

Soubory simulace GROMACS

Vojtěch Stránský

FJFI

29. března 2023

Co potřebujeme k simulaci?

- .top
- .gro
- .mdp

topology

- popisuje neměnné konstanty systémů
- atomy - (počet, ne polohu), vazby - (druh, ne délku)
- počet molekul, rozpoštědlo
- mění se při simulaci
- lze se odkazovat na základní knihovnu
- `gmx pdb2gmx -p`
- `gmx solvate -cs tip4p -o conf.gro -box 2.3 2.3 2.3 -p topol.top`
- `gmx insert-molecules -ci methane.pdb -o box.gro -nmol 10 -box 3.2 3.2 3.2`

je to potřeba ve skutečnosti ovládat, když můžeme použít převod z pdb?

Ne, ale ano. Samotný soubor `.top` nahradí `pdb`, ale naše knihovny nemusí obsahovat odkazované molekuly. jsou proto potřeba dodefinovat v `.rtp`.

Residue topology

- definice molekul
- sepisujeme sami
- vazby atomů, úhly

Příklad souboru .top

```
[ moleculetype ]
; Name          nrexcl
Methanes        1

[ atoms ]
; nr   type    resnr  residu   atom    cgnr      charge      mass
  1   CH4       1     CH4     C1       1         0     16.043
  2   CH4       1     CH4     C2       2         0     16.043

[ constraints ]
; ai    aj  funct    length_A  length_B
  1     2    2         0.7       1.7

#include "gromos43a1.ff/spc.itp"

[ system ]
; Name
Methanes in Water

[ molecules ]
; Compound      #mols
Methanes        1
SOL              2002
```

Příklad souboru .rtp

```
[ bondedtypes ]
; bonds  angles  dihedrals  impropers  all_dihedrals  nrexcl  HH14  RemoveDih
  1      1      3          1          1              3      1      0

; Methane
[ CH4 ]
[ atoms ]
  C      opls_138    -0.240      1
  H1     opls_140     0.060      1
  H2     opls_140     0.060      1
  H3     opls_140     0.060      1
  H4     opls_140     0.060      1
[ bonds ]
  C      H1
  C      H2
  C      H3
  C      H4
```

Jednotky

Table 2 Basic units used in GROMACS

Quantity	Symbol	Unit
length	r	nm = 10^{-9} m
mass	m	u (unified atomic mass unit) = $1.660\,538\,921 \times 10^{-27}$ kg
time	t	ps = 10^{-12} s
charge	q	e = elementary charge = $1.602\,176\,565 \times 10^{-19}$ C
temperature	T	K

GROMOS

- generuje se automaticky při každém kroku se zásahem do systémů
- obdoba PDB
- časový vývoj
- structure file

Mám na to sahat?

Ne. Gromacs si obslouží soubor sám. Stejně s tím manuálně nic nelze udělat.

Příklad souboru .gro

MD of 2 waters, t= 0.0

6

1WATER	OW1	1	0.126	1.624	1.679	0.1227	-0.0580	0.0434
1WATER	HW2	2	0.190	1.661	1.747	0.8085	0.3191	-0.7791
1WATER	HW3	3	0.177	1.568	1.613	-0.9045	-2.6469	1.3180
2WATER	OW1	4	1.275	0.053	0.622	0.2519	0.3140	-0.1734
2WATER	HW2	5	1.337	0.002	0.680	-1.0641	-1.1349	0.0257
2WATER	HW3	6	1.326	0.120	0.568	1.9427	-0.8216	-0.0244
1.82060	1.82060	1.82060						

Parameter

- obsahují parametry běhu simulace
- neobsahují postup, jen parametry příkazů v konzoli
- při opakované definici proměnné je použita poslední možnost

Mám na to sahat?

Ne. Gromacs si obslouží soubor sám. Stejně s tím manuálně nic nelze udělat.

Příklad souboru .mdp

```
integrator          = md
dt                 = 0.002
nsteps             = 500000

nstlog             = 5000
nstenergy          = 5000
nstxout-compressed = 5000

continuation       = yes
constraints        = all-bonds
constraint-algorithm = lincs

cutoff-scheme      = Verlet

coulombtype        = PME
rcoulomb           = 1.0

vdwtype            = Cut-off
rvdw               = 1.0
DispCorr           = EnerPres
```

Zdroje

- <https://manual.gromacs.org/documentation/current/reference-manual>
- https://github.com/shekfeh/gromacs-tutorials/tree/master/2_methane_in_water