

GROMACS und das GMX Plugin

Julia Epp
10.07.2013

Inhaltsverzeichnis

- GROMACS
 - Entwicklung
 - Aufbau
 - Funktionsweise
 - Periodic Boundaries und Gruppen
 - Potentialfunktionen
 - Workflow
 - Topologie Datei
- CELLmicrocosmos Gromacs Plugin
 - Entwicklung
 - Aufbau
 - Netzwerkeinstellungen und JobList
 - Job Einstellungen
 - Job-Monitor
 - Datei Import
 - Anwendungsbeispiel

GROMACS

Entwicklung

- GROMACS GROningen MAchine for Chemical Simulations
- GROMACS wird hauptsächlich für molekulardynamische Simulationen genutzt
- Entwicklung Anfang 1990er Jahre an der Universität Groningen (Niederlande)
- Weitere Entwicklung an verschiedenen Universitäten, u.a. der Universität Uppsala oder der Universität in Stockholm
- Das Programm ist ein Linux-Paket und läuft unter der General Public License

Aufbau

- Bedienung über die Konsole
- Hauptsächlich C-Funktionen mit einigen Ausnahmen
 - durch effizienten Algorithmus wird eine schnellere Berechnung ermöglicht
- Der Output der Berechnungen ist zur Visualisierung nicht an ein bestimmtes Programm gebunden (z.B. PyMOL oder VMD)
- GROMACS bedient sich der Molekülmechanik (klassische Mechanik) Grundformel: $F=ma$
- Komplizierter aber genauer ist eine quantenmechanische Berechnung (Schrödinger-Gleichungen)
 - wird jedoch aufgrund des zu hohen Rechenaufwands nicht eingesetzt

Funktionsweise

Periodic Boundaries und Gruppen

- GROMACS setzt für die Simulation so genannte triklone Boxen ein, um Randeffekte zu minimieren
- Es gibt Gruppen in denen bestimmte Moleküle eingeordnet werden:
 - Temperature-Coupling Gruppen (Einstellung von Referenztemperaturen und Freiheitsgrade)
 - Freeze-Gruppen (Simulation fester Strukturen)

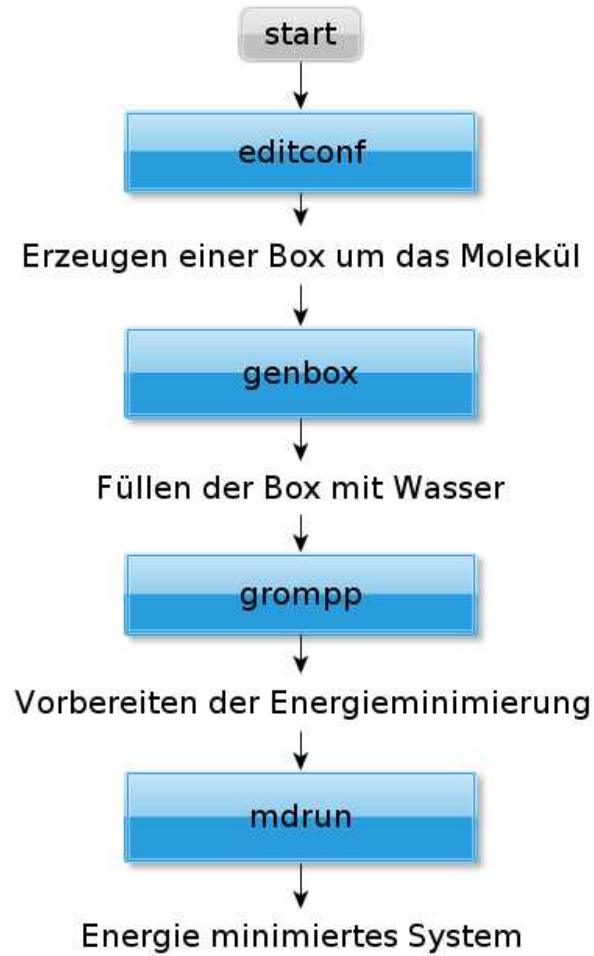
Force Fields

- eigentliche Atombewegung werde mit verschiedener Force Fields berechnet
- Enthaltene Potenzialfunktionen lassen sich in 3 verschiedene Bereiche

$$\begin{aligned}
 E_{tot} = & \sum_{bonds} k_b (r - r_0)^2 + \sum_{angle} k_\alpha (\alpha - \alpha_0)^2 \\
 & + \sum_{UB} K_{1-3} (r^{1-3} - r_0^{1-3})^2 \\
 & + \sum_{improper} k_\gamma (\gamma - \gamma_0)^2 \\
 & + \sum_{dihedrals} V [\cos(n\tau - \tau_0) + 1] \\
 & + \sum_{nonbonded} \left\{ \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \right\}
 \end{aligned}$$

- Nicht gebundene Interaktionen
- Gebundene Interaktionen
- Einschränkende Bedingungen

Workflow



Topologie Datei

Listing 2.1: Eine Topologie Datei

```
1      ; Include forcefield parameters
2      #include "ffG45a3.itp"
3
4      ; Include Content
5      #include "lipidsFFG45a3.itp"
6      #include "ions.itp"
7
8      ; include water
9      #include "flexspce.itp"
10
11     ;System Name
12     [System]
13     lipids in water
14
15     ; Anzahl der Mol in der pdb in gleicher reihenfolge
16     [molecules]
17     CDN          10
18     DPC          15
19     POC          14
20     SOL          6341
```

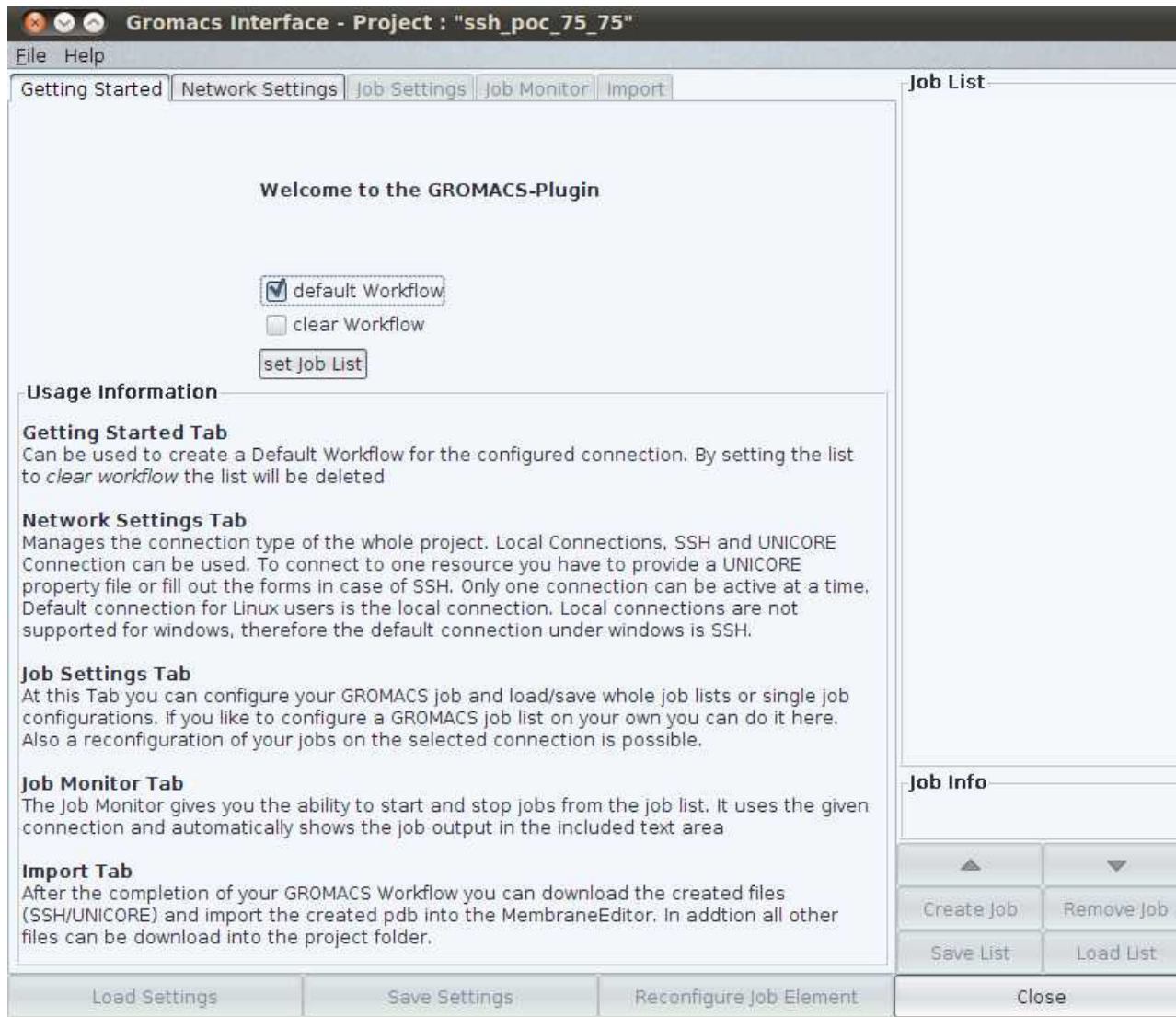
CELLmicrocosmos Gromacs Plugin

Entwicklung

- Entwickelt von Sebastian Rubert im Rahmen seiner Masterarbeit und einem vorangegangenen Projekt
- Grund: Im CmME können keine molekulardynamischen Simulationen vorgenommen werden
- Der GROMACS-Algorithmus kann auf eine im CmME erzeugten Lipidmembran angewandt werden

Aufbau

Start



Netzwerkeinstellungen

Network Settings

Connection State

OFFLINE

☐ Use the local machine

☒ Connect via ssh

SSH Settings

host

host

user

user

password

•••

remoteWorkingDir

/home/user/gromacs_projects/

remoteExecutablePath

/home/user/gromacs_install_dir/

Upload File

membrane.pdb

Upload Files

☒ Connect via uncore

Unicore Settings

app version

4.5.3

property file

tian/Master_Arbeit/unicore/unicore.properties

Upload File

membrane.pdb

Choose File

Delete Storage Folder

Upload Files

Connect

Disconnect

retrieve job status

Job Einstellungen und JobList

Gromacs Interface - Project : "local_poc_100_100"

File Help

Getting Started Network Settings Job Settings Job Monitor Import

editConfOptions genBoxOptions gromppOptions mdrunOptions mdpEditor

Files

☒ -f (in)

☒ -o (out)

☐ -n (in, opt)

Advanced Options:

☐ -w ☐ -ndef ☐ -c ☐ -princ

☐ -vol ☐ -pbc ☐ -mead ☐ -grasp

☐ -atom ☐ -legend

☒ -box (, ,) ☐ -angles , ,)

☐ -center , ,) ☐ -translate , ,)

☐ -rotate , ,) ☐ -scale , ,)

☐ -d ☐ -density ☐ -rvdw ☐ -label

Boxtype:

☐ -bt (opt)

Command Line:

```
editconf -box 10 10 10 -f
/home/sebastian/Cm2_Workspace/gromacsFiles/local_poc_100_100/membrane.pd
b -o /home/sebastian/Cm2_Workspace/gromacsFiles/local_poc_100_100/box.pdb
```

Job List

- editconf_0(local)
- genbox_1(local)
- grompp_2(local)
- mdrun_3(local)
- grompp_4(local)
- mdrun_5(local)
- grompp_6(local)
- mdrun_7(local)

Job Info

connection type OK

▲ ▼

Create Job Remove Job

Save List Load List

Load Settings Save Settings Reconfigure Job Element Close

Job-Monitor

The screenshot displays the 'Gromacs Interface - Project : "local_cdn_dpc_poc_75_75"' window. The 'Job Monitor' tab is active, showing a list of jobs and their progress. The 'Gromacs Info' section displays simulation parameters for steps 5 through 22. The 'Job List' section shows a list of jobs, with 'mdrun_3(local)' highlighted. The 'Job Info' section is currently empty. The 'Connection Type' is set to 'LOCAL Connection'. The 'Processing request ...' bar is active. The 'start', 'stop', and 'clear Output' buttons are visible. The 'Load Settings', 'Save Settings', and 'Reconfigure Job Element' buttons are at the bottom. The 'Create Job', 'Remove Job', 'Save List', 'Load List', and 'Close' buttons are on the right.

Gromacs Info

Step= 5, Dmax= 2.1e-02 nm, Epot= 1.64387e+07 Fmax= 2.47792e+08, atom= 4471
Step= 6, Dmax= 2.5e-02 nm, Epot= 1.06151e+07 Fmax= 6.43030e+07, atom= 969
Step= 7, Dmax= 3.0e-02 nm, Epot= 5.55760e+06 Fmax= 2.14426e+07, atom= 4471
Step= 8, Dmax= 3.6e-02 nm, Epot= 3.15684e+06 Fmax= 5.09459e+06, atom= 969
Step= 9, Dmax= 4.3e-02 nm, Epot= 1.62417e+06 Fmax= 1.11891e+06, atom= 4471
Step= 10, Dmax= 5.2e-02 nm, Epot= 7.26072e+05 Fmax= 1.59994e+06, atom= 969
Step= 11, Dmax= 6.2e-02 nm, Epot= 4.33843e+05 Fmax= 8.92812e+05, atom= 968
Step= 12, Dmax= 7.4e-02 nm, Epot= 1.90466e+05 Fmax= 1.02106e+06, atom= 4471
Step= 13, Dmax= 8.9e-02 nm, Epot= 1.49460e+05 Fmax= 4.82423e+06, atom= 968
Step= 14, Dmax= 1.1e-01 nm, Epot= 5.37059e+04 Fmax= 9.18785e+05, atom= 4472
Step= 15, Dmax= 1.3e-01 nm, Epot= 1.15875e+05 Fmax= 1.13520e+07, atom= 4472
Step= 16, Dmax= 6.4e-02 nm, Epot= -8.02294e+04 Fmax= 3.72969e+05, atom= 4471
Step= 17, Dmax= 7.7e-02 nm, Epot= -1.21031e+04 Fmax= 7.18283e+05, atom= 4471
Step= 18, Dmax= 3.9e-02 nm, Epot= -1.13738e+05 Fmax= 3.37020e+05, atom= 4471
Step= 19, Dmax= 4.6e-02 nm, Epot= 2.24155e+05 Fmax= 8.77878e+05, atom= 2328
Step= 20, Dmax= 2.3e-02 nm, Epot= -1.06807e+05 Fmax= 3.29872e+05, atom= 2328
Step= 21, Dmax= 1.2e-02 nm, Epot= -1.51011e+05 Fmax= 1.29014e+05, atom= 4471
Step= 22, Dmax= 1.4e-02 nm, Epot= -1.63955e+05 Fmax= 1.60363e+05, atom= 2328

Job List

- editconf_0(local)
- genbox_1(local)
- grompp_2(local)
- mdrun_3(local)
- grompp_4(local)
- mdrun_5(local)
- grompp_6(local)
- mdrun_7(local)

Job Info

Processing request ...

Connection Type

LOCAL Connection

start

stop

clear Output

Load Settings

Save Settings

Reconfigure Job Element

Create Job

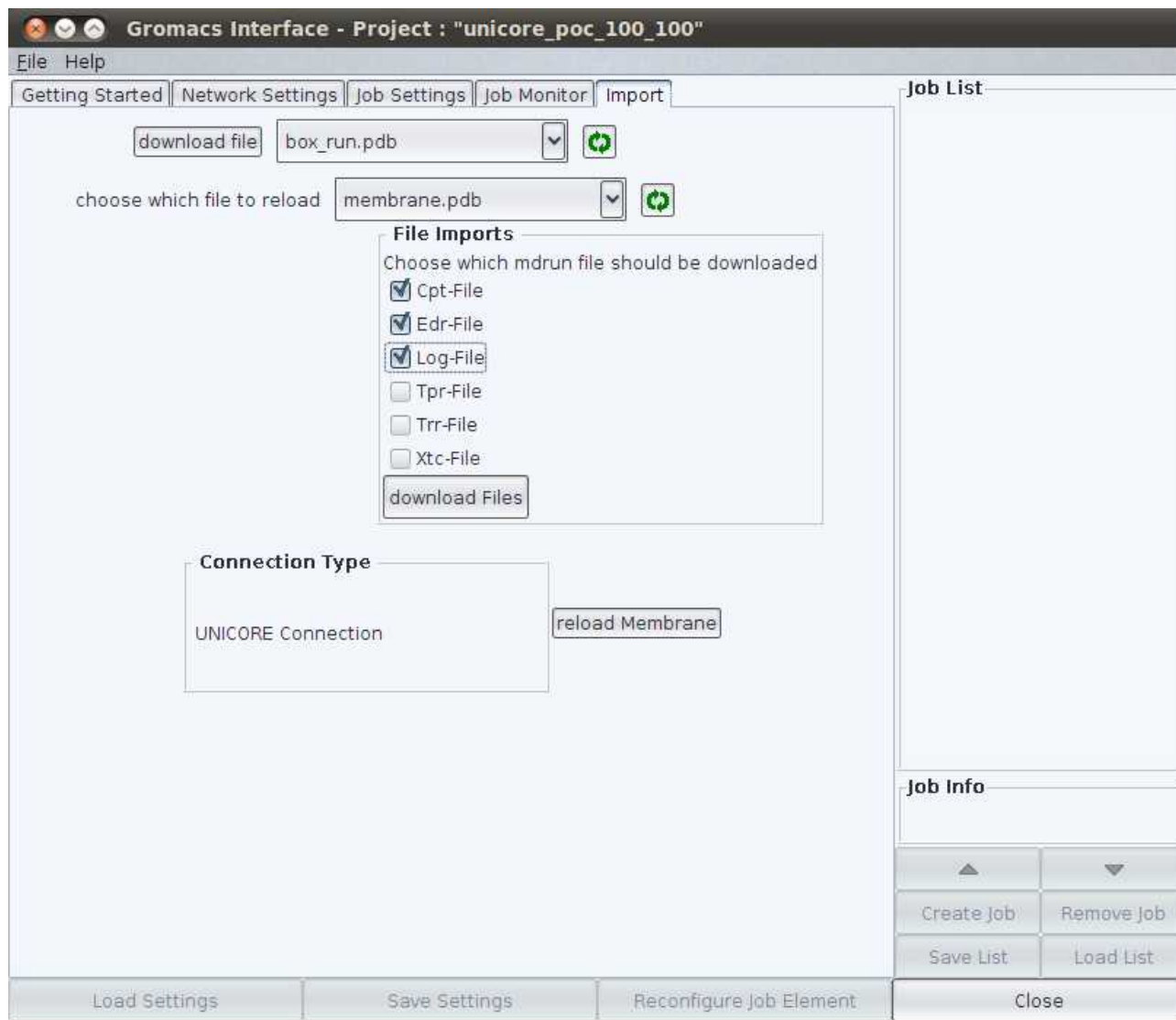
Remove Job

Save List

Load List

Close

Datei Import



Anwendungsbeispiel

Literatur

- *Rubert Sebastian: Entwicklung eines CELLmicrocosmos 2.2 MembraneEditor Plugins zur Verwaltung von molekulardynamischen GROMACS- Simulationen in Cluster-Umgebungen*
- *Lukat Gunther: Diplomarbeit im Studiengang Naturwissenschaftliche Informatik: Entwurf eines Programms zur Voronoi-Diagramm-unterstützten Analyse von Membransimulationen*
- *<http://www.chemie1.uni-rostock.de/pci/paschek/LECTURE/index.html>*
- *http://www.bpc.uni-frankfurt.de/guentert/wiki/index.php/MD_Simulation*
- *<http://de.inforapid.org/index.php?search=GROMACS>*
- *http://www.physik.uni-luebeck.de/~paulsen/Bachelorarbeit_Glanert_2010.pdf*
- *http://www.icp.uni-stuttgart.de/~icp/mediawiki/images/5/50/Hs0910_buechele_ausarbeitung.pdf*

Danke für die
Aufmerksamkeit