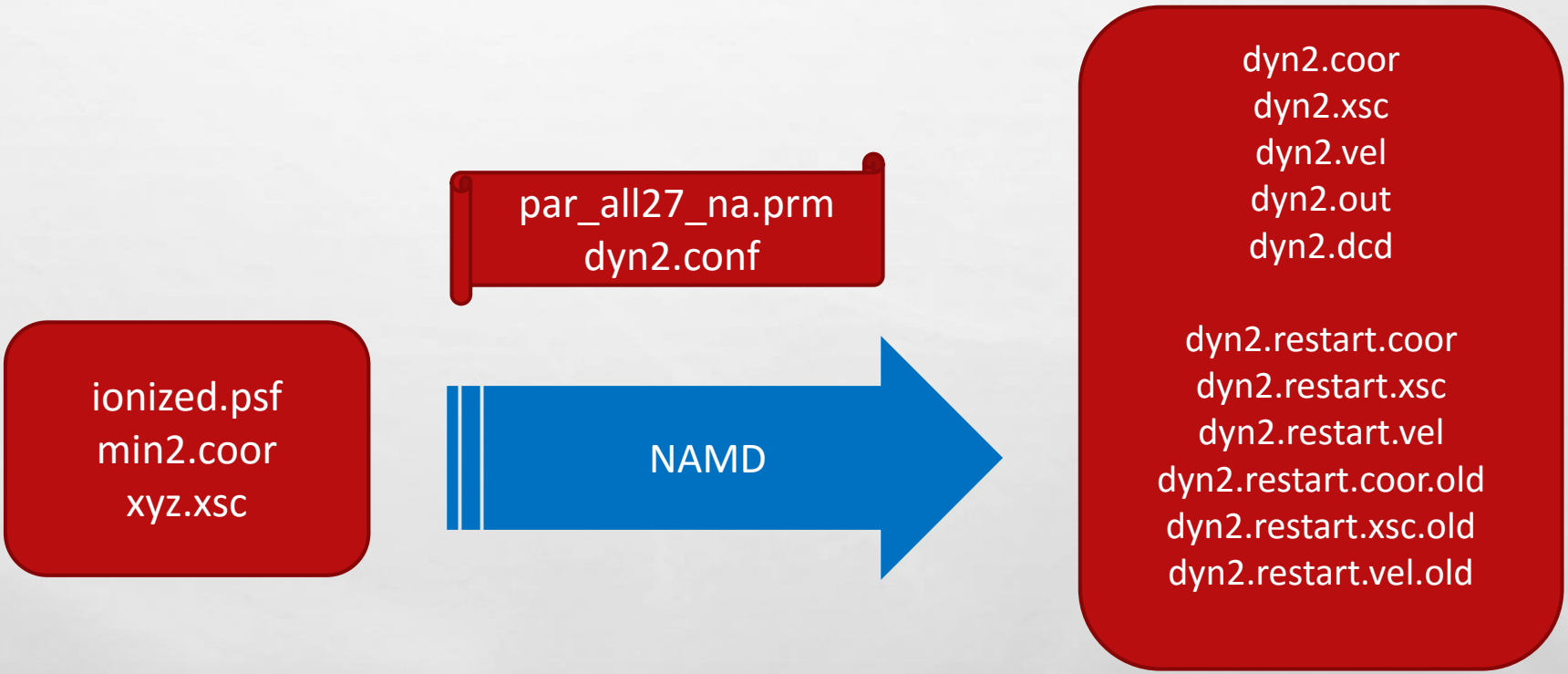
ANALIZA ENERGII W SYMULACJACH DYNAMIKI MOLEKULARNEJ

ŁUKASZ CHARZEWSKI

15.12.2015



SYMULACJA DYNAMIKI MOLEKULARNEJ



ANALIZA ENERGII - CO BĘDZIE POTRZEBNE?

- Pole siłowe – parametry + wzory
- Trajektoria – próbkowanie z przebiegu symulacji
- Kilka innych plików i skryptów
- Software –VMD/NAMD

POLE SIŁOWE – CHARMM27

Parametry: stałe siłowe, wartości równowagowe, promienie VdW

$$U(\vec{R}) = \sum_{\text{bonds}} K_b(b - b_0)^2 + \sum_{\text{UB}} K_{\text{UB}}(S - S_0)^2 + \sum_{\text{angle}} K_\theta(\theta - \theta_0)^2 + \sum_{\text{dihedrals}} K_\chi(1 + \cos(n\chi - \delta)) + \sum_{\text{impropers}} K_{\text{imp}}(\varphi - \varphi_0)^2 + \sum_{\text{nonbond}} \epsilon\left[\left(\frac{R_{\min_{ij}}}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{R_{\min_{ij}}}{r_{ij}}\right)^{6}\right] + \frac{q_i q_j}{\epsilon_l r_{ij}}$$

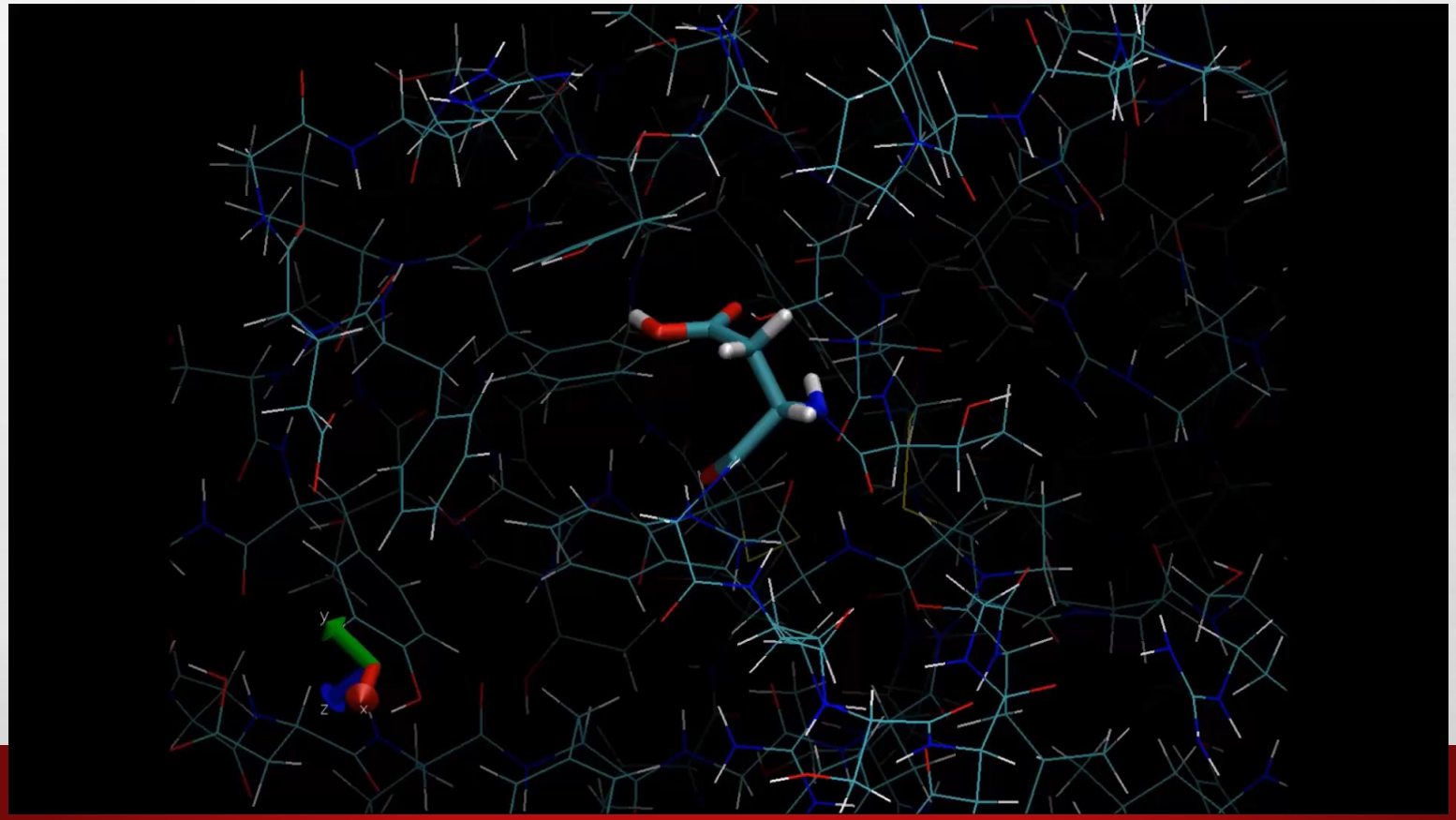
TRAJEKTORIA SYMULACJI

- NAMD2 zapisuje przebieg symulacji do binarnych plików DCD
- Plik zawiera informacje:
  - Krok czasowy
  - Liczba atomów w układzie
  - Wymiary komórki elementarnej
  - Liczba klatek symulacji
  - Położenia atomów w kolejnych klatkach
- Standardowo: co 5000 kroków czasowych (5 ps)

TRAJEKTORIA SYMULACJI

- Oprócz pliku DCD potrzebne są dodatkowe pliki:
- Topologia układu – plik psf
- Wymiary komórki elementarnej – plik xsc, najlepiej z końca symulacji

ZAWSZE NALEŻY NAJPIERW OBEJRZEĆ UKŁAD!



DODATKOWE INFORMACJE

- Parametry pola siłowego – plik prm
- Wybór atomów do analizy:
  - Generujemy nowy plik pdb decydujący o tym co będzie uwzględnione w obliczeniach
  - Wykorzystujemy kolumnę beta
    - Atomy wyłączone z analizy – wartość 0
    - Atomy wybrane do analizy – wartość 1 lub 2

KOLUMNA BETA

```
ATOM    354  N   GLY B 861      -0.950   7.730  12.712  1.00  0.00      MMP3 N
ATOM    355  HN  GLY B 861      -1.114   7.240  11.857  0.00  0.00      MMP3 H
ATOM    356  CA  GLY B 861      -1.775   8.898  12.932  1.00  0.00      MMP3 C
ATOM    357  HA1 GLY B 861      -2.126   8.862  13.867  1.00  0.00      MMP3 H
ATOM    358  HA2 GLY B 861      -1.203   9.711  12.821  1.00  0.00      MMP3 H
ATOM    359  C   GLY B 861      -2.921   8.931  11.948  1.00  0.00      MMP3 C
ATOM    360  O   GLY B 861      -3.481   7.890  11.602  1.00  0.00      MMP3 O
ATOM    361  N   SER B 862      -3.261  10.132  11.490  1.00  0.00      MMP3 N
ATOM    362  HN  SER B 862      -2.761  10.974  11.694  0.00  0.00      MMP3 H
ATOM    363  CA  SER B 862      -4.420  10.320  10.632  1.00  0.00      MMP3 C
ATOM    364  HA  SER B 862      -4.596   9.411  10.253  1.00  0.00      MMP3 H
ATOM    365  CB  SER B 862      -5.614  10.819  11.455  1.00  0.00      MMP3 C
ATOM    366  HB1 SER B 862      -6.421  10.933  10.875  1.00  0.00      MMP3 H
ATOM    367  HB2 SER B 862      -5.823  10.183  12.197  1.00  0.00      MMP3 H
ATOM    368  OG  SER B 862      -5.333  12.075  12.041  1.00  0.00      MMP3 O
ATOM    369  HG1 SER B 862      -6.173  12.438  12.350  0.00  0.00      MMP3 H
ATOM    370  C   SER B 862      -4.140  11.273   9.477  1.00  0.00      MMP3 C
ATOM    371  O   SER B 862      -3.135  11.989   9.470  1.00  0.00      MMP3 O
```

ENERGIA WEWNĘTRZNA



energia.coor
energia.xsc
energia.vel

Wczytujemy układ do VMD:

```
$ vmd ionized.psf –pdb min2.coor
```

W Tk Console oznaczamy atomy wybrane do analizy:

```
% set all [atomselect top all]
% $all set beta 0
% set prot [atomselect top „protein”]
% $prot set beta 1
```

I zapisujemy jako plik pdb:

```
% $all writepdb en.pdb
```

Sprawdzamy nazwy plików i ścieżki dostępu w pliku i uruchamiamy NAMDa z odpowiednim plikiem conf:

```
$ namd2 energia.conf > energia.out
```

Co zawiera plik conf?

```
# protocol params
coordinates      en.pdb

# initial config
extendedsystem  dyn2.restart.xsc

# periodic cell
wrapall           on

# output params
outputname        en_dyn2
binaryoutput      off
outputenergies    1

# integrator parameters
timestep            1.0
nonbondedfreq       1
fullelectfrequency  2
stepspercycle       10
```

```
# force field params
paratypecharmm  on
structure       ionized.psf

parameters
/home/krzysko/par/par_all27_na.prm
exclude         scaled1-4
1-4scaling      1.0
switching       on
switchdist      8.0
cutoff          12.0
pairlistdist    13.5
margin          3.0
```

```
pairInteraction       on
pairInteractionfile   en.pdb

# pairInteractioncol       o
pairInteractionGroup1     1
##pairInteractionGroup2    2
pairInteractionSelf       on

###
coorfile open dcd dyn2.dcd
set ts 0
while { [coorfile read] != -1 } {
  incr ts 5000
  firsttimestep $ts
  run 0
}
coorfile close
```

Powielenie tego bloku pozwala analizować kolejno kilka plików dcd

EFEKT DZIAŁANIA SKRYPTU

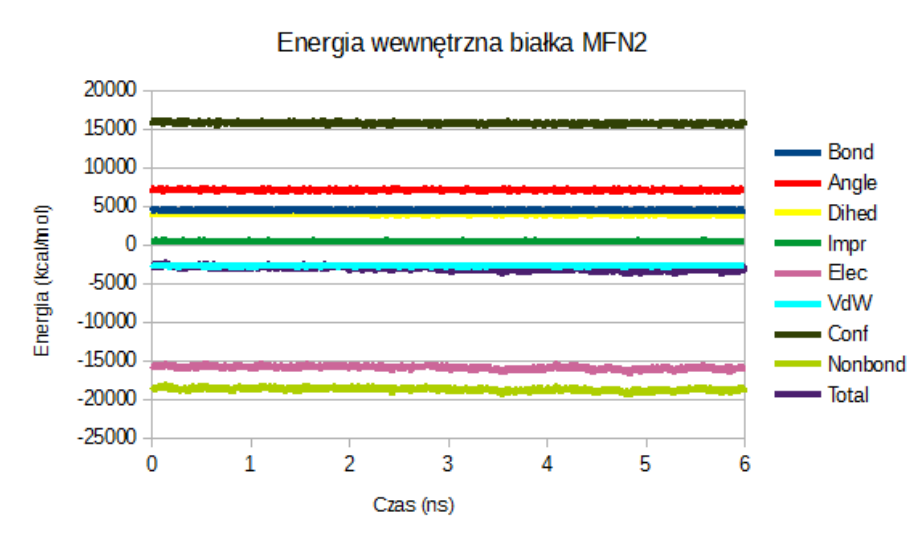
```
INFO: READING TIMESTEP FROM FILE.
INFO: UPDATING UNIT CELL FROM TIMESTEP.
WARNING: CELL BASIS VECTORS SHOULD BE SPECIFIED BEFORE READING TRAJECTORY.
TCL: SETTING PARAMETER FIRSTTIMESTEP TO 0
TCL: ORIGINAL NUMSTEPS 1 WILL BE IGNORED.
TCL: RUNNING FOR 0 STEPS
ETITLE:      TS           BOND          ANGLE          DIHED          IMPRP                ELECT            VDW       BOUNDARY
MISC        KINETIC               TOTAL           TEMP      POTENTIAL         TOTAL3        TEMPAVG

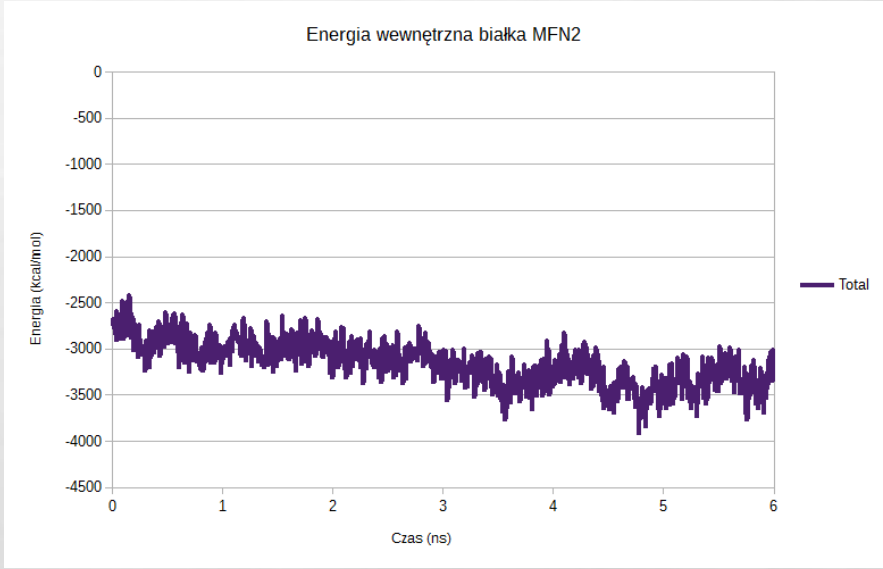
ENERGY:       0      2760.7811      4487.9996      2534.2018       262.4283         -10811.5735     -2094.8000         0.0000
0.0000         0.0000          -2860.9629         0.0000     -2860.9629     -2807.7110         0.0000

PAIR INTERACTION: STEP: 0    VDW_FORCE:          0.0000         0.0000         0.0000 ELECT_FORCE:          0.0000
0.0000         0.0000
INFO: READING TIMESTEP FROM FILE.
INFO: UPDATING UNIT CELL FROM TIMESTEP.
WARNING: CELL BASIS VECTORS SHOULD BE SPECIFIED BEFORE READING TRAJECTORY.
TCL: SETTING PARAMETER FIRSTTIMESTEP TO 5000
TCL: ORIGINAL NUMSTEPS 0 WILL BE IGNORED.
TCL: RUNNING FOR 0 STEPS
ENERGY:    5000      2840.3742      4422.2655      2549.6758       254.5029         -10904.0933     -2053.8169         0.0000
0.0000         0.0000          -2891.0919         0.0000     -2891.0919     -2844.8894         0.0000

PAIR INTERACTION: STEP: 5000 VDW_FORCE:          0.0000         0.0000         0.0000 ELECT_FORCE:          0.0000
0.0000         0.0000
```

ENERGIA WEWNĘTRZNA





ENERGIA ODDZIAŁYWANIA

Wczytujemy układ do VMD:

```
$ vmd ionized.psf –pdb min2.coor
```

W Tk Console oznaczamy atomy wybrane do analizy:

```
% set all [atomselect top all]
% $all set beta 0
% set prot1 [atomselect top „segname ASF”]
% $prot1 set beta 1
% set prot2 [atomselect top „segname TOPO”]
% $prot2 set beta 2
```

I zapisujemy jako plik pdb:

```
% $all writepdb en.pdb
```

Sprawdzamy nazwy plików i ścieżki dostępu w pliku i uruchamiamy NAMDa z odpowiednim plikiem conf:

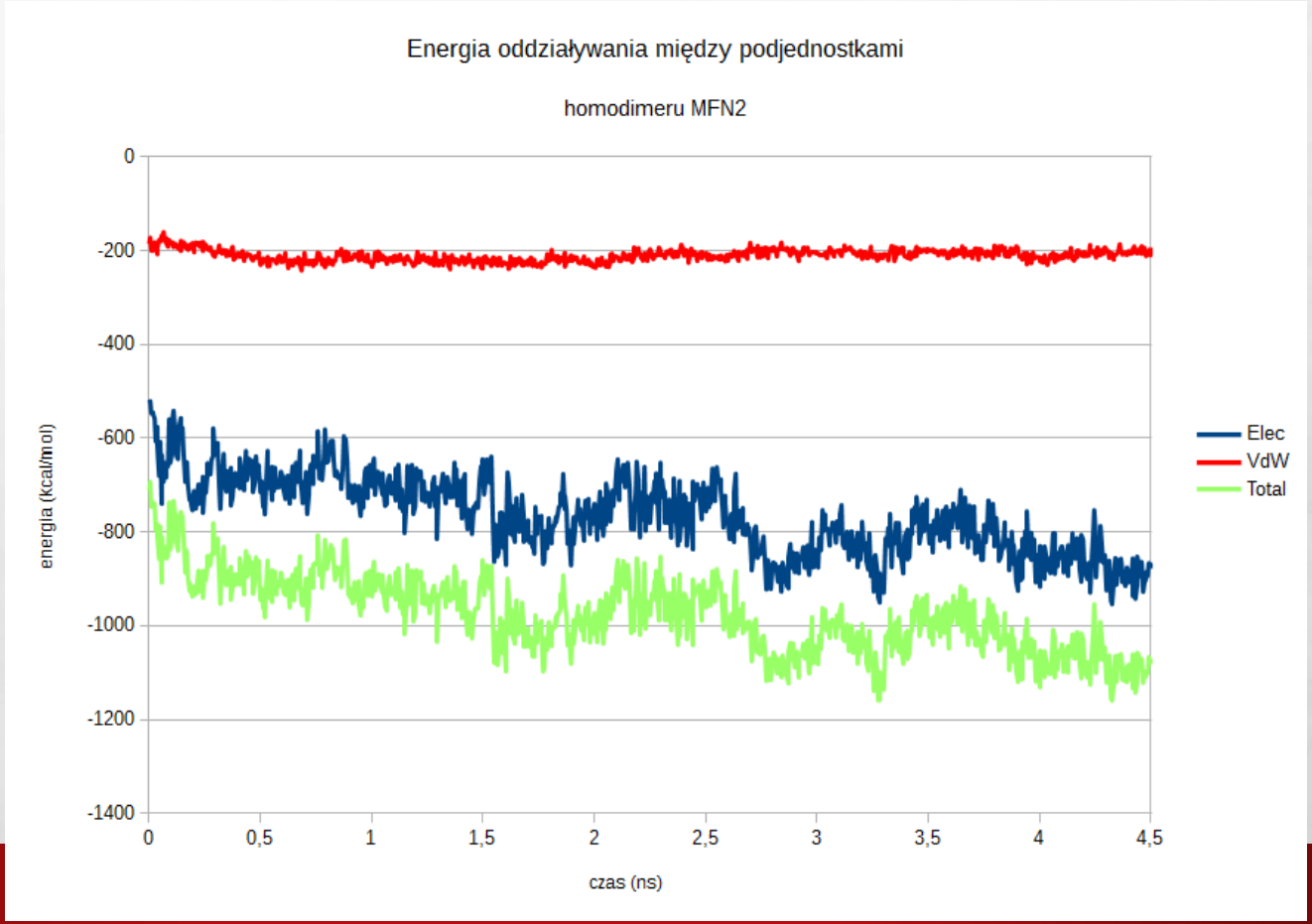
```
$ namd2 energia.conf > energia.out
```

ENERGIA ODDZIAŁYWANIA

```
pairInteraction       on
pairInteractionfile   en.pdb

# pairInteractioncol       o
pairInteractionGroup1      1
pairInteractionGroup2      2
pairInteractionSelf        off
```

ENERGIA ODZIAŁYWANIA



CO PAŃSTWO NAM POKAŻĄ:

I wykres:
Energia całkowita podjednostek (obliczone oddzielnie)
Energia całkowita kompleksu

II wykres:
Energia oddziaływania między podjednostkami

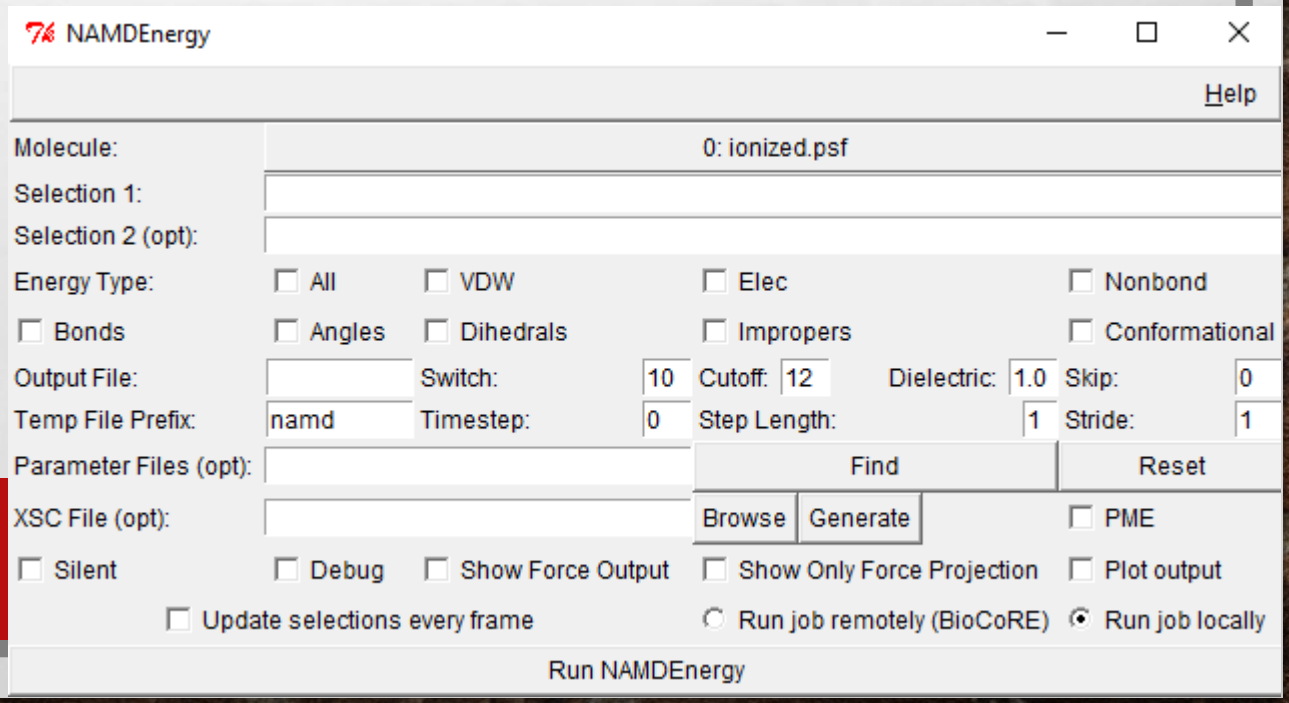
CO BYŚMY CHCIELI ZOBACZYĆ:

Docelowo:
1 ns symulacji o stabilnej energii

W ramach ćwiczeń:
Nierosnącą energię układu w czasie symulacji

PLUGIN NAMDENERGY

- Wczytać do VMD układ razem z trajektoriami:
- Wybrać w VMD: Extensions/Analysis/NAMD Energy
- Uzupełnić pola w oknie dialogowym



PLUGIN NAMDENERGY

- Wygodnie
- Można uruchomić także przez terminal
- Trzeba wczytać cały układ do pamięci, co nie zawsze jest możliwe
- W wygenerowanym skrypcie widnieje:

```
# NAMD configuration file generated automatically by NAMDenergy
# It may be ugly, but it should work.
# I wouldn't recommend using it for anything else though.
```

PLUGIN NAMDENERGY

```
mol new ionized.psf
mol addfile min2.coor type pdb
mol addfile dyn2.dcd waitfor all

set par {/home/charzewski/wzory/par_all27_prot_na.prm}

set var0 "protein"
set var1 "segname MMP9"
set var2 "segname TIMP"

set sel0 [atomselect top $var0]
set sel1 [atomselect top $var1]
set sel2 [atomselect top $var2]

package require namdenergy

namdenergy -all -sel $sel0 -par $par -extsys dyn2.xsc –pme -ofile
"InternalEnergy_proteins.dat"

namdenergy -vdw -elec -sel $sel1 $sel2 -par $par -extsys dyn2.xsc –pme  -ofile
"InteractionEnergy_MMP9-TIMP.dat"
```

module load namd/2.9

DZIĘKUJĘ ZA UWAGĘ!

