Киназы антибиотикорезистентности - Production #395

Project # 419 (New): Второй металл и протоны в AmiN

Production # 396 (New): Динамики с ANP-PNP

Параметризация AMP-PNP

03.05.2021 14:06 - Alexander Zlobin

Status:	Resolved	**Start date:**	03.05.2021
Priority:	Normal	**Due date:**	01.06.2021
Assignee:	July Belyaeva	**% Done:**	100%
Category:			
Target version:			

Description

Есть основания полагать, что никакой из 60 паттернов протонирования/металлирования активного центра не может быть похож на кристалл именно из-за того, что в нем, вообще говоря, AMP-PNP. Для подтверждения этой идеи надо найти состояние АЦ с AMP-PNP, при котором достигается соответствие кристаллу в динамике - так мы покажем, что наблюдаемые отклонения с ATP это не следствия плохих параметров, а следствие фишек самой системы.

History

#1 - 04.05.2021 14:28 - July Belyaeva

Нужно дополнительное напоминание о процедуре запуска **RESP** (ранее этого не делала) на одном примере.

Также нужны дополнительные комментарии по поводу **parameterize**:

- где взять параметры для запуска, чтобы его протокол соответствовал собранным ранее системам с АТФ?

- где его запускать (упоминалось, что не на src)?

#2 - 04.05.2021 20:21 - Alexander Zlobin

Шаги работы для получения зарядов

1. Структуры AMP-PNP, AMP-PNP-h, и двух хвостов нарисовать в авогадро. Присвоить атомам названия аналогичные таковым у ATP в наших готовых параметрах.
2. Пример папки с проведенным RESP: /home/domain/data/zlobin/2021/kinase/params/ATH/full_resp. Взять оттуда файл RED.cfg
3. Входной файл - структура в формате pdb. Запустить Ante_RED-1.5.pl <pdb_file>. Среди файлов выдачи есть файл формата p2n. Скопировать его, назвав копию Mol_red1.p2n. Внутри прописать правильный суммарный заряд в графе CHARGE-VALUE
4. Запустить RED-vIII.51.pl

Нужные для нас заряды находятся в Data-RED/Mol_m1-o1.mol2. Нужно усреднить заряды у эквивалентных атомов, если РЕД сам не справился с осознанием их эквивалентности.

Шаги работы для запуска parameterize

1. Входной файл - mol2 с прописанными зарядами из RED
2. Логинься ко мне, от меня - на макарыч (ssh makarich, пароль тот же, что и для ломоносова). Создай папку, закинь туда нужный файл.
3. Пример запуска можно посмотреть тут: /home/vsbg/work/kinase/frag_parm. Возьми оттуда run.bash. Модифицируй внутри имя файла, заряд.
4. Поставить расчет в очередь: qsub run,bash
5. Посмотреть состояние очереди: qstat
6. Ждать около суток

#3 - 09.05.2021 14:23 - July Belyaeva

- % Done changed from 0 to 60

#4 - 20.05.2021 12:22 - July Belyaeva

- Status changed from New to In Progress

#5 - 20.05.2021 16:18 - Alexander Zlobin

- Parent task set to #396

#6 - 20.05.2021 16:20 - Alexander Zlobin

- Tracker changed from Написать to Production

#7 - 31.05.2021 12:11 - July Belyaeva

Запуск parameterize для amp-pnp и amp-pnph производится со следующими параметрами:

> *parameterize Mol_m1-o1.mol2 -c -4 —charge-type None -n 6 —no-dihed —min-type*

None —scan-type None

#8 - 31.05.2021 12:33 - July Belyaeva

- % Done changed from 60 to 80

#9 - 31.05.2021 16:56 - July Belyaeva

Слияние топологий:

- в файле /home/domain/data/julybel/amin-2021/AMP-PMP/*amp-pnp*/parameterize/parameters/GAFF2/mol.mol2 переписывались типы атомов (на те, что будут соответствовать хвосту);
- перезаписывание некоторые типов атомов (только za) и добавление геометрических параметров в файле /home/domain/data/julybel/amin-2021/AMP-PMP/*amp-pnp*/parameterize/parameters/GAFF2/mol.frcmod, удалялись исходные геометрические параметры с za;
- запускался tleap с инструкциями по файлу tleap.in; были получены файлы mol.crd, structure.prmtop;
- то же самое было проделано для /home/domain/data/julybel/amin-2021/AMP-PMP/*amp-pnph*/parameterize/parameters/GAFF2/mol.mol2.

#10 - 31.05.2021 17:09 - July Belyaeva

- % Done changed from 80 to 100

Пути до файлов с топологией:

1) /home/domain/data/julybel/amin-2021/AMP-PMP/amp-pnp/parameterize/parameters/GAFF2/amp-pnp.top
2) /home/domain/data/julybel/amin-2021/AMP-PMP/amp-pnph/parameterize/parameters/GAFF2/amp-pnph.top

#11 - 20.08.2021 14:14 - Alexander Zlobin

- Status changed from In Progress to Resolved