

Master M2

TD de Modélisation multi-échelle

Voici des extraits de fichiers d'entrée de programme de dynamique moléculaire.

Pour chaque extrait identifier (si pertinent):

- Le type de simulation (minimisation ou dynamique)
- la durée du temps de pas
- la durée de la dynamique
- Le nombre de pas pour l'ensemble de la dynamique
- Tous les combien de pas les coordonnées, vitesses et énergies sont stockées.
- L'ensemble thermodynamique dans lequel est fait le calcul
- La taille de la boîte d'eau
- Le nombre d'atomes
- Le champ de force utilisé
- Les contraintes et thermostats utilisés
- Les rayons de coupure utilisés
- Quelles sont les unités par défaut de temps et de longueur pour chaque logiciel ?

Exemple d'un fichier d'entrée du programme Tinker : input.key

```
#forcefield
parameters /home/aminoia/tinker/params/oplsaa.prm

#additional oplsaa parameters for pdmaema from gromacs oplsaa
atom      251      1      CT      "CH2 pdmaema"      6      12.000      4
charge    251 -0.06

#periodic cell specifications
a-axis 150
b-axis 122.9756
c-axis 150

#cutoffs
cutoff 15

#electrostatic
ewald

#thermostats and coupling
thermostat andersen
tau-temperature 0.1

#constraints
rattle
inactive -1 2000
```

Exemple d'un fichier d'entrée du programme Gromacs :

```
-----run.mdp-----  
integrator      = md  
nsteps         = 5000  
dt             = 0.002  
nstlist        = 10  
rlist          = 1.0  
coulombtype    = pme  
rcoulomb       = 1.0  
cutoff-scheme  = verlet  
vdw-type       = cut-off  
rvdw           = 1.0  
tcoupl         = v-rescale  
tc-grps        = protein non-protein  
tau-t          = 0.1 0.1  
ref-t          = 298 298  
nstxtcout      = 1000  
nstenergy      = 1000  
constraints    = all-bonds  
-----
```

Exemple d'un fichier d'entrée Gromacs :

```
-----em.mdp-----  
integrator      = steep  
nsteps         = 200  
nstlist        = 10  
cutoff-scheme  = verlet  
vdw-type       = cut-off  
  
rvdw           = 1.0  
coulombtype    = pme  
rcoulomb       = 1.0  
-----
```

Exemple d'un fichier Amber :

```
Minimize  
&cntrl  
  imin=1,  
  ntx=1,  
  irest=0,  
  maxcyc=2000,  
  ncyc=1000,  
  ntp=100,  
  ntwx=0,  
  cut=8.0,  
/
```

Exemple d'un fichier Amber :

```
Production
&cntrl
  imin=0,
  ntx=5,
  irest=1,
  nstlim=30000,
  dt=0.002,
  ntf=2,
  ntc=2,
  temp0=300.0,
  ntp=100,
  ntwx=100,
  cut=8.0,
  ntb=2,
  ntp=1,
  ntt=3,
  gamma_ln=2.0,
  ig=-1,
/
```

Exemple d'un fichier d'entrée du programme LAMMPS :

```
# Solvated 5-mer peptide

units          real
atom_style     full

pair_style     lj/charmm/coul/long 8.0 10.0 10.0
bond_style     harmonic
angle_style    charmm
dihedral_style charmm
improper_style harmonic
kspace_style   ppm 0.0001

read_data      data.peptide

neighbor       2.0 bin
neigh_modify   delay 5

timestep       2.0

thermo_style   multi
thermo         50

fix            1 all nvt temp 275.0 275.0 100.0 tchain 1
fix            2 all shake 0.0001 10 100 b 4 6 8 10 12 14 18 a 31

group          peptide type <= 12
dump           1 peptide atom 10 dump.peptide

run            300
```