


Dynamique moléculaire: exercices supplémentaires

Marc Baaden

BPTI exo opt

Copyright © 2003-2005 Marc Baaden

Simulation dans l'ensemble NVE



Un bon test pour vérifier l'influence des différentes approximations couramment utilisées pour une simulation par dynamique moléculaire est un calcul à énergie constante. La dérive de l'énergie alors observée est à imputer à d'éventuels problèmes algorithmiques ou numériques. Examinez la dérive d'énergie d'un calcul modèle par rapport au calcul que nous venons d'effectuer.

Déplacez vous dans le répertoire de cet exercice avec **cd opt_1_nve**, initiez tous les fichiers par **make prep** et appelez **make compare**. En haut vous verrez l'évolution de l'énergie totale pour notre précédent calcul, en bas celui pour un calcul avec un minimum d'approximations et un pas d'intégration d'une femtoseconde. Analysez et vérifiez aussi les conditions de calcul utilisées dans le fichier `md_vide.mdp`. Quels sont les améliorations ?

Vous pouvez faire la même comparaison pour des calculs avec des pas d'intégration de 0.1, 0.2 et 2 femtosecondes. Pour cela copiez les fichiers `.edr` correspondants vers `md_vide.edr`, et refaites un **make compare**. Qu'en concluez vous ? Comparez avec les graphes `time-step.png`, `nvetest.png` et `econs.png`.

Analyse visuelle avancée

Ces exercices s'effectuent dans VMD [<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>] sur la trajectoire de BPTI dans l'eau. Pour y accéder faites **make vis**.

Plot de Ramachandran interactif

Explorez le plot de Ramachandran implémenté dans VMD. Ceci se trouve dans le menu Extensions->Analysis et permet une connection interactive avec la trajectoire chargée.

Comportement des contre-ions

N'affichez que la protéine et ses contre-ions. Utilisez la vue cumulée sous forme de points pour afficher tout l'espace exploré par les contre-ions en même temps (Graphical Representations -> Trajectory -> Draw Multiple Frames; résultat dans `counterions1.vmd`).

Affichez la protéine sous forme Van der Waals, coloré en fonction du type de résidu. Visualisez la trajectoire. Quel rapport avec les contre-ions (résultat dans `counterions2.vmd`).

Explorez VMD

Testez l'option de filtrage de la trajectoire sur la protéine (Graphical Representations -> Trajectory -> Trajectory Smoothing Window Size) et comparez/superposez avec la trajectoire non filtrée (`filter.vmd`).

Sélectionnez la distance entre GLU49:OE1 et SER47:HG (Mouse -> Label -> Bonds) et tracez son évolution en fonction du temps (Graphics -> Labels -> Bonds -> Graph).

Explorez Extensions->Analysis->Contact Map.

Explorez Extensions->Analysis->Sequence Viewer.

Explorez Extensions->Analysis->Timeline.

D'autres analyses

Vous trouverez par la suite quelques idées d'analyses supplémentaires à effectuer avec les outils de Gromacs [<http://www.gromacs.org>]. Étudiez d'abord la documentation du programme d'analyse que vous allez utiliser (option **-h**).



Fluctuations atomiques (g_rmsf)

Les fluctuations atomiques - qualitativement comparables aux facteurs de température obtenus par radiocristallographie - peuvent être calculés avec **g_rmsf**.

Autres programmes

Testez **g_mindist**, **g_cluster**, **g_rdf**, **g_hbond**, **g_saltbr** et **g_sas**.