

Simulazioni MD-REM di GPM12: Analisi risultati

1 Riordinare le traiettorie

Le traiettorie si possono riordinare con il comando

```
> orac-rem-order [nome-file-pdb] [nome-file-energie]
```

I nomi dei file corrispondenti sono uguali in tutti le sottodir delle traiettorie (PAR????/)

Con qs comando si creano dei file ...-0001, ...-0002, etc, che contengono i dati di una stessa *replica*. In particolare ci interessa la replica a potenziale pieno (-0001)

2 Energie delle repliche

L'energia potenziale delle varie *traiettorie* e delle varie *repliche* si può diagrammare rispettivamente con

```
> plot PAR00??/REM_DIAGNOSTIC -1,5
```

e

```
> plot REM_DIAGNOSTIC-00?? -1,5
```

Diagrammando l'hamiltoniano di Nosè (terza colonna) si nota una deriva verso l'alto, dell'ordine di $0.1 kJ mol^{-1}/ps$

3 Complicazione dovuta al limite massimo di un run

Si è notato che se un run supera i 10ps qualche accumulo di errore fa sì che la simulazione diventi instabile.

Soluzione: si fa una serie di run di 1ps con restart

Per far questo si costruisce un piccolo programma di loop:

```
_____ loop.sh _____
#!/bin/bash
FROM=0;
TO=1;
PROG=orac;
while getopts "f:p:t:" Option do
  case $Option in
    f      )      FROM=$OPTARG ;;
    p      )      PROG="$OPTARG" ;;
    t      )      TO=$OPTARG ;;
  esac
done
echo "Running program $PROG, loop will run from $FROM to $TO"
for ((i=$FROM; i<=$TO; i++)); do
  printf -v l "%04d" $i
  echo $l;
  loop-pre-run $i $l;
  $PROG < loop-new.in > loop-new.out
  loop-post-run $i $l;
  for f in loop-new.*; do
    cp $f $f/loop-new/$l
    cp $f $f/loop-new/loop-old
  done
done
done
```

In sostanza, ad ogni ciclo: si prepara un nuovo input con la procedura `loop-pre-run`; si lancia `orac`; si manipolano i file creati con `loop-post-run`:

```
----- loop-pre-run -----
#!/bin/bash
i=$1;
l=$2;
awk -v I=$i -f loop-pre-run.awk < loop-new.in > a.in
mv a.in loop-new.in
```

```
----- loop-pre-run.awk -----
#!/bin/awk -f
/  TIME  /  time=$2+1000000.; print "    TIME          ",time;next
print
```

```
----- loop-post-run -----
#!/bin/bash
l=$2;
for d in PAR00*;do
  cd $d;
  for f in loop-new.*; do
    cp $f $f/loop-new/$l
    cp $f $f/loop-new/loop-old
  done
  cp REM_DIAGNOSTIC REM_DIAGNOSTIC.$l
  cp out* $l.out
  cd ..;
done
```

Nell'input `loop-new.in` i file creati devono avere i nomi opportuni per essere manipolati da queste procedure:

```
----- loop-new.in -----
...
&INOUT
  ASCII  1000.0  OPEN  loop-new.pdb
  RESTART
    read loop-old.rst
    write 1000.0 OPEN loop-new.rst
  END
&END
```

In questo modo in ogni sottodirectory `PARxxxx` si ottengono una serie di file `REM_DIAGNOSTIC.0001 ... e 0001.out ... 0001.pdb ...`

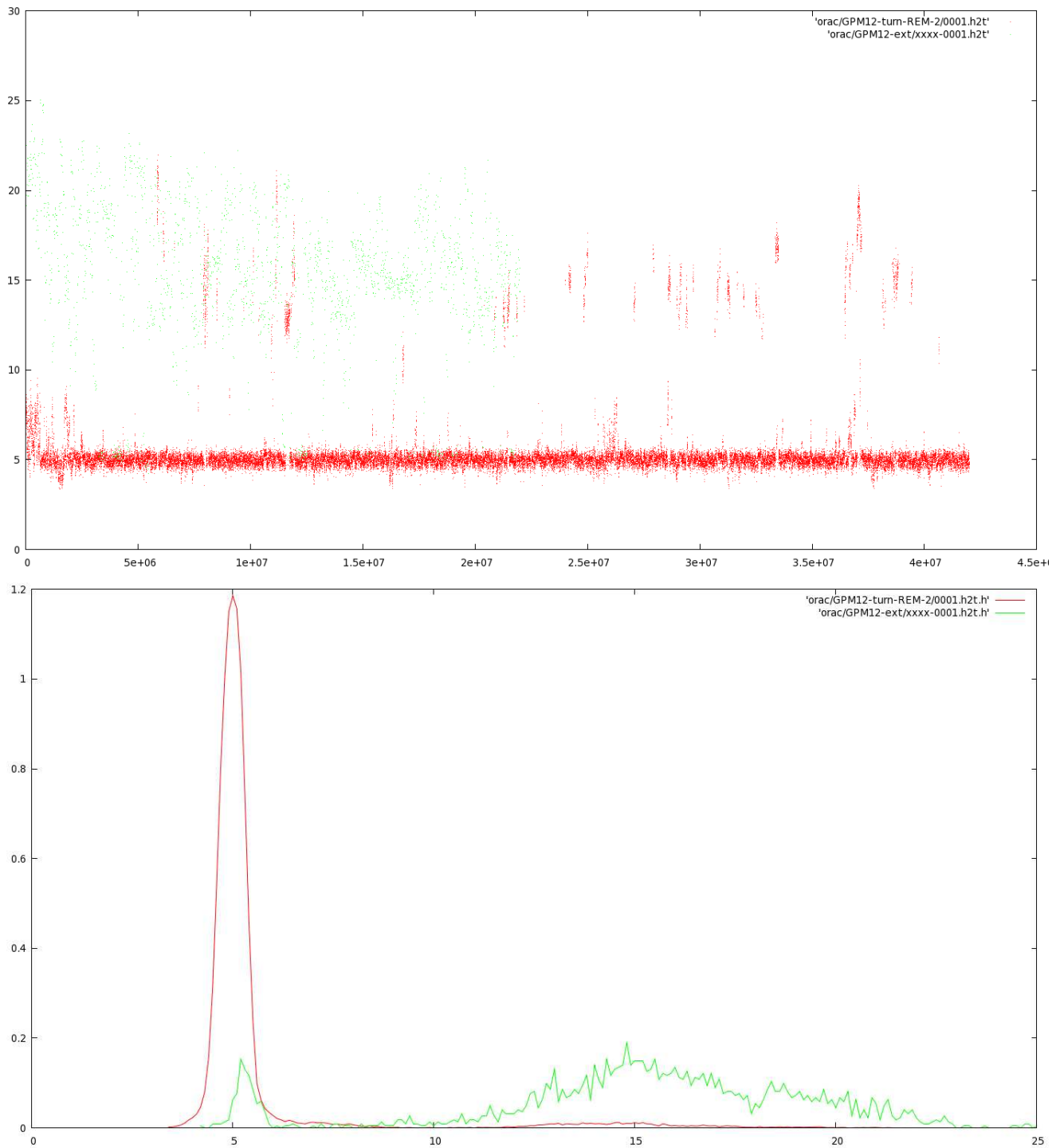
4 Parametri configurazionali

4.1 distanze

Come parametri caratteristici della configurazione di questi polipeptidi con (possibile) β -turn si possono prendere alcune distanze interatomiche:

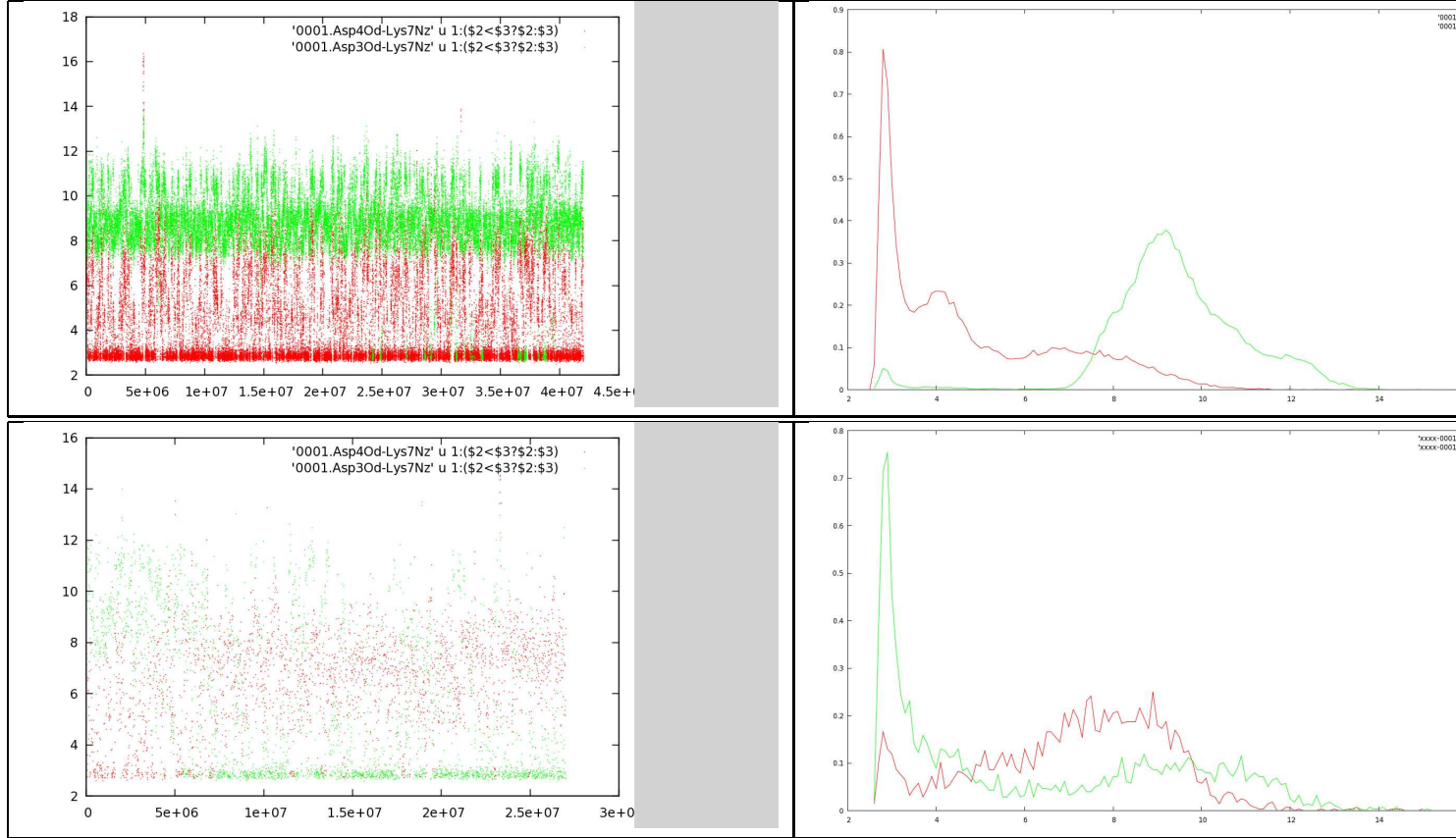
- distanza testa-coda (tra i C^α dei residui 1 e 10)

Figura 1: partendo da piegata (0-42 ns; rossa) e estesa (0-20 ns; verde); il campionamento sull'estesa è più rado di un fattore 10.



- distanze $Asp3O^\delta - Lys7N^\varsigma$ e $Asp4O^\delta - Lys7N^\varsigma$ (ponti salini, non presenti nella chignolina).
Il ponte salino $Asp3O^\delta - Lys7N^\varsigma$ stabilizza la struttura estesa, $Asp4O^\delta - Lys7N^\varsigma$ quella piegata

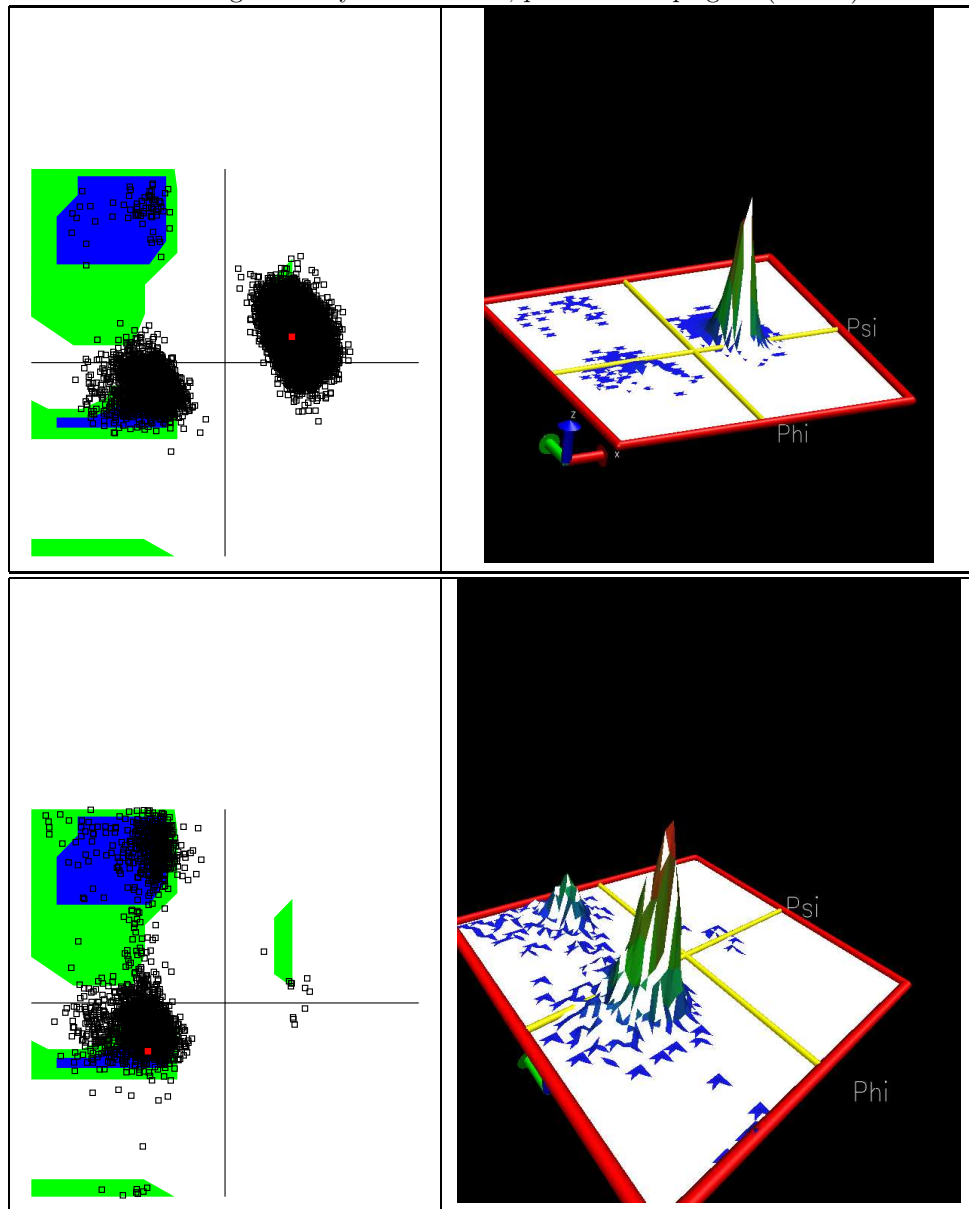
Figura 2: ponti salini partendo da piegata (prima riga) e estesa (seconda riga). Il campionamento sull'estesa è più rado di un fattore 10.



4.2 angoli

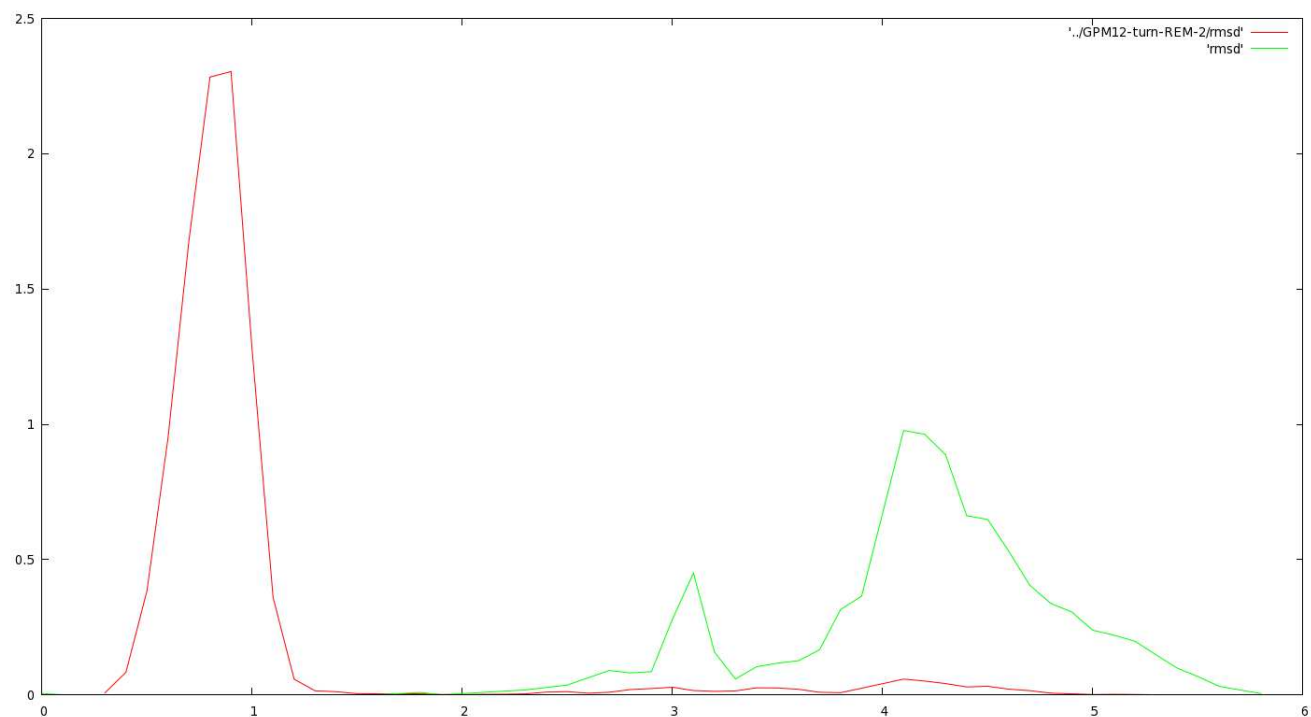
La presenza del β -turn (che interessa i residui 4-5-6-7) è evidenziata dal diagramma di Ramachandran del residuo 7. Se c'è il turn, la sequenza è $\alpha_R - \alpha_R - \gamma_R - \alpha_L$. Nella chignolina il residuo Gly7 è α_L .

Figura 3: Lys7 in GPM12, partendo da piegata (3-40ns) e da estesa (0-20ns)



4.3 RMSD dei C_{2-9}^{α}

Figura 4: distribuzione degli RMSD rispetto alla struttura 1 della chignolina; residui 2-9, solo backbone



5 Stima della stabilità della struttura piegata

6 Confronto con simulazioni tradizionali di analoga durata

Figura 5: distanza testa-coda, REM e tradizionale

