

A17 - Exploration #390

Project # 410 (Closed): Улучшение A17

Проблема с SCC в Gromacs-DFTB+ на реакции с параоксоном

30.04.2021 16:33 - Andrey Golovin

Status:	Closed	Start date:	30.04.2021
Priority:	High	Due date:	25.06.2021
Assignee:	Alexander Zlobin	% Done:	100%
Category:			
Target version:			
Description			
GMX-DFTB+ не может стабильно считать реакцию с параоксоном в системе тирозин-глутамат. Задача этого проекта - максимально сузить пространство возможностей того, в чем же проблема.			
 /home/domain/data/zlobin/2021/A17/crashes			

History

#1 - 30.04.2021 17:04 - Alexander Zlobin

Лог от 30.04.2021. АЗло

Какие варианты были проработаны:

1. Отличие GMX-DFTB от GMX-DFTB+

1 ходок в GMX-DFTB прошел через барьер. Динамика закончилась взрывом. Насколько это тот же самый феномен, или другой - не понятно. Можем ли мы придумать дизайн эксперимента, который бы явно показал, сохраняется ли тренд в старом интерфейсе или нет? (мини-системы. Пока прогнаны только на DFTB+ и GMX-DFTB+)

2. Влияние параметров dftb

Между 3ob-3-1-orphyd-1-2 и 3ob-2-1-l02 разницы нет, как в GMX-DFTB+ (как real-life, так и мини-система) так и просто в DFTB+ (мини-система)

3. Влияние дисперсии, real-life система

Между отсутствием коррекции, D3, D4, D3H5 разницы нет

4. Mixers, мини-система в воде

Миксер по умолчанию - бройден. Падение на ~3500 шаге

Mixer DIIS - нет разницы

Mixer Simple - падение сразу

Mixer Anderson - падение на ~50000 шаге (ЛЮБОПЫТНО!)

5. ForceEvaluation "dynamics", Filling Fermi 10K или 1e-6K

Нет разницы

#2 - 30.04.2021 17:10 - Alexander Zlobin

- Subject changed from Исследование падучести dftbplus с параоксоном to Проблема с SCC в Gromacs-DFTB+ на реакции с параоксоном

- Due date set to 05.05.2021

Note: формально это не часть проекта РНФ-абзим, это часть РФФИ-Сириус. Однако статейно конечно в любом случае подходит и под

РНФ, и решить в любом случае надо.

Задание 1: гипотеза о влиянии состава системы

Мы уже заметили, что просто трансфер протона с тирозина на глутамат протекает вообще без всяких проблем. При добавлении параоксона они возникают. Гипотеза: что-то в самой сути параоксона не дает ему нормально обсчитываться нашими методами.

Проверка гипотезы: воспроизведение расчета с другим фосфатом с тем же суммарным зарядом:

- ДФП
- зарин
- эхотиофат

Дедлайн: 5 мая 2021

#3 - 01.05.2021 18:52 - Alexander Zlobin

- Status changed from New to In Progress

#4 - 02.05.2021 11:33 - Andrey Golovin

Саша, на всякий случай укажите директорию где вы это делаете. Для горизонтальной передачи знаний.

#5 - 05.05.2021 13:39 - Alexander Zlobin

- Project changed from РНФ - абзим к S белку to A17

#6 - 05.05.2021 13:53 - Alexander Zlobin

- Description updated

#7 - 05.05.2021 17:41 - Alexander Zlobin

Итак, что-то явно происходит особенное с параоксоном - ДФП работает отлично, реакция проходит шикарно.

Параллельно протестировал глупую, но все же идею: есть ли разница между наличием 5-х связей, пар и механических зарядов и их отсутствием для атомов QM системы в топологии. Разницы нет, что хорошо - так и предполагалось.

Нужно сформулировать новые гипотезы.

- Влияет ли ароматичность уходящей группы?
- Влияет ли нитрогруппа?

#8 - 05.05.2021 17:41 - Alexander Zlobin

- Due date changed from 05.05.2021 to 17.05.2021

#9 - 11.05.2021 12:43 - Andrey Golovin

- 1) Есть смысл проверить $\text{MaxAngularMomentum} = d$ для азота?
- 2) Падение происходит при образовании PNP иона?

#10 - 12.05.2021 14:53 - Alexander Zlobin

- 1) Принял в работу
- 2) Нет, падение не сопровождается отслеживаемыми глазом геометрическими событиями

Допишу также апдейт из телеграма, чтобы тоже был тут:

Корень проблем - нитрогруппа. Почему я так считаю:

- 1) Системы с фенолом и тиофенолом не падают (вообще). Система с тиофенолом даже умудрилась дойти до продуктов (тиофенолят таки лучшая уходящая группа, чем фенолят).
- 2) Системы с нитрофенолом и тионитрофенолом падают.

#11 - 12.05.2021 15:17 - Alexander Zlobin

BREAKING NEWS

Дублирование связей и углов из механики для части квантовой системы (от мостикового кислорода до нитро-группы включительно) в виде рестрейнтов плюмеда (получается искусственная риджидификация) позволяет реакции пройти без падений.

Это костыль, конечно, но для задач дизайна вполне применим.

Тем не менее вариант с d-орбиталью для азота тоже проверю.

#12 - 12.05.2021 16:50 - Alexander Zlobin

D-орбиталь азота ничего не изменила, быстрое падение.

#13 - 15.05.2021 12:16 - Alexander Zlobin

Дублирование связей и углов не помогло в реальной системе

#14 - 15.05.2021 12:21 - Alexander Zlobin

- *Priority changed from Normal to High*

#15 - 16.05.2021 22:59 - Alexander Zlobin

- *Parent task set to #410*

#16 - 17.05.2021 14:20 - Alexander Zlobin

- *Due date changed from 17.05.2021 to 24.05.2021*

Пока мы в тупике.

Из вариантов рассматриваю возможность набрать системной информации о падениях, сделав метадинамику по RMSD чисто параоксона в воде в куче реплик и изучить, происходит ли падение.

#17 - 18.05.2021 12:31 - Alexander Zlobin

Если считать RMSD по всем атомам POX, то Segmentation fault на первом же шаге.

Если убрать расчет RMSD с атомов ароматических водородов, то все хорошо. В 10 репликах метадинамика по RMSD не упала за 50 пс.

UPD: Даже не со всех ароматических, а только с двух наиболее близких к нитро-группе.

#18 - 18.05.2021 21:42 - Alexander Zlobin

Следующий шаг в сборе информации для идей: мини-системы со старым интерфейсом

#19 - 19.05.2021 15:08 - Alexander Zlobin

Alexander Zlobin wrote:

Если считать RMSD по всем атомам POX, то Segmentation fault на первом же шаге.

Если убрать расчет RMSD с атомов ароматических водородов, то все хорошо. В 10 репликах метадинамика по RMSD не упала за 50 пс.

UPD: Даже не со всех ароматических, а только с двух наиболее близких к нитро-группе.

Проверить то же самое, но без MM части.

#20 - 20.05.2021 11:38 - Alexander Zlobin

GMX-DFTB+ на системе без MM части (параоксон в кубике). RMSD по всем атомам отлично считается.

GMX-DFTB3 на системе "параоксон в механической воде". RMSD по атомам. Та же проблема, что и с плюсом: если все атомы в списке тех, по которым рассчитывается RMSD, то сегфолт на первом же фрейме. Если убрать два ближайших к нитрогруппе водорода, то все окей.

#21 - 20.05.2021 16:54 - Alexander Zlobin

- Tracker changed from Написать to Exploration

#22 - 20.05.2021 19:07 - Alexander Zlobin

1. Посмотреть эволюцию зарядов
2. Посчитать с квантовой водой
3. Протестировать GMX_QMMM_VARIANT (1, 0, eqmmmVACUO)
4. Попробовать -COOH

#23 - 23.05.2021 23:39 - Alexander Zlobin

1. Ничего странного не наблюдается, миграции заряда к началу ароматической группы нет
2. Пока не сделал
3. 0 и eqmmmVACUO не работают на системе только из POX, так же сегфолт. Без метад работают. Проверить на системах глу-тир-параоксон.
4. Вариант с GOO падает так же, как и параоксон

#24 - 31.05.2021 13:40 - Alexander Zlobin

- Due date changed from 24.05.2021 to 04.06.2021

Пока реально тупик. Перемещаю фокус внимания на следующие действия:

- 1) Детально изучить оптимальный теозим, а не умозрительный
- 2) Делать дизайны с ним
- 3) Использовать старый интерфейс

Дедлайн по теозиму - 04.06.2021

#25 - 06.06.2021 13:36 - Alexander Zlobin

- Due date changed from 04.06.2021 to 09.06.2021

#26 - 18.06.2021 11:47 - Alexander Zlobin

- Due date changed from 09.06.2021 to 25.06.2021

Расчеты для ASP/GLU теозима почти завершены, ориентировочно еще 2 дня. К понедельнику - финализировать набор теозимов. На неделе 21-25 прогнать энзедз по ним. Также - протестировать интерфейс на риппере на старых дизайнах.

#27 - 06.07.2021 09:39 - Alexander Zlobin

- Status changed from In Progress to Closed

- % Done changed from 0 to 100

Главная гипотеза на данный момент - такая реакция вовсе не может идти, потому и идет взрыв. Вероятно, тирозин депротонируется не в сопряженном режиме. Ближайшая проверка, что проблема не в параоксоне - реакция в параоксоназе в проекте metadbench.