

## 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

<b>Status:</b>	Resolved	<b>Start date:</b>	03.05.2021
<b>Priority:</b>	Normal	<b>Due date:</b>	01.06.2021
<b>Assignee:</b>	July Belyaeva	<b>% Done:</b>	100%
<b>Category:</b>			
<b>Target version:</b>			
<b>Description</b>			
<p>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 АТФ это не следствия плохих параметров, а следствие фишек самой системы.</p>			

### 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 АТФ 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. Логишься 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.frctop, 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