

1. お 知 ら せ

- I. 汎用データ可視化システム AVS のレベルアップについて
- II. 分子構造・分子振動表示プログラムのダウンロードサービスについて
- III. AMBER 7 の利用開始について
- IV. SAS Release 6.12 のサービスの終了について

I. 汎用データ可視化システム AVS のレベルアップについて

汎用データ可視化システム AVS が、4月17日より AVS/Express 6.0 にバージョンアップしました。このバージョンでは、次の機能が拡張されています。

- ・イルミネーションライン表示
- ・オフスクリーン・レンダリング機能
- ・MPEG エンコーダーの改良
- ・オブジェクトの透明度表示の改良
- ・カラーマップ・エディタの改良
- ・volume_render モジュールの改良

詳しくは、次の URL を参照してください。

<http://www.kgt.co.jp/product/avs/express/info/rel60.html>

(以上「速報」No. 1-14.4.22 発行)

II. 分子構造・分子振動表示プログラムのダウンロードサービスについて

分子構造・分子振動表示プログラム MOLCAT のダウンロードサービスを始めました。Gaussian 98 等の出力データを視覚化するのに使用できます。URL は、http://www2.itc.nagoyau.ac.jp/sys_riyou/vpp/vpptebiki.htm の Gaussian 98 の利用方法の項です。

参考文献は、Chemistry Letters 1995, p. 517 (1995)です。

(以上「速報」No. 3-14.6.19 発行)

III. AMBER 7 の利用開始について

AMBER 7 が利用できるようになりました。プログラムとデータベースは、以下に示すディレクトリにあります。AMBER 7 の並列版は、gibbs ソルバと sander ソルバだけが用意されていて、そのプログラム名は、gibbs が gibbs_parallel, sander が sander_parallel です。従来の AMBER との大きな変更点は、AMBER 7 では、sander_classic の計算ソルバが利用できなくなったこと

です。現在 sander_classic ソルバを利用している方は、sander ソルバをご利用ください。なお、sander を利用する場合には、一部入力データに sander_classic との非互換がありますので、以下の【sander_classic から sander へ】の項を参照してください。AMBER 7 のマニュアルは図書室にあります。

vpp 版のディレクトリ

プログラム： /opt/apl/amber 7/exe

データベース： /opt/apl/amber 7/dat

gpcs 版のディレクトリ

プログラム： /opt/local/amber 7/exe

データベース： /opt/local/amber 7/dat

【sander_classic から sander へ】

1. 計算結果について

AMBER 7 の sander では以下の理由により、sander_classic と結果が異なる可能性があります。なお、パラメータを調整することで結果を近づけることは可能です。

- cutoff (ある原子への作用をどの範囲まで考えるか) の手法が異なること
- sander ではデフォルトの計算手法として PME を採用していること (sander_classic では PME 法を陽に記述する必要がありました。)

2. データコンバートについて

2-1 の方法である程度実行可能なデータは作成できますが、sander_classic の結果により近づけるためにはさらに 2-2 の方法を行うことを推奨します。

2-1 最も簡単な方法

2-1-1 以下の変数以外の変数を入力データの &cntrl~&end から、無条件に削除します。

```
TIMLIM, IREST, IBELLY, NTX, NTXO, NTCX, IG, TEMPI, HEAT,  
NTB, NTT, TEMP0, DTEMP, TAUTP, NTP, PRES0, COMP, TAUP, NPSCAL,  
NDFMIN, NTCM, NSCM, NSTLIM, NTU, T, DT,  
NTC, NTCC, NCONP, TOL, NTF, NTN, NSNB, CUT, SCNB, SCEE, DIELC,  
NTPR, NTWX, NTWV, NTWE, NTAVE, NTPP, IOUTFM,  
NTR, NRC, NTRX, TAUR, NMROPT, NMRMAX,  
IVCAP, MATCAP, FCAP, imin, drms, dele, dx0, dxm,  
pencut, ipnlty, iscale, scalm, noeskp,  
maxcyc, ncyc, ntmin, vlimit,  
mxsub, ipol, jfastw, watnam, owtnm, hwtm1, hwtm2,  
ntwprt, ntwpr0, n3b, nion, at1, at2, acon, beta3, gamma3, tausw,  
ntwr, plevel, iyampp, imcdo,
```

igb, igbfreq, saltcon, offset, readrad, gbparm, gbsa, vrand,
surften, iwrap

2-1-2 次に&endに数字の羅列（PME法の設定データ）がある場合、それも削除します。

2-1-3 テスト実行するとエラーが返される場合があります。上記変数のうち、とれる値の範囲が sander_classic と異なる場合があります。その場合はマニュアルを参考に値を修正する（解析内容が合うように）必要があります。

2-2 詳細な方法

2-2-1 2-1の変更は済んでいるものとしします。

2-2-2 2-1で削除した変数のうち、解析内容を操作するパラメータについて、sanderの変数で代替できるものがあれば別途追加・修正します。

2-2-3 &end以降はPME法のためのデータです。sanderのデフォルトの解析法はPME法を詳細に記述するため、羅列の情報を入力データに次の要領で加えます。

[sander_classic]

```
77.3604 66.8482 60.2014 90.00 90.00 90.00  
80 64 64 4 0 0 0  
0.000001
```

↓

[sander]

```
&ewald  
A=77.3604, B=66.8482, C=60.2014, ALPHA=90.00, BETA=90.00,  
GAMMA=90.00,  
NFFT1=80, NFFT2=64, NFFT3=64, ORDER=4, ISCHRGD=0, VERBOSE=0,  
EW_TYPE=0,  
DSUM_TOL=0.000001  
&end
```

2-3 実例

2-1によるコンバート例です（下線部分が非互換箇所です）。

[sander_classic]

```
equilbrate apo-dhfr  
&cntrl  
ntr=0, nscm=50,  
ntb=2, nsnb=50, idiel=1,  
cut=9.0, scnb=2.0, scee=1.2, ntp=1,  
ntc = 2,  
nstlim = 10, tempi=0.0, temp0=300.0,  
  
ntt=5, dt=0.001, tautp=1.0, ntx=7, irst=1, vlimit=10.0,  
ntp=1, taup = 2.0,  
iewald=1, plevel=2, ntwr=1000,  
&end  
77.3604 66.8482 60.2014 90.00 90.00 90.00  
80 64 64 4 0 0 0  
0.000001
```

idiel is invalid

iewald is invalid

ntt must be 0,1 or 4

} PME parameter

↓

[sander]

```
equilibrate apo-dhfr
&cntrl
  ntr=0, nscm=50,
  ntb=2, nsnb=50,
  cut=9.0, scnb=2.0, scee=1.2, ntp=1,
  ntc = 2,
  nstlim = 10, tempi=0.0, temp0=300.0,
  ntt=1, dt=0.001, tautp=1.0, ntx=7, irect=1, vlimit=10.0,
  ntp=1, taup = 2.0,
  plevel=2, ntwr=1000,
&end
&ewald
  A=77.3604, B=66.8482, C=60.2014, ALPHA=90.00, BETA=90.00,
  GAMMA=90.00,
  NFFT1=80, NFFT2=64, NFFT3=64, ORDER=4, ISCHRGD=0, VERBOSE=0
  EW_TYPE=0
  DSUM_TOL=0.000001
&end
```

(以上「速報」No. 4-14.7.19 発行)

IV. SAS Release 6.12 のサービスの終了について

SAS Release 6.12 のサポートが、平成 14 年 12 月末日で打ち切られることになりました。このため sas 6 コマンドで起動する SAS Release 6.12 のサービスをこの 12 月をもって終了します。現在、sas 6 コマンドをご利用の方は、早めに sas コマンド (SAS Release 8 を起動) に移行してください。なお、sas コマンドで結果が異なるなど移行上の問題点がある場合には、soudan@cc.nagoya-u.ac.jp までご連絡ください。

(以上「速報」No. 6-14.9.19 発行)