

## 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

<b>Status:</b>	Resolved	<b>Start date:</b>	03.05.2021
<b>Priority:</b>	Normal	<b>Due date:</b>	15.06.2021
<b>Assignee:</b>	July Belyaeva	<b>% Done:</b>	100%
<b>Category:</b>			
<b>Target version:</b>			
<b>Description</b>			
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-rnp

### #5 - 15.06.2021 13:32 - July Belyaeva

- % Done changed from 40 to 100

**Системы (белок+амикумация+amp-rnp+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 амикумация,
- .itp amp-rnp,

### #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 rosre.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 по, 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 РуMol 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*