

Modifications Xplor

Pour permettre la gestion de
multiples jeux de
coordonnées pour chaque
résidu

David Mignon, le 17/12/13

Introduction des notions de resclass et de modèle

Une resclass identifie un résidu par le resid, le resname et le segid.

Un modèle est un jeu de coordonnées par resclass.

L'utilisateur ne manipule que les modèles.

Le lien modèle resclass se fait via la sélection d'atomes.

Lecture des modèles

deux possibilités

```
coord disp=model @file.pdb
```

Tous les modèles de file.pdb sont ajoutés dans un tableau en mémoire.

Un nombre est lu à la colonne 67-71.

Il représente l'indice des modèles pour une resclass.

```
Coord disp=model @true.pdb push=true
```

Ici, un seul modèle par resclass est ajouté à la fin du tableau. L'indice n'est pas lu dans true.pdb mais calculé « plus grand indice existant » + 1.

Copie des modèles

La commande `coor copy` a évolué:

```
coor copy from=A to=B idx=i=j end
```

avec `A,B=main,comp,xref` ou `model`

Par défaut:

```
idx=1 pour from=model
```

```
idx=nb modèles +1 pour to=model
```

L'ancienne syntaxe est toujours supportée.

Écriture des modèles

```
Write coor from=model output=my.pdb end
```

Cette commande imprime tous les modèles dans le fichier.

```
Write coor from=model idx=i output=my.pdb end
```

Ici, seul le modèle *i* de chaque resclass est imprimé.

La colonne 67-71 est renseignée dans les deux cas avec l'indice du modèle.

ATOM	339	N	GLY	39	-3.933	5.444	16.117	1.00	0.00	14	A
ATOM	340	H	GLY	39	-3.661	4.518	16.366	1.00	0.00	14	A
ATOM	341	CA	GLY	39	-4.479	6.276	17.176	1.00	0.00	14	A
ATOM	342	C	GLY	39	-3.682	7.552	17.389	1.00	0.00	14	A
ATOM	343	O	GLY	39	-4.251	8.617	17.614	1.00	0.00	14	A
ATOM	1044	OD1	ASP	111	-13.801	-5.521	-3.500	1.00	0.00	13	A
ATOM	1045	OD2	ASP	111	-14.043	-4.328	-5.339	1.00	0.00	13	A
ATOM	1046	C	ASP	111	-12.244	-8.798	-5.753	1.00	0.00	13	A
ATOM	1047	O	ASP	111	-11.038	-9.008	-5.762	1.00	0.00	13	A
ATOM	1048	N	LYS	112	-13.097	-9.470	-6.515	1.00	0.00	13	A
ATOM	1049	H	LYS	112	-14.075	-9.280	-6.501	1.00	0.00	13	A
ATOM	1050	CA	LYS	112	-12.655	-10.531	-7.415	1.00	0.00	13	A
ATOM	1051	CB	LYS	112	-13.852	-11.135	-8.142	1.00	0.00	13	A
ATOM	1052	CG	LYS	112	-14.788	-11.857	-7.220	1.00	0.00	13	A

Exemple d'utilisation les modèles stockent les coordonnées de rotamères

```
write coor sele=(resid $1 and resn $aa1 and not store9)  
from=main to=model idx=$rot1 end
```

Remplace :

```
eval ($rotafilename1 = "local/Rota/" + encode($1) + "_" + $aa1 +  
"_" + encode($rot1) + ".pdb")  
write coor output=$rotafilename1 sele=(resid $1 and resn $aa1 and  
not store9) end
```

Et

```
coor copy sele=(resid $2 and resn $aa2 and not store9)  
from=model idx=$rot2 to=main end
```

Remplace :

```
eval ($rotafilename2 = "local/Rota/" + encode($2) + "_" + $aa2 +  
"_" + encode($rot2) + ".pdb")  
coor sele=(resid $2 and resn $aa2 and not store9) @$rotafilename2
```

Les modèles en mémoire

tableau de modèles pour une resclass

x1,y1,z1,x2,y2,z2,...

nb d'atomes par modèle

nb de modèles par block mémoire

nb courant de modèles

index atomique