

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 **GRO**ningen **MA**chine for **C**hemical 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 trikline 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)

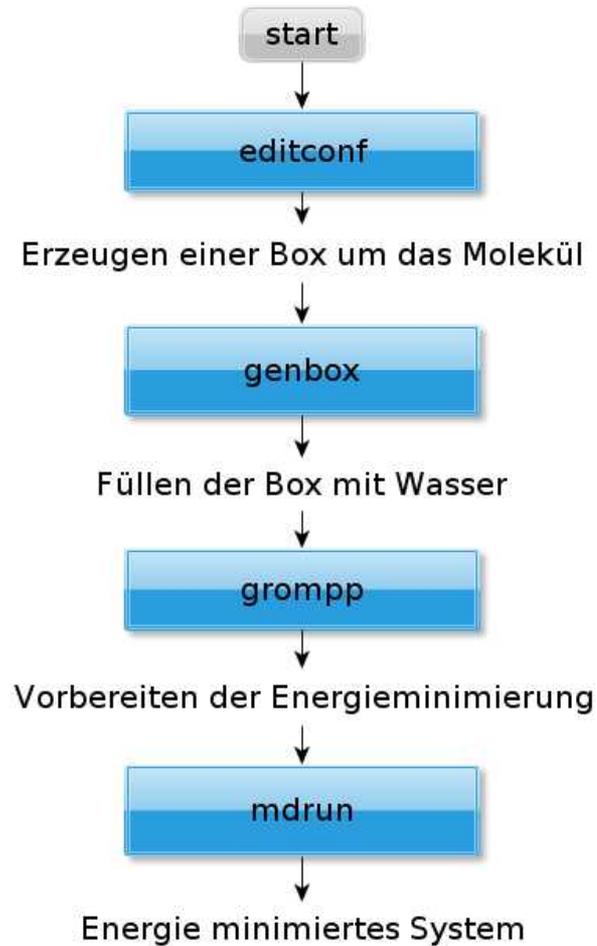
Force Fields

- 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
```

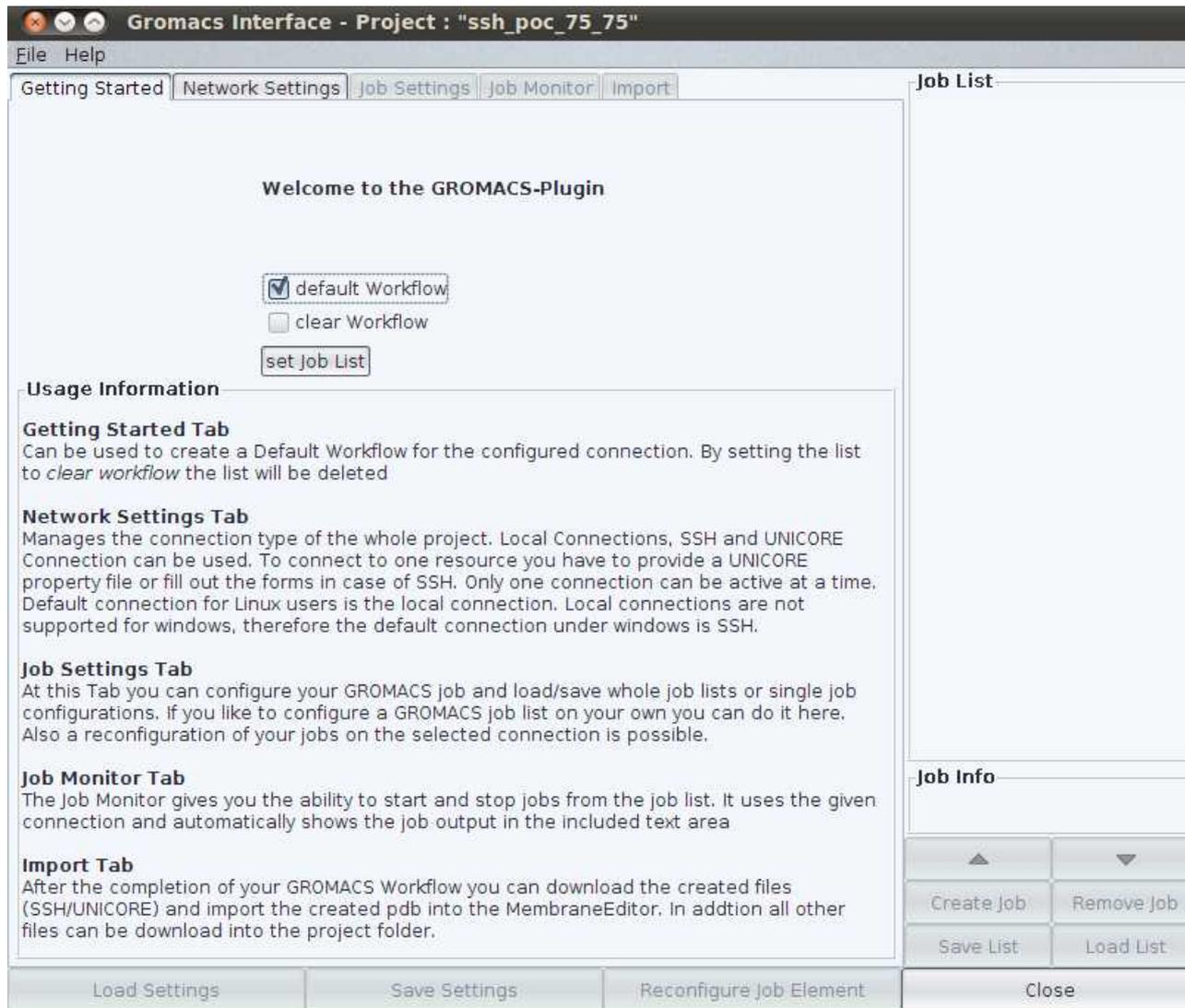
CELLmicrocosmos Gromacs Plugin

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

Use the local machine

Connect via ssh

SSH Settings

host	<input type="text" value="host"/>
user	<input type="text" value="user"/>
password	<input type="password" value="•••"/>
remoteWorkingDir	<input type="text" value="/home/user/gromacs_projects/"/>
remoteExecutablePath	<input type="text" value="/home/user/gromacs_install_dir/"/>

Connect via uniconore

Uniconore Settings

app version	<input type="text" value="4.5.3"/>
property file	<input type="text" value="tian/Master_Arbeit/uniconore/uniconore.properties"/>

Job Einstellungen und JobList

The screenshot displays the Gromacs Interface window titled "Gromacs Interface - Project : 'local_poc_100_100'". The interface includes a menu bar (File, Help) and a toolbar with buttons for "Getting Started", "Network Settings", "Job Settings", "Job Monitor", and "Import". Below the toolbar are tabs for "editConfOptions", "genBoxOptions", "gromppOptions", "mdrunOptions", and "mdpEditor".

The "Files" section contains input fields for job parameters:

- f (in) membrane.pdb
- o (out) box.pdb
- n (in, opt)

The "Advanced Options:" section features several checkboxes and numerical input fields:

- w, -ndef, -c, -princ
- vol, -pbc, -mead, -grasp
- atom, -legend
- box (10, 10, 10)
- angles 90, 90, 90
- center 0, 0, 0
- translate 0, 0, 0
- rotate 0, 0, 0
- scale 1, 1, 1
- d 0
- density 0
- rvdw 0
- label

The "Boxtype:" section has a dropdown menu for "-bt (opt)" set to "tric".

The "Command Line:" section shows the generated command:

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

On the right side, the "Job List" panel shows a list of job elements:

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

The "Job Info" section displays "connection type OK". At the bottom right, there are buttons for "Create Job", "Remove Job", "Save List", and "Load List".

The bottom of the window features a row of buttons: "Load Settings", "Save Settings", "Reconfigure Job Element", and "Close".

Job-Monitor

Gromacs Interface - Project : "local_cdn_dpc_poc_75_75"

File Help

Getting Started Network Settings Job Settings Job Monitor Import

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
```

Processing request ...

Connection Type

LOCAL Connection

start

stop

clear Output

Load Settings Save Settings Reconfigure Job Element

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

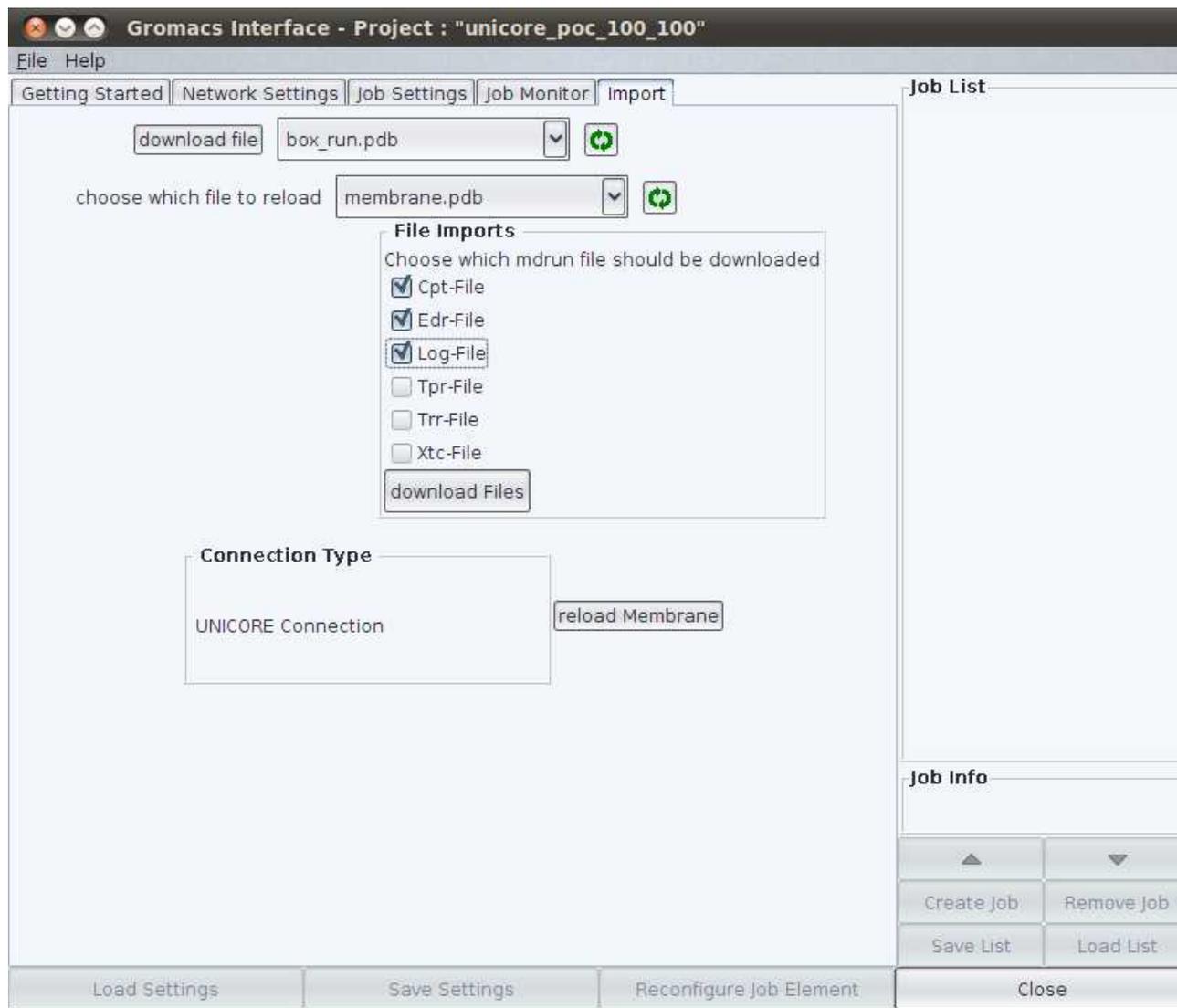
▲ ▼

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