

## Laboratorio 2 - (27 marzo 2007)

### 1 Strumenti di calcolo

#### 1.1 ripasso shell

1. Ripassare la tabella sul reindirizzamento di input e output e sulla pipeline

#### 1.2 ripasso gnuplot

#### 1.3 grafica molecolare: vmd

### 2 Simulazioni con ORAC

#### 2.1 il programma ORAC

#### 2.2 copia dei file di dati

1. Creare la directory `~orac` e copiarci tutto il contenuto di `/home/signorini/biomol/orac`
2. Osservare il contenuto delle varie directory

#### 2.3 la deca-alanina

Visualizzare la molecola aprendo il file `~orac/pdb/ala.pdb` con `vmd`

#### 2.4 simulazione di deca-alanina a 300 K nel vuoto (E,V=cost).

1. portarsi in `~/orac/Ala300`; si analizza il file di input di ORAC (`Ala.in`), in particolare i seguenti blocchi:

- `&SETUP`
- `&PARAMETERS`
- `&SIMULATION`
- `&RUN`
- `&INOUT`

2. lanciare il programma con output sullo schermo

```
orac < Ala.in
```

3. lanciare il programma con output su file

```
orac < Ala.in > Ala.out
```

4. analizzare l'output

5. trasformare il file della traiettoria (PDB) per poterlo visualizzare in `vmd`

```
grep -v REMARK 15.pdb > a.pdb  
sed 's/TER/END/' a.pdb > b.pdb
```

o meglio usando una pipeline

6. Visualizzare il risultato in `vmd`