Laboratorio 2 - (22 novembre 2010)

1 simulazione della proteina a 300 K nel vuoto (E,V=cost).

1.1 primo run: controllo della conservazione di E

1. portarsi in ~/orac/data; creare un input di ORAC (es. protein.in) per una simulazione:

- (a) nel potenziale si omette il cutoff (i cutoff per le varie shell sono definiti nel blocco &INTEGRATOR), e si levano gli stretching C-H, N-H, O-H

```
&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
```

Note:

- nel caso di una molecola nel vuoto si suddivide solo il potenziale "legato"; quello "non legato" ha un timestep unico.
- il timestep del potenziale non legato deve essere più basso che nel solvente, anche a medio-lungo raggio (tanto l'aggravio di calcolo è trascurabile); questo perché i moti sono presumibilmente più veloci
- il cutoff deve essere alto (cariche), ma meno del lato della pseudo-cella

- (c) modificare il blocco &RUN :

```
&RUN
CONTROL 0
REJECT 0.0
TIME 10000.0
PRINT 100.0
PROPERTY 1000.0
&END
```

2. lanciare il programma con output sullo schermo

```
orac < protein.in
```

3. lanciare il programma con output su file

```
orac < protein.in > protein.out
```

4. verificare la conservazione dell'energia totale (media stabile):

```
plot -2,9 energie
```

5. se l'energia non si conserva, diminuire i timestep

1.2 simulazione con equilibratura iniziale

1. 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
```

1.3 Analisi delle proprietà

Analizzare

- Energie
 - RMSD
 - Angoli di Ramachandran
 - distanza "head-to-tail"
-

2 simulazione (N,V,T) nel vuoto

1. preparazione dell'input; si deve solo modificare il blocco &SIMULATION

```
&SIMULATION
...
THERMOS
  cofm 30.0
  solute 30.0
  solvent 30.0
  temp_limit 1000.
END
&END
```

2. verifica delle proprietà del sistema

(a) energie

i. L'energia del sistema, $EREAL$, non è costante; è costante l'Hamiltoniano di Nosé-Hoover $ETOT = EREAL + KINH + HPOT$

$$H_{NH} = \sum \frac{p_i^2}{2m_i} + U(\mathbf{r}) + \frac{p_\eta^2}{2Q} + \frac{L}{\beta}\eta \quad (1)$$

$$EREAL = \sum \frac{p_i^2}{2m_i} + U(\mathbf{r}) \quad (2)$$

$$KINH = \frac{p_\eta^2}{2Q} \quad (3)$$

$$HPOT = \frac{L}{\beta}\eta \quad (4)$$

[non fatto]

- i. confrontare l'andamento e soprattutto le fluttuazioni dell'energia totale nell'insieme NVT con quella dell'insieme NVE con medesimo input
- ii. vedere la dipendenza del risultato dal valore delle "masse" del termostato;
- iii. verificare che se $Q \rightarrow \infty$ si ricade nell'insieme N, V, E
- iv. verificare l'entità delle fluttuazioni dell'energia cinetica

(b) RMSD

confrontare l'andamento e il valore finale di RMSD nell'insieme NVT con quelle dell'insieme NVE con medesimo input