

Soubory simulace GROMACS II

Vojtěch Stránský

FJFI

13. dubna 2023

Co potřebujeme k simulaci?

- .mdp
- kroky eql, min, prd

Parametry integrace

- integrator - md(leap-frog), md-vv(verlet)
- tinit - počáteční čas
- dt - časový krok integrace
- nsteps - počet kroků

Parametry logování

- nstenergy - počet kroků ob které se zapíše energie do souboru energie
- nstlog - počet kroků ob které se zapíše energie do logu
- nstout-compressed - počet kroků ob které se zapíše souřadnice do .xtc

Parametry teploty

- gen-vel - yes, no, generování rychlostí podle Maxwellova rozdělení
- gen-temp - teplota pro Maxwellovu distribuci

Parametry vazeb

- continuation - navázat na předchozí stav
- constraint-algorithm - volba algoritmu na řešení vazeb
- constraints - řídí, které vazby se považují za pevné
- cutoff-scheme - Verlet, parametr řešení přetrhání vazeb
- verlet-buffer-tolerance - parametr tolerance

Coulombické vazby

- coulombtype - PME, Ewald, user
- rcoulomb - vzdálenost rozpojení vazby

Van der Waalsovi vazby

- vdwtpe - PME, Cut-off, user
- rvdw - vzdálenost rozpojení vazby
- DispCorr - korekce žádné, energie, energie a tlak

Parametry teploměru

- tcoupl - no, berendsen, andersen. . .
- tc-grps - rozdělení na skupiny s různou teplotou
- tau-t - čas ob který se přepočítává teplota
- ref-t - referenční teplota

Eql 1

```
integrator          = md
dt                  = 0.002      ; 2 fs
nsteps              = 50000      ; 100 ps

nstenergy           = 200
nstlog              = 2000
nstxout-compressed  = 10000

gen-vel             = yes
gen-temp            = 298.15

constraint-algorithm = lincs
constraints          = h-bonds

cutoff-scheme       = Verlet

coulombtype         = PME
rcoulomb            = 1.0

vdwtype             = Cut-off
rvdw                = 1.0
DispCorr            = EnerPres

tcoupl              = Nose-Hoover
tc-grps             = System
tau-t               = 2.0
ref-t               = 298.15
nhchainlength       = 1
```