

1 Chignolina: minimizzazione energia

Si può eseguire la minimizzazione

- con due metodi: Steepest Descent e Conjugate Gradient
- a partire da varie configurazioni NMR

1.1 preparazione input ed esecuzione

1. Portarsi sulla directory di lavoro (es. ~/orac/data).
2. Creare un input (es minim.in) che esegua una minimizzazione dell'energia della molecola:

```
&SETUP
  [...]
  READ_PDB ../pdb/chignolin.pdb
&END
&SOLUTE
  SCALE_CHARGES 1 1
&END
&PARAMETERS
  READ_TPG_ASCII ../lib/amber_all.tpg
  READ_PRM_ASCII ../lib/amber_all.prm
  JOIN SOLUTE
    gly-h tyr asp pro glu thr gly thr trp gly-o
  END
&END
&POTENTIAL
  [...]
  CUTOFF 100.
  STRETCHING
&END
&SIMULATION
  MINIMIZE
    CG 0.00001
    # oppure SD 0.00001
    WRITE_GRADIENT
  END
&END
&INOUT
  ASCII 100.0 OPEN minim.pdb
&END
&RUN
  TIME 3000.0
  PRINT 100.0
  PROPERTY 100.0
&END
```

3. lanciare il programma usando la prima struttura NMR (es. chignolin.pdb)

1.2 analisi risultati

1. Visualizzare i risultati con `vmd`
 2. Misurare gli RMSD con `vmd`
 3. *(non fatto) Analizzare i diversi contributi all'energia:*
post-out P="TotPot NonBond Bonded" chigno.out > ene
plot -1,2-4 ene
 4. *(non fatto) Osservare*
 - (a) *se vi è correlazione tra variazione nei RMSD e nell'energia*
 - (b) *quale modifica conformazionale determina la massima variazione di energia*
 - (c) *quale parte del potenziale guida la transizione verso il minimo*
-

2 simulazione di chignolina a 300 K nel vuoto (E,V=cost).

1. portarsi in `~/orac/data`; creare un input di ORAC (es. `chigno.in`) per una simulazione:
 - (a) nel potenziale si omette il cutoff (è definito nel blocco `&INTEGRATOR`), e si levano i C-H, N-H, O-H stretch

```
&POTENTIAL
[...]
# CUTOFF 100.
STRETCHING HEAVY
&END
```

- (b) inserire il blocco `&INTEGRATOR` e modificare il blocco `&SIMULATION`

```
&SIMULATION
MDSIM
TEMPERATURE 300.0 40.0
&END
&INTEGRATOR
TIMESTEP 2.0
MTS_RESPA
  step intra 2
  step intra 2
  step nonbond 1 100.
  test_times OPEN energie
END
&END
```

- (c) modificare il blocco `&RUN` inserendo un ciclo di equilibratura appropriato:

```
&RUN
CONTROL 0
REJECT 50000.0
TIME 30000.0
PRINT 100.0
PROPERTY 1000.0
&END
```

2. lanciare il programma con output sullo schermo

```
orac < chigno.in
```

3. lanciare il programma con output su file

```
orac < chigno.in > chigno.out
```