

1 Chignolina: 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 $ETOT = EREAL + KINH + HPOT$

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

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

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

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

- ii. confrontare l'andamento e soprattutto le fluttuazioni dell'energia totale nell'insieme NVT con quella dell'insieme NVE con medesimo input
 - iii. vedere la dipendenza del risultato dal valore delle "masse" del termostato
 - 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
-

2 Chignolina: simulazioni con solvente.

2.1 Preparazione input

1. Considerazioni sul calcolo dei dati di input

(a) lato cella è opportuno che sia almeno il doppio della lunghezza della proteina

(b) densità dell'acqua:

$$\begin{aligned}\rho/amu \cdot^{-3} &= \rho/g \cdot cm^{-3} \cdot \frac{g}{amu} \cdot \left(\frac{cm}{amu}\right)^3 \\ &= \rho/g \cdot cm^{-3} \cdot N_A \cdot (10^{-8})^3 \\ &= \rho/g \cdot cm^{-3} \cdot 0.6023 \\ &\simeq 0.6\end{aligned}$$

Per n molecole di acqua in un box di lato L Angstrom:

$$\rho/amu \cdot^{-3} = 0.6 = \frac{18n}{L^3}$$

Se $L = 31.07$, si ha $n = 999.8 \simeq 10^3$. Si può dunque scegliere

$$\begin{aligned}n &= 10^3 \\ L &= 31.07\end{aligned}$$

2. copiare sulla propria directory di lavoro il file di input:

```
~signorini/biomol/orac/data/slv.in
```

3. copiare sulla propria directory di lavoro il file di coordinate della molecola di H_2O :

```
~signorini/biomol/orac/pdb/water.pdb
```

4. Notare le differenze rispetto al file utilizzato per la simulazione nel vuoto (magari usando il comando ediff di Emacs):

(a) aggiungere solvente

```
&SETUP
  CRYSTAL 31.07 31.07 31.07
&END
&SOLUTE
  COORDINATES chignolin.pdb
&END
&SOLVENT
  CELL SC
  INSERT 1.4
  COORDINATES ../pdb/water.pdb
  GENERATE RANDOMIZE 10 10 10
&END
&PARAMETERS
  [...]
  JOIN SOLVENT
  hoh
  END
&END
```

(b) aggiornare i time-step

```
&INTEGRATOR
  TIMESTEP 10.0
  MTS_RESPA
  step intra 2
  step intra 2
  step nonbond 2 4.7
  step nonbond 3 7.5 reciprocal
  step nonbond 1 9.7
  test_times OPEN energie
  END
```

```

&END
(c) Ewald
    &POTENTIAL
        EWALD PME 0.43 24 24 24 4
        [...]
    &END
(d) salvare un restart
    &INOUT
        RESTART
            write 500.0 OPEN chigno.rst
        END
        ASCII 200.0 OPEN chigno.pdb
        [...]
    &END

```

2.2 Equilibratura

1. lanciare, salvando un restart
2. notare quanto è più lenta la simulazione aggiungendo il solvente (circa 10 volte)
3. monitorare le energie, in particolare:
 - (a) Energia totale EREAL [scende , poi cost]
 - (b) EPTOT
 - (c) EKIN [oscilla intorno a 300K]
 - (d) ESLV [scende]
 - (e) ESLV-SLT [scende?]
 - (f) ESLT [potrebbe salire]

Tutte queste grandezze sono listate nel file `energie`.

Si controllano usando `gnuplot`

4. Visualizzare il sistema in VMD
 - (a) vedere se la RMSD rispetto alla conformazione sperimentale è minore che nel vuoto