Corso di Laurea Specialistica in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2006/2007

Laboratorio 6 - (15 maggio 2007)

1 Strumenti UNIX

1.1 plot

 $\dot{\rm E}$ un comando (fatto da noi) per potere diagrammare file di dati da riga di comando. $\dot{\rm E}$ un'interfaccia per gnuplot.

1.2 avg

Di una colonna di dati, fa la media, $\sigma,$ etc.

2 Simulazione con dinamica guidata nel vuoto.

2.1 Run con t=20ps in parallelo

- 1. Creare la directory ~/orac/Ala_steer/
- 2. Dalla directory ~signorini/biomol/orac/Ala_steer copiare in questa directory:
 - (a) il file di input, N.in
 - (b) il file di restart, Ala.rst.N
 - (c) il file binario parametri+topologia, ala.prmtpg

 $\mathrm{con}\; N=1,2,\ldots$

3. notare la parte dell'input che controlla la dinamica guidata:

```
&POTENTIAL

ADD_STR_BONDS 1 102 500.0 15.9 31.5

...

&END

...

%LNOUT

...

PLOT STEER 16.0 OPEN N.wrk

&END

&RUN

...

STEER 2000. 22000.
```

4. lanciare il programma (dovrebbe durare pochi minuti):

orac < N.in > N.out &

2.2 confronto con altri run

1. estrarre i dati diagrammabili dal file N.wrk:

grep bond N.wrk > N.plt

2. diagrammare energia in funzione della distanza; si può fare in modo compatto con

plot N.plt -5,7

- 3. copiare N.plt e N.pdb sulla directory ~signorini/tmp/
- 4. diagrammare tutte le curve:

plot ~signorini/tmp/?.plt -5,7

2.3 calcolare media e σ

1. Preparare un file con tutti i lavori finali:

tail -1 ~signorini/tmp/?.plt| awk '/bond/ {print \$NF}' > dw

2. si calcolano media e σ :

$$\bar{w} = \frac{1}{N} \sum w_i$$
$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum (w_i - \bar{w})^2}$$
$$\Delta G = \bar{w} - \frac{\beta \sigma^2}{2}$$

3. Media e σ si possono calcolare anche direttamente con

avg dw

4. Es
attamente, la formula per il ΔG è

avg dw |awk 'NR==2 {print \$2-.2*\$4}'

2.4 ripetere con t=50 ps

Per non sovrascrivere sui dati a 20ps, creare una sottodirectory 20 e copiarci tutti i file *.plt *.pdb *.out

3 Visualizzazione e calcolo degli spostamenti atomici (RMSD)

3.1 preparare il file della traiettoria

• filtrare il file PDB prodotto da ORAC con il comando pdb2vmd

3.2 caricare solo la prima e ultima istantanea

- 1. caricare la traiettoria; poi distruggere dalla seconda istantanea in poi con Molecule > Delete frames
- 2. ricaricare come nuova molecola la stessa traiettoria distruggendo tutte le istantanee meno l'ultima
- 3. per entrambe le rappresentazioni scegliere ad es. Drawing method: tube e Coloring method: ColorID
- 4. In VMD Main, selezionare la prima molecola come T (top); magari rinominare la due molecole come first e last

3.3 calcolo RMSD

- 1. Da VMD Main > Extensions > Analysis scegliere RMSD Calculator
- 2. Nella finestra in alto a sx eseguire una selezione (ad es. all, o protein)
- 3. Verificare che nella finestra in basso a sx sono elencate le due molecole. Altrimenti premere il bottone All in memory
- 4. Calcolare gli RMSD pigiando il bottone relativo
- 5. Ripetere, dopo avere allineato (minimizzato le distanze tra gli atomi selezionati) con Align
- 6. Calcolare in questo modo gli RMSD tra tutte le configurazioni finali ottenute con uno stesso tempo di tiraggio