



Lista de exercícios 5.

1. No Exemplo 16 do livro texto, um passo de tempo de 1 fs e uma frequência de escalonamento das velocidades de 0,1 ps (fase de equilíbrio) foram usados para integrar as equações dinâmicas. Repita as simulações para o mesmo tempo total de simulação, mas usando:

- Diferentes passos de tempo (menores e maiores do que 1 fs);
- Diferentes parâmetros de acoplamento do termostato na fase de equilíbrio (menores e maiores que 0,1 ps);

Para os itens a) e b), discuta como os resultados mudam em comparação aos resultados do Exemplo 16. A conservação de energia é substancialmente melhor? Como os valores dos ângulos diedros mudam (veja Seção 9.4 e Exemplo 17)? Existem maneiras melhores de comparar as diferentes trajetórias?

2. Faça várias simulações longas de bALA a partir de diferentes estruturas iniciais (por exemplo `bala_c7eq`, `bala_c5`, `bala_alpha`, etc, disponíveis em `pDynamo3/examples/book/data/xyz/`) e repita a análise dos ângulos ϕ e ψ da Seção 9.4 e Exemplo 17. Como os mapas se comparam com a superfície de energia potencial obtida para bALA no Exercício 7.2 (Lista 4)?

3. 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:

- Histograma dos valores;
- A correspondente densidade de probabilidade normalizada, ρ . Explique como você calculou esta ρ ;
- Qual é a forma da $\rho(\theta)$? Lembre-se da função de energia potencial para ângulos de ligações (harmônica) e explique porque $\rho(\theta)$ tem essa forma.
- 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 (trajetória) dos ângulos contra o tempo. Comente a diferença qualitativa da amostragem para os dois ângulos;
- Desenhe um gráfico de Ramachandran para o resíduo GLY-29 com os dados da tabela e responda:
 - Os diedrais são estatisticamente correlacionados? Porque? Qual a explicação física ou estrutural?
 - Compare o gráfico de Ramachandran com os gráficos projetados obtidos na parte a). Que informação é perdida neste processo de projeção?
- 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?