; (デフォルト)
REPDELta : 許容誤差
=1.0 ; (デフォルト)

```

CAP 拘束のパラメーター

CAP 拘束では、CAP 拘束対象原子の指定ファイル (EXE>INPUT の章参照)、“CALCAP=CALC”の指定以外に、CAP の中心、半径、壁を形成する反発ポテンシャルの型と力の係数についてのパラメーターが必要になります。デフォルト値はありますが、力の定数 (FORCAP) 以外の

パラメーターはユーザが指定するのが普通です。

RADCAP : CAP 拘束の半径(A)。

(この半径の内側では拘束力は0、外側ではポテンシャルで拘束されます)

=20.0 : (デフォルト)

FORCAP : CAP の壁を作る反発ポテンシャルの力の定数

=150.0 : (デフォルト)

FUNCAP : CAP の壁の反発ポテンシャルの形

=HARMonic : 2 次関数パラボラポテンシャル (デフォルト)

$F = 0.5 * \text{FORCAP} * (R - \text{RADCAP})^2$

ここで、 $R = (\text{チェインの重心}) - (\text{CAP の中心})$ 。

=BIQUadratic : 4 次関数型ポテンシャル

$F = 0.25 * \text{FORCAP} * (R^2 - \text{RADCAP}^2)^2$

ここで、 $R = (\text{チェインの重心}) - (\text{CAP の中心})$ 。

SETCEN : CAP の中心を系の第一チェインの重心にセットする。

=NO : セットしない。中心はCENTRX/CENTRY/CENTRZ で指定する (デフォルト)

=YES : セットする。CAP の中心をデカルト座標 (A) で設定する。

CENTRX= 0.0 : (デフォルト)

CENTRY= 0.0 : (デフォルト)

CENTRZ= 0.0 : (デフォルト)

【注意】これらのパラメーターは、CAP 指定ファイルとコントロールファイルに重複して指定が行われる場合、コントロールファイルの指定が優先します。

【注意】CAP ポテンシャルは、分子・残基の重心に適用されます。従って分子・残基が大きい場合、重心が CAP 半径内にあっても、分子・残基に含まれる原子が CAP 半径の外に出ている場合があります。

拡張 CAP 拘束のパラメーター

拡張 CAP 拘束では、対象原子、対象範囲および力の係数の指定を全て拡張 CAP 指定ファイルにより行います。制御ファイルからは拡張指定ファイル (EXE>INPUT の章参照)、“EXTCAP=CALC”以外の指定は行いません。

(4) 拘束条件の指定

(4-1) SHAKE/RATTLE の指定

SHAKE/RATTLE を使用する場合は、EXE>INPUT グループで対象原子の原子番号と拘束距離を指定した SHAKE ファイルを指定します。さらに、EXE> MIN グループで、計算方法と収束条

件などを指定します。

SHAKEMethod : SHAKE の方法の指定

=NOSHake ; SHAKE を行わない (デフォルト)

=HBON ; 他の拘束と重ならない、独立した拘束として計算する。

=ALLB ; 互いに関連しあう拘束すべてを反復法を用いて計算する。

COVSHK : SHAKE の収束判定条件の閾値。

(CBL - IBL) / IBL がこの値以下であるとき SHAKE は収束したとする。

CBL: 計算し修正した結合長、IBL: 入力で指定した結合長

= 1.0D-6 ; (デフォルト) (△)

LIMSHK : SHAKE の反復解法の反復回数の上限值

=1000 ; (デフォルト) (△)

【注意】他の拘束との重なりがある、互いに関連しあう拘束条件を SHAKE ファイルに指定した場合は、“SHAKEMethod= ALLB”を使用しなければなりません。

【注意】3原子による三角形および4原子による四面体のトポロジーでの特別な拘束は、“SHAKEMethod= [HBON | ALLB]”の指定に関わらず、反復法で計算します。

【注意】極度に歪みの大きい系では、SHAKE が収束せずに計算を中断する場合があります。

【注意】SHAKE/RATTLE は、適用範囲に制限があります。

SHAKE/RATTLE の適用範囲

		SHAKE	RATTLE
エネルギー最小化 (EXE> MIN)	最急降下法 (METHOD=STEEP)	○	×
	共役勾配法 (METHOD=CONJ)	×	×
MD 計算 (EXE> MD)	Leap Frog Verlet (INTEGR=LEAP)	○	×
	Velocity-Verlet (INTEGR=VELO)	×	○
	Multi Time Step (INTEGR=MTS)	×	×

(5) PME, Ewald, FMM の指定

(5-1) Particle Mesh Ewald 法, Ewald 法の指定

周期境界条件においては、1-5 静電相互作用の計算に PME (Particle Mesh Ewald) 法、または、Ewald 法を用いることができます。使用できるのはどちらか一方だけです。

CALPME : PME 法を適用する。

=NOCALC : 適用しない (デフォルト)

=CALC : 適用する

PMESPD : PME 法での計算間隔の調整。

=NORM : 毎回計算する (デフォルト)

=HIGH : 座標情報の更新サイクル"UPDATE"と同期する

PMEUPD : PMESPD= HIGH の場合の計算方法。

=CUT : カットオフ計算を使用する (デフォルト)

近距離相互作用のみを毎ステップ計算更新し、遠距離からの相互作用の計算は、座標情報の更新サイクル"UPDATE"と同期する。

=RECI : 逆空間項計算を使用する

実空間の相互作用のみを毎ステップ計算更新し、波数空間からの相互作用の計算は、座標情報の更新サイクル"UPDATE"と同期する。

【注意】PMEUPD オプションの推奨値は PMEUPD= CUT です。この方法には便宜的ですが保存量の保存性は高い計算方法です。

【注意】PMEUPD= RECI による計算は、PMEUPD= CUT による計算に比べて保存量の保存性が低下します。

CALEWA : Ewald 法を適用する。

=NOCALC : 適用しない (デフォルト)

=CALC : 適用する

【注意】PME および Ewald 法では、以下の指定が必要です。

CALE15= CALC ; 近接原子は相互作用テーブルを用いた CUTOFF 法で計算します。

BOUND= PERI ; PME, Ewald は周期境界条件でないと使用できません。

DIEFUN= CONS ; PME, Ewald ではクーロン力の空間誘電率は定数でないといけません。

PME, Ewald の制御パラメーター

EWAPRM : PME, Ewald 法での Ewald パラメーター

実空間と逆空間の収束パラメーターで、大きくすると実空間の収束が速くなり、小さくすると逆空間の収束が速くなる。0.0~1.0 で指定する。

= 0.35 ; (デフォルト)

REATOL : Ewald 法の実空間でのカットオフに対する許容誤差 (ϵ)

$(\text{erfc}(\beta R_{\text{cut}}) / R_{\text{cut}} < \epsilon)$

= 1.0d-19 ; (デフォルト)

PME でのメッシュ数の指定

MESHLX= 16 : X 軸方向 (デフォルト)

MESHLY= 16 : Y 軸方向 (デフォルト)

MESHLZ= 16 : Z 軸方向 (デフォルト)

PMEORD : 電荷分布をメッシュ点で代表するときのスプライン関数フィットの次数

=5 : EWAPRM = 0.35 のときの推奨値 (デフォルト)

【注意】メッシュ数は、1Å程度でメッシュが切れるように指定するのが良い。

(5-2) Fast Multiple Method の指定

USEFMM : Fast Multipole 法の適用の有無

クーロン力をカットオフしない方法として Fast Multipole 法(FMM)を適用するか、しないかを指定する。周期境界条件でない場合に適用できる。

=NO ; FMM を適用しない (デフォルト)

=YES ; FMM を適用する。

FMMSPD : FMM 法での 1-5 静電相互作用の計算間隔の調整。

=NORM : 毎回計算する (デフォルト)

=HIGH : 座標情報の更新サイクル"UPDATE"と同期する

FMTREE : Fast Multipole 法の Tree の深さ

Fast Multipole 法の Tree の深さ。最小セルの個数は 8**FMTREE 個であり、最小セルに原子が数個～数十個含まれるように設定する。オーバーフローで停止する場合は、FMTREE の値を大きくする。

= 3 ; (デフォルト)

FMPOLE : Fast Multipole 法の多極子展開の次数

Fast Multipole 法の多極子展開の次数。FMPOLE が大きいと精度が上がるが速度は遅くなる。しかし、速度に及ぼす影響は少ない。

= 8 ; (デフォルト)

FMNUMA : Fast Multipole 法の最小セルに含まれる最大原子数

= 1000 ; (デフォルト)

【注意】Fast Multipole 法の最小セル内に含まれる原子数が FMNUMA オプションで指定した値を超えた場合はエラーとし、cosgene の実行を停止します。この場合は、FMTREE オプションの値を増やすか、FMNUMA オプションの値を増やしてください。必ず DIEFUN=CONS を指定してください。

(6) 溶媒効果

(6-1) Accessible Surface Area 法の指定

CALASA : ASA 法及び GB/SA 法での SA 法の適用

implicit water モデルで Accessible surface area 法を溶媒和の計算に適用する。

= NOCALC ; 適用しない (デフォルト)

= CALC ; 適用する

ASAPRO : プローブ半径 (Å)

ASA 法において溶媒水をプローブとする半径の設定。

通常水分子の半径として 1.4~1.6 Å 程度にとる。

= 1.4 ; (デフォルト)

ASAWEI : ASA 重み

ASA 法において ASA 項のエネルギー項への寄与のスケール因子。

= 1.0 ; (デフォルト)

ASACUT : ASA 用 cut off 長 (Å)

ASA 法において、ASA の重なりを判定するための原子間距離。

(原子半径+プローブ半径) × 2 より長くとるが、長くしすぎると計算速度が低下する。

= 4.5 ; (デフォルト)

【注意】 溶媒水分子、カウンターイオンなどの溶媒は用いてはならない。

(6-2) Generalized Born / Surface Area 法の指定

Generalized Born 法と Accessible surface area 法の両方の計算を同時に指定する (GB 法の計算 "CAL-GB= CALC" と、ASA 法の計算 "CALASA= CALC" の両方を指定する) ことによって、GB/SA 法の計算を行います。

CAL-GB : Generalized Born 法の適用

implicit water モデルで Generalized Born 法を静電場の計算に適用する。

= NOCALC ; 適用しない (デフォルト)

= CALC ; 適用する

CALASA : GB/SA 法での SA 法の適用

implicit water モデルで Surface area 法を溶媒和の計算に適用する。

= NOCALC ; 適用しない (デフォルト)

= CALC ; 適用する

GBWELE : 水の誘電率

GB 法において溶媒水領域の比誘電率の設定。

温度によって変化するが 298 K 付近の誘電率をデフォルトに採用している。

= 78.3 ; (デフォルト)

GBMELE : 蛋白質の誘電率

GB 法において蛋白質領域の比誘電率の設定。

温度、蛋白質の種類によって変化するが通常 1~4 程度にとる。

= 1.0 ; (デフォルト)

GBDELTA : Born 半径の補正值 (Å)

GB 法において Born 半径の補正值 (Onufriev の論文で導入された " δ " に相当)。

計算に使用する Born 半径 = Born 半径 - GBDELTA。

= 0.0 ; (デフォルト)

GBOFFS : van der Waals 半径補正值 (Å)

GB 法において van der Waals 半径補正值。

計算に使用する van der Waals 半径 = van der Waals 半径 - GBOFFS。

= 0.09 ; (デフォルト)

【注意】「Born 半径の補正值 "GBDELTA"」は、Onufriev の論文で導入された " δ " に相当します。Still, Hawkins の論文由来では "GBDELTA=0.00"、Onufriev の論文由来では "GBDELTA=0.15" になります (論文については、巻末「参考文献」を参照)。

【注意】「van der Waals 半径補正值 "GBOFFS"」のデフォルト値は、Still WC の論文由来です (論文については、巻末「参考文献」を参照)。

【注意】ASA 法と GB/SA 法の計算で用いている Atomic Solvation Parameter は、自動的に切り替わります。

【注意】溶媒水分子、カウンターイオンなどの溶媒は用いてはならない。

(7) 境界条件

myPresto で使用できる境界条件は、球・楕円体、周期境界条件（直方体 6 面体セル）です。球・楕円体では、弾性衝突を実現する剛体壁が用いられます。中心の指定など一部変数は共通の名前が使用されます。周期境界条件使用時は、ユニットセルへの座標引き戻しのサイクル（UPDATE）を忘れずに指定してください。CAP 拘束と異なり対象原子指定ファイルは不要です。

BOUNDary : 境界条件の種類

=NO ; 境界なし（デフォルト）

=PERI ; 周期境界条件。

=ELLIPsoid ; 楕円体境界

=SPHERE ; 球境界

【注意】周期境界条件において、NO CUTOFF (CAL15N=CALC) は指定しないこと。また、CUTMET の推奨値は RESC です。PME 法または Ewald 法は周期系で使用できますが、CUTOFF の指定が必要です。

【注意】周期境界条件では、以下の場合に計算を中断することがあります。

- ・必要な相互作用計算のスイッチが OFF である。
- ・不自然に大きな力が発生した。

(初期座標の歪み、UPDATE の間隔が長い、time step が大きい、などが原因)

- ・残基の大きさと CUTOFF 距離の和が、セルサイズの半分より大きい。

(7-1) 境界条件の中心の設定

周期系では、直方体ユニットセルの重心、球・楕円体ではそれらの重心を境界条件の中心とします。

SETCEN : 系の第一チェーンの重心を境界条件の中心にする

=NO : 適用しない（デフォルト）。CENTRX/CENTRY/CENTRZ で指定する。

=YES : 適用する

SETCEN=NO の場合、境界条件の中心をデカルト座標 (A) で指定する。

CENTRX= 0.0 ; (デフォルト)

CENTRY= 0.0 ; (デフォルト)

CENTRZ= 0.0 ; (デフォルト)

(7-2) 境界条件のサイズの設定

周期境界条件の場合：

ユニットセルの X 軸・Y 軸・Z 軸の長さ (A) を指定します。

```
LXCELL=      40.0      ; (デフォルト)
LYCELL=      40.0      ; (デフォルト)
LZCELL=      40.0      ; (デフォルト)
```

楕円体の場合：

楕円は、長軸・短軸が、XYZ 座標方向に揃っているものとし、X 軸 Y 軸 Z 軸方向の半径 (A) を指定します。

```
ELLIPA=      30.0      ; (デフォルト)
ELLIPB=      30.0      ; (デフォルト)
ELLIPC=      30.0      ; (デフォルト)
```

球の場合：

球の半径を指定します。

```
RADIUS=      30.0      ; (デフォルト)
```

【注意】初期座標の原子のうち、1 原子でも原子核の座標が境界の外にあればエラーとなります。分子・残基の重心ではないので注意。計算開始後、原子が境界の外に出る場合のみ、座標を修正し、境界の内部へ引き戻す処理をします。

(7-3) ユニットセルへの座標引き戻し方法の指定

周期系でのユニットセルへの座標引き戻しを、原子単位、残基単位、チェーン単位のいずれの方法で行うかを指定します。

```
REPLAC : 座標引き戻し方法
=ATOM  : 原子単位 (デフォルト)
=RESI  : 残基単位
=CHAI  : チェイン単位
```

【注意】 REPLAC オプションは、BOUND= PERI または HEXA のときのみ有効です。

【注意】 残基ベースカットオフ (CUTMET= RESA または RESC) を使用し、REPLAC= ATOM と指定した場合は、残基単位での座標引き戻しを行います。

(8) LIST

「LIST」を書き加えれば、現在のパラメーター設定が表示されます。引数なし。

(9) QUIT

EXE>グループ入力の終了を示します。引数なし。

4.3 EXE> MD グループ

MIN/MD 入力事項表

		MIN	MD
1	エネルギー最小化制御パラメーター (STEEP/CONJ 共通)	○	
1-1	最急降下法 (STEEP) での制御パラメーター	○	
1-2	共役勾配法 (CONJ) での制御パラメーター	○	
1-3	計算結果の出力指定 (STEEP/CONJ 共通)	○	
1	MD 制御パラメーター		○
1-1	計算上限の設定		○
1-2	MD のタイムステップとループ回数の指定		○
1-3	MD 計算の種類		○
1-4	拡張アンサンブル		○
1-5	温度設定		○
1-6	MD 計算条件		○
1-7	ジョブのリスタート設定		○
1-8	計算結果の出力指定		○
2	解析用データ出力 (エネルギー変化)	○	
2	解析用データ出力 (トラジェクトリー、パラメーター)		○
3	エネルギー計算に関する制御パラメーター	○	○
3-1	相互作用 CUTOFF の方法	○	○
3-2	相互作用計算のスイッチ	○	○
3-3	Filling Potential 法		○
4	拘束の指定	○	○
4-1	SHAKE/RATTLE の指定	○	○
4-2	剛体モデルの指定		○
5	PME, Ewald, FMM の指定	○	○
6	溶媒効果	○	○
7	境界条件	○	○
8	LIST	○	○
9	QUIT	○	○

(1) MD の制御パラメーター

(1-1) 計算上限の設定

SETTImelimit : シミュレーション時間の設定 (ps)。

後述の「ループ回数 (LOOPLI) × タイムステップ (TIMEST)」で得られる時間 (ps) の値が大きい場合、この時間で計算を打ち切る。(◎)

=5.0 ; (デフォルト)

CPUTImelimit : CPU 時間での上限 (秒) (◎)

=60.0 ; (デフォルト)

(1-2) MD のタイムステップとループ回数の指定

LOOPLIlimit : MD シミュレーションのループ回数 (◎)

=0 ; (デフォルト)

TIMESTep : タイムステップ (fs)。

通常は 0.5-1.0fs、系の全ての H に対し SHAKE または剛体モデルを使用する時には 1.0-2.0fs に設定する。(◎)

=1.0 ; (デフォルト)

(1-3) MD 計算の種類

(1-3-1) 計算法 : 積分器

時間積分の方法を指定します。Multi time step (RESPA 法) を使用する場合は、さらに、タイムステップの変化の方法を指定します。

INTEGR : 時間積分の仕方

=LEAPfrog ; Leap-frog Verlet method (デフォルト)

=VELOcity ; Velocity-Verlet method

=MTS ; Multi Time Step (RESPA)

=PRCO ; Predictor-Corrector

=RK40 ; 4 次 Runge-Kutta 法

=GEAR ; GEAR 法

=EXVP ; EXtended phase space Volume Preserving integrator

【注意】本バージョンでは、Predictor-Corrector, 4 次 Runge-Kutta 法, GEAR 法, EXtended phase space Volume Preserving integrator は実行ファイルのみの提供とし、ソースプログラムは提供しません。このため、ソースプログラムをコンパイルして得られた実行ファイルでは、それらの機能は使用できません。

Multi time step を使用する場合は、力 f を周期の長い運動による力 f_a 、中間の力 f_b 、周期の短い運動による力 f_c の 3 種類に分け、それぞれに対応するタイムステップ Δt_a , Δt_b , Δt_c を制御します。これらのタイムステップは、計算頻度 K , L を使い、

$$\Delta t_b = K \Delta t_c,$$

$$\Delta t_a = L \Delta t_b = LK \Delta t_c \quad (K, L \text{ は自然数})$$

という関係で指定します。

FREQMedium : 計算頻度 (間隔一中) の指定 (上式の K に相当 : $\Delta t_b = K \Delta t_c$)

=1 ; (デフォルト)

FREQLong : 計算頻度 (間隔一長) の指定 (上式の L に相当 : $\Delta t_a = LK \Delta t_c$)

=1 ; (デフォルト)

さらに、各相互作用計算がどのタイムステップに支配されて計算するかを指定します。次の計算に同じように指定します。

CALBON : 1-2 相互作用の計算

=NOCALC ; 計算しない

=CALC ; 計算する。タイムステップ Δt_c に支配される (デフォルト)

=MEDIUM ; 計算する。タイムステップ Δt_b に支配される

=LONG ; 計算する。タイムステップ Δt_a に支配される

CALANG : 1-3 相互作用の計算

CALTOR : torsion 相互作用の計算

CALIMP : improper torsion の計算

CALV14 : 1-4 van der Waals の計算

CALE14 : 1-4 静電相互作用の計算

CALV15 (または CALV5N) : 1-5 van der Waals

CALE15 (または CALE5N) : 1-5 静電相互作用

CALHYD (または CALH5N) : 水素結合

CALPSR : position restraint

CALDSR : distance-restraint

CALDHR : dihedral-restraint

CALREP : simple repulsion

CALCAP : CAP 拘束

EXTCAP : 拡張 CAP 拘束

CALUMB : UMBRELLA ポテンシャル計算

CALFLW : FLOW ポテンシャル計算

CAL-GB : GB 計算

CALASA : ASA 計算

【注意】 Multi time step 指定 (“INTEGR=MTS”) 以外で、相互作用計算のスイッチに “MEDI” または “LONG” 指定した場合はエラーとし、プログラムの実行を停止する。

【注意】 周期の長い運動 f_a のタイムステップ Δt_a (“TIMEST” $\times$ “FREQME” $\times$ “FREQL0”) が 4.0fs を超えないように指定することが望ましい。

【注意】 RATTLE を NVT アンサンブルの MD 計算に適用する場合、Nose-Hoover 法による温度制御 (“THERMO= NOSE”) を指定する必要があります。

【注意】 SHAKE/RATTLE は、適用範囲に制限があります。

SHAKE/RATTLE の適用範囲

		SHAKE	RATTLE
エネルギー最小化 (EXE> MIN)	最急降下法 (METHOD=STEEP)	○	×
	共役勾配法 (METHOD=CONJ)	×	×
MD 計算 (EXE> MD)	Leap Frog Verlet (INTEGR=LEAP)	○	×
	Velocity-Verlet (INTEGR=VELO)	×	○
	Multi Time Step (INTEGR=MTS)	×	×

(1-3-2) 計算方法 : アンサンブルの発生方法

METHOD : アンサンブルの種類を指定する。

=MICROcanonical ;Micro-canonical (NVE) (デフォルト)

=CANOnical ;Canonical (NVT)

=NPT ;NPT

=EXPAnded ;拡張アンサンブル

=TSAL ;Tsallis Dynamics

【注意】 NPT アンサンブル “METHOD=NPT” は周期境界条件下でのみ指定可能です。

【注意】 Tsalli Dynamics “METHOD=TSAL” は、4 次 Runge-Kutta 法使用時のみ有効です。

(1-3-3) 計算法 : 温度・圧力制御方法

THERMOstat : 温度制御方法。

“METHOD=CANO” の場合に適用される。適用範囲に注意してください。

=CONStant ;Hoover-Evans Gaussian constraint 法 (デフォルト)

=NOSE ;Nose-Hoover 法

COUPLIngtime : Nose-Hoover 法でのカップリング時間 (τ : 単位 fs)。

“THERMO=NOSE” の場合に適用される。

=100.0 ; (デフォルト)

BAROSat : 圧力制御方法。

“METHOD=NPT” の場合に適用される。適用範囲に注意してください。

=ANDersen ;Andersen 法 (デフォルト)

=PARA ;Parrinello Rahmann 法

=BERE ;Berendsen 法

SETPRE : NPT での目標の圧力 (単位 atm)。

= 1.0 ; (デフォルト)

COUPHB : NPT での温度制御のカップリング時間 (単位 fs)。

= 1000.0 ; (デフォルト)

COUPPI : NPT での圧力制御のカップリング時間 (単位 fs)。

= 1000.0 ; (デフォルト)

MODIFIcation : NPT でのセル形状。(ANDERSEN では無効)

= FLEX ; 自由度 6、斜方セル (デフォルト)

= MONOclinic ; 自由度 4。3 方向にそれぞれ伸縮および、基本セルの
角 γ (a 軸と b 軸のなす角度) が変化

= ORTHorhombic ; 自由度 3。3 方向にそれぞれ伸縮

= ISOTropic ; 自由度 1。等方的な変形

= SINGLe_direction ; 自由度 1。z 軸方向のみ変形

圧力制御方法と指定可能なセル形状の対応表

	Parrinello Rahmann 法	Berendsen 法
FLEX	○	
MONO	○	
ORTH	○	○
ISOT	○	○
SING	○	

(1-4) 拡張アンサンブル法

EXPAND : 拡張アンサンブル法の手法の指定

- = FORC : Force-Biased McMD
- = SIMU : Simulated Tempering
- = GST : Generalized Simulated Tempering
- = EFFE : Effective Temperature

(1-4-1) Force-biased Multicanonical MD 法

RESETC : ヒストグラム作成のステップサイクル

F.B. McMD はヒストグラムを用いた反復解法であり、エネルギーのヒストグラムを“RESETC”のステップごとに作成しなおす。短すぎると系が空間を十分に探索しないためヒストグラムに偏りが生じ、長すぎると計算に時間がかかる。系が大きくなるにつれ、“RESETC”は長く取るのが良い。真空中では数残基のペプチド程度に対し 200000~400000 ステップ程度。

= 300000 ; (デフォルト)

DUMMYL : F.B. McMD を始める前に捨てるダミーループのステップ数。

平衡状態から F.B. McMD を始める場合は、“1”に設定する。

= 1 ; (デフォルト)

TEM MAX : F.B. McMD が探索する温度範囲の上限値 (K)。

= 700 ; (デフォルト)

TEM MIN : F.B. McMD が探索する温度範囲の下限値 (K)。

= 250 ; (デフォルト)

ENEMAX : F.B. McMD が作成するヒストグラムの上限値 (kcal/mol)。

“TEM MAX”でのエネルギー分布を被覆するため“TEM MAX”での平均エネルギーより十分高めにとる必要がある。あらかじめ、温度“TEM MAX”でのカノニカルの計算を行い平均エネルギーを求め、それより高い値に設定するようにする。

= 10000 ; (デフォルト)

ENEMIN : F.B. McMD が作成するヒストグラムの下限値 (kcal/mol)。

“TEM MIN”でのエネルギー分布を被覆するため“TEM MIN”での平均エネルギーより十分低めにとる必要がある。あらかじめ、温度“TEM MIN”でのカノニカルの計算を行い平均エネルギーを求め、それより低い値に設定するようにする。

= -10000 ; (デフォルト)

BINSIZ : F.B. McMD でヒストグラムを作成するときの bin サイズ (kcal/mol)。

細かくとるとヒストグラムが滑らかでなくなりヒストグラムの微分が計算できず、粗くと

るとヒストグラムの形を表現できない。“ENEMAX”-“ENEMIN”を 100～200 程度で割った値に設定するのが良い。

= 5.0 ; (デフォルト)

LIMITS : ヒストグラムで使用する範囲を決める閾値

F. B. McMD でエネルギーをサンプリングする範囲のヒストグラムの下限值であって LIMITS= LIMITC にとるのが良い。通常、0.0005～0.001 の範囲にとる。

= 0.001 ; (デフォルト)

LIMITC : ヒストグラムをアップデートする閾値

反復解法において、“LIMITC”よりヒストグラムの値が大きい範囲でのみヒストグラムのアップデートを行う。ヒストグラムが“LIMITC”より低い場合はノイズが多く γ が正確に計算できないものとみなす。通常、0.0005～0.001 の範囲にとる。

= 0.001 ; (デフォルト)

FBRSTO : 分布データリスタートファイル出力形式

F. B. McMD の分布データ (スケール因子、ヒストグラム) をファイル出力する際の形式をアスキー形式、バイナリ形式のいずれかで指定する。

= NOWR ; 出力しない (デフォルト)

= ASCI ; アスキー形式

= DOUB ; 倍精度バイナリ形式

NAMEFO= (分布データ出力ファイル名、133 文字以内)

FBRSTI : 分布データリスタートファイル入力形式

F. B. McMD の分布データ (スケール因子、ヒストグラム) をリスタート入力する際の形式をアスキー形式、バイナリ形式のいずれかで指定する。

NAMEFI= (分布データ入力ファイル名、133 文字以内)

UNITFR : 分布データリスタートファイルの IO unit

= 85 ; (デフォルト)

(アスキー形式でのファイル例)

```

# PREVIOUS POTENTIAL, LOCAL LOOP, TOTAL LOOP, CURRENT STEP
19.6646786598415          1          1          1
# LOCAL HISTGRAM          351
2.000000000000000
0.000000000000000E+000
:
2.000000000000000
0.000000000000000E+000
# TOTAL HISTGRAM          351
2.000000000000000
1.000000000000000
5.000000000000000
:
4.000000000000000
# PREVIOUS SCALING FACTOR
0.750000000000000
0.750000000000000
1.16322986359255
0.991723974379762
:
0.750000000000000
# BIN-LOWER, BIN-UPPER, PREVIOUS-LOWER, PREVIOUS-UPPER
117          155          112          158

```

【注意】 F. B. McMD の参照温度として、“SETTEM”を設定する。運動エネルギーはこの温度に固定される。一般に“TEMMIN”より高く、“TEM MAX”より低く設定する。

(1-4-2) Simulated Tempering Multicanonical MD 法

RESETC : ヒストグラム作成のステップサイクル

S. T. McMD は温度遷移の判定に使用する関数を“RESETC”のステップごとに作成しなおす。短すぎると系が温度空間を十分に探索しないためヒストグラムに偏りが生じ、長すぎると計算に時間がかかる。系が大きくなるにつれ、“RESETC”は長く取るのが良い。真空中では数残基のペプチド程度に対し 200000～400000 ステップ程度。

= 300000 ; (デフォルト)

DUMMYL : S. T. McMD を始める前に捨てるダミーループのステップ数。

平衡状態から S. T. McMD を始める場合は、"1"に設定する。

= 1 ; (デフォルト)

TEMMAX : S. T. McMD が探索する温度範囲の上限値 (K)。

= 700 ; (デフォルト)

TEMMIN : S. T. McMD が探索する温度範囲の下限値 (K)。

= 250 ; (デフォルト)

ENEMAX : S. T. McMD が作成するエネルギーヒストグラムの上限值 (kcal/mol)。

"TEMMAX"でのエネルギー分布を被覆する必要があるため"TEMMAX"での平均エネルギーより十分高めにとる必要がある。あらかじめ、温度"TEMMAX"でのカノニカルの計算を行い平均エネルギーを求め、それより高い値に設定するようにする。

= 10000 ; (デフォルト)

ENEMIN : S. T. McMD が作成するエネルギーヒストグラムの下限値 (kcal/mol)。

"TEMMIN"でのエネルギー分布を被覆する必要があるため "TEMMIN"での平均エネルギーより十分低めにとる必要がある。あらかじめ、温度"TEMMIN"でのカノニカルの計算を行い平均エネルギーを求め、それより低い値に設定するようにする。

= -10000 ; (デフォルト)

BINSIZ : S. T. McMD でエネルギーヒストグラムを作成するときのエネルギーbin サイズ (kcal/mol)。

= 5.0 ; (デフォルト)

LIMITS : 温度ヒストグラムの使用する範囲を決める閾値

S. T. McMD がサンプリングした温度範囲を決定する際の下限值であって LIMITS= LIMITC にとるのが良い。通常、0.0005~0.001 の範囲にとる。

= 0.001 ; (デフォルト)

LIMITC : 温度ヒストグラムをアップデートする閾値

"LIMITC"よりヒストグラムの値が大きい範囲でのみヒストグラムの項 γ を利用する。ヒストグラムが"LIMITC"より低い場合はノイズが多く γ が正確に計算できないものとみなす。通常、0.0005~0.001 の範囲にとる。

= 0.001 ; (デフォルト)

STTNUM : 温度分割数

TEMMIN から TEMMAX までの温度範囲を STTNUM 個に分割して S. T. McMD を実行する。STTNUM が大きいほど自然な温度遷移が実現するが収束のために必要なサンプリング時間も増大する。

= 100 ; (デフォルト)

STEBAS : ベースエネルギー

系のとりうるエネルギーの最低値を設定する。温度"TEMMIN"でのカノニカルの計算によりあらかじめ見積もっておく。

= 0.0 ; (デフォルト)

【注意】 S.T. McMD の参照温度として、“SETTEM”を設定する。運動エネルギーはこの温度に固定される。一般に“TEMMIN”より高く、“TEMMAX”より低く設定する。

(1-4-3) Generalized Simulated Tempering 法

一般的なエネルギー分布 $P(E)$ は、様々な温度 $\beta_i (=1/k_B T_i)$ での Canonical 分布を重み F_i で重ね合わせたもので表現できる。Simulated Tempering 法では、 β で決まるサブアンサンブル Q が重み $F(\beta)$ で重ね合わされたアンサンブル Ξ を考えてきた。Generalized Simulated Tempering では、パラメーター λ を導入し、 λ で決まる一般のサブアンサンブルの重ね合わせで表す。

GSTMIN : パラメーター λ の下限
 = 0.001d0 ; (デフォルト)

GSTMAX : パラメーター λ の上限
 = 0.006d0 ; (デフォルト)

GSTNUM : パラメーター λ の個数
 = 20 ; (デフォルト)

GSTUPD : パラメーター λ の更新間隔
 = 100 ; (デフォルト)

GSTCON : パラメーター λ の収束 MD 回数
 = 10000000 ; (デフォルト)

GSTSAM : パラメーター λ のスケーリング前のサンプリング回数
 = 50000 ; (デフォルト)

GSTBAS : ベースエネルギー
 系のとりうるエネルギーの最低値を設定する。
 = 25.5 ; (デフォルト)

GSTETA :
 = 0.5 ; (デフォルト)

(1-4-4) Effective Temperature 法

RESETC : ヒストグラム作成のステップサイクル

短すぎると系が温度空間を十分に探索しないためヒストグラムに偏りが生じ、長すぎると計算に時間がかかる。系が大きくなるにつれ、“RESETC”は長く取るのが良い。真空中では数残基のペプチド程度に対し 200000~400000 ステップ程度。

= 300000 ; (デフォルト)

ENEMAX: Effective Temperature 法が作成するエネルギーヒストグラムの上限值(kcal/mol)。

= 10000 ; (デフォルト)

ENEMIN Effective Temperature 法が作成するエネルギーヒストグラムの下限值 (kcal/mol)。

= -10000 ; (デフォルト)

BINSIZ : Effective Temperature 法でエネルギーヒストグラムを作成するときのエネルギー-bin サイズ (kcal/mol)。

= 5.0 ; (デフォルト)

LIMITS : 温度ヒストグラムの使用する範囲を決める閾値

Effective Temperature 法がサンプリングした温度範囲を決定する際の下限值であって LIMITS= LIMITC にとるのが良い。通常、0.0005~0.001 の範囲にとる。

= 0.001 ; (デフォルト)

LIMITC : 温度ヒストグラムをアップデートする閾値

"LIMITC" よりヒストグラムの値が大きい範囲でのみヒストグラムの項 γ を利用する。ヒストグラムが "LIMITC" より低い場合はノイズが多く γ が正確に計算できないものとみなす。通常、0.0005~0.001 の範囲にとる。

= 0.001 ; (デフォルト)

(1-4-5) 拡張アンサンブルデータファイル出力

拡張アンサンブル (Effective Temp, Force Bias, Simulated Tempering, Generalized Simulated Tempering) 使用時の確率、スケール因子、エネルギーデータを出力するファイル名を指定する。

NAMEEP : 確率データファイル名 (133 文字以内)

= expand. prob ; (デフォルト)

UNITEP : 確率データファイルの IO unit

= 78 ; (デフォルト)

NAMEES : スケール因子データファイル名 (133 文字以内)

= expand. scale ; (デフォルト)

UNITES : スケール因子データファイルの IO unit

= 77 ; (デフォルト)

NAMEEE : エネルギーデータファイル名 (133 文字以内)

= expand. energy ; (デフォルト)

UNITEE : エネルギーデータファイルの IO unit

= 79 ; (デフォルト)

(1-5) Tsallis Dynamics

【注意】本バージョンでは、Tsallis Dynamics は実行ファイルのみの提供とし、ソースプログラムは提供しません。このため、ソースプログラムをコンパイルして得られた実行ファイルでは、Tsallis Dynamics は使用できません。

(1-5-1) 分布密度関数パラメーター設定

ポテンシャルエネルギーの範囲に応じて、Tsallis Dynamics の分布密度関数を変更することが可能である。

ELOWER : 低エネルギー側閾値

= 0.0 ; (デフォルト)

EUPPER : 高エネルギー側閾値

= 0.0 ; (デフォルト)

ROF1DR : ρ 1 のパラメーター d の条件

= 0.5 ; (デフォルト)

ROF2XI : ρ 2 のパラメーター ξ の値

= 10 ; (デフォルト)

ROF2VX : ρ 2 のパラメーター δ の条件

= 1000 ; (デフォルト)

ROF2VY : ρ 2 のパラメーター γ の条件

= 0.5 ; (デフォルト)

(1-5-2) ファイル出力オプション

MNTRZT : zeta 値モニタファイルの出力形式

=NO ; 出力しない (デフォルト)

=ASCII ; アスキーファイル

=SING ; 単精度バイナリーファイル

=DOUB ; 倍精度バイナリーファイル

UNITZT : zeta 値モニタファイルの IO unit

= 80 ; (デフォルト)

NAMEZT= (zeta 値モニタファイル名、133 文字以内。)

OUTZET : zeta 値モニタファイル出力間隔

= 1 ; (デフォルト)

MNTRCK : Tsallis 積分チェック値モニタファイルの出力形式

=NO ; 出力しない (デフォルト)

=ASCII ; アスキーファイル
=SING ; 単精度バイナリーファイル
=DOUB ; 倍精度バイナリーファイル
UNITCK : Tsallis 積分チェック値モニタファイルの IO unit
= 75 ; (デフォルト)
NAMECK= (Tsallis 積分チェック値モニタファイル名、133 文字以内。)
OUTCHK : Tsallis 積分チェック値モニタファイル出力間隔
= 1 ; (デフォルト)

MNTRPK : エネルギーモニタファイルの出力形式

=NO ; 出力しない (デフォルト)
=ASCII ; アスキーファイル
=SING ; 単精度バイナリーファイル
=DOUB ; 倍精度バイナリーファイル
UNITPK : エネルギーモニタファイルの IO unit
= 81 ; (デフォルト)
NAMEPK= (エネルギーモニタファイル名、133 文字以内。)
OUTZPK : エネルギーモニタファイル出力間隔
= 0 ; (デフォルト)
FLGPKT= (エネルギーモニタファイル出力項目。potential, kinetic, total を 3 文字
で表す。"+" が出力対象となり、"- " は対象外となる。)

MNTRQU : 物理量モニタファイルの出力形式

=NO ; 出力しない (デフォルト)
=ASCII ; アスキーファイル
=SING ; 単精度バイナリーファイル
=DOUB ; 倍精度バイナリーファイル
UNITQU : 物理量モニタファイルの IO unit
= 82 ; (デフォルト)
NAMEQU= (物理量モニタファイル名、133 文字以内。)
OUTQUA : 物理量モニタファイル出力間隔
= 1 ; (デフォルト)

MNTRDO : Tsallis 分布密度関数モニタファイルの出力形式

=NO ; 出力しない (デフォルト)
=ASCII ; アスキーファイル

=SING ; 単精度バイナリーファイル
=DOUB ; 倍精度バイナリーファイル
UNITDO : Tsallis 分布密度関数モニタファイルの IO unit
= 82 ; (デフォルト)
NAMEDO= (Tsallis 分布密度関数モニタファイル名、133 文字以内。)
OUTDOF : Tsallis 分布密度関数モニタファイル出力間隔
= 1 ; (デフォルト)

(1-6) 温度設定

(1-6-1) 目標温度設定

SETTemperature : 系の目標温度 (K)。

温度一定のアンサンブル Canonical (NVT), NPT での目標温度。F.B. McMD では参照温度となる。Micro-canonical (NVE) では使用しない。

=300.0 ; (デフォルト)

TEMPControl2 : 系の温度制御の仕方。

系全体の温度 (運動エネルギー) をコントロールする場合 (TEMPCO=NO) と、分子毎に温度をコントロールする場合 (TEMPCO=YES) の 2 種類がある。TEMPCO=NO の場合、水中の蛋白では蛋白と水の温度が異なる場合がある。TEMPCO=YES の場合、蛋白と水、リガンド分子などそれぞれの分子の温度が同じになりやすい。ただし、単原子イオンの温度も一定に保たれるなど不自然な場合もある。

=NO ; (デフォルト)

=YES

(1-6-2) 初期温度設定

INITIALvelocity : 初期速度の設定の仕方。

=ZERO ; 初期速度=0、初期温度=0 (デフォルト)

=SET ; 以下の RANDOM により定義される乱数を用い、各原子の初期速度が平均値が "STARTT" であるようなガウス関数型の分布となるように設定する。

=RESET ; リスタートジョブの初期条件変更 ((1-7) を参照)

STARTTemperature : 初期温度の平均値 (K)

=300.0 ; (デフォルト)

RANDOMseed : 速度分布を得るための random seed number (整数値 < $2^{31} - 1$)

=584287 ; (デフォルト)

HEATLoop : Hoover-Evans Gaussian constraint 法での昇温のための MD ループ回数。

=0 ; (デフォルト)

(1-7) MD 計算条件

UPDATEinterval : 座標情報の更新サイクル。(△)

1-5 相互作用エネルギーに CUTOFF が用いられている場合、相互作用テーブルの更新サイクルを指定する。周期境界条件の場合は、ユニットセルから飛び出した原子の座標をユニットセル内に補正する計算の更新サイクルを指定する

=20 ; (デフォルト)

STOPCEnterofmass : MD 計算中の重心の固定方法。

CAP 拘束または周期境界条件を適用するときは、並進運動または回転運動をゼロにする重心の固定を行うようにする。

=NO ; 重心を固定しない (デフォルト)

=TRAN ; 系の第一チェーンの並進の運動量をゼロにする

=ROTA ; 系の第一チェーンの回転の運動量をゼロにする

=BOTH ; 系の第一チェーンの並進と回転の運動量をゼロにする

BESTFit : MD での、参照構造に対する系の第 1 チェインの RMSD の変化を標準出力する。参照構造は、EXE> INPUT フェーズにて "REFCOORD", "NAMERE" を指定する必要がある。(△)

=NO ; 計算しない (デフォルト)

=YES ; 計算する。

(1-8) ジョブのリスタート設定

MD 計算を任意のステップで打ち切り、再度リスタートをかけて計算を継続する場合は、ジョブ終了時に出力されたリスタートファイルを使用します。リスタートするジョブには、リスタートファイルを読み込んで計算を再開するための指定が必要です。
なお、リスタートするジョブの初期速度および初期座標を変更することが可能です。

(1-8-1) リスタートファイルのファイル名を指定：リスタート前の MD 計算

NAMERO：リスタートファイルのファイル名。書式はバイナリー形式です。

UNITRO：リスタートファイルの IO Unit

=41 ; (デフォルト)

【注意】 リスタートファイルは、MD 計算の終了時に必ず出力されます。ファイル名を指定しなかった場合は、システムデフォルトのファイル名になります。

(1-8-2) リスタート用ファイルを読み込む指定：リスタートするときに行う

RESTART：リスタートする。

=NO ; リスタートしない。初期速度設定（* 上述）が適用される（デフォルト）

=YES ; リスタートする

NAMERI=既に準備したリスタートファイルの名前。

UNITRI：リスタートファイルの IO Unit

=40 ; (デフォルト)

(1-8-3) チェックポイントの設定：自動リスタートファイルの出力間隔を指定する

OUTReStartfile：自動リスタートファイル出力 CPU 時間間隔

=0 ; 自動リスタートファイルを出力しない（デフォルト）

OUTReStartfileLoop：自動リスタートファイル出力ループ間隔

=0 ; 自動リスタートファイルを出力しない（デフォルト）

【注意】 自動リスタートファイルの出力は、OUTRST 指定時は自動リスタートファイル出力 CPU 時間間隔ごとに、OUTRSL 指定時は自動リスタートファイル出力ループ間隔ごとに随時行われる。

【注意】 ファイル名は “name.num”（name は NAMERI オプションで指定したリスタートファイル名、num はシーケンス番号）となり、リスタートファイルの上書きは行わない。

(1-8-4) 初期条件の変更：リスタート時の初期速度および初期座標を変更する
リスタートジョブの初期速度および初期座標を設定します。

INITIALvelocity：初期速度の設定の仕方。

=ZERO ; 初期速度=0、初期温度=0 (デフォルト)

=SET ; 以下の RANDOM により定義される乱数を用い、各原子の初期速度が
平均値が "STARTT" であるようなガウス関数型の分布となるように
設定する。

=RESET ; リスタートジョブの初期条件変更

RANDOMseed：速度分布を得るための random seed number (整数値 < $2^{31} - 1$)

=584287 ; (デフォルト)

NAMETrajectoryIn=入力トラジェクトリファイル名

NUMBERTRJ：座標トラジェクトリの位置

=0 ; (デフォルト)

(1-9) 結果の出力指定

MD の途中結果のうち、各エネルギー項・RMSD・温度・圧力・CPU 時間などが標準出力されます。モニター出力・トラジェクトリは、別の指定項目により、それぞれ別のファイルに出力されます。

OUTLOG : 途中結果出力をする MD ステップの回数。

=1 ; 1 ステップごとに結果を出力する (デフォルト)

LOGFOrmat : 出力形式

=SHORt ; 1 行 80 文字以内の簡易出力 (デフォルト)

=DETAil ; 1 行 80 文字以内の詳細出力。各エネルギーを追加。

(2) 解析用データ入出力 (トラジェクトリー、パラメーター)

以下の各種トラジェクトリは、すべてファイルに出力されます。

- ・MD エネルギートラジェクトリ：MD 計算の一定ステップ毎に、各エネルギーをファイルに出力する。入力指定ファイルなし。
- ・モニター指定トラジェクトリ：MD 計算の一定ステップ毎に、特定原子の座標、原子間距離、原子間角度、原子間2面角をファイルに出力する。入力指定はファイル入力で行い、“EXE> INPUT” で “OUTMON”, “NAMEMO”を指定する。コントロールファイルには、原子の名前を指定する。
- ・座標トラジェクトリ：MD 計算の一定ステップ毎に、系に含まれる (固定原子以外の) すべての原子の座標のみをファイル出力する。入力指定ファイルなし。
- ・速度トラジェクトリ：MD 計算の一定ステップ毎に、系に含まれる (固定原子以外の) すべての原子の速度のみをファイル出力する。入力指定ファイルなし。
- ・総エネルギーデータ:MD 計算のステップ毎に、系の総エネルギー (total potential energy) をファイルに出力する。入力指定ファイルなし。

MD エネルギートラジェクトリ

MNTREnergy : MD エネルギートラジェクトリーファイルの形式

=NO ; ファイルを出力しない (デフォルト)

=ASCIi ; アスキー形式で出力

=SINGLe ; 単精度・バイナリーで出力

=DOUBLe ; 倍精度・バイナリーで出力

OUTENERgy : 出力のタイミング

=0 ; 0 ステップ毎 (デフォルト)

UNITENERgy : MD エネルギートラジェクトリーファイルの IO Unit

=44 ; (デフォルト)

NAMEENERgy = MD エネルギートラジェクトリのファイル名

モニター指定トラジェクトリ

MNTRTrajectory : モニター指定トラジェクトリファイルの形式

=NO ; ファイルを出力しない (デフォルト)

=ASCIi ; アスキー形式で出力

=SINGLe ; 単精度・バイナリーで出力

=DOUBLe ; 倍精度・バイナリーで出力

OUTTRJ : 出力のタイミング

=0 ; 0 ステップ毎 (デフォルト)

UNITTR : モニター指定トラジェクトリファイルの IO Unit

=50 ; (デフォルト)

NAMETR =モニター指定トラジェクトリのファイル名

座標トラジェクトリ

MNTRCOrdinate : 座標トラジェクトリファイルの形式

=NO ; ファイルを出力しない (デフォルト)

=ASCIi ; アスキー形式で出力

=SINGLe ; 単精度・バイナリーで出力

=DOUBLe ; 倍精度・バイナリーで出力

OUTCOO : 出力のタイミング

=0 ; 0 ステップ毎 (デフォルト)

UNITCO : 座標トラジェクトリファイルの IO Unit

=42 ; (デフォルト)

NAMECO =座標トラジェクトリのファイル名

速度トラジェクトリ

MNTRVeloCity : 速度トラジェクトリファイルの形式

=NO : ファイルを出力しない (デフォルト)

=ASCIi ; アスキー形式で出力

=SINGLe ; 単精度・バイナリーで出力

=DOUBLe ; 倍精度・バイナリーで出力

OUTVEL : 出力のタイミング

=0 ; 0 ステップ毎 (デフォルト)

UNITVE : 速度トラジェクトリファイルの IO Unit

=43 ; (デフォルト)

NAMEVE =速度トラジェクトリのファイル名

総エネルギーデータ

MNTRTotalenergy : 総エネルギーデータファイルの形式

=NO ; ファイルを出力しない (デフォルト)

=ASCIi ; アスキー形式で出力

=SINGle ; 単精度・バイナリーで出力

=DOUBle ; 倍精度・バイナリーで出力

UNITTotalenergy : 総エネルギーデータファイルの IO Unit

=59 ; (デフォルト)

NAMETotalenergy =総エネルギーデータのファイル名

【注意】 総エネルギーデータ (total potential energy) は、MD 計算のステップごとに出
力されます。

(3) エネルギー計算に関する制御パラメーター (MIN/MD 共通)

(3-1) 相互作用 CUTOFF の方法 (MIN/MD 共通)

「EXE> MINimize グループ」の本項を参照。

(3-2) 相互作用計算のスイッチ

「EXE> MINimize グループ」の本項を参照。

(3-3) Filling Potential 法

CALUMB : Filling Potential 法を適用するかどうか

アンブレラポテンシャル法的一种である Filling Potential 法を適用するかどうか。
Filling Potential 法を使用する場合、アンブレラポテンシャルを指定する制御ファイル、
結果の解析ツール、が必要になる。

= NOCALC ; 適用しない (デフォルト)

= CALC ; 適用する

(4) 拘束条件の指定

(4-1) SHAKE/RATTLE の指定

SHAKE/RATTLE を使用する場合は、EXE>INPUT グループで対象原子の原子番号と拘束距離を指定した SHAKE ファイルを指定します。さらに、EXE>MD グループで、計算方法と収束条件などを指定します。

「EXE> MINimize グループ」の本項を参照。

(4-2) 剛体モデルの指定

剛体モデルでは、分子の任意の原子を剛体化し、内部自由度を固定することができます。TIP4P モデルを使用するときは必須の機能です。剛体モデルを使用する場合、どの分子の、どの部分を剛体化するかを剛体モデルファイルに指定する方法と、プログラムで自動的に剛体化を行う方法があります。

プログラムで自動的に剛体化を行う場合、以下の方法で行います。

(a) 水分子以外場合 (分子名が"WAT"でない場合)

水素でない原子に対し 1~3 つの水素原子が共有結合している場合に、それぞれ 2~4 原子を剛体として設定します。

(b) 水分子の場合 (分子名が"WAT"の場合)

水を構成する全原子を剛体として設定します。原子の相対位置はプログラム内部に保持している相対位置を使用します。所属原子数が 3 の場合は TIP3P として、4 の場合は TIP4P として扱います。

RIGIDModel : 剛体モデル用の適用指定 (△)

=NO ; 剛体モデルを適用しない (デフォルト)

=YES ; 剛体モデルを適用する

=AUTO ; 剛体モデルを自動作成する

UNITRM : 剛体モデルの指定ファイルの IO unit (△)

=58 ; (デフォルト)

NAMERM =(剛体モデルファイル名、133 文字以内。)

剛体モデルを自動作成した場合 (RIGIDM= AUTO)、作成された情報をファイル出力することができます。出力されるファイルの書式は、入力ファイルと同じです。

DBGRIg : 剛体モデル自動作成情報出力指定 (△)

=NOWR ; ファイル出力しない (デフォルト)

=ASCII ; ファイル出力する

UNITDR : 剛体モデル自動作成情報ファイルの IO unit (Δ)

=84 : (デフォルト)

NAMEDR =(剛体モデル自動作成情報ファイル名、133 文字以内。)

【注意】剛体モデルファイルは、専用ツールによる作成もできます。ファイルには剛体化する原子の組や、固定する 3 次元座標などを指定します（指定方法は、巻末「A ファイル書式」を参照）。

(5) PME, Ewald, FMM の指定

(5-1) Particle Mesh Ewald 法, Ewald 法の指定

周期境界条件においては、1-5 静電相互作用の計算に PME (Particle Mesh Ewald) 法、または、Ewald 法を用いることができます。使用できるのはどちらか一方だけです。

「EXE> MINimize グループ」の本項を参照。

【注意】 PME および Ewald 法では、以下の指定が必要です。

CALE15= CALC ; 近接原子は相互作用テーブルを用いた CUTOFF 法で計算します。

BOUND= PERI ; PME, Ewald は周期境界条件でないと使用できません。

DIEFUN= CONS ; PME, Ewald ではクーロン力の空間誘電率は定数でないといけません。

(5-2) Fast Multiple Method の指定

「EXE> MINimize グループ」の本項を参照。

(6) 溶媒効果 (MIN/MD 共通)

(6-1) Accessible Surface Area 法の指定 (MIN/MD 共通)

「EXE> MINimize グループ」の本項を参照。

【注意】溶媒水分子、カウンターイオンなどの溶媒は用いてはならない。

(6-2) Generalized Born / Surface Area 法の指定 (MIN/MD 共通)

「EXE> MINimize グループ」の本項を参照。

【注意】溶媒水分子、カウンターイオンなどの溶媒は用いてはならない。

(7) 境界条件 (MIN/MD 共通)

(7-1) 境界条件の中心の設定 (MIN/MD 共通)

「EXE> MINimize グループ」の本項を参照。

(7-2) 境界条件のサイズの設定 (MIN/MD 共通)

「EXE> MINimize グループ」の本項を参照。

(8) LIST

“LIST” を書き加えれば、現在のパラメーター設定が表示されます。引数なし。

(9) QUIT

EXE>グループ入力の終了を示します。

4.4 EXE> OUTPUT グループ

OUTPUT グループでは、トポロジーファイル、最終座標の出力のために、それらの外部ファイルの指定を行います。これら OUTPUT グループの入力は "EXE> MIN", "EXE> MD" に共通で使用されます。

【注意】 各外部ファイルの書式は、巻末「A ファイル書式」を参照。

OUTPUT グループでの指定事項：

- (1) 系のトポロジーの指定
- (2) 系の座標の指定

(1) 系のトポロジーの指定

TOPOLOGY：トポロジーファイルの書式 (○)

=NOWrite ; トポロジーファイル出力なし (デフォルト)

=FORMatted ; 書式つきアスキーファイル

=BINArY ; バイナリーファイル

UNITTopology：トポロジーファイルの IO unit (△)

=90 ; (デフォルト)

NAMETology= (トポロジーファイル名。TOPOLOGY=[FORM|BINA] のとき)

(2) 系の座標の指定

ここで出力する座標ファイルは、MD ステップが N 回のとき、N+1 回目のステップの座標を出力します。

COORDinate：PDB 書式 3 次元座標ファイルの書式 (○)

=NOWrite ; 座標入力なし (デフォルト)

=PDB ; PDB ファイルフォーマット

=BINArY ; バイナリーファイル

UNITCoordinate：座標ファイルの IO unit (△)

=91 ; (デフォルト)

NAMECoordinate= (座標ファイル名。COORD=[PDB|BINA] のとき)

(3) QUIT

EXE>グループの入力の終わりを示す。

4.5 EXE> END グループ

END は、cosgene のコントロールファイルの終了を示します。
入力は、「EXE> END」の 1 行のみです。

5. トラジェクトリーの解析方法

cosgene は、MIN や MD のエネルギートラジェクトリファイルおよび座標トラジェクトリファイルを解析する機能“ANALYSIS”を含んでいます。

5.1 ANALYSIS 実行方法

参照座標やトポロジーファイル、計算条件などの分子情報は、MIN/MD 計算と同様にコントロールファイルで指定します（以下、ユーザマニュアル「cosgene」の章を参照）。

```
% (path)/cosgene < control_file > output
```

5.2 ANALYSIS 入力データの作成

5.2.1 コントロールファイルの構成

コントロールファイルは、以下のグループからなり、各グループは“QUIT”で終了します。

- ・ EXE> INPUT グループ : 主な入力ファイル名を指定します。
- ・ EXE> ANALYSIS グループ : トラジェクトリー解析のオプションを指定します。
- ・ EXE> OUTPUT グループ : 最終結果の出力を指定します。
- ・ EXE> END : コントロールファイルの終わりを示します。

```
EXE> INPUT
      TOPOLOGY=  FORM      NAMETO=   initial.tpl ; 系のトポロジーファイル
      COORDINA=  PDB       NAMECO=   initial.pdb ; 系の PDB ファイル
      REFCOORD=  PDB       NAMERE=   initial.pdb ; 参照座標
      QUIT
EXE> ANALYS
      METHOD=     MD
      NAMETR=    traject.cor ; MD 計算の座標トラジェクトリーファイル
      DATATY=    COR4       ; トラジェクトリーファイルの種類の指定
      LOGFOR=    DETAIL     ; 標準出力の指定
      INTERV=    1          ; 解析のステップ間隔
      STARTT=    0.0        ; 解析開始時刻 (PSEC)
      ENDTIM=    20.0       ; 解析終了時刻 (PSEC)
      UNITBS=    61         ; NAMEBS の I/O ユニット番号
      NAMEBS=    setbst_1.bst ; 座標重ね合わせに用いる原子指定
      BESTFI=    YES        ; 座標の重ね合わせを行なう。
      FLUCTU=    YES        ; 揺らぎの計算を行なう。
      NAMEPL=    rmsd_plot.data ; RMSD のプロットデータ
      QUIT
EXE> OUTPUT
      COORDINATE= PDB      NAMECO=    mean.pdb ; 出力する平均構造
      QUIT
EXE> END
```

トラジェクトリー解析の場合のコントロールファイルの例

5.2.2. EXE> INPUT グループ

MIN/MD 計算と同様に、INPUT グループでは、トポロジーファイル、初期座標、各種拘束・モニター対象の原子の指定などのために、それらの外部ファイルの指定を行います（各外部ファイルの書式は、ユーザマニュアル巻末「A 入出力ファイル」参照）。

ANALISIS では、次の指定が可能です。

INPUT グループでの指定事項：

- (1) 系のトポロジーの指定
- (2) 系の座標の指定
- (3) 固定原子(fix atom)・自由原子の指定
- (4) CAP ポテンシャルの指定
- (5) RMSD を計算するときの指定
- (6) 位置拘束の指定
- (7) 原子間距離拘束の指定
- (8) 二面角拘束の指定
- (9) QUIT

(1) 系のトポロジーの指定

TOPOLogy：トポロジーファイルの書式 (◎)

- =NOREad ; トポロジーファイル入力なし (デフォルト)
- =FORMAtted ; 書式つきアスキーファイル
- =BINArY ; バイナリーファイル

UNITTopology：トポロジーファイルの IO unit (△)

- =10 ; (デフォルト)

NAMETOpology=(トポロジーファイル名、80 文字以内。TOPOLogy=[FORM|BINA]のとき)

(2) 系の座標の指定

COORDinate:PDB 書式 3 次元座標ファイルの書式 (◎)

- =NOREad ; 座標入力なし (デフォルト)
- =PDB ; PDB ファイルフォーマット
- =BINArY ; バイナリーファイル

UNITCOordinate：座標ファイルの IO unit (△)

- =11 ; (デフォルト)

NAMECOordinate=(座標ファイル名、80 文字以内。COORD=[PDB|BINA]のとき)

(3) 固定原子(fix atom)・自由原子の指定

固定原子指定は、指定した原子を MIN/MD 計算の対象から外し力場を与える点として扱います。自由原子は通常の MIN/MD 計算の対象となる原子です。固定すべき原子番号を指定するか、または特定の中心と半径 R1, R2 を指定し、中心からの距離 R が $R1 < R < R2$ 内となる原子を指定することができます。そのための指定ファイルが必要です。同様に自由原子の指定が行われます。この指定がなければ、系の原子はすべて自由原子として扱われます。

SETVArIables=:固定原子・自由原子指定ファイルの書式 (△)

=NOREad ; 固定原子指定なし (デフォルト)

=READ ; 固定原子指定あり

UNITVArIbles : 固定原子指定ファイルの IO unit (△)

=13 ; (デフォルト)

NAMEVArIables =(固定原子指定ファイル名、80 文字以内。)

(4) CAP ポテンシャルの指定

CAP ポテンシャルを適用する原子と CAP の中心の座標、半径・力の定数を指定します。CAP 指定ファイルに原子を指定、中心座標などは CAP 指定ファイルでもコントロールファイルでも指定できますが、コントロールファイルの入力が優先されます。

SETBOUndary : CAP ポテンシャルを適用する原子と CAP の半径・力の定数を指定 (○)

=NOREad ; CAP を使用しない (デフォルト)

=READ ; CAP を使用する

UNITBOUndary : CAP 指定ファイルの IO Unit (△)

=14 ; (デフォルト)

NAMEBOUndary=(CAP 指定ファイルの名前、80 文字以内 (○))

(5) RMSD を計算するときの指定 (MIN、MD 使用時)

REFCOOrdinate : 参照ファイル。基準となる PDB 書式の座標ファイル (○)

=NOREad ; 使用しない (デフォルト)

=PDB ; 使用する

UNITREfcoordi : 参照ファイルの IO Unit (△)

=15 ; (デフォルト)

NAMEREFcoordi=(参照ファイルのファイル名、80 文字以内)

(6) 位置拘束の指定

位置拘束を使用するには、次の2つのファイルの準備が必要です。

- ・拘束の対象原子の指定と力の定数に関する情報を記載した拘束指定ファイル
- ・拘束する座標を記載した PDB 形式の参照ファイル

REFC00rdinate : 参照ファイル、RMSD の時と同じ (○)

=NOREad ; 使用しない (デフォルト)

=PDB ; 使用する

UNITREfcoordi : 参照ファイルの IO Unit (△)

=15 ; (デフォルト)

NAMEREFcoordi=(参照ファイルのファイル名、80 文字以内 (○))

POSITIonrestrain : 対象原子、力の定数などの指定 (○)

=NOREad ; 使用しない (デフォルト)

=READ ; 使用する

UNITP0sition : 拘束対象指定ファイルの IO Unit

=16 ; (デフォルト) (△)

NAMEP0sition=(拘束指定ファイルの名前、80 文字以内(○))

(7) 原子間距離拘束の指定

原子間距離拘束指定ファイルを用意します。

DISTANcerestrain : 原子間距離拘束を用いる

=NOREad ; 適用しない (デフォルト)

=READ ; 適用する

UNITDlstance : 距離指定ファイルの IO Unit

=17 ; (デフォルト) (△)

NAMEDlstance= (原子間距離拘束指定ファイルの名前、80 文字以内)

(8) 二面角拘束の指定

二面角拘束指定ファイルを用意します。

DIHEDRalrestrain : 2 面角拘束を用いる

=NOREad ; 適用しない (デフォルト)

=READ ; 適用する

UNITDH : 2 面角拘束指定ファイルの IO Unit

=18 ; (デフォルト) (△)

NAMEDH= (2 面角拘束指定ファイルの名前、80 文字以内)

(9) QUIT

EXE>グループの入力の終わりを示す。

5.2.3. EXE> ANALysis グループ

ここでは、トラジェクトリー解析に必要な、方法、計算結果の出力、計算に用いるエネルギー項の指定、境界条件・拘束条件の指定を行います。

エネルギー計算に関する指定のほとんどは、EXE> MD グループと共通です。

(1) 解析手法

(1-1) 単一の構造を解析する手法

INPUT グループで指定される座標ファイルを解析する。

VIOLATioncheck : 異常結合長、異常結合角、van der Waals 接触の検査を行なう。

=NO ; (デフォルト)

=YES

FORCEAnalysis : 各原子に働く力を atom data file に出力する。

MIN/MD と同様にエネルギーパラメーターの指定が必要である。FMM/PME には対応していない。

=NO ; (デフォルト)

=YES

ELECTRostatic : 各原子に働く 1-5 静電相互作用を計算し atom data file に出力する。

誘電率の指定が必要。

=NO ; (デフォルト)

=YES

【注意】現在、空のファイルをトラジェクトリーファイルとして用意し、形式的にトラジェクトリーファイルの入力指定“NAMETR”（後述）を行なわなければならない。

(1-2) トラジェクトリーファイルを解析する手法

ENERGYtrajectory : エネルギートラジェクトリーを計算し、平均値・標準偏差を計算、plot-data file に出力する。

=NO ; (デフォルト)

=YES

DISTANceanalysis : 座標のトラジェクトリーファイルから、原子間距離のトラジェクトリーを計算し、plot-data file に出力する。距離拘束の制御ファイルを読み込む必要がある。

=NO ; (デフォルト)

=YES

DIHEDRalanalysis : 座標のトラジェクトリーファイルから、2 面角のトラジェクト

リーを計算し、plot-data file に出力する。2 面角拘束の制御ファイルを読み込む必要がある。

=NO ; (デフォルト)

=YES

FLUCTUation : 座標のトラジェクトリーファイルから、平均構造と、RMSD, 座標の揺らぎを計算し、plot-data file に出力する。平均構造は、OUTPUT セクションで出力される。

=NO ; (デフォルト)

=YES

(2) 計算結果の標準出力指定

LOGFOrmat : 標準出力の書式 (△)

=SHORT ; 1 行 80 文字以内の簡易出力 (デフォルト)

=DETAil ; 1 行 80 文字以内の詳細出力。各エネルギーを追加。

(3) 構造重ね合わせ計算の指定

BESTFIt : 参照構造に対する系の第 1 チェイン、または、座標重ね合わせ指定ファイルで指定された原子の重ねあわせを行なう。平均構造・座標の揺らぎ・RMSD を計算する場合 (FLUCTUation=YES) に指定する。

=NO ; 計算しない (デフォルト)

=YES ; 計算する。

【注意】 参照構造として、EXE> INPUT フェーズにて "REFCOORD", "NAMERE" を指定する必要がある。(△)

(4) 解析用データ入力

(4-1) トラジェクトリーファイル

NAMETR = (トラジェクトリーのファイルの名前)

UNITRA : トラジェクトリーのファイルの IO Unit

=60 ; (デフォルト)

DATAType = (トラジェクトリーファイルの種類)

= ENER ; エネルギートラジェクトリーファイル (デフォルト)

= COR4 ; 単精度座標トラジェクトリーファイル

= COR8 ; 倍精度座標トラジェクトリーファイル

(4-2) 座標重ね合わせの指定ファイル

平均構造・座標の揺らぎ・RMSD を計算する場合 (FLUCTUation=YES)、レファレンス座標への座標の重ね合わせに用いる原子の指定をする。

NAMEBS = (原子名指定ファイルの名前)

UNITBS : 原子名指定ファイルの IO Unit

=0 ; (デフォルト)

【注意】 "UNITBS" が 0 または負数の場合、"NAMEBS" で指定したファイルは読み込まれず、第一チェーンの全原子が用いられる。正の値 (=61) に指定すれば、ファイルが読み込まれ、複数のチェーンの原子を指定することができる。ただし、指定する原子は、第一チェーンの原子を必ず含む必要がある。

(5) 解析用データ出力

NAMEPL = (plot data ファイルの名前)

UNITPL : plot data ファイルの IO Unit

=62 ; (デフォルト)

NAMEAT = (atom data ファイルの名前)

UNITAT : atom data ファイルの IO Unit

=63 ; (デフォルト)

(6) エネルギートラジェクトリの計算の指定

METHOD : エネルギートラジェクトリの種別を指定する。

= MINI ; minimization の結果のエネルギートラジェクトリ解析 (デフォルト)

= MD ; MD の結果のエネルギートラジェクトリ解析

以下は、METHOD=MINI の場合にのみ有効である。

STARTLoop : 解析を始めるループ回数

=0 ; (デフォルト)

ENDLoop : 解析を終了するループ回数

=10000 ; (デフォルト)

以下は、METHOD=MD の場合にのみ有効である。

INTERVal : 解析を行なうステップ間隔

=1 ; (デフォルト)

STARTTime : 解析を始める時刻 (PSEC)

=0 ; (デフォルト)

ENDTime : 解析を終了する時刻 (PSEC)

=10000 ; (デフォルト)

(7) "FORCEAnalysis=YES"の場合の制御パラメーター

トラジェクトリを生成した時と同じパラメータを指定します。

(7-1) 相互作用 CUTOFF の方法

CUTMETHod : 相互作用 CUTOFF の方法

=RESC ; residue base cutoff (デフォルト)

残基の重心間の距離が、CUTOFF 長以下なら残基に含まれる全原子間の相互作用を計算する。

=ATOM ; atom base cutoff

原子重心間の距離が、CUTOFF 長以下なら原子間の相互作用を計算する。

=RESA ; residue base cutoff

残基に含まれる 2 原子間の最短の距離が、CUTOFF 長以下なら残基に含まれる全原子間の相互作用を計算する。

CUTLENgth : cutoff 長 (Å)

=8.0 ; (デフォルト)

DIEFUNction : 空間の比誘電率の形式

=CONS ; 誘電率は定数 (デフォルト)

=DIST ; 誘電率 ϵ は距離に比例する。 $\epsilon = \text{DIEVAL} * \text{距離}(\text{Å})$

DIEVALue : 空間の比誘電率

=1.0 ; (デフォルト)

(7-2) 相互作用計算のスイッチ

特定の相互作用を計算する (しない) 場合に、以下のスイッチを用います。

(7-2-1) 1-2、1-3、1-4 相互作用のスイッチ

通常の MIN/MD 計算では、すべてデフォルト値を用います。極めてまれですが、特定の相互作用を計算したくない場合にのみ用います。

CALBONd : 1-2 相互作用の計算

=CALC ; 計算する (デフォルト)

=NOCALc ; 計算しない

CALANGLe : 1-3 相互作用の計算

=CALC ; 計算する (デフォルト)

=NOCALc ; 計算しない

CALTORSion : torsion 相互作用の計算

=CALC ; 計算する (デフォルト)

=NOCALC ; 計算しない

CALIMProper : improper torsion の計算

=CALC ; 計算する (デフォルト)

=NOCALC ; 計算しない

CALV14 : 1-4 van der Waals の計算

=CALC ; 計算する (デフォルト)

=NOCALC ; 計算しない

CALE14 : 1-4 静電相互作用の計算

=CALC ; 計算する (デフォルト)

=NOCALC ; 計算しない

(7-2-2) 1-5 相互作用計算のスイッチ

CUTOFF を用いる計算 (相互作用テーブルを用いる計算) をする場合と、CUTOFF を用いないで全ての 1-5 相互作用を全原子対に対し計算 (直接計算) する場合で、スイッチの指定を切り替えます。デフォルトでは、CUTOFF を用いる場合に設定されています。通常, 1-5 van der Waals, 1-5 静電相互作用、水素結合はすべて計算します (デフォルト)。極めてまれですが、特定の相互作用を計算したくないときにスイッチを切り替えてください。水素結合 (12-10 ポテンシャル) を含まない力場を用いる場合は、スイッチ CALHYD の値に関わらず水素結合は計算されません。

相互作用テーブルを使用する (CUTOFF を用いる) 場合

以下の CALV15, CLAE15, CALHYD を=CALC に設定、CALV5N, CALE5N, CALH5N を=NOCALC に設定する。(デフォルト)

CALV15 : 1-5 van der Waals

=CALC ; 計算する (デフォルト)

=NOCALC ; 計算しない

CALE15 : 1-5 静電相互作用

=CALC ; 計算する (デフォルト) ※PME/FMM のとき必須

=NOCALC ; 計算しない

CALHYD : 水素結合

=CALC ; 計算する (デフォルト)

=NOCALC ; 計算しない

相互作用テーブルを使用しない場合

以上の CALV15, CLAE15, CALHYD を=NOCALC に設定、 CALV5N, CALE5N, CALH5N を=CALC に設定する。

```

CALV5N : 1-5 van der Waals
    =NOCALC    ; 1-5 van der Waals を直接計算しない (デフォルト)
    =CALC      ; 計算する
CALE5N : 1-5 静電相互作用
    =NOCALC    ; 1-5 静電相互作用を直接計算しない (デフォルト)
    =CALC      ; 計算する
CALH5N : 水素結合
    =NOCALC    ; 水素結合を直接計算しない (デフォルト)
    =CALC      ; 計算する

```

(7-2-3) 拘束ポテンシャル

拘束用ポテンシャルはデフォルトでは全て NOCALC (計算しない) にセットされています。CAP 拘束、position restraint, distance/angle/torsion restraint、van der Waals 反発項のソフトコア (soft repulsion) などを用いる場合、それぞれのエネルギー計算項を CALC に設定してください。さらに、通常これらのポテンシャルは対象原子の指定 (EXE>INPUT の章を参照) と、力の定数などのパラメーターを必要とするため各々のパラメーターも入力してください。

これらの拘束ポテンシャルはすべて、系全体のポテンシャルエネルギー項に加算されます。

```

CALPSR : position restraint
    =NOCALC    ; 計算しない (デフォルト)
    =CALC      ; 計算する
    EXE>INPUT フェーズにて、以下を指定する。
        POSITION=READ
        NAMEPO= (position restraint 指定ファイル)
        REFCOORD=PDB
        NAMERE= (参照座標ファイル)
CALDSR : distance-restraint
    =NOCALC    ; 計算しない (デフォルト)
    =CALC      ; 計算する
    EXE>INPUT フェーズにて、以下を指定する。
        DISTANcerestrain =READ
        NAMEDIstance= (distance restraint 指定ファイル)

```

CALDHR : dihedral-restraint
=NOCALc ; 計算しない (デフォルト)
=CALC ; 計算する
EXE>INPUT フェーズにて、以下を指定する。
DIHEDRAlrestrain =READ
NAMEDH= (dihedral restraint 指定ファイル)

CALREP : simple repulsion
=NOCALc ; 計算しない (デフォルト)
=CALC ; 計算する

CALCAP : CAP 拘束
=NOCALc ; 計算しない (デフォルト)
=CALC ; 計算する
EXE>INPUT フェーズにて、以下を指定する。
SETBOUndary =READ
NAMEBOUndary = (CAP boundary 指定ファイル)

拘束ポテンシャルに必要なパラメーター

TEMPERature: 拘束に用いる温度 (K) (Position, Distance, Repulsion, Dihedral).
=300.0 ; (デフォルト) (Δ)

WETDSR : distance restraint の重み
=1.0 ; (デフォルト)

WETPSR : position restraint の重み
=5.0 ; (デフォルト)

WETDHR : dihedral restraint の重み
=10.0 ; (デフォルト)

Simple repulsion のパラメーター

WETREP : simple repulsion の重み
=1.0 ; (デフォルト)

REPScale : van der Waals 半径のスケール因子
=1.0 ; (デフォルト)

REPDELta : 許容誤差
=1.0 ; (デフォルト)

CAP 拘束のパラメーター

CAP 拘束では、CAP 拘束対象原子の指定ファイル (EXE>INPUT の章参照)、“CALCAP=CALC” の指定以外に、CAP の中心、半径、壁を形成する反発ポテンシャルの型と力の係数についてのパラメーターが必要になります。

RADCAP : CAP 拘束の半径 (A)。

(この半径の内側では拘束力は 0、外側ではポテンシャルで拘束されます)

=20.0 : (デフォルト)

FORCAP : CAP の壁を作る反発ポテンシャルの力の定数

=150.0 : (デフォルト)

FUNCAP : CAP の壁の反発ポテンシャルの形

=HARMonic : 2 次関数パラボラポテンシャル (デフォルト)

$$F = 0.5 * \text{FORCAP} * (R - \text{RADCAP}) ** 2$$

ここで、 $R = (\text{チェーンの重心}) - (\text{CAP の中心})$ 。

=BIQUadratic : 4 次関数型ポテンシャル

$$F = 0.25 * \text{FORCAP} * (R ** 2 - \text{RADCAP} ** 2) ** 2$$

ここで、 $R = (\text{チェーンの重心}) - (\text{CAP の中心})$ 。

(8) 境界条件

myPresto で使用できる境界条件は、球・楕円体、周期境界条件（直方体 6 面体セル）です。球・楕円体では、弾性衝突を実現する剛体壁が用いられます。中心の指定など一部変数は共通の名前が使用されます。周期境界条件使用時は、ユニットセルへの座標引き戻しのサイクル (UPDATE) を忘れずに指定してください。CAP 拘束と異なり対象原子指定ファイルは不要です。

BOUNDary : 境界条件の種類

=NO ; 境界なし (デフォルト)
=PERI ; 周期境界条件。
=ELLIPsoid ; 楕円体境界
=SPHERE ; 球境界

(8-1) 境界条件のサイズの設定

周期境界条件の場合 :

ユニットセルの X 軸・Y 軸・Z 軸の長さ (A) を指定します。

LXCELL= 40.0 ; (デフォルト)
LYCELL= 40.0 ; (デフォルト)
LZCELL= 40.0 ; (デフォルト)

楕円体の場合 :

楕円は、長軸・短軸が、XYZ 座標方向に揃っているものとし、X 軸 Y 軸 Z 軸方向の半径 (A) を指定します。

ELLIPA= 30.0 ; (デフォルト)
ELLIPB= 30.0 ; (デフォルト)
ELLIPC= 30.0 ; (デフォルト)

球の場合 :

球の半径を指定します。

RADIUS= 30.0 ; (デフォルト)

(9) LIST

「LIST」を書き加えれば、現在のパラメーター設定が表示されます。引数なし。

(10) QUIT

EXE>グループ入力の終了を示します。引数なし。

5.3. ANALYSIS 計算実行例

cosgene の ANALYSIS をテスト実行するためのサンプルファイルは、cosgene_packYYMMDD.tar.gz(YYMMDD は年月日を示す数字です。)ANALYSIS 用サンプルファイルは、cosgene_packYYMMDD/sample_analysis/の下にあります。また、ANALYSIS を自動的にテスト実行するプログラムは cosgene_packYYMMDD/bin/test_analysis.sh です。

■制御ファイル (md.inp)

```
EXE> INPUT
      TOPOLOGY= FORM      NAMETO=  initial.tpl
      COORDINA= PDB       NAMECO=  initial.pdb
      POSITION=  READ      NAMEPO=  M_all.res
      REFCOORD= PDB       NAMERE=  initia0.pdb
      SETBOU=  READ       NAMEBO=  M_dock.capbc
      SETSHAKE= READ      NAMESH=  initial.shk
      QUIT
EXE> MD
      LOOPLI=  10000
      SETTIM=  5000.000   CPUTIM= 3600000.000
      UPDATE=  20
      TIMEST=  2.000
      OUTLOG=  200       LOGFOR=  DETA
      STOPCE=  NO

      OUTCOO=  100
      NAMECO=  traject.cor ; 座標トラジェクトリーファイル
      MNTRCO=  SING

      OUTENE=  200
      NAMEEN=  traject.ene ; エネルギートラジェクトリーファイル
      MNTREN=  ASCII

      NAMETO=  traject.eto
      MNTRTO=  ASCII

      METHOD=  CANONICAL
      SETTEM= 300.000   INITIA=  SET
      STARTT=300.000   RANDOM= 654321
      SHAKEM= ALLB
      CALCAP= CALC      RADCAP= 22.0
      FORCAP= 100.0     FUNCAP= HARMonic
      SETCEN= NO
      CALPSR= CALC      WETPSR= 10.00
      BESTFI= YES
      CUTMET= RESA      CUTLEN= 10.000
      DIEFUN= CONS      DIEVAL= 1.000
      CALV15= CALC      CALE15= CALC
      CALHYD= NOCALC    CALV5N= NOCALC
      CALE5N= NOCALC    CALH5N= NOCALC
      QUIT
EXE> OUTPUT
      COORDINATE= PDB     NAMECO=  final.pdb
      QUIT
EXE> END
```

位置拘束によって固定されたタンパク質の一部と、それに配位した金属原子・リガンドを含む系を CAP 水によって囲んだ系を計算します。系は、第1チェーンがタンパク質、第2－4チェーンが Ca イオン、第5チェーンが Zn イオン、第6チェーンがリガンド、第7チェーン以降が水分子です。系の MD は、上記の md.inp を制御ファイルとして行ないます。

位置拘束ファイル M_all.res は以下のように指定し、リガンド分子と水分子は CAP ポテンシャル内で自由に動けるようになっています。

■位置拘束指定ファイル (M_all.res)

```
GROUP> LIST
  1  1  1 137  CA  *  1.0  MASS  YES
  1  1  1 137  N   *  1.0  MASS  YES
  1  1  1 137  C   *  1.0  MASS  YES
  1  1  1 137  O   *  1.0  MASS  YES
  2  5  1  1  *   *  1.0  MASS  YES
END
GROUP> STOP
```

この座標トラジェクトリーファイルを解析し、座標トラジェクトリーの各ステップでの参照座標からのずれ (RMSD) の推移と、平均構造を求めます。RMSD の推移は、標準出力とプロットデータに出力され、平均構造は NAMECO で指定するファイルに出力されます。

■制御ファイル ana_1.inp

```
EXE> INPUT
  TOPOLOGY=  FORM      NAMETO=  initial.tpl ;系のトポロジーファイル
  COORDINA=  PDB      NAMECO=  initial.pdb ;系の PDB ファイル
  REFCOORD=  PDB      NAMERE=  initial.pdb ;参照座標
  QUIT
EXE> ANALYS
  METHOD=      MD
  NAMETR=  traject.cor ; MD 計算の座標トラジェクトリーファイル
  DATATY=  COR4      ;トラジェクトリーファイルの種類の指定
  LOGFOR=  DETAIL    ;標準出力の指定
  INTERV=  1        ;解析のステップ間隔
  STARTT=  0.0      ;解析開始時刻 (PSEC)
  ENDTIM=  20.0     ;解析終了時刻 (PSEC)
  UNITBS=  61       ;NAMEBS の I0 ユニット番号
  NAMEBS=  setbst_1.bst ;座標重ね合わせに用いる原子指定
  BESTFI=  YES      ;座標の重ね合わせを行なう。
  FLUCTU=  YES      ;揺らぎの計算を行なう。
  NAMEPL=  rmsd_plot.data ;RMSD のプロットデータ
  QUIT
EXE> OUTPUT
  COORDINATE=  PDB      NAMECO=  mean.pdb ;出力する平均構造
  QUIT
EXE> END
```


RMSD の計算は、参照座標にトラジェクトリーファイルの座標を重ね合わせて計算しますが、原子の重ね合わせは、何も指定しないと第一チェーンの全原子が指定されます。水素原子は、重ね合わせの指定から外し、第 2 - 5 チェインまでの金属原子も重ね合わせにもちいるように指定したいので、以下のような原子指定ファイルを作成し、指定します。2 行目、FIX で、いったん全ての原子の指定を解除し、それ以降の行で改めて原子を指定します。指定するとき、必ず第一チェーンの原子が指定に含まれていないといけません。

■原子指定ファイル (setbst_1.bst)

```
SETBST> LIST
FIX  1  1  1 137  *  YES  ; 原子指定を外す。
FREE 1  1  1 137  C* YES  ; 全ての C から始まる原子名の原子を指定する。
FREE 1  1  1 137  N* YES  ; 全ての N から始まる原子名の原子を指定する。
FREE 1  1  1 137  O* YES  ; 全ての O から始まる原子名の原子を指定する。
FREE 1  1  1 137  S* YES  ; 全ての S から始まる原子名の原子を指定する。
FREE 2  5  1  1  *  YES  ; 第 2 - 5 チェインの全ての原子を指定する。
SETBST> END
```

標準出力ファイルには、RMSD の推移、平均構造、各原子の RMSD と、RMSD の x, y, z 成分などが出力されます。

■標準出力ファイル (ana_1.out)

```
INFORMATION> ANALYS
  CALCULATE AVERAGE AND FLUCTUATION
    NUMBER OF SELECTED DATA   :   100

  RMSD DATA
  NUMBER OF ATOMS OF FIRST CHAIN :   2008
  NUMBER OF ATOMS FOR BEST-FIT   :   1049
  1) AVERAGE
    ALL ATOM      :  4.2578762709675724
    SELCTED ATOM  :  0.41109270952623123
  2) SD
    ALL ATOM      :  1.3583200792547043
    SELCTED ATOM  :  3.94575716745282287E-2

  EACH ATOM DATA ; 平均構造の x, y, z 座標、RMSD, RMSD の x, y, z 成分
    1 N      GLY      1      1  1 -16.58385  5.37864 14.14423  0.12539
0.7546969E-01 0.8198197E-01 0.5748686E-01
    2 H1     GLY      1      1  1 -16.96925  5.08163 14.94453  0.04053
0.1919956E-01 0.3203947E-01 0.1574088E-01
```

プロットデータには RMSD の推移が出力されます。第 1 カラムは、経過時間 (PSEC)、第 2 カラムは RMSD (Å) です。最初に、トラジェクトリーの座標を、重ね合わせ原子の指定によって指定された原子を参照座標に重ね合わせ、全原子の RMSD を計算して出力します。次に、#RMSD PART 以降に、トラジェクトリーの座標を、重ね合わせ原子の指定によって指定された原子を参照座標に重ね合わせ、指定された原子のみの RMSD の値を出力します。通常は、#RMSD PART 以降の値を解析に用います。

■プロットデータ (rmsd_plot.data)

# RMSD ALL	; 全原子の RMSD
0.2000000	0.7820804
0.4000000	1.1031598
0.6000000	1.3053278
0.8000000	1.4847158
:	
:	
:	
19.7999992	6.1756648
20.0000000	6.2183821
# RMSD PART	; 指定した原子の RMSD
0.2000000	0.2947671
0.4000000	0.3071040
0.6000000	0.3031894
0.8000000	0.3269165
:	
:	
:	

6. 参考文献

◆ General

- [1] K. Morikami, T. Nakai, A. Kidera, M. Saito & H. Nakamura. PRESTO(PRotein Engineering SimulaTOr): A vectorized molecular mechanics program for biopolymers. *Computers Chem. Vol. 16, No. 3*, 243-248(1992).

◆ Empirical parameters of the potential energy functions

a) AMBER UNITED ATOM parameter

- [2] S. J. Weiner, P. A. Kollman, D. A. Case, U. C. Singh, C. Ghio, G. Alagona, S. Profeta, Jr. & P. Weiner. A new force field for molecular mechanical simulation of nucleic acids and proteins. *J. Am. Chem. Soc.* **106**, 765-784(1984).

b) AMBER ALL ATOM parameter

- [3] S. J. Weiner, P. A. Kollman, D. T. Nguyen, & D. A. Case. An all-atom force field for simulations of proteins and nucleic acids. *J. Computat. Chem.* **7**, 230-252(1986).

c) AMBER force field (C96, Param99, GAFF)

- [4] W. D. Cornell, P. Cieplak, C. I. Bayly, I. R. Gould, K. M. Merz, Jr., D. M. Ferguson, D. C. Spellmeyer, T. Fox, J. W. Caldwell & P. A. Kollman. A second generation force field for the simulation of proteins, nucleic acids, and organic molecules. *J. Am. Chem. Soc.* **117**, 5179-5197(1995).
- [5] P. A. Kollman, R. Dixon, W. Cornell, T. Fox, C. Chipot & A. Pohorille. The development/application of a 'minimalist' organic/biochemical molecular mechanic force field using a combination of *ab initio* calculations and experimental data. In *Computer Simulation of Biomolecular Systems, Vol. 3*, A. Wilkinson, P. Weiner & W. F. van Gunsteren, Ed. Elsevier, (1997). pp. 83-96.
- [6] M. D. Beachy & R. A. Friesner. *J. Am. Chem. Soc.* **119**, 5908-5920(1997).

- [7] J. Wang, P. Cieplak & P. A. Kollman. How well does a restrained electrostatic potential (RESP) model perform in calculating conformational energies of organic

and biological molecules?. *J. Comput. Chem.* **21**, 1049–1074(2000).

- [8] Junmei Wang, Romain M. Wolf, James W. Caldwell, Peter A. Kollman, David A. Case, "Development and testing of a general amber force field", *J. Comput. Chem.* **25**, 1157–1174, (2004).

d) OPLS parameter

- [9] W.L. Jorgensen, & J. Tirado-Rives. The OPLS potential functions for proteins. Energy minimizations for crystals of cyclic peptides and crambin. *J. Am. Chem. Soc.* **110**, 1657–1666 (1988).

e) ION in parameter files

- [10] J. Åqvist. Ion-water interaction potentials derived from free energy perturbation simulations. *J. Phys. Chem.* **94**, 8021–8024(1990).
[11] T. Darden, D. Pearlman & L.G. Pedersen. Ionic charging free energies: Spherical versus periodic boundary conditions. *J. Chem. Phys.* **109**, 10921–10935(1998).

f) TIP3P water

- [12] W.L. Jorgensen, J. Chandrasekhar, J. Madura & M.L. Klein. Comparison of Simple Potential Functions for Simulating Liquid Water. *J. Chem. Phys.* **79**, 926–935(1983).
[13] W.L. Jorgensen & J.D. Madura. *Mol. Phys.* **56**, 1381(1985).

g) CHARMM

- [14] B. R. Brooks, R. E. Bruccoleri, B. D. Olafson, D. J. States, S. Swaminathan, and M. Karplus. CHARMM: A Program for Macromolecular Energy, Minimization, and Dynamics Calculations. *J. Comp. Chem.* **4**, 187–217 (1983).

◆ Energy minimization

a) Conjugate gradient minimization

- [15] M.J.D. Powell. Restart procedures for the conjugate gradient method. *Math. Prog.* **12**, 241–254(1977).
[16] S.J. Watowich, E.S. Meyer, R. Hagstrom & R. Josephs. A stable, rapidly converging conjugate gradient method for energy minimization. *J. Comp. Chem.* **9**,

650-661(1988).

b) Minimization with SHAKE Constraints

- [17] W.F. Gunsteren & M. Karplus. A method for constrained energy minimization of macromolecules. *J. Comp. Chem.* **1**, 266-274(1980).

◆ Molecular dynamics

a) General documents

- [18] W.F. Gunsteren. The role of computer simulation techniques in protein engineering. *Protein Engineering* **2**, 5-13(1988).
[19] 岡崎進, 「コンピュータ・シミュレーションの基礎」, 化学同人(2000).

b) Method of differentiation (method of integration)

- [20] L. Verlet. Computer "Experiments" on classical fluids. I. thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. *Phys. Rev.* **159**, 98-103(1967).

c) SHAKE constraints

- [21] J.P. Ryckaert, G. Ciccotti & H.J.C. Berendsen. Numerical integration of the cartesian equations of motion of a system with constraints: Molecular dynamics of n-alkanes. *J. Comp. Phys.* **23**, 327-341(1977).

d) Distance restraint

- [22] W. Braun & N. Go. *J. Mol. Biol.* **186**, 611(1985).

e) Position restraint

- [23] R.E. Brouccoleri & M. Karplus. *J. Comput. Chem.* **7**, 165(1986).

f) Torsion restraint

- [24] G.M. Clore, A.T. Brünger, M. Karplus & A.M. Gronenborn. *J. Mol. Biol.* **191**, 523(1986a).

g) Soft repulsion

- [25] M. Nilges, A.M. Gronenborn, A.T. Brünger & G.M. Clore. *Protein Eng* **2**, 27(1998).

h) Constant temperature simulation

- [26] H.J.C. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F. van Gunsteren, A. DiNola & J.R. Haak.

Molecular dynamics with coupling to an external bath. *J. Chem. Phys.* **81**, 3684–3690(1984).

i) BEST fit (Jacobi's diagonalization)

[27] S.K. Kearsley. On the orthogonal transformation used for structural comparisons. *Acta Cryst.* A45, 208–210(1989)

j) Particle Mesh Ewald

[28] U.Essmann, L.Perera, M.L.Berkowitz, T.Darden, H.Lee and L.G.Pedersen. A smooth particle meth Ewald method. *J. Chem. Phys.* 103, 8577–8593(1995)

k) Thermostat, Rigid-body

[29] T. Terada and A. Kidera. Generalized form of the conserved quantity in constant-temperature molecular dynamics. *J. Chem. Phys.* 116, 33–41(2002)

l) NPT Ensemble

[30] Glenn J. Martyna, Mark E. Tuckerman, Douglas J.Tobias, Michael L. Klein, Explicit reversible integrators for extended systems dynamics, *Molecular Physics*, 1996, vol.87, No.5, 1117–1157.

m) RESPA

[31] M. Tuckerman, B. J. Berne, G. J. Martyna, Reversible multiple time scale molecular dynamics, *J. Chem. Phys.* 97 (3), 1 August 1992.

n) Fast Multipole Method

[32] L. Greengard, "The Rapid Evaluation of Potential Fields in Particle Systems", MIT Press, Cambridge, MA, 1988.

[33] L. Greengard and V. Rokhlin, "A Fast Algorithm for Particle Simulations", *Journal of Computational Physics*, 73, 325–348, 1987.

◆ Implicit water model

a) Generalized Born / Surface Area

- [34] Still, W. C., Tempczyk, A., Hawley, R., C. & Hendrickson, T. Semianalytical Treatment of Solvation for Molecular Mechanics and Dynamics. J. Am. Chem. Soc. 112, 6127 (1990).
- [35] Hawkins, D., Gregory., Cramer, J., Christopher. & Truhlar, G., Donald. Parameterized Models of Aqueous Free Energies of Solvation Based on Pairwise Descreening of Solute Atomic Charges from a Dielectric Medium. J Phys Chem 100, 19824-39 (1996).
- [36] Hawkins, D., Gregory., Cramer, J., Christopher. & Truhlar, G., Donald. Pairwise solute descreening of solute charges from a dielectric medium. Chemical Physics Letters 246, 122-129 (1995).
- [37] Onufriev, A., Bashford, D. & Case, D. A. Modification of the Generalized Born Model Suitable for Macromolecules. J Phys Chem. B 104, 3712-3720 (2000).

b) Accessible Surface Area

- [38] Richmond, T. J. Solvent accessible surface area and excluded volume in proteins. Analytical equations for overlapping spheres and implications for the hydrophobic effect. J Mol Biol 178, 63-89. (1984).
- [39] T. Ooi, M. Oobatake, G. Nemethy, H. A. Scheraga, Accessible surface areas as a measure of the thermodynamic parameters of hydration of peptides. Proc. Natl. Acad. Sci. U S A 84 (1987)3086-90.
- [40] Kinjo, A. R., Kidera, A., Nakamura, H. & Nishikawa, K. Physicochemical evaluation of protein folds predicted by threading. Eur Biophys J 30, 1-10. (2001).

c) Atomic Solvation Parameter

- [41] Ponder JW, Case DA. Force fields for protein simulations. Adv Protein Chem 2003;66:27-85.

◆ Multicanonical MD

a) Multicanonical MD

- [42] N. Nakajima, H. Nakamura, and A. Kidera, "Multicanonical ensemble generated by molecular dynamics simulation for enhanced conformational sampling of peptides", J. Phys. Chem. B 101, 817-824 (1997).
- [43] J. Higo, N. Nakajima, H. Shirai, A. Kidera, H. Nakamura, "Two-component multicanonical Monte Carlo method for effective conformational sampling", J. Comp. Chem. 18, 2086 (1997).
- [44] N. Nakajima, "A selectively enhanced multicanonical molecular dynamics method for conformational sampling of peptides in realistic water molecules", Chem. Phys. Letters, 288, 319 (1998).
- [45] H. Shirai, N. Nakajima, J. Higo, A. Kidera and H. Nakamura, "Conformational sampling of CDR-H3 in antibodies by multicanonical molecular dynamics simulation", J. Mol. Biol., 278, 481-496 (1998).
- [46] S.T. Kim, H. Shirai, N. Nakajima, J. Higo, and H. Nakamura, "Enhanced conformational diversity search of CDR-H3 in antibodies: Roles of the first CDR-H3 residue", PROTEINS: Struct. Funct. and Genet., 37, 683-696 (1999).
- [47] H. Nakamura, S. Ono, and J. Higo, "A general ab initio approach for free energy landscapes of biological molecules around the transition states: Fusion of the classical molecular mechanics simulation and the quantum chemical calculation", Proc. Japan Acad. 75, Ser.B, 291-294 (1999).
- [48] N. Nakajima, J. Higo, A. Kidera, H. Nakamura, "Free energy landscape of peptides by enhanced conformational sampling", J. Mol. Biol. 296, 197 (2000).
- [49] S. Ono, N. Nakajima, J. Higo and H. Nakamura, "Peptide free energy profile is strongly dependent on the force field: Comparison of C96 and AMBER95", J. Comput. Chem. 9: 748-762 (2000).
- [50] J. G. Kim, Y. Fukunishi, H. Nakamura, Dynamical origin of uniform sampling in multicanonical ensemble, Physical Review E 67, 011105 (2003).
- [51] J. G. Kim, Y. Fukunishi, A. Kidera and H. Nakamura, "Determination of multicanonical weight based on a stochastic model of sampling dynamics", Physical Review E 68, 021110 (2003).
- [52] J. G. Kim, Y. Fukunishi, A. Kidera and H. Nakamura, "Stochastic formulation of sampling dynamics in generalized ensemble methods", Physical Review E 69, 021101 (2004).

[53] Yukihiisa S. Watanabe, Yoshifumi Fukunishi, Haruki Nakamura, "Modelling of third cytoplasmic loop of bovine rhodopsin by multicanonical molecular dynamics", J. Mol. Graph. Model. 23, 59-68 (2004).

b) Multicanonical WHAM

[54] Satoshi Ono, Nobuyuki Nakajima, Junichi Higo and Haruki Nakamura, "The multicanonical weighted histogram analysis method for the free energy landscape along structural transition paths", Chem. Phys. Lett. 312, 247-254 (1999).

c) Force-biased Multicanonical MD

[55] Jae Gil Kim, Yoshifumi Fukunishi, Haruki Nakamura, "Multicanonical molecular dynamics algorithm employing adaptive force-biased iteration scheme", Phys. Rev. E 70, 057103 (2004).

d) Force-biased Multicanonical MD with GB/SA

[56] Yukihiisa S. Watanabe, Jae Gil Kim, Yoshifumi Fukunishi, Haruki Nakamura, "Free energy landscapes of small peptides in an implicit solvent model determined by force-biased multicanonical molecular dynamics simulation", Chem. Phys. Lett. 400, 258-263 (2004).

[57] Narutoshi Kamiya, Yukihiisa S. Watanabe, Satoshi Ono, Junichi Higo, "AMBER-based hybrid force field for conformational sampling of polypeptides", Chem. Phys. Lett. 401, 312-317 (2005).

◆ Free Energy Estimation

a) WHAM

[58] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. 61, 2635 (1988).

b) Filling potential method

[59] Y. Fukunishi, Y. Mikami, and H. Nakamura, "The filling potential method: A method for estimating the free energy surface for protein-ligand docking", J. Phys. Chem. B. 107, 13201-13210 (2003).

◆ In silico screening method

- [60] "A virtual active compound produced from the negative image of a ligand-binding pocket, and its application to in-silico drug screening", Y. Fukunishi, S. Kubota, C. Kanai, H. Nakamura, *Journal of Computer-Aided Mol Design*, (2006) 20, 237-48.
- [61] "Finding ligands for G-protein coupled receptors based on the protein-compound affinity matrix", Y. Fukunishi, S. Kubota, H. Nakamura, *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 25, 633-43, (2007)

(付録 A) 入出力ファイル

A.1 構造探索エンジンの入出力ファイル

構造探索エンジンは、以下の目的でファイルの入出力を行う。

- (1) シミュレーション条件の指定
- (2) シミュレーション状態の保存
- (3) シミュレーション結果の出力

これらのファイルを総称して入出力ファイルと呼ぶ。

A.1.1 フェーズの説明

構造探索エンジンは、以下のフェーズでファイルの入出力を行う。

- (1) INPUT フェーズ

系のトポロジー、座標、シミュレーション条件などのファイルの入力。

- (2) OUTPUT フェーズ

シミュレーション後の系のトポロジー、座標のファイル出力。

- (3) MINimize フェーズ

系のポテンシャルエネルギーの最小化。

- (4) MD フェーズ

系の分子動力学シミュレーション。

A.2 入力ファイル

構造探索エンジンの入力ファイルを以下に示す。

項番	ファイル名称	対 象	用 途
#1	制御ファイル	-	構造探索エンジンの制御
#2	トポロジーファイル	全フェーズ	シミュレートする系のトポロジー指定
#3	座標ファイル	全フェーズ	シミュレートする系の原子座標指定
#4	SHAKE ファイル	MIN, MD	SHAKE 対象原子と拘束距離の指定
#5	固定原子・自由原子指定 ファイル	MIN, MD	自由/固定原子の指定
#6	CAP 指定ファイル	全フェーズ	セル形状、CAP 拘束の指定
#7	拡張 CAP 指定ファイル	全フェーズ	拡張 CAP 拘束の指定
#8	位置拘束ファイル	全フェーズ	位置拘束の指定
#9	距離拘束ファイル	全フェーズ	距離拘束の指定
#10	二面角拘束ファイル	全フェーズ	二面角拘束の指定
#11	モニター指定ファイル	MD	モニター対象の指定
#12	系の重心合わせ指定用 ファイル	MIN, MD	重心合わせ対象原子の指定
#13	系の GB/SA 及び ASA 用パ ラメーター指定ファイ ル	MIN, MD	GB/SA 及び ASA 用パラメーターの指定
#14	リスタートファイル	MD	リスタート情報の指定
#15	剛体モデルファイル	MD	剛体モデル対象原子の指定

A. 2.1 制御ファイル

対象フェーズ：全フェーズ

用途：構造探索エンジンの実行フェーズ制御とフェーズに指定するパラメーターを指定する。

特記事項：

実数の指数を示す文字は” D” でなければならない。

実数指数の指定例)

CPUTIM = 60.0D0

書式：

[実行フェーズ指定行 [フェーズ内パラメーター指定行]... パラメーター終了行]...

実行フェーズ指定行：実行するフェーズを以下の文字列で指定する。

INPUT フェーズ	=	“EXE> INPUT”
OUTPUT フェーズ	=	“EXE> OUTPUT”
MINimize フェーズ	=	“EXE> MIN”
MD フェーズ	=	“EXE> MD”
実行終了行	=	“EXE> END”

パラメーター終了行：フェーズ内パラメーター指定行の終了を以下の形式で指定する。

“QUIT”

フェーズ内パラメーター指定：各フェーズのパラメーターを以下の形式で指定する。

キーワード “=” 値

※キーワードは英字 6 文字で構成され、値はキーワードに対応し、選択型、実数型、整数型、文字型の 4 種類である。

キーワード指定例)

```
UNITAN = 30           ; 整数型パラメーター
NAMEAN = aa.ana       ; 文字型パラメーター
BINCL0 = NO           ; 選択型パラメーター
CPUTIM = 60.0D0       ; 実数型パラメーター
```

以下、各フェーズのキーワードと値を示す。英字の大文字が有効となる。

また、「内容」列の括弧内は、「値」列の形式に従い、次の項目を記述する。

- ・ 選択型 : 大文字は指定文字、アンダーライン付はデフォルト値
- ・ 整数型、実数型、文字型 : デフォルト値

A. 2. 1. 1 INPUT フェーズ

項番	項 目	キーワード	値	内 容
#1	入力トポロジー	<u>TOPOLO</u> gy	選択型	ファイルの読み込みと形式 (<u>NORE</u> ad <u>FORM</u> atted <u>BIN</u> ary)
#2		<u>UNIT</u> TOpology	整数型	装置番号 (10)
#3		<u>NAME</u> TOpology	文字型	ファイル名 ("")
#4	入力原子座標	<u>COORD</u> Iate	選択型	ファイルの読み込みと形式 (<u>NORE</u> ad <u>PDB</u> <u>BIN</u> ary)
#5		<u>UNIT</u> COordinate	整数型	装置番号 (11)
#6		<u>NAME</u> COordinate	文字型	ファイル名 ("")
#7	入力 SHAKE 情報	<u>SET</u> SHAke	選択型	ファイルの読み込み (<u>NORE</u> ad <u>READ</u> <u>AUTO</u>)
#8		<u>UNIT</u> SHake	整数型	装置番号 (12)
#9		<u>NAME</u> SHake	文字型	ファイル名 ("")
#10	出力 SHAKE 自動 作成情報	<u>DBG</u> SHA	選択型	ファイルの書き込み (<u>NOW</u> Rite <u>ASCII</u> i)
#11		<u>UNIT</u> D <u>S</u>	整数型	装置番号 (84)
#12		<u>NAME</u> R <u>S</u>	文字型	ファイル名 ("")
#13	入力固定原子 情報	<u>SET</u> VARiables	選択型	ファイルの読み込み (<u>NORE</u> ad <u>READ</u>)
#14		<u>UNIT</u> VARiables	整数型	装置番号 (13)
#15		<u>NAME</u> VARiables	文字型	ファイル名 ("")

#16	入力境界条件	<u>SETBO</u> undary	選択型	ファイルの読み込み (<u>NORE</u> ad READ)
#17		<u>UNITBO</u> undary	整数型	装置番号 (14)
#18		<u>NAMEBO</u> undary	文字型	ファイル名 (""")
#19	入力拡張 CAP 情報	<u>SETEXC</u>	選択型	ファイルの読み込み (<u>NORE</u> ad READ)
#20		<u>UNITEC</u>	整数型	装置番号 (23)
#21		<u>NAMEEC</u>	文字型	ファイル名 (""")
#22	入力位置拘束 座標	<u>REFCOO</u> rdinate	選択型	ファイルの読み込みと形式 (<u>NORE</u> ad PDB)
#23		<u>UNITRE</u> fcoordinate	整数型	装置番号 (15)
#24		<u>NAMERE</u> Fcoordinate	文字型	ファイル名
#25	入力位置拘束 情報	<u>POSITI</u> onrestrain	選択型	ファイルの読み込み (<u>NORE</u> ad READ)
#26		<u>UNITPO</u> sition	整数型	装置番号 (16)
#27		<u>NAMEPO</u> sition	文字型	ファイル名 (""")
#28	入力距離拘束 情報	<u>DISTAN</u> cerestrain	選択型	ファイルの読み込み (<u>NORE</u> ad READ)
#29		<u>UNITDI</u> stance	整数型	装置番号 (17)
#30		<u>NAMEDI</u> stance	文字型	ファイル名 (""")
#31	入力二面角拘束 情報	<u>DIHEDR</u> alrestrain	選択型	ファイルの読み込み (<u>NORE</u> ad READ)
#32		<u>UNITDH</u>	整数型	装置番号 (18)
#33		<u>NAMEDH</u>	文字型	ファイル名 (""")
#34	入力モニター 対象構造情報	<u>OUTMON</u> itoritems	選択型	ファイルの読み込み (<u>NORE</u> ad READ)
#35		<u>UNITMO</u> nitoritems	整数型	装置番号 (19)
#36		<u>NAMEMO</u> nitoritems	文字型	ファイル名 (""")
#37	入力 GB/SA 及び ASA 用パラメー ター情報	<u>ASAREA</u>	選択型	ファイルの読み込み (<u>NORE</u> ad READ)
#38		<u>UNITSA</u>	整数型	装置番号 (77)
#39		<u>NAMESA</u>	文字型	ファイル名 (""")
#40	入力 UMBRELLA 拘束情報	<u>UMBREL</u>	選択型	ファイルの読み込み (<u>NORE</u> ad READ)
#41		<u>UNITUI</u>	整数型	装置番号 (22)

#42		<u>NAMEUI</u>	文字型	ファイル名(“”)
#43	系の重心の センタリング	<u>SETORI</u> gin	選択型	センタリングの指定 (<u>NO</u> YES)

A. 2. 1. 2 OUTPUT フェーズ

項番	項 目	キーワード	値	内 容
#1	出力トポロジー	<u>TOPOLO</u> gy	選択型	ファイルの書き込みと形式 (<u>NOWR</u> ite FORM atted BINA ry)
#2		<u>UNITTO</u> pology	整数型	装置番号 (90)
#3		<u>NAMETO</u> pology	文字型	ファイル名(“”)
#4	出力原子座標	<u>COORDI</u> nate	選択型	ファイルの書き込みと形式 (<u>NOWR</u> ite PDB BINA ry)
#5		<u>UNITCO</u> rdiante	整数型	装置番号 (91)
#6		<u>NAMECO</u> ordinate	文字型	ファイル名(“”)
#7		<u>RMSDCO</u> ordinate	選択型	ファイルの書き込みと形式 (<u>NOWR</u> ite PDB BINA ry)

A. 2. 1. 3 MINimize フェーズ

項番	項 目	キーワード	値	内 容
#1	MIN エネルギー	<u>UNITAN</u>	整数型	装置番号 (30)
#2	データ	<u>NAMEAN</u>	文字型	ファイル名 ("")
#3	ジョブ制御	<u>CPUTIM</u> elimit	実数型	CPU 時間上限 (60. 0)
#4		<u>MONITO</u> rinterval	整数型	ログ出力間隔 (10)
#5		<u>LOGFOR</u> mat	選択型	ログ出力形式 (<u>SHORT</u> <u>DETA</u> il)
#6		<u>BESTFI</u> tmini	選択型	(least square fitting) 値の表示 (<u>NO</u> <u>YES</u>)
#7		<u>RMSDFI</u> rst	整数型	RMSD 計算対象先頭チェーン番号 (1)
#8		<u>RMSDLA</u> st	整数型	RMSD 計算対象最終チェーン番号 (1)
#9	エネルギー 最小化	<u>METHODO</u> fmini	選択型	計算方法 (<u>STEE</u> pest <u>CONJ</u> ugate)
#10		<u>LOOPLI</u> mit	整数型	MINIMIZE ループ回数 (0)
#11		<u>CONVGR</u> radient	実数型	収束 RMSF 値 (0. 1)
#12		<u>ISTEPL</u> ength	実数型	初期ステップ長 (0. 01)
#13		<u>UPRATE</u>	実数型	STEEP 法ステップ長上方倍率 (1. 2)
#14		<u>DOWNRA</u> te	実数型	STEEP 法ステップ長下方倍率 (0. 6)
#15		<u>LINESE</u> archlimit	整数型	CONJUGATE 法ループ回数 (10)
#16		<u>CONVLI</u> nesearch	実数型	CONJUGATE 法収束条件 (0. 1)
#17	相互作用計算	<u>CALBON</u> d	選択型	bond 力の計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc)
#18		<u>CALANG</u> le	選択型	angle 力の計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc)
#19		<u>CALTOR</u> sion	選択型	torsion 力の計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc)
#20		<u>CALIMP</u> roper	選択型	improper 力の計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc)
#21		<u>CALV14</u>	選択型	1-4 van der Waals 力の計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc)

#22		<u>CALE14</u>	選択型	1-4 静電力の計算 (<u>CALC</u> <u>NOCALc</u>)
#23		<u>CUTMET</u> hod	選択型	カットオフ方法 (<u>RESC</u> <u>ATOM</u> <u>RESA</u>)
#24		<u>CUTLEN</u> gth	実数型	カットオフ長 (8.0)
#25		<u>USESPL</u>	選択型	スプライン補間の適用 (<u>NO</u> <u>YES</u>)
#26		<u>CUT-ON</u>	実数型	スプライン開始距離 (6.0)
#27		<u>UPDATE</u> interval	整数型	相互作用テーブル更新間隔 (20)
#28		<u>CALV15</u>	選択型	カットオフあり 1-5vdW 力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCALc</u>)
#29		<u>CALE15</u>	選択型	カットオフあり 1-5 静電力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCALc</u>)
#30		<u>CALHYD</u>	選択型	カットオフあり 1-5 水素力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCALc</u>)
#31		<u>CALV5N</u>	選択型	カットオフなし 1-5vdW 力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCALc</u>)
#32		<u>CALE5N</u>	選択型	カットオフなし 1-5 静電力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCALc</u>)
#33		<u>CALH5N</u>	選択型	カットオフなし 1-5 水素力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCALc</u>)
#34		<u>DIEFUN</u> ction	選択型	静電の距離依存 (<u>CONS</u> <u>DIST</u>)
#35		<u>DIEVAL</u> ue	実数型	静電の係数 (1.0)
#36	PME 法, Ewald 法	<u>CALPME</u>	選択型	PME 法の実行 (<u>NO</u> <u>YES</u>)
#37		<u>CALEWA</u> ld	選択型	Ewald 法の実行 (<u>NO</u> <u>YES</u>)
#38		<u>PMESPD</u>	選択型	PME 法での計算間隔の調整 (<u>NORM</u> <u>HIGH</u>)
#39		<u>PMEUPD</u>	選択型	PMESPD= HIGH の場合の計算方法 (<u>CUT</u> <u>RECI</u>)
#40		<u>REATOL</u>	実数型	Ewald 法での許容誤差 (1.0d-19)
#41		<u>EWAPAR</u>	実数	PME 法、Ewald 法での逆空間計算 係数 (0.35)

#42	FMM 法	<u>PMEOR</u> der	整数型	PME 法多重極展開数 (5)
#43		<u>MESHL</u> X	整数型	PME 法 x 軸メッシュ数 (16)
#44		<u>MESHL</u> Y	整数型	PME 法 y 軸メッシュ数 (16)
#45		<u>MESHL</u> Z	整数型	PME 法 z 軸メッシュ数 (16)
#46		<u>USEF</u> MM	選択型	FMM 法の実行 (<u>NO</u> YES)
#47		<u>FM</u> SPD	選択型	FMM 法での計算間隔の調整 (<u>NORM</u> HIGH)
#48		<u>FM</u> TREE	整数型	FMM 法 Tree サイズ (3)
#49		<u>FM</u> POLE	整数型	FMM 法多重極展開数 (8)
#50		<u>FM</u> NUMA	整数型	FMM 法セル内最大原子数 (1000)
#51	拘束力計算	<u>CAL</u> PSR	選択型	位置拘束計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc)
#52		<u>WE</u> TPSR	実数型	位置拘束重み (5.0)
#53		<u>CAL</u> DSR	選択型	距離拘束力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc)
#54		<u>WE</u> TDSR	実数型	距離拘束重み (1.0)
#55		<u>CAL</u> DHR	選択型	二面角拘束力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc)
#56		<u>WE</u> TDHR	実数型	二面角拘束重み (10.0)
#57		<u>CAL</u> RE <u>P</u> ulsion	選択型	repulsion 力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc)
#58		<u>WE</u> TRE <u>P</u> ulsion	実数型	repulsion 重み (1.0)
#59		<u>RE</u> PS <u>C</u> ale	実数型	repulsion スケールファクタ (1.0)
#60		<u>RE</u> P <u>DE</u> lta	実数型	repulsion 許容誤差 (1.0)
#61		<u>CAL</u> CAP	選択型	cap 拘束力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc)
#62		<u>EX</u> T <u>C</u> AP	選択型	拡張 cap 拘束力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc)
#63		<u>RAD</u> CAP	実数型	cap 半径 (20.0)
#64		<u>FOR</u> CAP	実数型	cap 係数 (150.0)
#65		<u>FUN</u> CAP	選択型	cap 種別 (<u>HARM</u> onic <u>BIQU</u> adratic)
#66		<u>TEMPER</u> ature	実数型	拘束温度 (300.0)

#67		<u>SHAKE</u> method	選択型	shake 種別 (<u>NO</u> SHake <u>HBON</u> d <u>ALLB</u> ond)
#68		<u>COVSHK</u>	実数型	shake 収束値 (1.0D-6)
#69		<u>LIMSHK</u>	整数型	shake ループ上限 (1000)
#70	GB 計算	<u>CAL-GB</u>	選択型	GB 計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc)
#71		<u>GBWELE</u>	実数型	水の誘電率 (78.3)
#72		<u>GBMELE</u>	実数型	蛋白の誘電率 (1.0)
#73		<u>GBDELT</u>	実数型	Born 半径の補正值 (0.0)
#74		<u>GBLAMB</u>	実数型	容積補正值 (1.0)
#75		<u>GBOFFS</u>	実数型	van der Waals 半径補正值 (0.09)
#76	ASA 計算	<u>CALASA</u>	選択型	ASA 計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc)
#77		<u>ASAPRO</u>	実数型	PROBE 半径 (1.4)
#78		<u>ASAWEI</u>	実数型	ASA 重み (1.0)
#79		<u>ASACUT</u>	実数型	ASA 用カットオフ長 (4.5)
#80	境界条件	<u>BOUND</u> ary	選択型	基本セルの形状 (<u>NO</u> <u>PERI</u> <u>ELLIP</u> Soid <u>SPHERE</u>)
#81		<u>SETC</u> enter	選択型	先頭分子の重心をセルの中心に 設定 (<u>NO</u> <u>YES</u>)
#82		<u>CENTRX</u>	実数型	セルの中心 x 座標 (0)
#83		<u>CENTRY</u>	実数型	セルの中心 y 座標 (0)
#84		<u>CENTRZ</u>	実数型	セルの中心 z 座標 (0)
#85		<u>LXCELL</u>	実数型	立方体セルの x 軸サイズ (40)
#86		<u>LYCELL</u>	実数型	立方体セルの y 軸サイズ (40)
#87		<u>LZCELL</u>	実数型	立方体セルの z 軸サイズ (40)
#88		<u>ELLIPA</u>	実数型	楕円体セルの半径 (30)
#89		<u>ELLIPB</u>	実数型	楕円体セルの半径 (30)
#90		<u>ELLIPC</u>	実数型	楕円体セルの半径 (30)
#91		<u>RADIUS</u>	実数型	SPHERE セルの半径 (30)
#92		<u>REPLAC</u>	選択型	座標引き戻し方法 (<u>ATOM</u> <u>RESI</u> <u>CHAI</u>)

A. 2. 1. 4 MD フェーズ

項番	項 目	キーワード	値	内 容
#1	リスタート	<u>UNITRI</u>	整数型	装置番号 (40)
#2	ファイル入力	<u>NAMERI</u>	文字型	ファイル名 (""")
#3	リスタート	<u>UNITRO</u>	整数型	装置番号 (41)
#4	ファイル出力	<u>NAMERO</u>	文字型	ファイル名 (""")
#5	原子速度出力	<u>MNTRVE</u> locity	選択型	形式 (<u>NO</u> <u>ASCI</u> i <u>SING</u> le <u>DOUB</u> le)
#6		<u>UNITVE</u> locity	整数型	装置番号 (43)
#7		<u>NAMEVE</u> locity	文字型	ファイル名 (""")
#8		<u>OUTVE</u> locity	整数型	出力間隔 (0)
#9	エネルギー 情報出力	<u>MNTRE</u> nergy	選択型	形式 (<u>NO</u> <u>ASCI</u> i <u>SING</u> le <u>DOUB</u> le)
#10		<u>UNITEN</u> ergy	整数型	装置番号 (44)
#11		<u>NAMEEN</u> ergy	文字型	ファイル名 (""")
#12		<u>OUTEN</u> ergy	整数型	出力間隔 (0)
#13	原子位置出力	<u>MNTRCO</u> ordinate	選択型	形式 (<u>NO</u> <u>ASCI</u> i <u>SING</u> le <u>DOUB</u> le)
#14		<u>UNITCO</u> ordinate	整数型	装置番号 (42)
#15		<u>NAMECO</u> ordinate	文字型	ファイル名 (""")
#16		<u>OUTCOO</u> rdinate	整数型	出力間隔 (0)
#17	トラジェクトリ ー出力	<u>MNTRTR</u> ajectory	選択型	形式 (<u>NO</u> <u>ASCI</u> i <u>SING</u> le <u>DOUB</u> le)
#18		<u>UNITTR</u> ajectory	整数型	装置番号 (50)
#19		<u>NAMETR</u> ajectory	文字型	ファイル名 (""")
#20		<u>OUTTRJ</u>	整数型	出力間隔 (0)
#21	総エネルギー (total potential energy) 出力	<u>MNTRTO</u> talenergy	選択型	形式 (<u>NO</u> <u>ASCI</u> i <u>SING</u> le <u>DOUB</u> le)
#22		<u>UNITTO</u> talenergy	整数型	装置番号 (59)
#23		<u>NAMETO</u> talenergy	文字型	ファイル名 (""")
#24	ジョブ制御	<u>CONTIN</u> uousjob	選択型	同一ジョブ内の MD 計算間で結果 の物理量を引き継ぐ (<u>NO</u> <u>YES</u>)
#25		<u>RESTAR</u> t	選択型	トラジェクトリ <u>Q</u> <u>YES</u>)

#26		<u>OUTRST</u>	実数型	自動リスタートファイル出力 秒間隔 (0.0) : 0 以下は出力しない
#27		<u>OUTRSL</u>	整数型	自動リスタートファイル出力 ループ間隔 (0) : 0 以下は出力しない
#28		<u>NAMETI</u>	文字型	入力座標トラジェクトリ ファイル名 ("")
#29		<u>NUMTRJ</u>	整数型	座標トラジェクトリの位置 (0)
#30		<u>CPUTIME</u> limit	実数型	CPU 時間上限 (60.0)
#31		<u>OUTLOG</u>	整数型	ログ出力間隔 (1)
#32		<u>LOGFOR</u> mat	選択型	ログ出力形式 (<u>SHORT</u> <u>DETA</u> il)
#33		<u>BESTFI</u> t	選択型	ベストフィットの実行 (<u>NO</u> <u>YES</u>)
#34		<u>RMSDFI</u> rst	整数型	RMSD 計算対象先頭チェーン番号 (1)
#35		<u>RMSDLA</u> st	整数型	RMSD 計算対象最終チェーン番号 (1)
#36	MD 方法	<u>LOOPLI</u> mit	整数型	MD ループ回数 (0)
#37		<u>TIMEST</u> ep	実数型	MD 時間増分 (1.0)
#38		<u>SETTIM</u> e limit	実数型	シミュレーション時間 (5.0)
#39		<u>HEATLO</u> op	整数型	昇温ループ回数 (0)
#40		<u>STARTT</u> empearture	実数型	初期温度 (300.0)
#41		<u>INITIA</u> l velocity	選択型	初期速度指定 (<u>ZERO</u> <u>SET</u> <u>RESE</u> t)
#42		<u>RANDOM</u> seed	整数型	初期速度設定用の乱数種 (584287)
#43		<u>SETTEM</u> perature	実数型	シミュレーション温度 (300.0)
#44		<u>TEMPCO</u> ntrol2	選択型	温度制御種別 (<u>NO</u> <u>YES</u>)
#45		<u>STOPCE</u> nterofmass	選択型	系全体の回転、移動を停止 (<u>NO</u> <u>TRAN</u> slate <u>ROTA</u> tion <u>BOTH</u>)

#46		<u>METHOD</u>	選択型	アンサンブル種別 (<u>MICRO</u> canonical <u>CANON</u> ical <u>NPT</u> <u>EXPA</u> nded)
#47		<u>THERMO</u> stat	選択型	Canonical アンサンブルの温度制御種別 (<u>CONS</u> tant <u>NOSE</u> -hoover)
#48		<u>SCLUPD</u>	整数型	GAUSS の束縛法での速度スケール ング間隔 (0)
#49		<u>COUPL</u> ingtime	実数型	Nose-Hoover 法でのカップリング 時間 (100. 0)
#50		<u>BAROS</u> tat	選択型	NPT アンサンブルの圧力制御種 別 (<u>ANDE</u> rsen <u>PARA</u> <u>BERE</u> ndsen)
#51		<u>MODIFI</u>	選択型	Parrinello Rahman 法でのセル 変形条件 (<u>FLEX</u> <u>MONO</u> <u>ORTH</u> <u>SING</u> <u>ISOT</u>)
#52		<u>SETPRE</u>	実数型	設定圧力 (1. 0)
#53		<u>COUPHB</u>	実数型	温度制御用カップリング タイムスケール (1000. 0)
#54		<u>COUPPI</u>	実数型	圧力制御用カップリング タイムスケール (1000. 0)
#55		<u>INTEGR</u> ation	選択型	積分器の種別 (<u>LEAP</u> -flog <u>VELO</u> city)
#56		<u>FREQME</u>	整数型	計算頻度 (中) (1)
#57		<u>FREQLO</u>	整数型	計算頻度 (長) (1)
#58	拡張アンサンブル	<u>EXPAND</u> -ensemble	選択型	拡張アンサンブル種別 (<u>FORCE</u> -bias <u>SIMUL</u> ated tempering <u>GST</u> <u>EFFE</u>)
#59		<u>DUMMY</u> loop	整数型	ダミーループ回数 (1)
#60		<u>RESETC</u>	整数型	ヒストグラム更新間隔初期値 (300000)
#61		<u>BINSIZ</u> e	実数型	ヒストグラムのビンサイズ (5. 0)
#62		<u>ENEMIN</u>	実数型	最小エネルギー (-10000. 0)
#63		<u>ENEMAX</u>	実数型	最大エネルギー (10000. 0)

#64		<u>TEMMIN</u>	実数型	最小温度 (250. 0)
#65		<u>TEMMAX</u>	実数型	最大温度 (700. 0)
#66		<u>LIMITS</u>	実数型	最小検索閾値 (0. 001)
#67		<u>LIMITC</u>	実数型	確率密度関数計算閾値 (0. 001)
#68		<u>STTNUM</u>	整数型	温度分割数 (100)
#69		<u>STEBAS</u>	実数型	最小エネルギー - (ベ - スエネルギー) (0. 0)
#70		<u>GSTMIN</u>	実数型	パラメーターλ の下限 (0. 001d0)
#71		<u>GSTMAX</u>	実数型	パラメーターλ の上限 (0. 006d0)
#72		<u>GSTNUM</u>	整数型	パラメーターλ の個数 (20)
#73		<u>GSTUPD</u>	整数型	パラメーターλ の更新間隔 (100)
#74		<u>GSTCON</u>	整数型	パラメーターλ の収束 MD 回数 (10000000)
#75		<u>GSTSAM</u>	整数型	パラメーターλ のスケーリング 前のサンプリング回数 (50000)
#76		<u>GSTBAS</u>	実数型	最小エネルギー - (ベ - スエネルギー) (25. 5)
#77		<u>GSTETA</u>	実数型	(0. 5)
#78		<u>FBRSTO</u>	選択型	FB 分布データファイル出力形式 (<u>NOWR</u> <u>ASCII</u> <u>DOUB</u>)
#79		<u>NAMEFO</u>	文字型	出力 FB 分布データファイル名 ("")
#80		<u>FBRSTI</u>	選択型	FB 分布データファイル入力形式 (<u>NORE</u> <u>ASCII</u> <u>DOUB</u>)
#81		<u>NAMEFI</u>	文字型	入力 FB 分布データファイル名 ("")
#82		<u>UNITFR</u>	整数型	FB 分布データファイル装置番号 (85)
#83		<u>UNITEP</u>	整数型	確率データファイルの装置番号 (78)
#84		<u>NAMEEP</u>	文字型	確率データファイル名 ("expand. prob")
#85		<u>UNITES</u>	整数型	スケール因子データファイルの 装置番号 (77)
#86		<u>NAMEES</u>	文字型	スケール因子データファイル名 ("expand. scale")

#87	Tsallis Dynamics	<u>UNITEE</u>	整数型	エネルギーデータファイルの 装置番号 (79)
#88		<u>NAMEEE</u>	文字型	エネルギーデータファイル名 ("expand. energy")
#89		<u>ELOWER</u>	実数型	低エネルギー側閾値 (0. 0d0)
#90		<u>EUPPER</u>	実数型	高エネルギー側閾値 (0. 0d0)
#91		<u>ROF1DR</u>	実数型	$\rho 1$ のパラメータ d の条件
#92		<u>ROF2XI</u>	実数型	$\rho 2$ のパラメータ ξ の値
#93		<u>ROF2VX</u>	実数型	$\rho 2$ のパラメータ δ の条件
#94		<u>ROF2VY</u>	実数型	$\rho 2$ のパラメータ γ の条件
#95		<u>UNITZT</u>	整数型	zeta 値モニタファイル装置番 号 (80)
#96		<u>NAMEZT</u>	文字型	zeta 値モニタファイル名 ("zeta_TD. dat")
#97		<u>OUTZET</u>	整数型	zeta 値モニタファイル出力間 隔 (1)
#98		<u>MNTRZT</u>	選択型	zeta 値モニタファイル出力形 式 (<u>NO</u> ASCI SING DOUB)
#99		<u>UNITCK</u>	整数型	Tsallis 積分チェック値モニタ ファイル装置番号 (75)
#100		<u>NAMECK</u>	文字型	Tsallis 積分チェック値モニタ ファイル名 ("check_TD. dat")
#101		<u>OUTCHK</u>	整数型	Tsallis 積分チェック値モニタ ファイル出力間隔 (1)
#102		<u>MNTRCK</u>	選択型	Tsallis 積分チェック値モニタ ファイル出力形式 (<u>NO</u> ASCI SING DOUB)
#103	分布密度関数 のモニタ出力	<u>UNITDD</u>	整数型	Tsallis 分布密度関数モニタフ ァイル装置番号 (83)
#104		<u>NAMEDD</u>	文字型	Tsallis 分布密度関数モニタフ ァイル名 ("")

#105		<u>OUTDDF</u>	整数型	Tsallis 分布密度関数モニタ ファイル出力間隔(1)
#106		<u>MNTRDD</u>	選択型	Tsallis 分布密度関数モニタ ファイル出力形式 (<u>NO</u> ASCII SING DOUB)
#107	エネルギーの モニタ出力	<u>UNITPK</u>	整数型	装置番号(81)
#108		<u>NAMEPK</u>	文字型	ファイル名(“”)
#109		<u>OUTPKT</u>	整数型	出力間隔(0)
#110		<u>MNTRPK</u>	選択型	出力形式(<u>NO</u> ASCII SING DOUB)
#111		<u>FLGPKT</u>	選択型	出力項目(---, ---+, ---, ---+, +---, ++, ++-, +++) potential, kinetic, total を 3文字で表し、“+”が出力対象
#112	全体の物理量 モニタ出力 (重心、全運動 量、全角運動 量、全力、全ト ルク、rmsd)	<u>UNITQU</u>	整数型	装置番号(82)
#113		<u>NAMEQU</u>	文字型	ファイル名(“”)
#114		<u>OUTQUA</u>	整数型	出力間隔(1)
#115		<u>MNTRQU</u>	選択型	出力形式 (<u>NO</u> ASCII SING DOUB)
#116	相互作用計算	<u>CALBON</u> d	選択型	bond 力の計算 (<u>CALC</u> <u>NOCAL</u> c <u>MEDI</u> um <u>LONG</u>)
#117		<u>CALANG</u> le	選択型	angle 力の計算 (<u>CALC</u> <u>NOCAL</u> c <u>MEDI</u> um <u>LONG</u>)
#118		<u>CALTOR</u> sion	選択型	torsion 力の計算 (<u>CALC</u> <u>NOCAL</u> c <u>MEDI</u> um <u>LONG</u>)
#119		<u>CALIMP</u> roper	選択型	improper 力の計算 (<u>CALC</u> <u>NOCAL</u> c <u>MEDI</u> um <u>LONG</u>)
#120		<u>CALV14</u>	選択型	1-4 van der Waals 力の計算 (<u>CALC</u> <u>NOCAL</u> c <u>MEDI</u> um <u>LONG</u>)
#121		<u>CALE14</u>	選択型	1-4 静電力の計算 (<u>CALC</u> <u>NOCAL</u> c <u>MEDI</u> um <u>LONG</u>)
#122		<u>CUTMET</u> hod	選択型	カットオフ方法 (<u>RESC</u> <u>ATOM</u> <u>RESA</u>)
#123		<u>CUTLEN</u> gth	実数型	カットオフ長(8.0)
#124		<u>UPDATE</u> interval	整数型	相互作用テーブル更新間隔(20)

#125		<u>USESPL</u>	選択型	スプライン補間の適用 (<u>NO</u> YES)
#126		<u>CUT-ON</u>	実数型	スプライン開始距離 (6.0)
#127		<u>CALV15</u>	選択型	カットオフあり 1-5vdW 力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCALc</u> <u>MEDIum</u> LONG)
#128		<u>CALE15</u>	選択型	カットオフあり 1-5 静電力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCALc</u> <u>MEDIum</u> LONG)
#129		<u>CALHYD</u>	選択型	カットオフあり 1-5 水素力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCALc</u> <u>MEDIum</u> LONG)
#130		<u>CALV5N</u>	選択型	カットオフなし 1-5vdW 力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCALc</u> <u>MEDIum</u> LONG)
#131		<u>CALE5N</u>	選択型	カットオフなし 1-5 静電力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCALc</u> <u>MEDIum</u> LONG)
#132		<u>CALH5N</u>	選択型	カットオフなし 1-5 水素力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCALc</u> <u>MEDIum</u> LONG)
#133		<u>DIEFUN</u> ction	選択型	静電の距離依存 (<u>CONS</u> DIST)
#134		<u>DIEVAL</u> ue	実数型	静電の係数 (1.0)
#135	PME 法, Ewald 法	<u>CALPME</u>	選択型	PME 法の実行 (<u>NO</u> YES)
#136		<u>CALEWA</u> ld	選択型	Ewald 法の実行 (<u>NO</u> YES)
#137		<u>PMESPD</u>	選択型	PME 法での計算間隔の調整 (<u>NORM</u> HIGH)
#138		<u>PMEUPD</u>	選択型	PMESPD= HIGH の場合の計算方法 (<u>CUT</u> RECI)
#139		<u>REATOL</u>	実数型	Ewald 法での許容誤差 (1.0d-19)
#140		<u>EWAPAR</u>	実数	PME 法、Ewald 法での逆空間計算 係数 (0.35)
#141		<u>PMEORD</u> er	整数型	PME 法多重極展開数 (5)
#142		<u>MESHLX</u>	整数型	PME 法 x 軸メッシュ数 (16)
#143		<u>MESHL</u> Y	整数型	PME 法 y 軸メッシュ数 (16)
#145		<u>MESHL</u> Z	整数型	PME 法 z 軸メッシュ数 (16)
#146	FMM 法	<u>USEFMM</u>	選択型	FMM 法の実行 (<u>NO</u> YES)

#147		<u>FMMSPD</u>	選択型	FMM 法での計算間隔の調整 (<u>NORM</u> HIGH)
#148		<u>FMTREE</u>	整数型	FMM 法 Tree サイズ (3)
#149		<u>FMPOLE</u>	整数型	FMM 法多重極展開数 (8)
#150		<u>FMNUMA</u>	整数型	FMM セル内最大原子数 (1000)
#151	拘束力計算	<u>CALPSR</u>	選択型	位置拘束計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc <u>MEDI</u> um <u>LONG</u>)
#152		<u>WETPSR</u>	実数型	位置拘束重み (5.0)
#153		<u>CALDSR</u>	選択型	距離拘束力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc <u>MEDI</u> um <u>LONG</u>)
#154		<u>WETDSR</u>	実数型	距離拘束重み (1.0)
#155		<u>CALDHR</u>	選択型	二面角拘束力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc <u>MEDI</u> um <u>LONG</u>)
#156		<u>WETDHR</u>	実数型	二面角拘束重み (10.0)
#157		<u>CALRE</u> pulsion	選択型	repulsion 力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc <u>MEDI</u> um <u>LONG</u>)
#158		<u>WETRE</u> pulsion	実数型	repulsion 重み (1.0)
#159		<u>REPS</u> cale	実数型	repulsion scale factor (1.0)
#160		<u>REPDE</u> lta	実数型	repulsion 許容誤差 (1.0)
#161		<u>CALCAP</u>	選択型	cap 拘束力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc <u>MEDI</u> um <u>LONG</u>)
#162		<u>RADCAP</u>	実数型	cap 半径 (20.0)
#163		<u>FORCAP</u>	実数型	cap 係数 (150.0)
#164		<u>FUNCAP</u>	選択型	cap 種別 (<u>HARM</u> onic <u>BIQU</u> adratic)
#165		<u>EXTCAP</u>	選択型	拡張 cap 拘束力計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc)
#166		<u>TEMPER</u> ature	実数型	拘束温度 (300.0)
#167		<u>SHAKE</u> method	選択型	shake 種別 (<u>NOSH</u> ake <u>HBON</u> d <u>ALLB</u> ond)
#168		<u>COVSHK</u>	実数型	shake 収束値 (1.0D-6)
#169		<u>LIMSHK</u>	整数型	shake ループ上限 (1000)
#170	剛体モデル	<u>RIGID</u> model	選択型	剛体モデル指定 (<u>NO</u> <u>YES</u> <u>AUTO</u>)
#171		<u>UNITRM</u>	整数型	装置番号 (56)
#172		<u>NAMERM</u>	文字型	ファイル名 ("")

#173		<u>DBGRIG</u>	選択型	剛体モデル自動生成情報出力指定 (<u>NOWR</u> <u>ASCII</u>)
#174		<u>UNITDR</u>	整数型	装置番号 (84)
#175		<u>NAMEDR</u>	文字型	ファイル名 ("")
#176	GB 計算	<u>CAL-GB</u>	選択型	GB 計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc <u>MEDI</u> um <u>LONG</u>)
#177		<u>GBWELE</u>	実数型	水の誘電率 (78. 3)
#178		<u>GBMELE</u>	実数型	蛋白の誘電率 (1. 0)
#179		<u>GBDELT</u>	実数型	Born 半径の補正值 (0. 0)
#180		<u>GBLAMB</u>	実数型	容積補正值 (1. 0)
#181		<u>GBOFFS</u>	実数型	van der Waals 半径補正值 (0. 09)
#182	ASA 計算	<u>CALASA</u>	選択型	ASA 計算 (<u>CALC</u> <u>NOCA</u> lc <u>MEDI</u> um <u>LONG</u>)
#183		<u>ASAPRO</u>	実数型	PROBE 半径 (1. 4)
#184		<u>ASAWEI</u>	実数型	ASA 重み (1. 0)
#185		<u>ASACUT</u>	実数型	ASA 用カットオフ長 (4. 5)
#186	UMBRELLA 拘束計算	<u>CALUMB</u>	選択型	UMBRELLA ポテンシャル計算 (<u>NOCA</u> lc <u>CALC</u> <u>MEDI</u> um <u>LONG</u>)
#187	境界条件	<u>BOUND</u> ary	選択型	基本セルの形状 (<u>NO</u> <u>PERI</u> <u>ELLIP</u> Soid <u>SPHERE</u>)
#188		<u>SETC</u> enter	選択型	先頭分子重心をセルの中心に設定 (<u>NO</u> <u>YES</u>)
#189		<u>CENTRX</u>	実数型	セルの中心 x 座標 (0. 0)
#190		<u>CENTRY</u>	実数型	セルの中心 y 座標 (0. 0)
#191		<u>CENTRZ</u>	実数型	セルの中心 z 座標 (0. 0)
#192		<u>LXCELL</u>	実数型	立方体セルの x 軸サイズ (40. 0)
#193		<u>LYCELL</u>	実数型	立方体セルの y 軸サイズ (40. 0)
#194		<u>LZCELL</u>	実数型	立方体セルの z 軸サイズ (40. 0)
#195		<u>ANGLBC</u>	実数型	LYCELL と LZCELL の角度 (90. 0)
#196		<u>ANGLCA</u>	実数型	LZCELL と LXCELL の角度 (90. 0)
#197		<u>ANGLAB</u>	実数型	LXCELL と LYCELL の角度 (90. 0)
#198		<u>ELLIPA</u>	実数型	楕円体セルの半径 (30. 0)
#199		<u>ELLIPB</u>	実数型	楕円体セルの半径 (30. 0)

#200		<u>ELLIPC</u>	実数型	楕円体セルの半径 (30.0)
#201		<u>RADIUS</u>	実数型	SPHERE セルの半径 (30.0)
#202		<u>REPLAC</u>	選択型	座標引き戻し方法 (<u>ATOM</u> RESI CHAI)

A.2.2 トポロジーファイル

対象フェーズ：全フェーズ

用途：シミュレートする系のトポロジーを指定する。

特記事項：

指定により、アスキー、バイナリ（8 バイト実数形式指定）にすることができる。

書式：出力指定により以下の2種類に分かれる。

(1) ASCII 形式指定 (TOPOLO= FORM)

特記事項：

行中の “;” 以降はコメントとなる。また、“->” は継続行をあらわす。

各指定部分は分子指定部分で記述された順序どおりに記述しなければならない。

キーワードは、“TPL> ” に続く 4 文字を認識する。

書式： トポロジーファイルは以下の部分で構成される。

タイトル記述 分子指定記述 原子指定記述 [BOND 指定記述] [ANGLE 指定記述] [TORSION 指定記述] [IMPROPER 指定記述] ポテンシャル関数指定記述 非結合相互作用指定記述

(1-1) タイトル記述

当該トポロジーのタイトルを記述する。10 行を越えてはならない。

“TPL> TITL”行 [タイトル行 ...]

例)

TPL> TITLE ALA-DIMER (AMBER UNITED ATOM)

(1-2) 分子指定記述

当該トポロジーの分子を記述する。

“TPL> MOLE”行 [分子名行 ...]

分子名行は以下の部分で構成される。

分子名称 分子数

分子名称：40 文字以内の英字名を記述する。

分子数：当該分子の個数を記述する。

例)

```
TPL> MOLECULE
ALA-DIMER-1          1
WATER (TIP3P-MODEL)-2 449
```

(1-3) 原子指定記述

分子指定記述の順に、その分子を構成する原子の情報を記述する。

“TPL> ATOM”行 分子名称行 [原子記述行 ...]

原子記述行は以下の部分で構成される。

```
原子名 原子タイプ 相互作用タイプ 残基名 残基番号 質量 vanderWaals 半径
電荷 1-2 結合原子数 1-3 結合原子数 1-4 結合原子数
[1-2 結合原子相手...] [1-3 結合原子相手...] [1-4 結合原子相手...]
[内部座標記述 (z-matrix)]
```

原子名：8 文字以下で原子名を記述する。

原子タイプ：4 文字以下で原子タイプを記述する。

相互作用タイプ：整数で相互作用タイプを記述する。

残基名：8 文字以下で残基名を記述する。

残基番号：分子内の残基の相対番号を記述する。

質量：1mol あたりの原子の質量を g 単位で記述する。

vanderWaals 半径：van der Waals 半径を Å 単位で記述する。

1-2 結合原子数:1-2 の結合をしている原子で、当該原子より後にある原子の数を記述する。
 1-3 結合原子数:1-3 の結合をしている原子で、当該原子より後にある原子の数を記述する。
 1-4 結合原子数:1-4 の結合をしている原子で、当該原子より後にある原子の数を記述する。
 1-2 結合原子相手:1-2 の結合をしている原子の相対位置を 1-2 結合原子数分だけ記述する。
 1-3 結合原子相手:1-3 の結合をしている原子の相対位置を 1-3 結合原子数分だけ記述する。
 1-4 結合原子相手:1-4 の結合をしている原子の相対位置を 1-4 結合原子数分だけ記述する。
 内部座標記述 (z-matrix) : 以下の通り。

- ・ 1-2 結合原子相手 : 1-2 の結合をしている原子の相対位置。
- ・ 1-3 結合原子相手 : 1-3 の結合をしている原子の相対位置。
- ・ 1-4 結合原子相手 : 1-4 の結合をしている原子の相対位置。
- ・ 位相基準原子 : 位相の基準となる原子の相対位置。
- ・ 平衡距離 : 平衡距離を Å 単位で記述する。
- ・ 平衡角 : 平衡角を度数 (degree) 単位で記述する。
- ・ 位相 : 初期位相を度数 (degree) 単位で記述する。

例)

```
TPL> ATOM
ALA-DIMER-1          ; 分子名行
N      N3      14      -> ; 原子名  原子タイプ  相互作用タイプ
ALA      1          -> ; 残基名  残基番号
14.010  1.850  -0.263  -> ; 質量    vanderWaals 半径  電荷
4      2      2          -> ; 1-2 結合原子数  1-3 結合原子数  1-4 結合原子数
1      2      3      4    -> ; 1-2 結合相手原子
5      6          -> ; 1-3 結合相手原子
7      8          -> ; 1-4 結合相手原子
0 0 0 0 0.0000 0.0000 0.0000 -> ; 内部座標 (z-matrix)
```

(1-4) BOND 指定記述

分子指定記述の順に、その分子内に存在する BOND の情報を記述する。

```
"TPL> BOND"行  分子名称行  [BOND 記述行 ...]
```

BOND 記述行は以下の部分で構成される。

```
BOND 構成原子 1  BOND 構成原子 2  係数  平衡距離
```

BOND 構成原子 1, 2 : 整数で BOND を構成する原子を記述する。

係数 : BOND の力の係数を $\text{KCAL}/(\text{MOL} \cdot \text{\AA}^2)$ 単位で記述する。

平衡距離 : 平衡距離を $\text{\AA}$ 単位で記述する。

例)

```
TPL> BOND
ALA-DIMER-1          ; 分子名行
1    2    434.00    1.010    ; 構成原子 1  構成原子 2  係数  平衡距離
```

(1-5) ANGLE 指定記述

分子指定記述の順に、その分子内に存在する ANGLE の情報を記述する。

```
"TPL> ANGL"行  分子名称行  [ANGLE 記述行 ...]
```

ANGLE 記述行は以下の部分で構成される。

```
ANGLE 構成原子 1  ANGLE 構成原子 2  ANGLE 構成原子 3  係数  平衡角
```

ANGLE 構成原子 1, 2, 3 : ANGLE を構成する原子を整数で記述する。2 が ANGLE の中心。

係数 : ANGLE の力の係数を $\text{KCAL}/(\text{MOL} \cdot \theta^2)$ 単位で記述する。

平衡角 : 平衡角を度数 (degree) 単位で記述する。

例)

```
TPL> ANGLE
ALA-DIMER-1          ; 分子名行
2    1    3    35.000    109.50    ; 構成原子 1  構成原子 2  係数  平衡角
```

(1-6) TORSION 指定記述

分子指定記述の順に、その分子内に存在する TORSION の情報を記述する。

```
"TPL> TORS"行  分子名称行  [TORSION 記述行 ...]
```

TORSION 記述行は以下の部分で構成される。

TORSION 構成原子 1	TORSION 構成原子 2	TORSION 構成原子 3
TORSION 構成原子 4	係数	重複 torsion 数
対象性	初期位相	1-4 相互作用計算フラグ

TORSION 構成原子 1, 2, 3, 4 : TORSION を構成する原子を整数で記述する。

原子 1, 2, 3 と原子 2, 3, 4 の組が平面を構成する。

係数 : TORSION の力の係数を KCAL/MOL 単位で記述する。

重複 TORSION 数 : 当該 TORSION と重なりのある TORSION の数を記述する。

対象性 : 当該 TORSION の対象性(周期の逆数)を記述する。

位相 : 当該 TORSION の初期位相を度数(degree)単位で記述する。

1-4 相互作用計算フラグ : 当該 TORSION の 1 と 4 の原子間の静電・van der Waals 力を計算する場合は 1 を、そうでない場合 0 を記述する。

例)

```

TPL> TORSION
ALA-DIMER-1          ; 分子名行
2      1      5      6      -> ; 構成原子 1  構成原子 2  構成原子 3  構成原子 4
1.4    6      3      0.0    -> ; 係数  重複 TORSION 数  対象性  初期位相
1                                     ; 1-4 相互作用計算フラグ

```

(1-7) IMPROPER-TORSION 指定記述

分子指定記述の順に、その分子内に存在する IMPROPER-TORSION の情報を記述する。

"TPL> IMPR"行	分子名称行	[IMPROPER 記述行 ...]
--------------	-------	--------------------

IMPROPER 記述行は以下の部分で構成される。

IMPROPER 構成原子 1	IMPROPER 構成原子 2	IMPROPER 構成原子 3
IMPROPER 構成原子 4	係数	重複 IMPROPER 数
対象性	初期位相	1-4 相互作用計算フラグ

IMPROPER 構成原子 1, 2, 3, 4 : IMPROPER を構成する原子を整数で記述する。

原子 1, 2, 3 と原子 2, 3, 4 の組が平面を構成する。

係数 : IMPROPER の力の係数を KCAL/MOL 単位で記述する。

重複 IMPROPER 数 : 当該 IMPROPER と重なりのある IMPROPER の数を記述する。

対象性 : 当該 IMPROPER の対象性(周期の逆数)を記述する。
 位相 : 当該 IMPROPER の初期位相を度数(degree)単位で記述する。
 1-4 相互作用計算フラグ: 当該 IMPROPER の 1 と 4 の原子間の静電・van der Waals 力を計算する場合は 1 を、そうでない場合 0 を記述する。

例)

```
TPL> IMPROPER
ALA-DIMER-1          ; 分子名行
6      5      1      7      -> ; 構成原子 1  構成原子 2  構成原子 3  構成原子 4
14.0  1      3  180.0  -> ; 係数  重複 IMPROPER 数  対象性  初期位相
0                                ; 1-4 相互作用計算フラグ
```

(1-8) ポテンシャル関数指定記述

系のポテンシャル関数の情報を記述する。

"TPL> FUNC"行 [ポテンシャル関数記述行 ...]

ポテンシャル関数記述行は以下の部分で構成される。

番号	係数の個数	ポテンシャル関数名称
----	-------	------------

番号 : 複数行記述する場合に 1 から昇順に整数値で記述する。

係数の個数 : ポテンシャル関数の係数の個数を記述する。

ポテンシャル関数名称: ポテンシャル関数の名称を記述する。

(AMBER | OPLS | ECEPP | CHARM)

例)

```
TPL> FUNCTION
1      4      AMBER ; 番号 係数の個数  ポテンシャル関数名称
```

(1-9) 非結合相互作用指定記述

系の非結合相互作用情報を記述する。

"TPL> NONB"行 [非結合相互作用記述行 ...]

ポテンシャル関数によって、非結合相互作用記述行の書式が異なる ((A), (B))。

(A) van der Waals の場合

非結合相互作用記述行に以下を記述する。

相互作用タイプ 1	相互作用タイプ 2	関数タイプ	vanderWaals 半径
vanderWaals 深さ	1-4vanderWaals 係数	1-4 静電係数	

相互作用タイプ 1 : 原子の相互作用タイプを記述する。

相互作用タイプ 2 : "0"を記述する。

関数タイプ : "1"を記述する。

vanderWaals 半径 : 当該原子の van der Waals 半径を Å 単位で記述する。

vanderWaals 深さ : van der Waals のエネルギーの深さを KCAL/MOL 単位で記述する。

1-4vanderWaals 係数 : 1-4 の van der Waal エネルギー計算で使用する係数を記述する。

1-4 静電係数 : 1-4 の静電エネルギー計算で使用する係数を記述する。

(B) 水素結合の場合

相互作用タイプ 1	相互作用タイプ 2	関数タイプ	12 乗項係数	10 乗項係数
-----------	-----------	-------	---------	---------

相互作用タイプ 1 : 原子の相互作用タイプを記述する。

相互作用タイプ 2 : 原子の相互作用タイプを記述する。

関数タイプ : "2"を記述する。

12 乗項係数 : 当該原子間の 12 乗項の係数を KCAL/(MOL*Å¹²) 単位で記述する。

10 乗項係数 : 当該原子間の 10 乗項の係数を KCAL/(MOL*Å¹⁰) 単位で記述する。

例)

TPL> NONBOND

; van der Waals の場合

1 0 1 -> ; 原子タイプ 1 原子タイプ 2 ("0") 関数タイプ ("1")
 1.9080 0.0860 -> ; vanderWaals 半径 vanderWaals 深さ
 0.8333 0.5 ; 1-4vanderWaals 係数 1-4 静電係数

; 水素結合の場合

14 14 2 -> ; 原子タイプ 1 原子タイプ 2 関数タイプ ("2")
 1.8000 0.2420 ; 12 乗項係数 10 乗項係数

(2) 実数形式指定 (TOPOLO= BINA)

タイトル	分子	原子	残基	チェーン	伸縮	変角	二面角
Improper	ポテンシャル関数数		原子種別				

タイトル :

行数	INTEGER × 1
タイトル文	CHARACTER (80) × 行数

分子 :

分子数	INTEGER × 1
分子名	CHARACTER (40) × 分子数
所属チェーン数	INTEGER × 分子数

原子 :

原子数	INTEGER × 1
所属分子	INTEGER × 原子数
所属チェーン	INTEGER × 原子数
所属残基	INTEGER × 原子数
非連結相互作用の種別	INTEGER × 原子数
1-2 相互作用数	INTEGER × 原子数
1-3 相互作用数	INTEGER × 原子数
1-4 相互作用数	INTEGER × 原子数
静電荷	REAL*8 × 原子数
質量	REAL*8 × 原子数
VanDerWaals 半径	REAL*8 × 原子数
原子名	CHARACTER (8) × 原子数
型名	CHARACTER (4) × 原子数
所属残基名	CHARACTER (8) × 原子数
1-2 相互作用テーブル No	INTEGER × 原子数 × 1-2 相互作用数
1-3 相互作用テーブル No	INTEGER × 原子数 × 1-3 相互作用数
1-4 相互作用テーブル No	INTEGER × 原子数 × 1-4 相互作用数

残基：

残基数	INTEGER × 1
先頭原子番号	INTEGER × 残基数
最終原子番号	INTEGER × 残基数

チェーン：

チェーン数	INTEGER × 1
最終原子番号	INTEGER × チェイン数

伸縮：

伸縮数	INTEGER × 1
構成原子	INTEGER × 伸縮数 × 2
係数	REAL*8 × 伸縮数
最小エネルギー距離	REAL*8 × 伸縮数

変角：

変角数	INTEGER × 1
構成原子	INTEGER × 変角数 × 3
係数	REAL*8 × 変角数
最小エネルギー角	REAL*8 × 変角数

二面角：

二面角数	INTEGER × 1
構成原子	INTEGER × 二面角数 × 4
とりうる角度の数	INTEGER × 二面角数
係数	REAL*8 × 二面角数
対称性	REAL*8 × 二面角数
位相	REAL*8 × 二面角数
1-4VanDerWaals 係数	REAL*8 × 二面角数
1-4 静電係数	REAL*8 × 二面角数

Improper：

Improper 数	INTEGER × 1
構成原子	INTEGER × Improper 数 × 4
とりうる角度の数	INTEGER × Improper 数
係数	REAL*8 × Improper 数
対称性	REAL*8 × Improper 数
位相	REAL*8 × Improper 数
1-4VanDerWaals 係数	REAL*8 × Improper 数
1-4 静電係数	REAL*8 × Improper 数

ポテンシャル関数数：

ポテンシャル関数数	INTEGER × 1
関数種別	INTEGER × ポテンシャル関数数
関数名	CHARACTER (40) × ポテンシャル関数数

原子種別：

原子種別数	INTEGER × 1
ポテンシャル関数種別 (FUNC_VDW, FUNC_HYD)	INTEGER × 原子種別数 × 原子種別数
1/距離**6 の VanDerWaals	REAL*8 × 原子種別数 × 原子種別数
1/距離**12 の VanDerWaals	REAL*8 × 原子種別数 × 原子種別数
1/距離**10 の水素結合	REAL*8 × 原子種別数 × 原子種別数
1/距離**12 の水素結合	REAL*8 × 原子種別数 × 原子種別数
vdW 最小半径	REAL*8 × 原子種別数 × 原子種別数
井戸型ポテンシャルの深さ	REAL*8 × 原子種別数 × 原子種別数
1-4vdW スケールファクタ	REAL*8 × 原子種別数 × 原子種別数
1-4 静電スケールファクタ	REAL*8 × 原子種別数 × 原子種別数

A. 2.3 座標ファイル

対象フェーズ：全フェーズ

用途：シミュレートする系の原子座標を指定する。

特記事項：

指定により、アスキー、バイナリ（8 バイト実数形式指定）にすることができる。

書式：出力指定により以下の2種類に分かれる。

(1) ASCII 形式指定 (COORDI= PDB)

PDB フォーマットの仕様に従う。

(2) 実数形式指定 (COORDI= BINA)

日付	CHARACTER (80) × 1
ユーザ名	CHARACTER (80) × 1
原子数	INTEGER × 1
x 座標	REAL*8 × 原子数
y 座標	REAL*8 × 原子数
z 座標	REAL*8 × 原子数

A. 2.4 SHAKE ファイル

対象フェーズ： MIN, MD フェーズ

用途： SHAKE 対象原子と拘束距離を指定する。

特記事項：

行中の “;” 以降はコメントとなる。また、“->” は継続行をあらわす。

SHAKE を構成する原子の数は 2, 3, 4 のいずれかとする。

複数の分子間にまたがる SHAKE は記述できない。

書式： SHAKE 指定は以下の行で構成される。

[SHAKE 情報先頭行 分子指定行 SHAKE 拘束情報行...]...

SHAKE 情報先頭行：先頭の文字列が “SHAKE> SHAKE” である行

分子指定行： 分子名を記述した行

SHAKE 拘束情報行：SHAKE 対象原子数、SHAKE 対象原子の分子内相対原子番号、SHAKE 拘束距離を記述した行。SHAKE を構成する原子数にしたがって以下のように記述する。

2 原子 SHAKE の場合：

“2” 原子 1 の番号 原子 2 の番号 原子 1-原子 2 間の距離
--

3 原子 SHAKE の場合：

“3” 原子 1 の番号 原子 2 の番号 原子 3 の番号
原子 1-原子 2 間の距離 原子 2-原子 3 間の距離 原子 3-原子 1 間の距離

4 原子 SHAKE の場合：

“4” 原子 1 の番号 原子 2 の番号 原子 3 の番号 原子 4 の番号
原子 1-原子 2 間の距離 原子 2-原子 3 間の距離 原子 3-原子 1 間の距離
原子 1-原子 4 間の距離 原子 3-原子 4 間の距離 原子 2-原子 4 間の距離

例)

SHAKE> SHAKE	:	SHAKE 情報先頭
ALA-DIMER-1	:	分子名
4	:	SHAKE 原子数=4
1 2 3 4	:	SHAKE 対象原子の番号
1.01000 1.64962 1.01000 1.01000 1.64962 1.64962	:	原子間距離
2	:	SHAKE 原子数=2
9 10	:	SHAKE 対象原子の番号
1.01000	:	原子間距離
SHAKE> SHAKE	:	SHAKE 情報先頭
WATER(TIP3P-MODEL)-2	:	分子名
3	:	SHAKE 原子数=3
1 2 3	:	SHAKE 対象原子の番号
0.95720 1.51360 0.95720	:	原子間距離

A. 2.5 固定原子・自由原子指定ファイル

対象フェーズ： MIN, MD フェーズ

用途： 固定原子、自由原子を指定する。

特記事項：

行中の“;”以降はコメントとなる。

“()”の中の項目は省略可能である。

書式：自由/固定原子の指定は以下の行で構成される。

[自由/固定原子情報先頭行 自由/固定原子情報行...]...
--

自由/固定原子情報先頭行： 以下の文字列で指定する。

(1) 原子リスト指定 = “SETVAR> LIST”

(2) 原子範囲指定 = “SETVAR> RADIUS”

自由/固定原子情報：先頭行にしたがって以下のように記述する。

(1) “SETVAR> LIST” の場合：

形式 チェイン先頭番号 チェイン最終番号 残基先頭番号 残基最終番号 原子名指定 (リスト出力)
--

(2) “SETVAR> RADIUS” の場合： 指定方式にしたがって以下のように記述する。

中心原子指定：

形式 “ATOM” 原子番号 半径下限 半径上限 原子名指定 (リスト出力)

中心座標指定：

形式 “COOR” x 座標 y 座標 z 座標 半径下限 半径上限 原子名指定 (リスト出力)
--

※上記にある項目は以下の値で構成される。

リスト出力 ::= "YES" | "NO" (デフォルトは "NO")

形式 ::= "FREE" | "FIX"

原子名指定 ::= ワイルドカード(*)指定可能

例)

SETVAR> LIST ; 原子リスト指定先頭行

FIX 1 1 1 130 * YES ; 原子情報

FREE 2 10000 1 1 0* ; 原子情報

SETVAR> RADIUS ; 原子範囲指定先頭行

FIX ATOM 100 10.0 20.0 C* YES ; 中心原子指定

FREE COOR 0.0 10.0 2.0 10.0 20.0 * ; 中心座標指定

A. 2. 6 CAP 指定ファイル

対象フェーズ： 全フェーズ

用途： セル形状、CAP 拘束を指定する。

特記事項：

行中の “;” 以降はコメントとなる。

“()” の中の項目は省略可能である。

書式： バウンダリの指定は以下の行で構成される。

[バウンダリ情報先頭行 バウンダリ情報行...]...

バウンダリ情報先頭行： 以下の文字列で指定する。

- | | |
|-----------------|------------------|
| (1)CAP 計算対象指定 = | “BOUND> INCLUDE” |
| (2)CAP 中心指定 = | “BOUND> CENTER” |
| (3)立方体セルサイズ指定 = | “BOUND> BOX” |
| (4)CAP 半径指定 = | “BOUND> RADIUS” |

バウンダリ情報：先頭行にしたがって以下のように記述する。

(1) “BOUND> INCLUDE” の場合：

分子名 チェイン先頭番号 チェイン最終番号 (リスト出力)
--

(2) “BOUND> CENTER” の場合： 3 種類の指定があり、それぞれ以下のように記述する。

チェイン重心指定：

“CHAI” チェイン番号

原子指定：

“ATOM” 中心原子の所属するチェイン番号 中心原子の所属する残基番号
原子名

座標指定：

“COORD” x 座標 y 座標 z 座標

(3) “BOUND> BOX” の場合：

x 成分 y 成分 z 成分

(4) “BOUND> RADIUS” の場合：

半径値

※上記にある項目は以下の値で構成される。

リスト出力 ::= “YES” | “NO” (デフォルトは “NO”)

例)

BOUND> INCLUDE					；	CAP 計算対象指定先頭行
WATER	1	200	YES		；	CAP 計算対象指定
BOUND> CENTER					；	CAP 中心指定先頭行
CHAIN	1				；	チェーン重心指定
ATOM	1	1	CA		；	原子指定
COORDINATES	0.0D0	0.0D0	0.0D0		；	座標指定
BOUND> BOX					；	立方体セルサイズ指定先頭行
0.0D0	0.0D0	0.0D0			；	立方体セルサイズ指定
BOUND> RADIUS					；	CAP 半径指定先頭行
30.0D0					；	CAP 半径指定

A. 2.7 拡張 CAP 指定ファイル

対象フェーズ： 全フェーズ

用途： 拡張 CAP 拘束対象、拘束条件を指定する

特記事項：

行中の “;” 以降はコメントとなる。

書式： 拡張 CAP 拘束の指定は以下の行で構成される。

[“EXTCAP>CONDition” 行	拘束条件指定行
“EXTCAP>INCLude” 行	拘束対象指定行...] ...

拘束条件指定行：“EXTCAP>CONDition” 行に引き続き、以下のように指定する。

球体 CAP 拘束の中心、半径、力の係数を指定；

“SPHEre”	中心の x 座標	中心の y 座標	中心の z 座標
	半径	力の係数	[リスト出力]

楕円体 CAP 拘束の焦点、焦点からの距離の和、力の係数を指定；

“GEometric ELlipsoiD”			
焦点 A の x 座標	焦点 A の y 座標	焦点 A の z 座標	
焦点 B の x 座標	焦点 B の y 座標	焦点 B の z 座標	
焦点からの距離の和/2.0d0	力の係数	[リスト出力]	

楕円体 CAP 拘束の中心、x 軸方向、y 軸方向、z 軸方向の半径、力の係数を指定；

“ALgebraic ELipsoiD”			
中心の x 座標	中心の y 座標	中心の z 座標	
x 軸方向の半径	y 軸方向の半径	z 軸方向の半径	
力の係数	[リスト出力]		

拡張 CAP 拘束計算対象指定行: “EXTCAP>INCLude” に引き続き、以下のように指定する。

チェーン単位での指定；

“CHAI”	分子名	先頭チェーン番号	最終チェーン番号	[リスト出力]
--------	-----	----------	----------	---------

残基単位での指定；

“RESI”	先頭チェーン番号	最終チェーン番号	先頭残基番号	最終残基番号	残基名	[リスト出力]
--------	----------	----------	--------	--------	-----	---------

原子単位での指定；

“ATOM”	先頭チェーン番号	最終チェーン番号	先頭残基番号	最終残基番号	原子名	残基名	[リスト出力]
--------	----------	----------	--------	--------	-----	-----	---------

※上記にある項目は以下の値で構成される。

リスト出力 ::= “YES” | “NO”

(CAP 拘束を 2 つ指定する例)

EXTCAP> COND	;	CAP 拘束 1 の拘束条件を指定
:SPHERE 39.0 26.0 -4.0 27.0 100.0 YES	;	(球体による指定)
GEEL 86.0 2.0 -1.0 10.0 58.0 1.0 48.5 150.0 YES	;	(楕円体による指定)
:ALEL 0.0 0.0 0.0 12.0 12.0 12.0 150.0 YES	;	(楕円体による指定)
EXTCAP> INCL	;	CAP 拘束 1 の拘束対象を指定
:CHAI WAT 1 216 YES	;	(チェーン単位での指定)
:RESI 1 1 1 3 HYD YES	;	(残基単位での指定)
ATOM 9 9 1 5 * * YES	;	(原子単位での指定)
EXTCAP> COND	;	CAP 拘束 2 の拘束条件を指定
:SPHERE 39.0 26.0 -4.0 27.0 100.0 YES	;	(球体による指定)
GEEL 86.0 2.0 -1.0 10.0 58.0 1.0 49.5 150.0 YES	;	(楕円体による指定)
:ALEL 0.0 0.0 0.0 12.0 12.0 12.0 150.0 YES	;	(楕円体による指定)
EXTCAP> INCL	;	CAP 拘束 2 の拘束対象を指定
:CHAI WAT 1 216 YES	;	(チェーン単位での指定)
:RESI 1 1 1 3 HYD YES	;	(残基単位での指定)
ATOM 10 1365 1 1 * WAT YES	;	(原子単位での指定)

A.2.8 位置拘束ファイル

対象フェーズ： 全フェーズ

用途： 位置拘束を指定する。

特記事項：

行中の “;” 以降はコメントとなる。

“()” の中の項目は省略可能である。

書式：位置拘束の指定は以下の行で構成される。

[位置拘束情報先頭行 位置拘束情報行... パラメーター終了行 終了情報行]...
--

位置拘束情報先頭行：以下の文字列で指定する。

(1) 拘束リスト指定 = “GROUP> LIST”

(2) 拘束範囲指定 = “GROUP> RADIUS”

パラメーター終了行：パラメーター指定行の終了を以下の形式で指定する。

“END”

終了情報行：先頭の文字列が “GROUP> STOP” である行

位置拘束情報：先頭行にしたがって以下のように記述する。

(1) “GROUP> LIST” の場合：

チェーン先頭番号 チェーン最終番号 残基先頭番号 残基最終番号 原子名指定 残基名指定 係数 “MASS” (リスト出力)

(2) “GROUP> RADIUS” の場合：

中心チェーン番号 中心残基番号 中心原子名 半径下限 半径上限 原子名指定 係数 “MASS” (リスト出力)

※上記にある項目は以下の値で構成される。

リスト出力 ::= “YES” | “NO” (デフォルトは “NO”)

拘束力を原子の質量に比例させる場合、“MASS”を指定する。

例)

```
GROUP> LIST ; 拘束リスト指定先頭行
1 1 5 13 CA * 1.0 MASS YES ; 位置拘束情報
1 1 1 67 N* ARG 1.0 MASS ; 位置拘束情報
END
GROUP> STOP

GROUP> RADIUS ; 拘束範囲指定先頭行
1 10 CA 0.0 5.0 C* 1.0 MASS YES ; 位置拘束情報
1 10 CA 0.0 5.0 N* 1.0 MASS YES ; 位置拘束情報
1 10 CA 0.0 5.0 O* 1.0 MASS YES ; 位置拘束情報
1 10 CA 0.0 5.0 S* 1.0 MASS YES ; 位置拘束情報
END
GROUP> STOP
```

A.2.9 距離拘束ファイル

対象フェーズ： 全フェーズ

用途： 距離拘束を指定する。

特記事項：

行中の“;”以降はコメントとなる。

“()”の中の項目は省略可能である。

書式：距離拘束の指定は以下の行で構成される。

[距離拘束情報先頭行 距離拘束情報行... パラメーター終了行 終了情報行]...

距離拘束情報先頭行：以下の文字列で指定する。

(1) 拘束リスト指定 = “RDDSTC> LIST”

パラメーター終了行：パラメーター指定行の終了を以下の形式で指定する。

“END”

終了情報行：先頭の文字列が“RDDSTC> STOP”である行

距離拘束情報：先頭行にしたがって以下のように記述する。

(1) “RDDSTC> LIST”の場合：

原子指定 1 原子指定 2 下界係数 上界係数 下界距離 上界距離（リスト出力）

※上記にある項目は以下の値で構成される。

原子指定 ::= 所属チェーン番号 所属残基番号 所属残基名 原子名

リスト出力 ::= “YES” | “NO” | “HBOND” （デフォルトは “NO”）

例)

```
RDDSTC> LIST ; 拘束リスト指定先頭行
1 1 ILE HA 1 2 ALA HN 1.00 1.00 1.95 2.50 YES ; 距離拘束情報
1 2 ALA HA 1 65 VAL CG* 1.00 1.00 2.70 4.90 YES ; 距離拘束情報
1 8 HIS HD2 1 19 THR HG2* 1.00 1.00 2.00 5.00 ; 距離拘束情報
1 4 PRO HB* 1 5 ALA HN 1.00 1.00 1.95 3.50 ; 距離拘束情報
1 4 PRO HB* 1 6 CYS HN 1.00 1.00 1.95 3.50 ; 距離拘束情報
1 4 PRO HD* 1 66 LEU CD* 1.00 1.00 2.70 6.40 ; 距離拘束情報
1 20 ASN HB* 1 43 ALA HB* 1.00 1.00 2.00 4.50 ; 距離拘束情報
1 5 ALA HB* 1 7 VAL HN 1.00 1.00 1.95 5.00 ; 距離拘束情報
1 11 ALA HB* 1 61 VAL CG* 1.00 1.00 2.70 6.40 ; 距離拘束情報
1 29 THR HA 1 51 PHE CZ 1.00 1.00 2.70 6.40 ; 距離拘束情報
1 89 ILE HN 1 76 ARG+ 0 0.50 0.50 1.70 2.30 HBOND ; 距離拘束情報
END
RDDSTC> STOP
```

A. 2. 10 二面角拘束ファイル

対象フェーズ： 全フェーズ

用途：二面角拘束を指定する。

特記事項：

行中の“;”以降はコメントとなる。

“()”の中の項目は省略可能である。

書式：二面角拘束の指定は以下の行で構成される。

[二面角拘束情報先頭行 二面角拘束情報行... パラメーター終了行 終了情報行]...
--

二面角拘束情報先頭行： 以下の文字列で指定する。

(1) 拘束リスト指定 = “CDIHE> LIST”

(2) 拘束番号指定 = “CDIHE> NUMBER”

パラメーター終了行：パラメーター指定行の終了を以下の形式で指定する。

“END”

終了情報行：先頭の文字列が“CDIHE> STOP”である行

二面角拘束情報：先頭行にしたがって以下のように記述する。

(1) “CDIHE> LIST” の場合：

所属チェーン番号 原子指定 1 原子指定 2 原子指定 3 原子指定 4
下界係数 上界係数 下界角 上界角 (リスト出力)

(2) “CDIHE> NUMBER” の場合：

原子番号 1 原子番号 2 原子番号 3 原子番号 4 下界係数 上界係数 下界角 上界角
(リスト出力)

※上記にある項目は以下の値で構成される。

原子指定 ::= 所属残基番号 原子名

リスト出力 ::= "YES" | "NO" (デフォルトは "NO")

例)

```
CDIHE> LIST ; 拘束リスト指定先頭行
```

```
1  11 CA  11 C  12 N  12 CA  1.0  1.0  175.0 -175.0  Y  ; 二面角拘束情報
```

```
1  16 CA  16 C  17 N  17 CA  1.0  1.0  175.0 -175.0  Y  ; 二面角拘束情報
```

```
END
```

```
CDIHE> STOP
```

```
CDIHE> NUMBER ; 拘束リスト指定先頭行
```

```
77  79  81  93  2.0  2.0 -90.0 -40.0  Y ; 二面角拘束情報
```

```
END
```

```
CDIHE> STOP
```


A. 2.11 モニター指定ファイル

対象フェーズ： MD

用途：モニター対象を指定する。

特記事項：

行中の“;”以降はコメントとなる。

“()”の中の項目は省略可能である。

キーワードは、“MONI> ”に続く4文字を認識する。

書式：モニターの指定は以下の行で構成される。

[モニター指定情報先頭行 モニター指定情報行...]...

モニター指定情報先頭行： 以下の文字列で指定する。

- (1) 原子位置指定 = “MONI> COOR”
- (2) 距離指定 = “MONI> DIST”
- (3) 変角指定 = “MONI> ANGL”
- (4) 二面角指定 = “MONI> TORS”

モニター指定情報行：先頭行にしたがって以下のように記述する。

- (1) “MONI> COOR” の場合：

原子指定 1 (リスト出力)

- (2) “MONI> DIST” の場合：

原子指定 1 原子指定 2 (リスト出力)

- (3) “MONI> ANGL” の場合：

原子指定 1 原子指定 2 原子指定 3 (リスト出力)

(4) “MONI> TORS” の場合：

原子指定 1 原子指定 2 原子指定 3 原子指定 4 (リスト出力)

※上記にある項目は以下の値で構成される。

原子指定 ::= チェイン番号 残基番号 原子名

リスト出力 ::= “YES” | “NO” (デフォルトは “NO”)

例)

MONI> COORDINATE	;	原子位置指定先頭行
1 3 CA YES	;	モニター指定情報
1 3 C YES	;	モニター指定情報
MONI> DISTANCE	;	距離指定先頭行
1 1 0 1 4 H YES	;	モニター指定情報
MONI> ANGLE	;	変角指定先頭行
1 1 C 1 1 0 1 2 N YES	;	モニター指定情報
MONI> TORSION	;	二面角指定先頭行
1 1 C 1 2 N 1 2 CA 1 2 C YES	;	モニター指定情報
1 3 N 1 3 CA 1 3 C 1 4 N YES	;	モニター指定情報

A. 2.12 系の重心合わせ指定用ファイル

対象フェーズ： MIN, MD

用途：重心合わせ対象原子を指定する。

特記事項：

行中の“;”以降はコメントとなる。

“()”の中の項目は省略可能である。

書式：重心合わせ対象原子の指定は以下の行で構成される。

[BESTFIT 対象原子情報先頭行 BESTFIT 対象原子情報行...]...
--

重心合わせ対象原子情報先頭行： 以下の文字列で指定する。

(1) 原子リスト指定 = “SETBST> LIST”

(2) 原子範囲指定 = “SETBST> RADIUS”

重心合わせ対象原子情報：先頭行にしたがって以下のように記述する。

(1) “SETBST> LIST” の場合：

形式 チェイン先頭番号 チェイン最終番号 残基先頭番号 残基最終番号 原子名指定 (リスト出力)
--

(2) “SETBST> RADIUS” の場合： 指定方式にしたがって以下のように記述する。

中心原子指定：

形式 “ATOM” 原子番号 半径下限 半径上限 原子名指定 (リスト出力)

中心座標指定：

形式 “COOR” x 座標 y 座標 z 座標 半径下限 半径上限 原子名指定 (リスト出力)
--

リスト出力 ::= "YES" | "NO" (デフォルトは "NO")

形式 ::= "FREE" | "FIX"

形式 ::= "FREE" | "FIX"

原子名指定 ::= ワイルドカード(*)指定可能

SETBST> LIST ; 原子リスト指定先頭行

SETBST> LIST ; 原子リスト指定先頭行

FIX 1 1 1 130 * YES ; 原子情報

FREE 2 10000 1 1 0* ; 原子情報

SETBST> RADIUS ; 原子範圍指定先頭行

```
FIX    ATOM  100          10.0   20.0   C*   YES          ; 中心原子指定
```

```
FREE COOR 0.0 10.0 2.0 10.0 20.0 * ; 中心座標指定
```

A. 2.13 系の GB/SA 及び ASA 用パラメーター指定ファイル

対象フェーズ： MIN, MD

用途：GB/SA 及び ASA 用パラメーターを設定する。

特記事項：

本ファイルで全原子のデータが設定されなければ、計算結果は保証しない。

行中の “;” 以降はコメントとなる。

書式：GB/SA の原子情報は以下の行で構成される。

[GB/SA 情報先頭行 GB/SA 情報行...]...

GB/SA 情報先頭行：以下の文字列で指定する。

(1) 原子リスト指定= “SOL> LIST”

(2) 総称名指定 = “SOL> ATOM”

GB/SA 情報行：先頭行にしたがって以下のように記述する。

(1) “SOL> LIST” の場合：

入力したトポロジーに対し、1 対 1 のリストで GB/SA の情報を指定する。

[未使用 20 文字 水素フラグ ASA の vdW 半径 (Å) ASA 用の atomic solvation parameter (kcal/mol/Å ²) GB/SA 用の atomic solvation parameter (cal/mol/Å ²) [GB の vdW 半径 (Å) GB のスケール因子]]...
--

(2) “SOL> ATOM” の場合：

指定した原子に対して、GB/SA の情報を設定する。原子、残基名にワイルドカード使用可。

[原子名 残基名 水素フラグ ASA の vdW 半径 (Å) ASA 用の atomic solvation parameter (kcal/mol/Å ²) GB/SA 用の atomic solvation parameter (cal/mol/Å ²) [GB の vdW 半径 (Å) GB のスケール因子]]...
--

例)

SOL>LIST

SOL	1	N	LYS1	1.550000	-0.132000	5.400000	1.625000	0.790000
-----	---	---	------	----------	-----------	----------	----------	----------

SOL	2	H1	LYS0	0.000000	0.000000	5.400000	1.150000	0.850000
-----	---	----	------	----------	----------	----------	----------	----------

SOL>ATOM

H*	LYS0	0.000000	0.000000	5.400000	1.150000	0.850000
----	------	----------	----------	----------	----------	----------

A. 2. 14 Umbrella 拘束ファイル

対象フェーズ： MD

用途：Umbrella Potential の条件を指定する。

特記事項：

行中の “;” 以降はコメントとなる。

書式：Umbrella Potential の指定は以下の行で構成される。

[UmbrellaPotential 情報先頭行 UmbrellaPotential 情報行...]

Umbrella 情報先頭行：Potential 種別を以下の文字列で指定する。

- | | |
|---|--------------|
| (1) FillingPotential-Potential (ガウス関数型) | "FILL> GAUS" |
| (2) FillingPotential-Potential (単一中心調和振動子型) | "FILL> HAR1" |
| (3) FillingPotential-Potential (単一中心線形) | "FILL> LIN1" |
| (4) FillingPotential-Potential (2 中心調和振動子型) | "FILL> HAR2" |
| (5) FillingPotential-Potential (2 中心線形) | "FILL> LIN2" |

UmbrellaPotential 情報行：

関数個数と適用原子数の指定行 原子指定行... 各構造のトラジェクトリ指定行...

(1) 関数個数と適用原子数の指定行： 関数個数および適用原子数を指定する。

関数（中心の構造）の数 適用原子数

(2) 原子指定行： PDB 上の原子 ID を昇順に記述する。

原子 ID

(3) 各構造のトラジェクトリ指定行：

各構造のトラジェクトリ指定行は、以下の行で構成される。

[ポテンシャル高さ行 [ポテンシャル広がり行].. [構造 1 行 [構造 2 行]]..]..

(3-1) ポテンシャル高さ行：

当該構造を中心とするポテンシャルの力の定数または高さを指定する。

力の定数(umb%coef) または Gauss 関数の高さ(umb%weight)

(3-2) ポテンシャル広がり行： 当該構造を中心とするポテンシャルの広がりを記述する。

CAP 半径 (ϵ :epsilon) または Gauss 関数の幅(EllipCoef)

(3-3a) 構造座標行：構造 1 行

当該構造での原子座標を PDB フォーマットで記述する。

(x 座標=31～38 カラム、y 座標=39～46 カラム、z 座標=47～54 カラム)

... x 座標 y 座標 z 座標 ...

(3-3b) 構造座標行：構造 2 行 (HAR2/LIN2 の場合)

当該構造での原子座標を PDB フォーマットで記述する。

(x 座標=31～38 カラム、y 座標=39～46 カラム、z 座標=47～54 カラム)

... x 座標 y 座標 z 座標 ...


```

例)
FILL> GAUS                                ; 関数形指定
3 2                                         ; 関数の数と使用する原子数
86                                          ; 原子指定行
102
4.000000000000000                        ; 構造 1 を中心とする高さ
0.0300000                                ; 幅
0.0300000
ATOM    86  N  VAL A  22    -6.505  3.453  0.990 16.00 -0.38 ;構造 1 の座標
ATOM    102 N  VAL A  22    -7.661  3.818 -1.008 16.00 -0.65
5.000000000000000                        ; 構造 2 を中心とする高さ
0.0300000                                ; 幅
0.0300000
ATOM    86  N  VAL A  22    -6.405  3.443  0.980 16.00 -0.38 ;構造 2 の座標
ATOM    102 N  VAL A  22    -7.561  3.828 -1.018 16.00 -0.65
5.000000000000000                        ; 構造 3 を中心とする高さ
0.0300000                                ; 幅
0.0300000
ATOM    86  N  VAL A  22    -6.405  3.443  0.980 16.00 -0.38 ;構造 3 の座標
ATOM    102 N  VAL A  22    -7.561  3.828 -1.018 16.00 -0.65
FILL> HAR1                                ; 関数形指定
2 1                                         ; 関数の数と適用する原子数
86                                          ; 原子指定行
50.0                                       ; 構造 1 を中心とする力の定数
0.5                                        ; 構造 1 の CAP 半径
ATOM    86  N  VAL A  22    -6.505  3.453  0.990 16.00 -0.38 ;構造 1 の座標
20.0                                       ; 構造 2 を中心とする力の定数
1.0                                        ; 構造 2 の CAP 半径
ATOM    86  N  VAL A  22    -6.405  3.443  0.980 16.00 -0.38 ;構造 2 の座標
FILL> HAR2                                ; 関数形指定
1 1                                         ; 関数の数と適用する原子数
86                                          ; 原子指定行
50.0                                       ; 構造 1, 2 を中心とする力の定数
0.5                                        ; 構造 1, 2 を中心とする CAP 半径
ATOM    86  N  VAL A  22    -6.505  3.453  0.990 16.00 -0.38 ;構造 1 の座標
ATOM    86  N  VAL A  22    -6.405  3.443  0.980 16.00 -0.38 ;構造 2 の座標

```

A. 2.15 リスタートファイル

対象フェーズ： MD

用途： リスタート情報を指定する。自動リスタートファイルはリスタートファイルと同じフォーマットで、指定された時間ごとに出力され、障害発生時のロールバックとして用いる。

特記事項：

リスタートファイルはバイナリーファイルである。

リスタートファイルは以下の行で構成され、総データ量は計算条件により異なる。

書式：

タイトル行（各計算条件共通）	原子数行（各計算条件共通）
エネルギー情報行（各計算条件共通）	原子情報行（各計算条件共通）
[原子の力情報行（Velocity Verlet 法または RESPA 法使用時のみ）]	
[Nose-Hoover 法情報行（Nose-Hoover 法使用時のみ）]	
[剛体モデル情報行（剛体モデル使用時のみ）]	
[NPT アンサンブル情報行（NPT アンサンブル使用時のみ）]	
[マルチカノニカルアンサンブル情報行（マルチカノニカルアンサンブル使用時のみ）]	

タイトル行：各計算条件共通

タイトル	: character*80 × 1
------	--------------------

原子数行：各計算条件共通

原子数	: integer*4 × 1
自由原子数	: integer*4 × 1

エネルギー情報行：各計算条件共通

ループ回数	: integer*4 × 1
シミュレート時間	: real*8 × 1
総エネルギー	: real*8 × 1
運動エネルギー	: real*8 × 1
ポテンシャルエネルギー	: real*8 × 1

原子情報行：各計算条件共通

原子座標	: real*8×3×原子数
自由原子速度	: real*8×3×自由原子数

原子の力情報行：Velocity Verlet 法 または RESPA 法使用時のみ

Velocity Verlet 法使用時：

Gradient	: real*8×3×原子数
----------	----------------

RESPA 法使用時：

Gradient (Short)	: real*8×3×原子数
Gradient (Medium)	: real*8×3×原子数
Gradient (Long)	: real*8×3×原子数

Nose-Hoover 法情報行：Nose-Hoover 法使用時のみ

仮想系の座標	: real*8×3×分子種別数
仮想系の運動量	: real*8×3×分子種別数
仮想系の速度	: real*8×3×分子種別数

剛体モデル情報行：剛体モデル使用時のみ

剛体の速度	: real*8×3×剛体数
剛体の座標	: real*8×3×剛体数
剛体の四元数	: real*8×3×剛体数
剛体の角運動量	: real*8×3×剛体数
剛体の並進力	: real*8×3×剛体数
剛体のトルク	: real*8×3×剛体数
剛体の並進力 (Short)	: real*8×3×剛体数 ※
剛体の並進力 (Medium)	: real*8×3×剛体数 ※
剛体の並進力 (Long)	: real*8×3×剛体数 ※
剛体のトルク (Short)	: real*8×3×剛体数 ※
剛体のトルク (Medium)	: real*8×3×剛体数 ※
剛体のトルク (Long)	: real*8×3×剛体数 ※

※印は、RESPA 法使用時のみ

NPT アンサンブル情報行：Andersen 法 または Parrinello-Rahman 法使用時のみ

Andersen 法使用時：

セルサイズ	: real*8×1
ピストン情報	: real*8×4
熱浴情報 1	: real*8×4
熱浴情報 2	: real*8×4

Parrinello-Rahman 法使用時：

セル行列	: real*8×1
セル行列の逆行列	: real*8×1
セル行列の行列式	: real*8×1
ピストン情報	: real*8×20
熱浴情報 1	: real*8×4
熱浴情報 2	: real*8×4

Andersen 法 または Parrinello-Rahman 法使用時：

ビリアル行列	: real*8×3×3×エネルギー種別数
ビリアル行列 (Short)	: real*8×3×3×エネルギー種別数 ※
ビリアル行列 (Medium)	: real*8×3×3×エネルギー種別数 ※
ビリアル行列 (Long)	: real*8×3×3×エネルギー種別数 ※

※印は、RESPA 法使用時のみ

マルチカノニカルアンサンブル情報行：マルチカノニカルアンサンブル使用時のみ

当該ステップのエネルギー	: real*8×1
サンプリング区間内のループ数	: integer*4×1
総ループ数	: integer*4×1
サンプリング区間のエネルギーヒストグラム	: real*8×サンプル数
全体のエネルギーヒストグラム	: real*8×サンプル数
スケーリングファクター	: real*8×サンプル数
当該ステップ後のエネルギー範囲の下限	: integer*4×1
当該ステップ後のエネルギー範囲の上限	: integer*4×1
当該ステップのエネルギー範囲の下限	: integer*4×1
当該ステップのエネルギー範囲の上限	: integer*4×1

A. 2.16 剛体モデルファイル

対象フェーズ： MD

用途： 剛体モデルの分子と原子を指定する。

特記事項：

行中の“;”以降はコメントとなる。

剛体モデルは Velocity-Verlet 指定時(“INTEGR=VELO”)のみ有効である。

SHAKE/RATTLE で指定した構造は、剛体モデルとして指定できない。

複数の剛体モデルに同じ原子を指定することはできない。

剛体モデルは MD フェーズで有効である (Minimize では扱えない)。

書式：剛体モデル対象原子の指定は、以下の行で構成される。

[剛体モデル先頭行 [剛体分子指定行 剛体原子情報行]...]...
--

剛体モデル先頭行： 以下の文字列で指定する。

- (1) 剛体原子リスト指定 = “RIGID> NUM”
- (2) 剛体原子リスト+モデル座標指定 = “RIGID> COO”

剛体分子指定行： 分子名を指定する。

剛体原子情報行：先頭行にしたがって以下のように記述する。

- (1) “RIGID> NUM”の場合：

原子数 [相対原子 ID...]

- (2) “RIGID> COO”の場合：

原子数 [相対原子 ID x 座標 y 座標 z 座標]...
--

例)

RIGID> NUM	;	剛体原子リスト指定
WAT	;	剛体分子名行
3 1 2 3	;	剛体原子情報行
RIGID> COO	;	剛体原子リスト+座標指定
WAT	;	剛体分子名行
3 1 0.0 0.1 0.0 ->	;	剛体原子情報行
2 -0.8 0.4 0.0 ->		
3 0.8 0.4 0.0		

A.3 出力ファイル

構造探索エンジンの出力ファイルを以下に示す。

項番	ファイル名称	出力フェーズ	用 途
#1	MIN エネルギートラジェクトリ	MIN	エネルギー最小化での エネルギートラジェクトリ
#2	MD エネルギートラジェクトリ	MD	MD 計算での エネルギートラジェクトリ
#3	モニター指定トラジェクトリ	MD	モニター指定ファイルの内容に対する トラジェクトリ
#4	総エネルギーデータ	MD	総エネルギー (total potential energy)
#5	座標トラジェクトリ	MD	原子座標のトラジェクトリ
#6	速度トラジェクトリ	MD	原子速度のトラジェクトリ

A.3.1 MIN エネルギートラジェクトリ

出力フェーズ： MIN

内容： エネルギー最小化でのエネルギートラジェクトリ。

特記事項：

MIN エネルギーデータファイルは 8 バイトのバイナリーファイルである。

書式：

[MIN 情報 MIN エネルギー情報] × 出力回数

MIN 情報：

当該ループ回数	: integer*4 × 1
WORK1	: real*8 × 1
CPU 時間	: real*8 × 1

MIN エネルギー情報：

ステップ長	: real*8 × 1
root mean square change	: real*8 × 1
WORK2	: real*8 × 1
エネルギー詳細情報※	: real*8 × 29 (29 : エネルギー種別数)
root-mean square force	: real*8 × 1
1-5 van der Waals 数	: integer*4 × 1
1-5 水素結合数	: integer*4 × 1
root-mean square deviation	: real*8 × 1

※「WORK1」「WORK2」フィールドは、現在未使用。0.0d0 が設定される。

※「エネルギー詳細情報」の各フィールドの内容は、次ページの通り。

エネルギー詳細情報の内訳：

- (1) ポテンシャルエネルギー
- (2) Bond
- (3) Angle
- (4) Torsion
- (5) Improper torsion
- (6) 1-4 van der Waals
- (7) 1-4 静電
- (8) 1-5 van der Waals
- (9) 1-5 静電
- (10) 1-5 水素結合
- (11) 1-5 van der Waals (カットオフなし)
- (12) 1-5 静電 (カットオフなし)
- (13) 1-5 水素結合 (カットオフなし)
- (14) 位置拘束
- (15) 距離拘束
- (16) 二面角拘束
- (17) Repulsion
- (18) CAP 拘束
- (19) 未使用1
- (20) 未使用2
- (21) 未使用3
- (22) 未使用4
- (23) Generalized Born
- (24) Accessible Surface Area
- (25) 未使用5
- (26) 未使用6
- (27) 未使用7
- (28) 未使用8
- (29) 未使用9

A.3.2 MD エネルギートラジェクトリ

出力フェーズ： MD

内容： MD 計算でのエネルギートラジェクトリ。

特記事項：

指定により、アスキー、バイナリ（4 バイト実数形式指定、8 バイト実数形式指定）にすることができる。

書式：出力指定により以下の3種類に分かれる。

(1) ASCII 形式指定 (MNTREN= ASCII)

[MD 情報行 MD エネルギー情報行] × 出力回数

MD 情報行：

当該ループ回数 シミュレート時間 CPU 時間

MD エネルギー情報行：

総エネルギー 運動エネルギー 温度 エネルギー詳細情報※ “root-mean square force” “1-5 van der Waals 数” “1-5 水素結合数” “root-mean square deviation”
--

※「エネルギー詳細情報」の各フィールドの内容は、前ページの通り。

(2) 4 バイト実数形式指定 (MNTREN= SINGLE)

[MD 情報 MD エネルギー情報] × 出力回数

MD 情報 :

当該ループ回数	: integer*4 × 1
シミュレート時間	: real*4 × 1
CPU 時間	: real*4 × 1

MD エネルギー情報 :

総エネルギー	: real*4 × 1
運動エネルギー	: real*4 × 1
温度	: real*4 × 1
エネルギー詳細情報	: real*4 × 29 (29 : エネルギー種別数)
root-mean square force	: real*4 × 1
1-5 van der Waals 数	: integer*4 × 1
1-5 水素結合数	: integer*4 × 1
root-mean square deviation	: real*4 × 1

(3) 8 バイト実数形式指定 (MNTREN= DOUBLE)

[MD 情報 MD エネルギー情報] × 出力回数

MD 情報 :

当該ループ回数	: integer*4 × 1
シミュレート時間	: real*8 × 1
CPU 時間	: real*8 × 1

MD エネルギー情報 :

総エネルギー	: real*8 × 1
運動エネルギー	: real*8 × 1
温度	: real*8 × 1
エネルギー詳細情報	: real*8 × 29 (29 : エネルギー種別数)
root-mean square force	: real*8 × 1
1-5 van der Waals 数	: integer*4 × 1
1-5 水素結合数	: integer*4 × 1
root-mean square deviation	: real*8 × 1

A.3.3 モニター指定トラジェクトリ

出力フェーズ：MD

内容： モニター指定ファイルの内容に対するトラジェクトリ。

特記事項：

指定により、アスキー、バイナリ（4バイト実数形式指定、8バイト実数形式指定）にすることができる。

書式：出力指定により以下の3種類に分かれる。

(1) ASCII 形式指定 (MNTTR= ASCII)

[トラジェクトリ情報行 データ行] × 出力回数

トラジェクトリ情報行：

当該ループ回数 原子位置数 二原子間距離数 変角数 二面角数 当該データの個数

※ 当該データの個数 = 3 × 原子位置数 + 二原子間距離数 + 変角数 + 二面角数

データ行：

実数値 × 当該データの個数

(2) 4 バイト実数形式指定 (MNTTR= SINGLE)

[トラジェクトリ情報 データ] × 出力回数

トラジェクトリ情報：

当該ループ回数	: integer*4 × 1
原子位置数	: integer*4 × 1
二原子間距離数	: integer*4 × 1
変角数	: integer*4 × 1
二面角数	: integer*4 × 1
当該データの個数	: integer*4 × 1

データ：

データ	: real*4 × (当該データの個数)
-----	-----------------------

※ 当該データの個数 = 3 × 原子位置数 + 二原子間距離数 + 変角数 + 二面角数

(3) 8 バイト実数形式指定 (MNTRTR= DOUBLE)

[トラジェクトリ情報 データ] × 出力回数

トラジェクトリ情報：

当該ループ回数	: integer*4 × 1
原子位置数	: integer*4 × 1
二原子間距離数	: integer*4 × 1
変角数	: integer*4 × 1
二面角数	: integer*4 × 1
当該データの個数	: integer*4 × 1

データ：

データ	: real*8 × (当該データの個数)
-----	-----------------------

※ 当該データの個数 = 3 × 原子位置数 + 二原子間距離数 + 変角数 + 二面角数

A.3.4 総エネルギーデータ

出力フェーズ：MD

内容： 総エネルギーデータ (total potential energy)

特記事項：

指定により、アスキー、バイナリ（4 バイト実数形式指定、8 バイト実数形式指定）にすることができる。

書式：出力指定により以下の3種類に分かれる。

(1) ASCII 形式指定 (MNTRTO= ASCII)

[総エネルギーデータ情報行] × 出力回数

総エネルギー情報行：

総エネルギーデータ

(2) 4 バイト実数形式指定 (MNTRTO= SINGLE)

[総エネルギー情報] × 出力回数

総エネルギー情報：

総エネルギー	: real*4 × 1
--------	--------------

(3) 8 バイト実数形式指定 (MNTRCO= DOUBLE)

[総エネルギー情報] × 出力回数

総エネルギー情報：

総エネルギー	: real*8 × 1
--------	--------------

A.3.5 座標トラジェクトリ

出力フェーズ：MD

内容： 原子座標のトラジェクトリ。

特記事項：

指定により、アスキー、バイナリ（4 バイト実数形式指定、8 バイト実数形式指定）にすることができる。

書式：出力指定により以下の3種類に分かれる。

(1) ASCII 形式指定 (MNTRCO= ASCII)

[エネルギー情報行 原子座標情報行] × 出力回数

エネルギー情報行：

当該ループ回数	シミュレート時間	CPU 時間	総エネルギー	運動エネルギー	温度
ポテンシャルエネルギー	“root-mean square force”	“1-5 van der Waals 数”			
“1-5 水素結合数”	“root-mean square deviation”				

原子座標情報行：

[x 座標 y 座標 z 座標] × 自由原子数

(2) 4 バイト実数形式指定 (MNTRCO= SINGLE)

[エネルギー情報 原子座標情報] × 出力回数

エネルギー情報：

当該ループ回数	: integer*4 × 1
シミュレート時間	: real*4 × 1
CPU 時間	: real*4 × 1
総エネルギー	: real*4 × 1
運動エネルギー	: real*4 × 1
温度	: real*4 × 1
ポテンシャルエネルギー	: real*4 × 1
root-mean square force	: real*4 × 1
1-5 van der Waals 数	: integer*4 × 1
1-5 水素結合数	: integer*4 × 1
root-mean square deviation	: real*4 × 1

原子座標情報：

原子座標	: real*4 × 3 × 自由原子数
------	----------------------

(3) 8 バイト実数形式指定 (MNTRCO= DOUBLE)

[エネルギー情報 原子座標情報] × 出力回数

エネルギー情報：

当該ループ回数	: integer*4 × 1
シミュレート時間	: real*8 × 1
CPU 時間	: real*8 × 1
総エネルギー	: real*8 × 1
運動エネルギー	: real*8 × 1
温度	: real*8 × 1
ポテンシャルエネルギー	: real*8 × 1
root-mean square force	: real*8 × 1
1-5 van der Waals 数	: integer*4 × 1
1-5 水素結合数	: integer*4 × 1
root-mean square deviation	: real*8 × 1

原子座標情報：

原子座標	: real*8 × 3 × 自由原子数
------	----------------------

A.3.6 速度トラジェクトリ

出力フェーズ： MD

内容： 原子速度のトラジェクトリ。

特記事項：

指定により、アスキー、バイナリ（4 バイト実数形式指定、8 バイト実数形式指定）にすることができる。

書式：出力指定により以下の3種類に分かれる。

(1) ASCII 形式指定 (MNTRVE= ASCII)

[エネルギー情報行 原子速度情報行] × 出力回数

エネルギー情報行：

当該ループ回数	シミュレート時間	CPU 時間	総エネルギー	運動エネルギー	温度
ポテンシャルエネルギー	“root-mean square force”	“1-5 van der Waals 数”			
“1-5 水素結合数”	“root-mean square deviation”				

原子速度情報行：

[x 成分 y 成分 z 成分] × 自由原子数

(2) 4 バイト実数形式指定 (MNTRVE= SINGLE)

[エネルギー情報 原子速度情報] × 出力回数

エネルギー情報：

当該ループ回数	: integer*4 × 1
シミュレート時間	: real*4 × 1
CPU 時間	: real*4 × 1
総エネルギー	: real*4 × 1
運動エネルギー	: real*4 × 1
温度	: real*4 × 1
ポテンシャルエネルギー	: real*4 × 1
root-mean square force	: real*4 × 1
1-5 van der Waals 数	: integer*4 × 1
1-5 水素結合数	: integer*4 × 1
root-mean square deviation	: real*4 × 1

原子速度情報：

原子速度	: real*4 × 3 × 自由原子数
------	----------------------

(3) 8 バイト実数形式指定 (MNTRVE= DOUBLE)

[エネルギー情報 原子速度情報] × 出力回数

エネルギー情報：

当該ループ回数	: integer*4 × 1
シミュレート時間	: real*8 × 1
CPU 時間	: real*8 × 1
総エネルギー	: real*8 × 1
運動エネルギー	: real*8 × 1
温度	: real*8 × 1
ポテンシャルエネルギー	: real*8 × 1
root-mean square force	: real*8 × 1
1-5 van der Waals 数	: integer*4 × 1
1-5 水素結合数	: integer*4 × 1
root-mean square deviation	: real*8 × 1

原子速度情報：

原子速度	: real*8 × 3 × 自由原子数
------	----------------------

