

g_mmpbsa

Općenito

g_mmpbsa programski je paket implementiran koristeći softvere GROMACS i APBS s načinom izvršavanja naredbi sličnim GROMACS-u. Funkcija mu je izračun komponentni slobodne Gibbsove energije vezanja koristeći MM-PBSA metodu (engl. *molecular mechanics poisson-boltzmann surface area*). Dekompozicija ukupne energije, odnosno entropijski i energetski doprinos svih rezidua ukupnoj energiji moguće je izračunati pomoću *python* skripti koje programski paket sadrži. Omogućuje odabir alternativnih atomskih radijusa i nekoliko različitih solvacijskih modela. Ekstenzivno se koristi u istraživanjima biomolekulskih interakcija. Često predstavlja korak analize nakon izvođenja simulacija molekulske dinamike.

Verzija **g_mmpbsa** programskog paketa dostupna na računalnom klasteru Isabella kompajlirana je pomoću gcc/9 GNU prevoditelja, a omogućuje paralelno izvođenje korištenjem **OpenMP** tehnologije.



Aplikacija nema mogućnost širenja izvan čvora pa je u skripti za podnošenje poslova nužno definirati neku od **mpisingle** paralelnih okolina.

Moduli

Moduli koji dopremaju *g_mmpbsa* u Vašu okolinu definirani su u tablici niže:

Verzija	Modul
1.1.0	g_mmpbsa/1.1.0

Primjer korištenja



Počevši od verzije GROMACS-a 5.0, svi alati su moduli izvršne datoteke pod nazivom **gmx**:

- **gmx grompp ...**
- **gmx mdrun ...**

Budući da **g_mmpbsa** koristi stariju GROMACS-a, svaki se od alata poziva direktno, bez **gmx**-a:

- **grompp ...**
- **mdrun ...**

mmpbsa.sge

```
#!/bin/bash

#$ -N mmpbsa
#$ -cwd
#$ -pe *mpisingle 4

module load g_mmpbsa/1.1.0

export OMP_NUM_THREADS=${NSLOTS}

g_mmpbsa -f input.xtc -s input.tpr -n input.ndx -i input.mdp <arg>
```

Praktični primjer

Izračun slobodne Gibbsove energije kompleksa HIV-1 proteaze i inhibitora BEA388

MM-PBSA metoda koristi se kod predikcije ukupne slobodne energije vezanja i evaluacije relativne stabilnosti različitih biomolekulskih struktura. Kombinacijom tri energetska pojma, točnije potencijalne energije u vakuumu, polarne i nepolarne solvatacijske energije, izračunava se slobodna ukupna Gibbsova energija vezanja. Potencijalna energija vezanja u vakuumu podrazumijeva vezne interakcije uključujući energiju veze, kuta i torzije, kao i nevezne interakcije poput elektrostatskih i van der Waalsovih. Polarna solvatacijska energija procjenjuje se u implicitnom solvatacijskom modelu desolvatacijom pojedinih biomolekulskih vrsta čija se energija vezanja izračunava. Uključivanjem nepolarne solvatacijske energije procjenjuje se konformacijska entropija prilikom stvaranja kompleksa u plinskoj fazi.

Izračun se može podijeliti u dva koraka:

1. Evaluacija tri komponente doprinosa ukupnoj slobodnoj Gibbosovoj energiji vezanja
2. Izračun ukupne slobodne Gibbosove energije vezanja

Ulazne tj. *input* podatke za primjere niže možete preuzeti u [zip arhivi](#).

mmpbsa.sge

```
#!/bin/bash

#$ -N mmpbsa
#$ -pe *mpisingle 4
#$ -cwd

module load g_mmpbsa/1.1.0

export OMP_NUM_THREADS=${NSLOTS}

echo 1 13 | g_mmpbsa -f 1EBZ.xtc -s 1EBZ.tpr -n 1EBZ.ndx -i ../pbsa.mdp -pdie 2 -pbsa -decomp

python MmPbSaStat.py -bs -nbs 2000 -m energy_MM.xvg -p polar.xvg -a apolar.xvg
```