Corso di Laurea Magistrale in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2005/2006

Laboratorio 3 - (4 aprile 2006)

1 Strumenti UNIX

1.1 creazione di *script* di comandi shell

Abbiamo visto che si può trasformare il file della traiettoria (PDB) per poterlo visualizzare in `vmd`, con la pipeline

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

Dato che questo comando verrà usato spesso, per non doverlo riscrivere tutte le volte, possiamo copiarlo su un file, che possiamo chiamare `pdb2vmd`, e eseguire quel file ogni volta che vogliamo dare il comando:

1. dobbiamo mettere in cima al file la riga "magica"

   ```
   #! /bin/sh
   ```
   che dice che questo file va eseguito in una shell

2. inoltre dobbiamo rendere il file eseguibile dando dal prompt il comando

   ```
   chmod +x pdb2vmd
   ```

3. infine, salviamo questo file nella nostra directory `~/bin` dove verrà "visto" sempre.

4. modifichiamo lo script per far sì che mandi l'output su standard output per poterlo ridirezionare dalla riga di comando:

   ```
   grep -v REMARK 15.pdb | sed 's/TER/END/'
   ```

   in questo modo si può ottenere lo stesso risultato di prima dando da prompt

   ```
   pdb2vmd > b.pdb
   ```

5. modifichiamo ancora lo script per far sì che il nome del file di input possa essere dato da prompt

   ```
   grep -v REMARK | sed 's/TER/END/'
   ```

   in questo modo si può ottenere il risultato iniziale dando da prompt

   ```
   pdb2vmd < 15.pdb > b.pdb
   ```

1.2 gnuplot

```
pl 'a.test' u 0:3 w l, 'a.test' u 0:5 w l, 'a.test' u 0:7, 'a.test' u 0:($5+$7)
```

2 Simulazione di deca-alanina a 300 K nel vuoto.

2.1 Nuove simulazioni

1. portarsi in `~/orac/Ala300` e editare il file di input di ORAC: `Ala.in`.
2. modificare i parametri (blocco `&SIMULATION`) in modo da simulare l'insieme N,V,E
3. modificare i parametri (blocco `&INTEGRATOR`) in modo da salvare le energie sul file definito dall'opzione `test_times`
4. lanciare il programma con output su file

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

5. con `gnuplot`, verificare la conservazione dell'energia
6. Visualizzare il risultato in `vmd`

2.2 Minimizzazione

1. Selezionare un'istantanea della propria traiettoria e salvarla su file; oppure usare una configurazione distorta, tipo `../pdb/ala20.pdb`
2. Portarsi sulla directory `~/orac/Alamin`.
3. Modificare l'input `Ala.in`, in modo da eseguire una minimizzazione dell'energia della molecola:

```
&SETUP
[...]
  READ_PDB ../pdb/ala20.pdb
&END

&SIMULATION
  MINIMIZE
  CG 0.00001
  WRITE_GRADIENT
  END
&END
&POTENTIAL
[...]
  CUTOFF 100.
  STRETCHING
&END
```

4. lanciare il programma con l'input `Ala.in` usando l'istantanea salvata come struttura di partenza.
5. ripetere la minimizzazione usando `~/orac/pdb/ala20.pdb` come struttura di partenza.
6. Visualizzare i risultati in `vmd`