Киназы антибиотикорезистентности - Production #397

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

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

Подготовка систем

03.05.2021 14:12 - Alexander Zlobin

Status:	Resolved	**Start date:**	03.05.2021
Priority:	Normal	**Due date:**	15.06.2021
Assignee:	July Belyaeva	**% Done:**	100%
Category:			
Target version:			

Description

Аккуратно и, по возможности, автоматизированно собрать системы.

Металлы:

- Mg
- MgLi
- MgMg

Фосфат:

- AMP-PNP
- AMP-PNPh-up
- AMP-PNPh-in
- AMP-PNPh-out

Амикумацин/белок:

- Ami / neg
- Am0 / neg
- Am0 / Glh36
- Am0 / Ash202
- Am0 / Ash222

History

#1 - 20.05.2021 16:20 - Alexander Zlobin

- Tracker changed from Написать to Production

#2 - 14.06.2021 23:14 - July Belyaeva

.gro всех систем:

/home/domain/data/julybel/amin-2021/AMP-PMP/systems-gro/

Системы:

/home/domain/data/julybel/amin-2021/AMP-PMP/systems

При попытке выполнить grompp (с ions.mdp) выдается следующее:

WARNING 1 [file topol.top, line 51827]:

98 non-matching atom names

atom names from topol.top will be used

Темплейты для топологий лежат здесь:

/home/domain/data/julybel/amin-2021/AMP-PMP/templates/for-topology

Все собирается с помощью jupyter-notebook, который лежит по следующему пути:

/home/domain/julybel/amin-2021/systems-creation.ipynb

Собирается правильно, проблема, думаю, при подготовке темплейтов топологии - буду разбираться с этим ворнингом
atom names from solv.gro will be ignored

#3 - 14.06.2021 23:15 - July Belyaeva

- % Done changed from 0 to 40

#4 - 15.06.2021 09:38 - July Belyaeva

Обновлю порядок атомов в itp для амикумация и amp-pnp

#5 - 15.06.2021 13:32 - July Belyaeva

- % Done changed from 40 to 100

Системы (белок+амикумацин+amp-pnp+ионы) лежат по следующему пути:
/home/domain/data/julybel/amin-2021/AMP-PMP/systems/

В директориях, соответствующих каждой системе, лежат файлы:
- .gro системы,
- topol.top,
- atoms.itp,
- .itp амикумацина,
- .itp amp-pnp,

#6 - 24.06.2021 15:07 - Alexander Zlobin

- % Done changed from 100 to 60

Есть системы, где неверное число атомов в GRO, также есть системы с неверно расположенным АТФ. Насколько это одни и те же системы, не могу пока сказать. Пример, где есть и то, и то:
am0-ash202_no_1mg

Проверь, пожалуйста, все папки на предмет того, что все правильно и хорошо.

Также как проверишь, создай везде индекс-файлы sys.ndx с группой Protein_holo (белок + атф + амик)
И создай posre.itp для группы белок без тяжелых атомов, где замени значение силовой константы по всем трем направлениям на "FC FC FC"

UPD

Всего в 45 системах есть ANP-PNP, а их должно быть 60, то есть в 15 у нас проблемы
Это собственно все системы с no, то есть непротонированным AMP-PNP

UPD 2

Во всех системах нужно сохранить кристаллическую воду

#7 - 24.06.2021 23:10 - July Belyaeva

- % Done changed from 60 to 80

Пересобранные системы лежат по следующему пути:
/home/domain/data/julybel/amin-2021/AMP-PMP/systems/

.gro каждой системы открывала в PyMol и смотрела глазами (быстро, на предмет соответствия названию, а не на идеальное взаиморасположение элементов).
Была добавлена кристаллическая вода.

Скрипт сборки систем из темплейтов работает очень быстро.

Остается это:
Также как проверишь, создай везде индекс-файлы sys.ndx с группой Protein_holo (белок + атф + амик)
И создай posre.itp для группы белок без тяжелых атомов, где замени значение силовой константы по всем трем направлениям на "FC FC FC"

#8 - 25.06.2021 13:29 - July Belyaeva
- % Done changed from 80 to 100

Для систем подготовлены sys.ndx и posre.itp

#9 - 20.08.2021 14:16 - Alexander Zlobin
- Status changed from New to Resolved