

目次

	計算化学シリーズ刊行にあたって	iii
	はじめに	v
1	分子シミュレーションのアウトライン	1
1.1	分子動力学法とモンテカルロ法はなぜ必要か	1
1.2	シミュレーションの視点	2
1.3	分子運動の視点	3
1.3.1	古典力学モデル	3
1.3.2	より一般的なモデル	4
1.4	分子間相互作用	4
1.4.1	ポテンシャル関数型	4
1.4.2	2体ポテンシャルと多体ポテンシャル	8
1.4.3	ポテンシャル定数の選びかた	8
1.5	分子シミュレーションの特徴	13
1.6	分子シミュレーションの実際	14
1.6.1	プログラムの準備	14
1.6.2	計算の実行と解析	14
2	分子動力学法の基礎	18
2.1	ヴェルレ法による運動方程式の解きかた	18
2.2	ヴェルレ法によるプログラム例	20
2.3	けた落ちについての注意	28
2.4	かえる跳び法	28
2.5	ラーマンの予測子修正子法	29
2.6	ギアの予測子修正子法	30
2.7	精度の比較	33

3	モンテカルロ法の基礎	41
3.1	メトロポリスの方法	41
3.2	プログラム例：クラスターのメトロポリス法シミュレーション	41
3.3	モンテカルロ法と乱数についてのメモ	50
4	分子シミュレーションの枠組み	57
4.1	単位系	57
4.1.1	無次元化	57
4.1.2	入出力部分の単位	58
4.2	周期境界条件と相互作用のカット	58
4.3	初期配置	62
4.4	温度の設定方法	63
4.5	熱平衡状態の判定法	64
4.6	プログラム例	65
5	単原子液体の分子動力学の実例とチェックポイント	68
5.1	プログラム構造の例	68
5.1.1	フローチャートの概略	69
5.1.2	分子動力学部分の計画	71
5.1.3	プログラム例	71
5.2	運動方程式の解のチェック	88
5.3	ポテンシャルエネルギーと圧力	88
5.4	分子分布関数	89
5.5	平均2乗変位と自己拡散係数	93
5.6	時間相関関数とスペクトル密度	96
6	分子の回転運動と水のシミュレーション	104
6.1	運動方程式の解きかた	104
6.2	水のモデル	104
6.3	クーロン力の計算	105
6.4	プログラム例	105

6.5	変数の意味	114
6.6	サブルーチン	114
7	アプリケーションプログラムパッケージ	119
7.1	プログラムパッケージの利用	119
7.2	アカデミックライブラリー	120
7.3	CCP5プログラムライブラリー	121
8	多原子分子液体の分子動力学 ——MDMPOLの使いかた——	125
8.1	運動方程式とプログラム構造	125
8.1.1	MDMPOLのモデルと運動方程式の解きかた	125
8.1.2	MDMPOLのプログラムの構造	125
8.2	走らせかた	128
8.2.1	京都大学大型計算機センターのTSS	128
8.2.2	京都大学大型計算機センターのバッチジョブ	131
8.2.3	アウトプットの例	131
8.2.4	プロダクションランの準備	134
8.2.5	物理的条件の設定	134
8.2.6	分子動力学法のコントロールパラメータの与えかた	135
8.2.7	引き続き分子動力学法を行うには(リスタート)	135
8.2.8	温度のコントロールと平衡化の段階	136
8.3	活用法	136
8.3.1	分子を取りかえる	136
8.3.2	溶液の場合	136
8.3.3	初期配置を独自に設定する	136
8.3.4	各種の統計サブルーチンを付け加える	137
8.3.5	スーパーコンピュータを使う	137
9	統合プログラムIMPACTの紹介	141
9.1	IMPACTとは	141
9.2	IMPACTのやさしい使いかたの例	141
9.3	入力ファイル	143

目次

9.3.1	入力ファイルの例	143
9.3.2	タスク (IMPACT の作業単位)	143
9.3.3	入力ファイルの例の説明	145
9.4	出力ファイル	147
9.4.1	出力ファイルの例	147
9.4.2	エネルギーのプロット	151
9.5	独自の解析をするために	152
9.6	自分の問題のための入力ファイル	152
9.7	IMPACT による研究例	152
10	2 面角空間でのタンパク質分子運動のシミュレーション ——INSPIDAS の使い方——	159
10.1	INSPIDAS とは	159
10.2	構成要素タスク	160
10.3	入力ファイル	160
10.4	アウトプットの例	163
10.5	基準振動に基づく解析の入力ファイルの例	165
10.6	基準振動に基づく解析の出力の例	166
11	分子シミュレーションのためのコンピュータ環境	171
11.1	コンピュータの性能	171
11.1.1	メモリ容量	171
11.1.2	CPU 速度	172
11.2	外部記憶装置	173
11.2.1	ディスク容量	173
11.2.2	磁気テープなど	173
11.3	プログラムの開発環境	174
11.4	シミュレーションを実行する環境	174
11.5	研究環境の整備	175
	索引	177