mdspass2 改良点について（2016年6月17日）

（最新版は<http://www.cmsm.iis.u-tokyo.ac.jp/code/mdspass2/forWin/> にアップ済）

1. mdspass2が時間がたつと落ちてしまう不具合を修正

前回、原子間ボンドを立体的に表示する機能を追加した際、配列処理の不具合によりメモリリークを起こしていたことが原因と判明。確保したメモリ領域を処理後に解放する命令が抜けていたので、これを修正した。

🡪挙動は安定した模様であり、解決したと思われる。

1. 表面積計算不具合を修正

前回、CNTの断面形状が真円でない場合にも表面積が計算できるようにルーチンを変更したが、断面の中心から最外殻層の原子位置をr(**)のように極座標表示してその経路を計算していた。ところが断面がダンベル型のような形状になった場合、r(**)が二価関数となってしまうことがあり、その場合には正しく経路が計算できないことが判明した。

そこで、最外殻のある原子を出発点として、その原子と結合している原子を次々に検索していくことで、最外殻の形状を求めるアルゴリズムに変更した。

🡪今度こそ正しく計算されていると思われるが、注意してチェックしてほしい。

1. 構造緩和計算に”re-heat”機能を追加

ある一定圧力のもとで構造緩和計算（座屈／非座屈判定）を行う際、Fmaxがある値(tolfor)以下になるとMDを停止する、という方法を取るのが一般的であるが、不安定平衡状態（座屈荷重に達しており系が不安定状態になっているにも関わらず、荷重が釣り合ってしまうために変形が起こらない）に陥ってしまうことがある。不安定平衡状態に陥っているかどうか判定するためには、その状態で少しだけ温度を与えてMD計算を行い、原子を「少し揺らしてやる」という方法が考えられる（再加熱：re-heatと称する）。

そこで、Fmax<tolforとなった後、MDを停止するのではなく、一定温度のMD（NVTアンサンブル）を一定ステップ実行し(re-heatプロセス)、その後再び緩和計算に入る、という機能を追加した。

Set parameter パネル内の”Stop MD by Fmax”の下に、”Reheat after stop”チェックボックスを設けた。両方にチェックが入っている場合にこの機能は有効となる。その少し下にある”Reheat param”をロールアウトすると、詳細設定ができる。re-heatプロセスにおける温度、MDの時間ステップ、ステップ数が設定できる。”# of reheats to go”はこのre-heat→緩和を何回行うかを指定するものである。例えば2にしておくと、緩和→re-heat→緩和→re-heat→緩和、となる（窓に表示される値はre-heatが行われる毎にカウントダウンされる）。

1. 多層CNTの特定の層だけを表示する機能を追加

“Set parameters”パネルの下の方にある”Special settings for CNT”ロールアウトの中に、”Which layer to show”という項目を追加した。Allにチェックが入っているとすべての原子を描画するが、このチェックが外され、1st, 2nd, ... のチェックボックスがONになると、多層CNTの層ごとに描画を行うことができる。1stは最外殻層、2nd はそれより一つ内側の層、・・・である。

　ただしこの機能は、各層がz軸にほぼ平行（xy断面形状がどこでも同じ）になっていることを想定している。Corrugationに対しては問題ないはずであるが、軸方向圧縮などにより座屈が起こっている場合には対応できない。