**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

È un comando (fatto da noi) per potere diagrammare file di dati da riga di comando. È 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`

   con $N = 1, 2, ...$
3. notare la parte dell'input che controlla la dinamica guidata:

```
&POTENTIAL
  ADD_STR_BONDS 1 102 500.0 15.9 31.5
  ...
&END
...
&INOUT
  ...
  PLOT STEER 16.0 OPEN N.wrk
&END
&RUN
  ...
  STEER 2000.  22000.
&END
```

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 $\sigma$

1. Preparare un file con tutti i lavori finali:

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

2. si calcolano media e $\sigma$:

$$\bar{w} = \frac{1}{N} \sum w_i$$

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

$$\Delta G = \bar{w} - \frac{\beta \sigma^2}{2}$$

3. Media e $\sigma$ si possono calcolare anche direttamente con

   ```
   avg dw
   ```

4. Esattamente, la formula per il $\Delta G$ 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