

## MODELISATION MULTI-ECHELLE

### Préparer un fichier pour pouvoir lancer une dynamique

#### Contexte

Le but de ce TP est de savoir préparer un fichier pour pouvoir lancer une dynamique moléculaire

Nous allons suivre le tutoriel donné sur la page suivante :

<http://ambermd.org/tutorials/pengfei/>

Ce tutoriel utilise les logiciels suivants :

« Awk » est un logiciel linux qui permet de manipuler des données dans les fichiers. Elle est utilisée pour récupérer le résidue OE8 dans le fichier .pdf. Vous pouvez essayé aussi de faire la même chose avec la commande « grep »

« reduce » a été utilisé dans le TP précédent pour protoner les molécules

« ambpdb » « pdb4amber » sont des logiciels de la suite de programme amber qui permettent de passer d'un fichier pdb à des fichiers de format amber (topologie ou structure).

« tleap » est un logiciel de la suite de programme amber pour préparer les fichiers d'entrée pour lancer une dynamique. Il existe une version graphique : xleap

Si vous avez fini en avance, vous pouvez regarder le tutoriel : <http://ambermd.org/tutorials/basic/tutorial4b/>