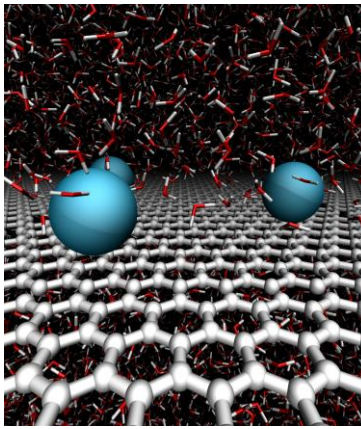
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Molekulová dynamika uhlíkových nanomateriálů



Gromacs

Karel Berka
Katedra fyzikální chemie a RCPTM, PřF UP
Michal Kolář
ÚOCHB AV ČR a PřF UK

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Osnova

- Molekulová dynamika
  - základy a pojmy
  - použití
- Gromacs
  - Fast
  - Free
  - Flexible

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Motto

Richard Feynman

"... everything living things do can be understood in term of the wiggling and jiggling of their atoms."

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Molekulová dynamika

Pohyb atomů

1. výpočet energií a sil s pomocí silového pole (force field)
2. řešení Newtonových pohybových rovnic

   ($F = m \cdot a$)
3. sledování trajektorie pohybu částic v systému => popis vlastností systému (statistický soubor)

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Silové pole

$$U = \sum_{\text{All Bonds}} \tfrac{1}{2}K_b(b-b_0)^2 + \sum_{\text{All Angles}} \tfrac{1}{2}K_\theta(\theta-\theta_0)^2$$

$$+ \sum_{\text{All Torsion Angles}} K_\phi[1-\cos(n\phi+\delta)]$$

$$+ \sum_{\text{All nonbonded pairs}} \epsilon\left[\left(r_0/r\right)^{12} - 2\left(r_0/r\right)^{6}\right]$$

$$+ \sum_{\text{All partial charges}} 332 q_i q_j / r$$

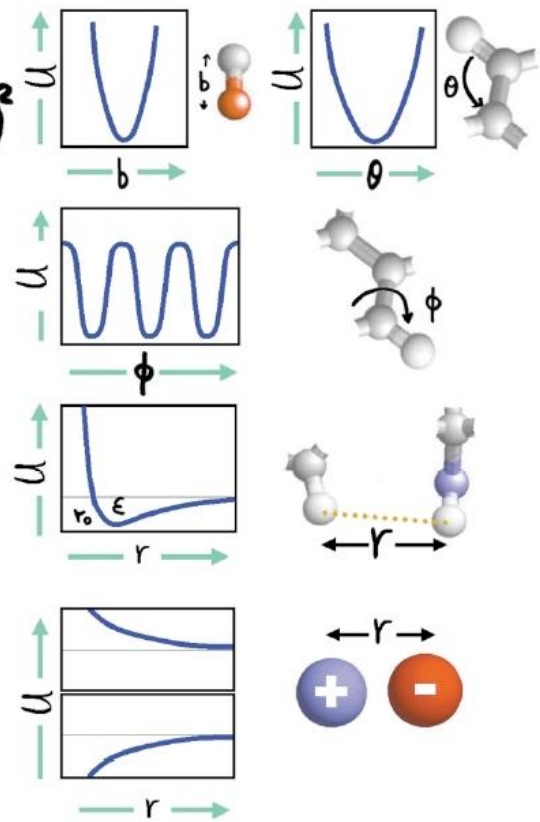
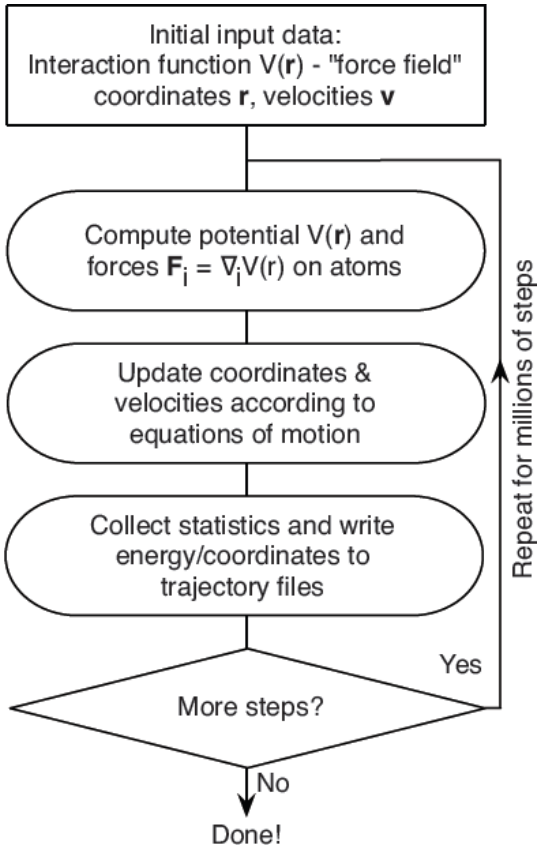


Fig. 1 The total potential energy of any molecule is the sum of terms allowing for bond stretching, bond angle bending, bond twisting, van der Waals interactions and electrostatics. Many properties of a biomolecules can be simulated with such an empirical energy function.

M.Levitt, Nat. Struct. Biol. 8, 392-393 (2001)

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Provedení molekulové dynamiky



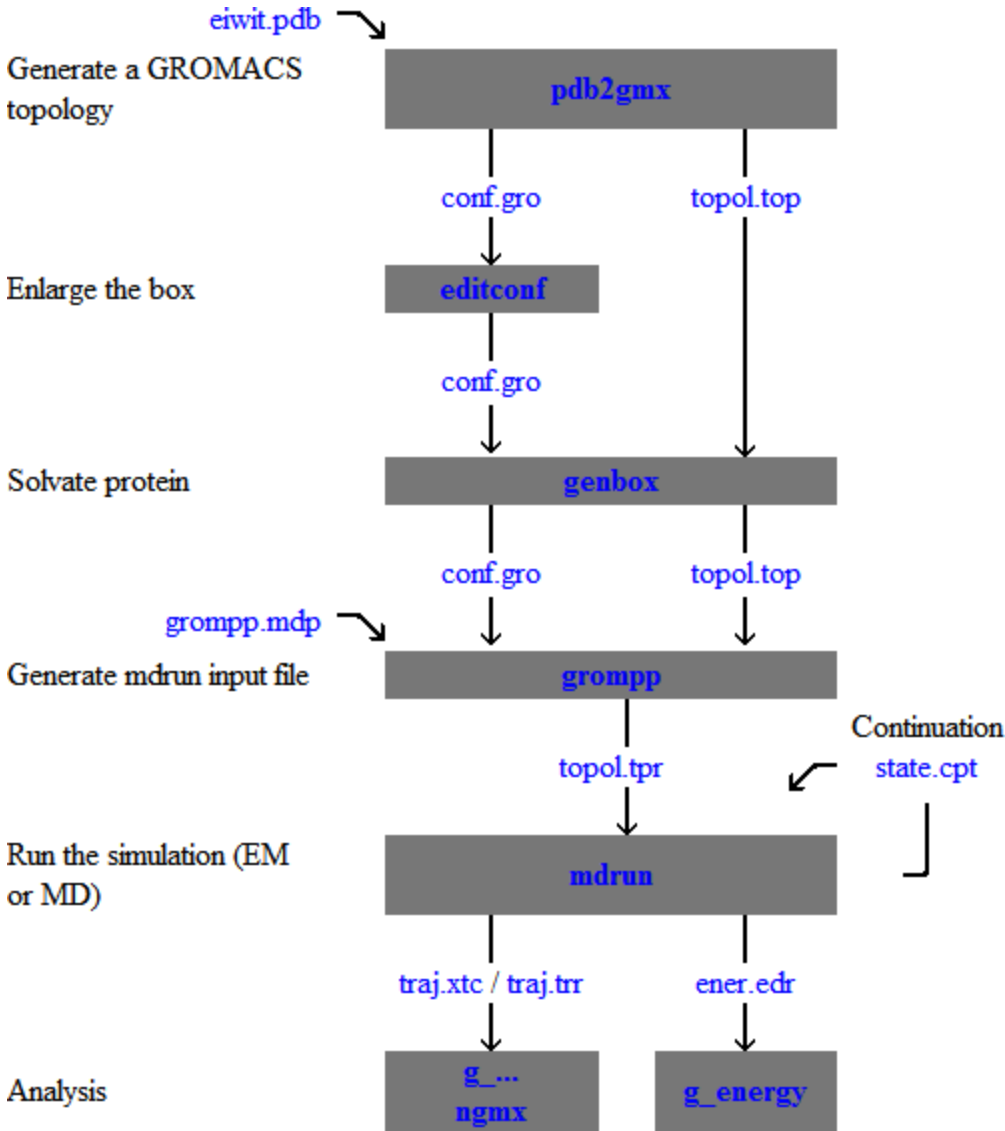
Struktura, topologie a rychlosti

1. spočítat potenciál a síly
2. posun o integrační krok
3. a znovu …

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Typická simulace

- Získat strukturu (PDB)
- Opravit ji
- Vytvořit simulační box
- Připravit topologii (parametry silového pole)
- Přidat solvent
- Minimalizace
- Ekvilibrační simulace
- Produkční simulace
- Analýza trajektorie

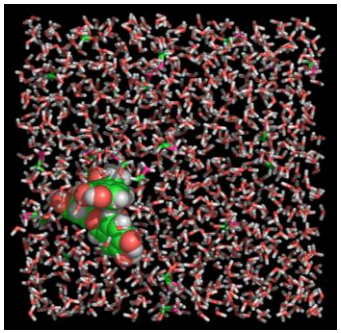


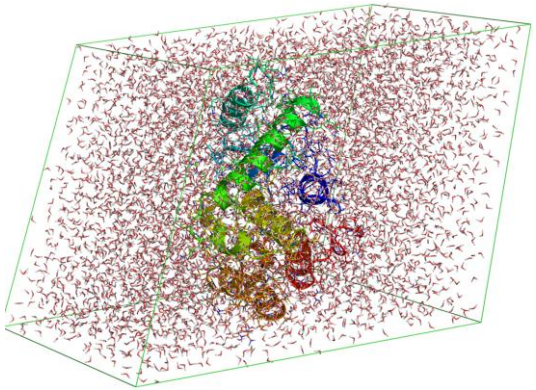
evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Simulační box

Vakuum

bez solventu





Implicitní solvent

popisuje hrubý vliv solventu,

ne specifické interakce s ním

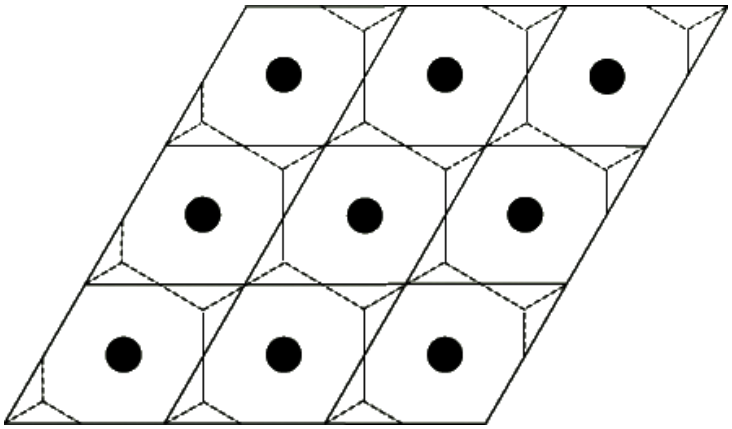
Kapka

dodatečný potenciál, držící ji pohromadě při správném tlaku

Periodický box

opakující se box

kubický, **triklinický** (GMX interně)



evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Minimalizace energie

- Nalezení lokálního minima

  … respektive snaha nemít v systému nerealisticky velké síly
- Síly F jsou gradientem potenciálu V
- Algoritmy:
  - Steepest descent
  - Conjugate gradients
  - L-BFGS
- Normálně malé změny

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Statistický soubor

- Reprodukce experimentálních podmínek
- Teplota = Kinetická energie
  - Maxwellova distribuce
  - musí být kontrolována v průběhu simulace (termostat)
    - simulace totiž mohou vést ke ztrácení energií (např. při používání cut-offs)
- Tlak
  - Kontrolujeme úpravou velikosti simulační cely (barostat)
- Chemický potenciál
  - Přidávání/odstraňování částic

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Výsledky molekulové dynamiky

Trajektorie:

- Energie - E(t)
- Souřadnice - x(t)
- Rychlosti - v(t)
- Síly – f(t)

=> jejich analýzou můžeme získat informace, která nás zajímá

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

MD - použití

- Vizuální analýza chování systému
- Volná energie (vazby, solvatace, interakce)
- Difuzní koeficienty, viskozita, radiální distribuční funkce, poloměr gyrace
- Mechanické vlastnosti - stabilita komplexu, simulace tahu, hustota, uspořádanost materiálu
- Clusterování, Analýza PCA, RMSD
- Chemické NMR posuny

- Experiment - průměr přes mnoho molekul (N_{av} ~ 6E23)
- Ekvipartiční teorém:
  - nahrazení statistiky přes množství struktur statistikou přes čas

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

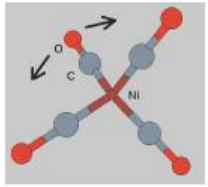
Gromacs - Fast

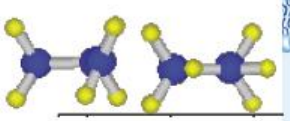
Proč chceme rychlost?

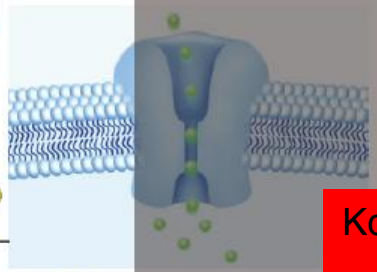
Experiment

statistické průměrování

nižší detail







Kde potřebujeme být

10^{-15}s 10^{-12}s 10^{-9}s 10^{-6}s 10^{-3}s 10^{0}s 10^{3}s

Kde jsme

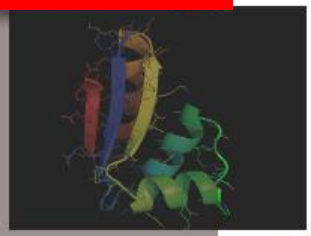
Kde chceme být

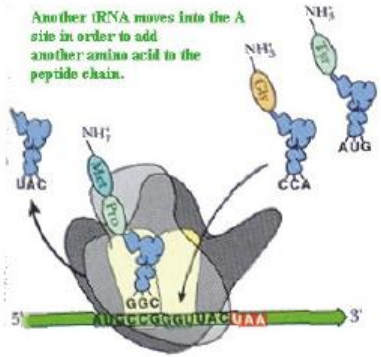
Simulace

extrémní detail

kvalita parametrů?

sampling?

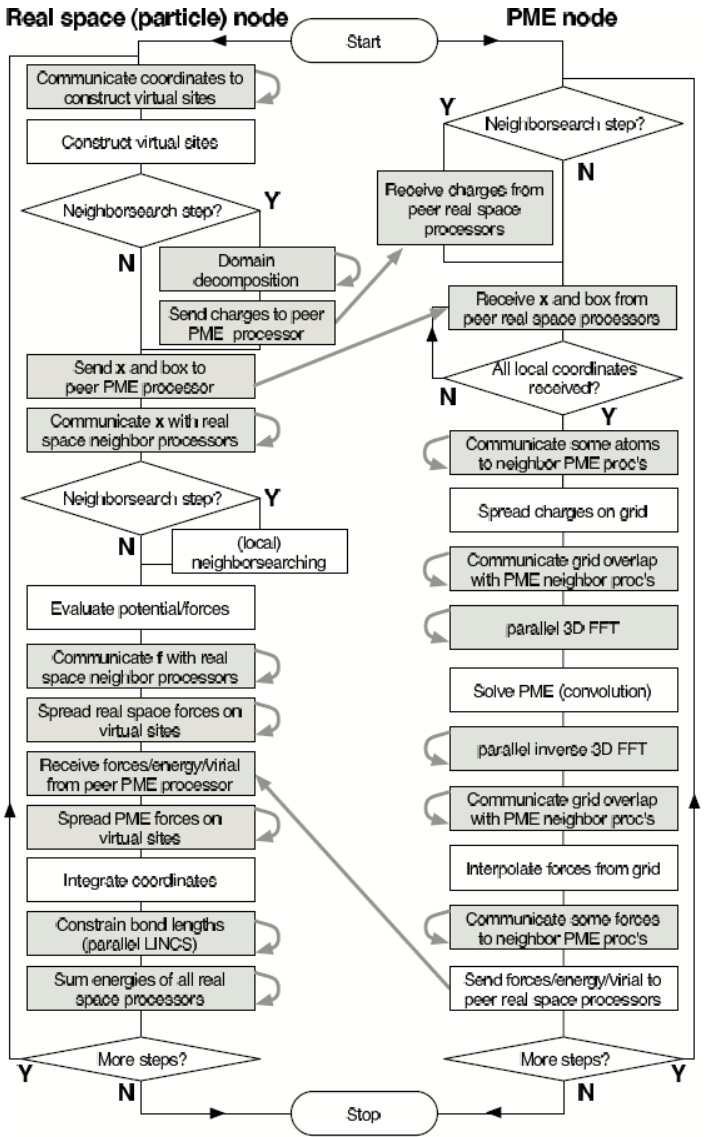




evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Fast - algoritmy

- Single precision
- Snaha vyhýbat se drahým testům jako je PBC check
- Triklinické buňky: 15-20% úspora velikosti boxu
- Assembler, rutina pro výpočet 1/sqrt(x) – Nekovalentní interakce
- výpočty potenciálů v předpočítané tabulce ve Fortanu (table search)
- Assembler cykly pro PC architekturu
- 4.x - domain decomposition
- TIP3P, TIP4P, SPC, SPC-E voda – zvláštní optimalizace vnitřních cyklů
- optimalizace FFT



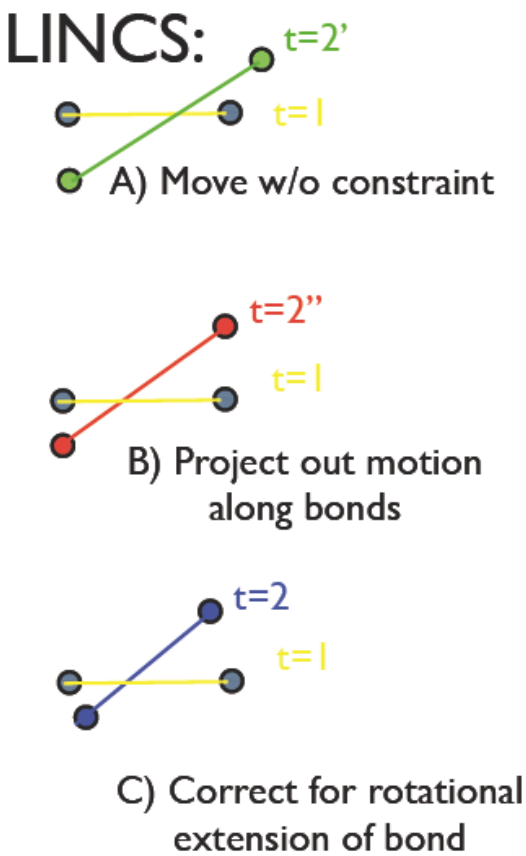
evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Fast - constraints

- Integrační krok (Δt) je limitován rychlými pohyby - 1fs
  - vibrace vazeb (nejrychlejší je vibrace vazby H-O)

Algoritmy na odstranění těchto vibrací (constraint) – umožnění delšího kroku:

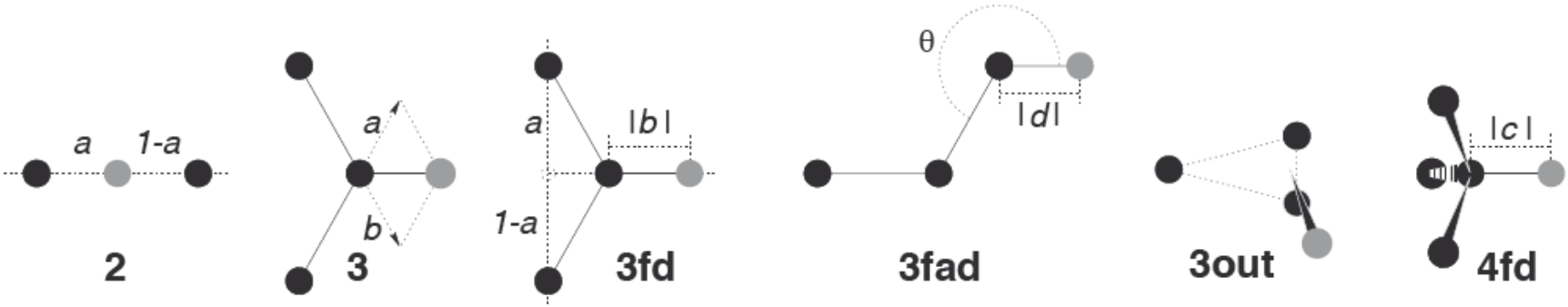
- SHAKE
  - iterativní, pomalý – 2 fs
  - špatně paralelizovatelné
  - zamrznutí jen vodíkových vazeb 1,4 fs
- LINCS (Gromacs) - LINear Constraint Solver
  - Approximate matrix inversion expansion
  - rychlý a stabilní - 2-3 fs
  - neiterativní, lze paralelizovat



evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Faster: Virtual Sites

- Další rychlý pohyb tvoří vibrace úhlů a rotace CH3/NH2 skupin
- Konstrukce (idealních) pozic vodíků z těžkých atomů
  - CH3/NH2 jsou pak rigidní
- Spočítat síly a projektovat je na těžké atomy
- Integrovat jen pozice těžkých atomů a pak na nich rekonstrukce vodíků na nich
- 4-5 fs integrační krok
  - NS co 5 kroků, virtual site vodíky and LINCS



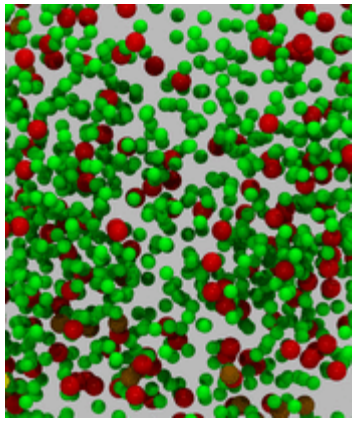
evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Fast and Furious: coarse-graining

- Zhrubené modely
  - Coarse-Grained force fields
  - stále populárnější (MARTINI, Bondini, …)
  - skupina atomů => „beads“
  - propojitelné s detailnějšími simulacemi

    (zpětný fit do zhrubeného modelu)

    nevýhoda – nezvládají dihedrální úhly

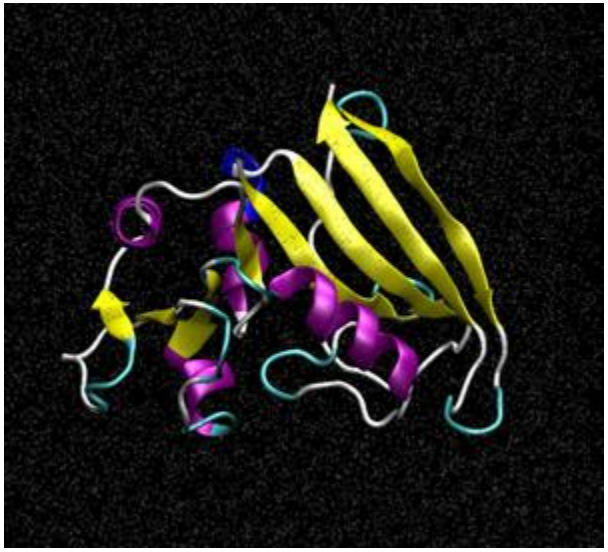


evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Srovnání rychlosti I – škálování

DHFR benchmark v explicitní vodě, NPT, 23558 atomů

n proc	time (ns/day)	n proc ekviv	η (%)
1	**3.01**	1.0	
2	**5.54**	1.8	92
4	**10.23**	3.4	85
8	**17.46**	5.8	72



sp-icc,PME, grid 1.2 A, cut offs = 8 A, 2fs step, write to x-xtc,e-edr, log, opls all-atom ff, cpt_15 min, LINKS, NPT 10, ingwe Intel Xeon E5420@2.50GHz, GMX 4.0.5

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Srovnání rychlosti II - verze

- DHFR, NPT benchmark

cluster	verze	#CPU	ns/den
olwe	JAC, **4.0.7**.sp - gcc	48	21.602
olwe	JAC, **4.5-beta2**.sp - gcc	48	37.172
olwe	JAC, **4.5.1**.sp - gcc	48	**43.329**
ingwe	JAC 4.0.7.sp - **gcc**	8	14.00
ingwe	JAC 4.0.7.sp - **intel**	8	17.46
ingwe	JAC 4.0.7.**dp** - intel	8	11.68

sp,PME, grid 1.2 A, cut offs = 8 A, 2fs step, write to x-xtc,e-edr, log, opls all-atom ff, cpt_15 min, LINKS, NPT

Srovnání rychlosti – Amber na CPU

- ingwe

Program	#CPU	ns/den	ekviv CPU
Amber 10	2	1.76	2.00
Amber 10	4	3.21	3.64
Amber 10	8	4.80	5.46
GMX 4.0.7 dp	8	11.68	4.97
GMX 4.0.7 sp	8	17.46	5.80

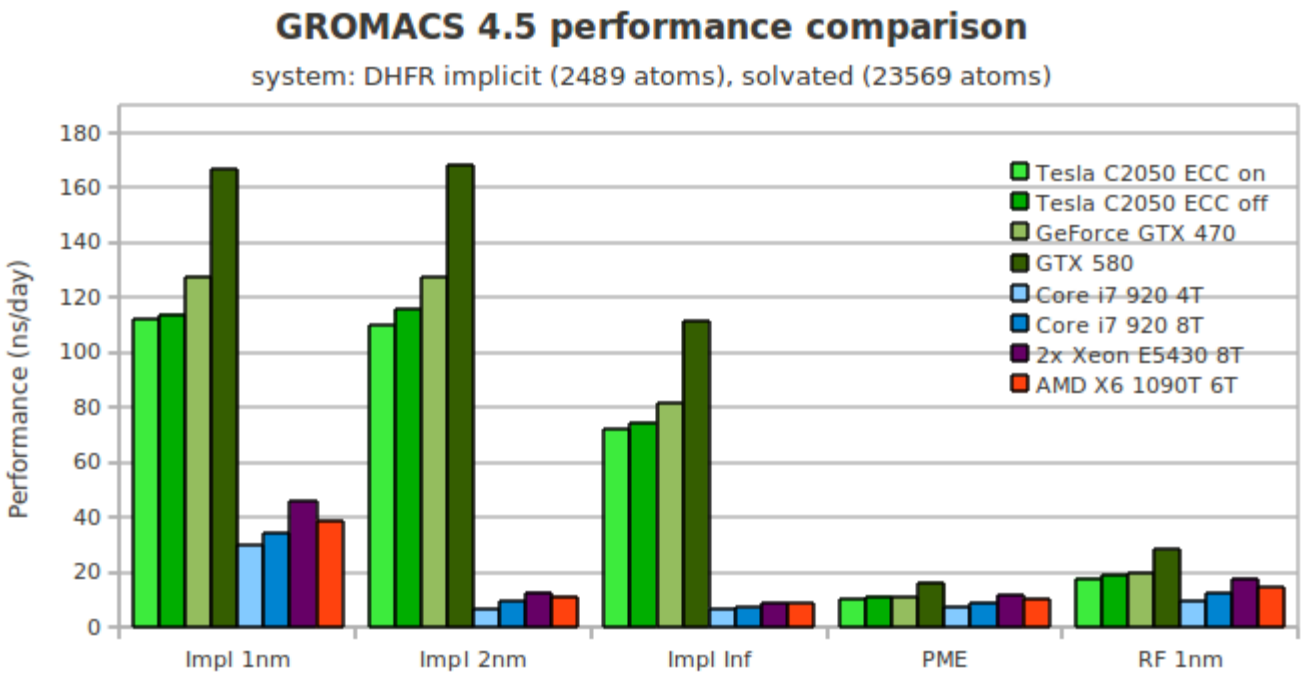
amber 10, PME, cut offs = 8, 2fs step, 2ps write log, 2 ps x-write, ffamber, SHAKE, NPT 10ps , 64x64x64 gridpoints

gmx 4.0.7, icc,PME, grid 1.2 A, cut offs = 8 A, 2fs step, 2ps x-write to xtc, 2ps log, opls all-atom ff, cpt_15 min, LINKS, NPT 10ps

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Srovnání rychlosti - GPU

- impl – implicitní solvent s cutoffem 1nm, 2nm, infinity
- PME – klasická explicitní simulace
- RF – reaction field elektrostatika, explicitní simulace



www.gromacs.org

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Gromacs - Free

- GNU GPL licence
- zdarma ke stažení na http://www.gromacs.org
- manuál a tutoriály na http://manual.gromacs.org
- aktivní uživatelská podpora gmx

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Obsah balení zadarmo - programy

- příprava simulací
  - velikost simulačního boxu, solvatace, protonace,…
- běh simulací
  - mdrun (včetně restartů simulací po pádu)
- převody
  - struktur, trajektorií, energií,…
- analýza
  - struktur, distribuční funkce, interakce, kinetické vlastnosti, normální módy, proteinů, volná energie

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Gromacs - Flexible

- human-readable
  - nápověda programů
  - hlavně většina souborů
  - simulační protokoly
  - úpravy kódu (C)

- koncept skupin atomů (groups)

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Flexible – simulační protokol

.mdp

nastavuje vlastnosti simulace

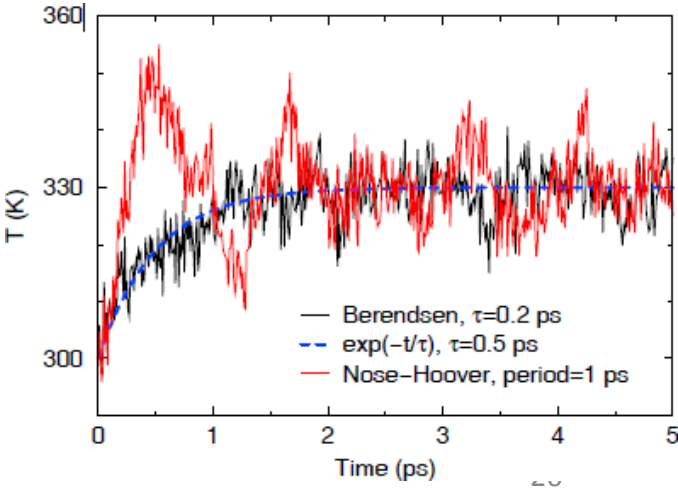
délku, krok, termostat, barostat,…

před spuštěním simulace GMX vypíše soubor **mdout.mdp** obsahující všechna nastavení

preprocessing (include, define)
run control (integrator, tinit, dt, nsteps, init_step, comm_mode,
langevin dynamics (bd_fric, ld_seed)
energy minimization (emtol, emstep, nstcgsteep)
shell molecular dynamics(emtol,niter,fcstep)
test particle insertion(rtpi)
output control (nstxout, nstvout, nstfout, nstlog, nstcalcenergy,
neighbor searching (nstlist, ns_type, pbc, periodic_molecules,
electrostatics (coulombtype, rcoulomb_switch, rcoulomb, epsil
VdW (vdwtype, rvdw_switch, rvdw, DispCorr)
tables (table-extension, energygrp_table)
Ewald (fourierspacing, fourier_nx, fourier_ny, fourier_nz, pme_
Temperature coupling (tcoupl, nsttcouple, tc_grps, tau_t, ref_t
Pressure coupling (pcoupl, pcoupltype, nstpcouple, tau_p, cor
simulated annealing (annealing, annealing_npoints, annealing
velocity generation (gen_vel, gen_temp, gen_seed)
bonds (constraints, constraint_algorithm, continuation, shake_t
Energy group exclusions (energygrp_excl)
Walls (nwall, wall_type, wall_r_linpot, wall_atomtype, wall_dens
COM pulling (pull, ...)
NMR refinement (disre, disre_weighting, disre_mixed, disre_fc
Free Energy calculations (free_energy, init_lambda, delta_lan
Non-equilibrium MD (acc_grps, accelerate, freezegrps, freeze
Electric fields (E_x, E_xt, E_y, E_yt, E_z, E_zt)
Mixed quantum/classical dynamics (QMMM, QMMM-grps, Q
Implicit solvent (implicit_solvent, gb_algorithm, nstgbradii, rgb
User defined thingies (user1_grps, user2_grps, userint1, user

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

- Termostaty
  - Berendsen (rychlé zchlazování systému, neprodukuje kanonický soubor s chybou 1/N, vede k špatným tepelným kapacitám,
  - V-Rescale (v podstatě opravený Berendsen pomocí stochastického členu, kanonický soubor)
  - Nosé-Hoover (ergodický, ale nestabilní k velkým výchylkám - osciluje)
  - pozor na paradox zmraženého solutu a zahřátého solventu – dá se překonat pomocí skupin pro jednotlivé části systému
- Barostaty
  - Berendsen (rychlá, pro malé systémy nedává NPT soubor, lze s povrchovým napětím)
  - Parinello-Rahman (analogie Nosé-Hoovera)
- Integrátory
  - leap-frog, velocity-verlet, langevin a další…



evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Flexible – souřadnice

.gro

fixní tvar souboru:

```
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                91 -0.7791
1                177   1.568   1.613 -0.9045 -2.6469  1.3180
2WATER                0.053   0.622  0.2519  0.3140 -0.1734
2WATER  HW2                2   0.680 -1.0641 -1.134
2WATER  HW3    6                    1.9427 -0.821
1.82060   1.82060   1.82060
```

komentář

počet atomů

xyz souřadnice

číslo molekuly/residua

atomy

název molekuly/residua

název atomového typu

xyz rychlosti (nepovinné)

číslo atomu (nekontrolováno)

velikost boxu

základní jednotka = nm

snadný převod do pdb – editconf

Flexible – trajektorie

.trr

komprimovaný soubor

souřadnice, rychlosti, síly, energie

tak často jak je specifikováno v .mdp

.xtc

přenosný formát souřadnic

xdr knihovna pro uchovávání dat na *NIX NFS systému

(jako integer čísla – násobení 1000x)

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Flexible – silová pole

Amber 94, 96, 99, 99sb, 99sb-ildn, 03, GS

Charmm 27

Encad S,V

GMX

Gromos 43a1, 43a2, 45a3, 53a5, 53a6,

OPLS-AA/P

MARTINI

+ lze připravit vlastní

Flexible – silová pole

.itp -

seznam parametrů vazebných, i nevazebných

volání z topologie:

#include ffnb.itp

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Flexible – topologie

.top

```
[ defaults ]
; nbfunc    comb-rule   gen-pairs fudgeLJ fudgeQQ
  1         1           no        1.0     1.0
; The force field files to be included
#include "rt41c5.itp"
[ moleculetype ]
; name  nrexcl
Urea         3
[ atoms ]
;   nr    type   resnr  residu    atom    cgnr  charge
     1       C       1    UREA      C1       1   0.683
     2       O       1    UREA      O2       1  -0.683
     3      NT       1    UREA      N3       2  -0.622
     4       H       1    UREA      H4       2   0.346
     5       H       1    UREA      H5       2   0.276
[ bonds ]
;  ai    aj funct           c0           c1
    3     4     1 1.000000e-01 3.744680e+05
    1     2     1 1.230000e-01 5.020800e+05
    1     3     1 1.330000e-01 3.765600e+05
[ pairs ]
;  ai    aj funct           c0           c1
    2     4     1 0.000000e+00 0.000000e+00
[ angles ]
;  ai    aj    ak funct           c0           c1
    1     3     4     1 1.200000e+02 2.928800e+02
    2     1     3     1 1.215000e+02 5.020800e+02
[ dihedrals ]
;  ai    aj    ak    al funct      c0         c1      c2
    2     1     3     4     1 1.80e+02 3.3472e+01 2.0e+00
[ dihedrals ]
;  ai    aj    ak    al funct           c0           c1
    3     4     5     1     2 0.000000e+00 1.673600e+02
; Include SPC water topology
#include "spc.itp"
[ system ]
Urea in Water
[ molecules ]
Urea        1
SOL         1000
```

Flexible – pdb2gmx

.ff – na tvorbu topologie

share/top adresář a aktuální adresář

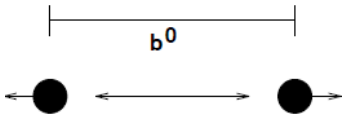
- <basename>.rtp
  - popis residua/molekuly
- <basename>.r2b (optional)
  - pojmenovávání residuí
- <basename>.arn (optional)
  - převody mezi jmény atomů
- <basename>.hdb (optional)
  - jak a kde jsou navázané vodíky
- <basename>.n.tdb (optional)
- <basename>.c.tdb (optional)
  - ukončení řetězce (pro proteiny)
- <basename>.vsd (optional)
  - definice virtual site
- specbond.dat

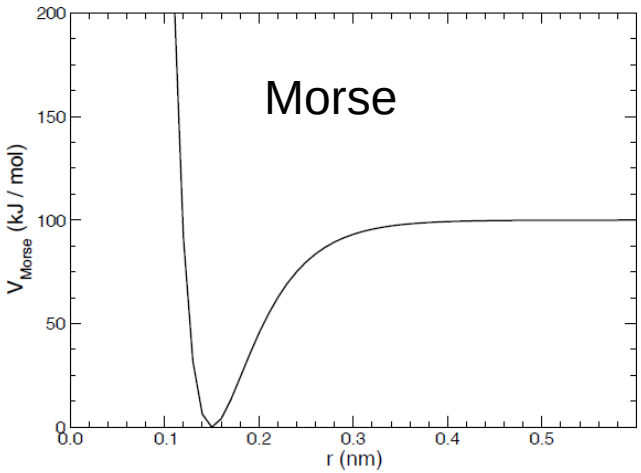
```
.rtp
[ bondedtypes ]  ; mandatory
; bonds  angles  dihedrals  impropers
     1       1          1          2  ; mandatory
[ GLY ]  ; mandatory
 [ atoms ]  ; mandatory
; name  type  charge  chargegroup
     N     N  -0.280     0
     H     H   0.280     0
    CA   CH2   0.000     1
     C     C   0.380     2
     O     O  -0.380     2
 [ bonds ]  ; optional
;atom1 atom2      b0      kb
     N     H
     N    CA
    CA     C
     C     O
    -C     N
 [ exclusions ]  ; optional
;atom1 atom2
 [ angles ]  ; optional
;atom1 atom2 atom3    th0    cth
 [ dihedrals ]  ; optional
;atom1 atom2 atom3 atom4   phi0     cp   mult
 [ impropers ]  ; optional
;atom1 atom2 atom3 atom4     q0     cq
    N    -C    CA     H
   -C   -CA     N    -O
```

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

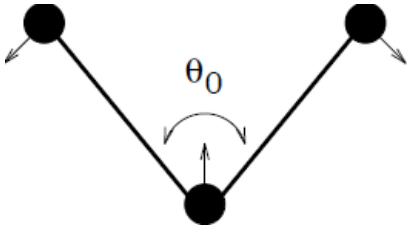
Flexible – varianty potenciálů

- Vazebné potenciály
  - Vazby
    - harmonické $[(r_{ij} - b_{ij})^2]$
    - 4.řádu $[(r_{ij}^2 - b_{ij}^2)^2]$
    - Morseho potenciál $[(1 - \exp(r_{ij}-b_{ij}))^2]$
    - FENE potenciál (coarse-grainy – elastic)
    - Tabelované





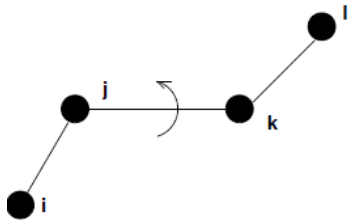
  - Úhly
    - harmonický $[(\theta_{ij} - \theta_{ij}^0)^2]$
    - cosin $[(\cos \theta_{ij} - \cos \theta_{ij}^{0)2}]$
    - Urey-Bradley $[(r_{ij} - b_{ij})^2 \cdot (\theta_{ij} - \theta_{ij}^0)^2]$ (CHARMm)
    - quartic $[\Sigma_n^5(\theta_{ij} - \theta_{ij}^0)^n]$
    - Tabelované

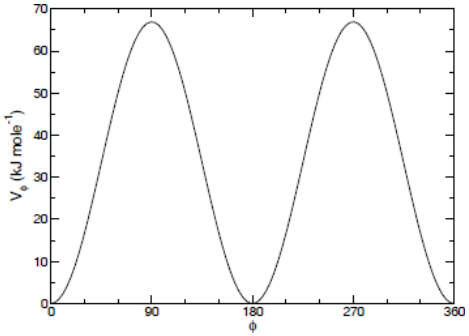


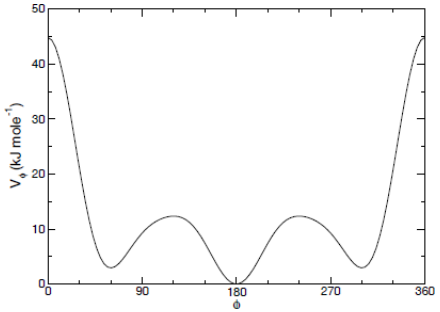
evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Flexible – varianty potenciálů II

- Vazebné potenciály
  - Nepravé dihedrály – udržení planarity
    - Harmonické $[(\phi_{ij} - \phi_{ij}^0)^2]$ (nespojitý v 180°)
    - Periodické
    - Tabelované
  - Dihedrály
    - periodický $[(1 + \cos(n\phi - \phi_s))]$
    - Ryckaert-Bellemans $[\Sigma_n^5(\cos\phi)^n]$
    - Fourrier (OPLS, ale interně se počítají jako RB)
    - Tabelované







Ryckaert-Bellemans

Jednotky: úhly v deg, silové konstanty kJ/mol/rad^2, 0 odpovídá cis konfiguraci

Flexible – varianty potenciálů III

Nevazebné potenciály

- Elektrostatika
  - Coulombický $[q_i \cdot q_j / r_{ij}]$
  - Tabelovaný $[q_i \cdot q_j / f(r_{ij})]$
- Van der Waals
  - Lennard-Jones ($1/r^{12} - 1/r^6$, dvě varianty: A,B ; ε,σ)
  - Buckingham (exponenciální repulze)
  - tabelovaný $[f_R(r_{ij}) - f_D(r_{ij})]$

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Flexible – polarizace

přidání shell částic k jednotlivým atomům a virtuálním místům

v každém kroku je minimalizovaná energie shell částice, aby se zachoval Born-Oppenheimerův povrch

metody

- jednoduchá polarizace (harmonický potenciál s ekvilibriem v 0)
- vodní polarizace (anizotropická polarizace jednotlivých shell částic)
- Tholeho polarizace (utlumení intramolekulární polarizace)

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Flexible – template.c

možnost napsat vlastní analyzační nástroj /share/template/template.c

většina kódu je v C

existují i Pythonovské knihovny

evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Shrnutí

Gromacs

Fast – spousta optimalizovaných algoritmů na zrychlení

Free – GNU/GPL, spousta nástrojů zdarma

Flexible – velké možnosti simulačních podmínek, volby silových polí a potenciálů (i bez programování), úprav topologie, úprav čitelného a dobře zdokumentovaného kódu

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Poděkování

- autorům Gromacsu:
  - David van der Spoel
  - Erik Lindahl
  - Berk Hess

  a dalším …

- projektu „Pokročilé vzdělávání ve výzkumu a aplikacích nanomateriálů“, který je financován Evropským sociálním fondem a rozpočtem České republiky.

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Děkuji Vám za pozornost