



GOLD 3.1 käytössä Sepelissä

Mikael Johansson
mikael.johansson@csc.fi

Pienten molekyylien telakointiohjelma GOLD päivitettiin äskettäin versioon 3.1. Tuki AIX-käyttöjärjestelmälle on päättynyt ja uusin versio on asennettu ainoastaan Sepeliin. Sepeli onkin huomattavasti IBM:ää tehokkaampi alusta, joten viimeistään tämän versiopäivityksen myötä on hyvä tilaisuus vaihtaa alustaa nykyaikaisempaan.

GOLD-paketti voidaan edelleen asentaa myös omalle Linux-työasemalle. Tämä on suositeltavaa etenkin niille, jotka käyttävät GOLDia sekä tulosten analysointiohjelmaa SILVERiä, graafisten käyttöliittymien kautta. X-yhteyden yli grafiikka voi tuntua tuskallisen hitaalta.

Interaktiivinen käyttö

Mikäli haluat käyttää graafisia käyttöliittymiä Sepelissä, tulee sinun ensin avata interaktiivinen sessio johonkin laskentanoodiin. Suoraan edustanoodissa ei pidä ajaa mitään minuuttia pidempikestoista ohjelmaa. Tämä tapahtuu qrsh-komennolla, jolle on lisäksi annettava lisäparametri muistinhallintaa varten:

```
qrsh -l h_stack=256M
```

GOLDin interaktiivisen ympäristön saa käyttöön komenolla

```
use gold
```

Laskentatyö eräajona

Kun ajat GOLD-töitä CSC:n koneilla, on sinun valmisteltava eräajotiedosto. CSC:n GOLD-sivustolta [1] löytyy esimerkki, jota voit muokata tarpeen mukaan. Voit myös ajaa GOLDia rinnakkaisesti. Rajoitetun lisenssimäärän takia yli kahdeksan prosessoriytimen samanaikaista käyttöä tulisi kuitenkin välttää, jotta lisenssejä riittää muillekin.

Uudet ominaisuudet versiossa 3.1

Verrattuna aikaisempaan versioon 3.0, päivitys toi mukanaan parannuksia ja laajennuksia, mielenkiintoisiksi. Tärkeimpinä uudistuksina voidaan pitää:

1. Proteiinin joustavuus. Paikalliset proteiinin päätetyn liikkeen ja sivuketjujen pyörimisliikkeet ovat nyt määriteltävissä. Tätä varten löytyy rotameerikirjasto. Kirjasto perustuu artikkeliin [2]. Lisätyt vapausasteet johtavat yleensä pidempiin ajoaikoihin konformaatioavaruuden laajentumisen myötä. Myös väärin positiivisten tulosten

todennäköisyys voi kasvaa. Uutta toimintoa kannattaakin käyttää harkiten.

2. Hemiryhmien parempi käsittely. Raudalle löytyy uudet metalliparametrit, joilla erityyppiset ligandivuorovaikutukset voidaan mallintaa paremmin. Yhdistettynä uusiin tyyppiparametreihin, ChemScoren onnistumisprosentti telakoitumisissa nousi aiemmasta 64 %:sta 73 %:iin [3]. Hemiproteiinien osalta kannattaa käyttää ChemScorea GoldScoren sijasta.

3. Telakoituminen pehmeillä paikallispotentiaaleilla. Nyt voidaan huomioida tilanne, jossa molekyyli telakoituessaan pystyy hieman siirtämään lähellä olevia aminohappotähteitä. Pehmeämmillä potentiaaleilla liganidin ja proteiinin pienestä päällekkäisyydestä ei rangaista niin kovalla kädellä kuin standardipotentiaaleilla.

Viitteet

[1] <http://www.csc.fi/chem>

[2] S. C. Lovell, J. M. Word, J. S. Richardson, D. C. Richardson, "The Penultimate Rotamer Library", *Proteins* 40 (2000) 389–408.

[3] S. B. Kirton, C. W. Murray, M. L. Verdonk, R. D. Taylor, "Prediction of Binding Modes for Ligands in the Cytochromes P450 and Other Heme-Containing Proteins", *Proteins* 58 (2005) 836–844.



Käytätkö CPC-ohjelmakirjastoa?

Jan Åström
jan.astrom@csc.fi

PC-kirjasto on 'Computer Physics Communication' -lehden ohjelmakirjasto.

Tämän tyyppisen kirjastojen käyttö on viime vuosikymmenen aikana vähentynyt merkittävästi.

Vaikka ohjelmakirjasto on suhteellisen halpa, sen ylläpito kuitenkin työllistää asiantuntijoitamme.

Tilastojen mukaan CPC-kirjaston käyttö on niin minimaalista, että CSC harkitsee tilauksen lopettamista.

Jos käytät CPC-kirjastoa ja haluat, että kirjasto kuluu myös tulevaisuudessa meidän tarjontamme, ilmoita siitä sähköpostiosoitteella 'astrom@csc.fi'.

