



QBQ5782: Simulação Computacional de Biomoléculas

Lista de exercícios 7.

1. A tabela fornecida no arquivo coords.csv, contém a evolução temporal dos valores do ângulo θ entre os átomos $C_\alpha-C_\beta-C_\gamma$ do resíduo ASP-1, e dos ângulos diedrais ϕ e ψ do resíduo GLY-29 de uma trajetória de 55 ns de simulação de dinâmica molecular da proteína Cdc25B (PDB ID 1QB0). Usando 90 intervalos entre os valores de -180° e 180° , obtenha os seguintes gráficos para o ângulo θ e para os dois diedrais de GLY-29:
 - (a) Histograma dos valores;
 - (b) A correspondente densidade de probabilidade normalizada, ρ . Explique como você calculou esta ρ ;
 - (c) Repita o item a) para θ e para ψ , mas use apenas a primeira metade da trajetória (até 22500 ps). Compare com os dois gráficos obtidos em a) e comente o caráter dinâmico da simulação. Ilustre com gráficos do valor dos ângulos contra o tempo. Comente a diferença qualitativa da amostragem para os dois ângulos;
 - (d) Desenhe um gráfico de Ramachandran para o resíduo GLY-29 com os dados da tabela e responda:
 - i. Os diedrais são estatisticamente correlacionados? Porque? Qual a explicação física ou estrutural?
 - ii. Compare o gráfico de Ramachandran com os gráficos projetados obtidos na parte a). Que informação é perdida neste processo de projeção?
 - (e) Calcule a média e a variância para os ângulos θ , ϕ e ψ dados. As distribuições são uni- ou multimodais? A variância de cada distribuição é grande ou pequena?
2. (Baseado nos exercícios 10.1 e 10.2 do livro do Field) Repita a simulação do Exemplo 20 usando o modelo NBModelABFS para interações não-ligantes com diferentes distâncias de truncagem (pelo menos 3 conjuntos). Faça uma análise das energias e de outras propriedades, como a função de distribuição por pares $[g(r)]$, para cada conjunto de distâncias de truncagem e discuta as diferenças. A aproximação de truncagem é razoável? O que acontece quando a classe NBModelFull é usada no lugar da NBModelABFS? Por que? Tente desativar a definição de simetria, rode e explique novamente o que acontece.