Плазмин - Study #447

Project # 446 (New): Байндинг-активация плазмина

Подготовка к работе

26.08.2021 11:20 - Alexander Zlobin

Status:	New	**Start date:**	26.08.2021
Priority:	Normal	**Due date:**	15.09.2021
Assignee:	Egor Ilin	**% Done:**	0%
Category:			
Target version:			

Description

До 15 сентября

1) Собрать подборку статей о структуре и функциях плазмина и том, что известно о его активации. Особое внимание обратить на то, было ли проведено когда-либо МД

- де-факто привести в порядок этот набор слов:

https://docs.google.com/document/d/1gvLNjjTxObEgTHGwiGfsFFq418UBWSJzjmsBdd4dShI/edit?usp=sharing

2) Прочитать и осознать

- https://www.livecomsjournal.org/article/5957-best-practices-for-foundations-in-molecular-simulations-article-v1-0
- https://www.livecomsjournal.org/article/5067-best-practices-for-quantification-of-uncertainty-and-sampling-quality-in-molecular-simulations-article-v1-0
- 10.1038/s42254-020-0153-0
- 10.1038/s41592-019-0506-8
- https://docs.google.com/document/d/1gvLNjjTxObEgTHGwiGfsFFq418UBWSJzjmsBdd4dShI/edit?usp=sharing

Пройти туториалы:

- https://www.livecomsjournal.org/article/5068-from-proteins-to-perturbed-hamiltonians-a-suite-of-tutorials-for-the-gromacs-2018-molecular-simulation-package-article-v1-0

> *альтернативная ссылка http://www.mdtutorials.com/gmx/index.html. Для старта стоит пройти первые 2 туториала, остальные - когда будет время*

- https://www.plumed.org/doc-v2.7/user-doc/html/tutorials.html - просмотреть серию туторов 21 года (названия 21.X). Делать самому не обязательно

Где делать туторы по громаксу:

- Логиниться на srv
- С него логиниться на xwing
- Вбить команду module load gmx/2020.3-threadedmpi-single-cuda10.2-pm2.6.1-gpu . Теперь для вызова громакс достаточно просто вбить gmx.
- Все вопросы писать сюда (update - записать текст в нижнем поле)

Перед началом любого счета убедиться, что ресурсы не используются!
(htop - контроль за CPU, RAM
nvidia-smi - контроль за GPU)

History

#1 - 03.09.2021 11:05 - Alexander Zlobin

https://go.drugbank.com/drugs/DB00086

"Streptokinase creates an active complex which promotes the cleavage of the Arg/Val bond in plasminogen to form the proteolytic enzyme plasmin." -

Надо понять, откуда они это взяли. Найти конкретные работы, понять, существует ли этот факт на уровне гипотезы или чем-то подтверждается. Свести воедино, чем.

Также надо раскопать постатейно то, что описано тут в Mechanism of action. https://en.wikipedia.org/wiki/Streptokinase
Дескать, стрептокиназа может негидролизованный плазмин переводить к нужной конформации активного центра. Чем доказывалось/показывалось? Как видишь, эта идея не соответствует той, что описана выше на драгбанке. Поэтому надо внимательно изучить доказательную базу для каждой гипотезы.