

项目文件使用教程

代码所在网址: https://github.com/ADE150/Cas13a_sensitivity_research

文件使用

文件名缩写寓意

文件名单词	英文全称	备注
cal	calculate	通过计算手段获得数据
plot	plot	将某数据绘制为 (图表)
get	get	通过任何手段获得数据
bases	bases	碱基, 一般指A(-3)/A(-4)碱基
resi	residue	残基
dis	distance	碱基/残基的距离
angle	angle	一般指A(-3)/A(-4)碱基之间的二面角
nearby	nearby	一般指A(-3)/A(-4)碱基附近的所有残基

文件作用与文件功能

以下标粗的为重要的文件夹与可用的Python脚本:

- **Python与PyMOL批量处理/**
 - .git/: 版本管理文件夹
 - .gitattributes
 - .idea/
 - **00_install_pymol/**: 安装PyMOL的文件夹
 - install_pymol.bat: 安装PyMOL相关的文件
 - pymol-3.0.0-cp39-cp39-win_amd64.whl: 安装PyMOL所需文件
 - pymol安装教程.txt
 - **01_get_Cas13a_designer/**:
 - 5xwp.cif: tgRNA-Cas13a野生型蛋白的结构文件
 - **A01_get_Cas13a_pdb.py**: 获取两个Cas13a相关的结构文件并进行预处理
 - mt3.pdb
 - wt2.pdb
 - **02_molecular_dynamics_simulation/**
 - 40_PDB_files/: 40个动力学模拟结果 (PDB文件)
 - mt3_1.pdb
 - mt3_2.pdb
 -
 - mt3_20.pdb
 - wt2_1.pdb

- wt2_2.pdb
 -
 - wt2_20.pdb
- **A01_get_all_object.py**: 获取40个PDB文件中的所有对象, 并集中到一个文件中
- par.mdin_分子动力学参数: 分子动力学模拟时使用的参数
- **03_SASA_analysis/**
 - **A01_get_catalytic_core_PDB.py**: 将所有PDB文件的催化活性中心提取出来
 - **A02_cal_SASA_by_web.py**
 - **A03_cal_SASA_by_pymol.py**
 - **A04_plot_SASA.py**
 - **B01_get_two_SASA_with_solvent.py**
 - _catalytic_core_PDB_files_with_solvent/:
 - catalytic_core_PDB_files/
 - mt3_1.pdb
 - mt3_2.pdb
 -
 - mt3_20.pdb
 - wt2_1.pdb
 - wt2_2.pdb
 -
 - wt2_20.pdb
- **04_get_dis_bases_and_nearby/**: 残基和附近碱基接触稳定性
 - A(-3)到963.png
 - A(-3)到967.png
 - A(-4)到963.png
 - A(-4)到967.png
 - **A01_cal_key_bases_and_resis.py**: cal_bases_nearby.py: 计算A(-3)/A(-4)碱基到963和967的距离与二面角, distance_and_angle.xlsx文件中
 - **A02_plot_key_bases_and_resis.py**: 读取表格, 绘制极坐标图和时间演化图
 - **A03_show_dis_difference.py**
 - **B01_cal_bases_nearby.py**
 - distance_and_angle.xlsx
- **05_已得到且已处理的数据文件/**
 - 01_get_Cas13a_designer/
 - 5xwp.cif
 - mt3.pdb
 - wt2.pdb
 - 02_molecular_dynamics_simulation/
 - MT3(20).png
 - WT2(20).png
 - all_origin_object.pse
 - 03_SASA_analysis/
 - SASA结果.xlsx
 - SASA结果_1.png
 - SASA结果_1.xlsx

- SASA结果_2.png
 - SASA结果_2.xlsx
 - SASA结果_3.png
 - SASA结果_3.xlsx
 - SASA结果_上一次文件_pymol.xlsx
 - SASA结果_带溶剂_pymol.xlsx
 - init_SASA.txt
- 04_get_dis_bases_and_nearby/
 - A(-3)与A(-4)附近的残基.xlsx
 - A(-3)到963.png
 - A(-3)到967.png
 - A(-4)到963.png
 - A(-4)到967.png
 - MT3(6)碱基与关键残基.png
 - WT2(6)碱基与关键残基.png
 - 碱基与关键残基的距离对比.pse
- 06_trash/: 过程文件和不再需要的代码
 - Deprecated/: 已遗弃的代码文件
 - A02_caculate_d_and_angle.py
 - A03_get_nearby_resis.py
 - B02_caculate_distance_and_dihedral_angle.py
 - B03_contact_analysis_from_literature.py
 - cal_d_and_angle.py
 - distance_angle_evolution.png
 - gen_d_and_angle_plot.py
 - gen_d_and_angle_plot_single.py
 - other_functions.py
 - Temp_tools/
 - get_file_tree.py: 生成文件树
 - print_page_num.py
 - Test/
 - C01_test_feature.py
 - compare_bat.py
 - flash_all_1.bat
 - flash_all_2.bat
 - test_cwd.py
 - Uncomplete_data/
 - distance_and_angle.xlsx
 - distance_angle_plot.png
 - 便捷的pymol指令.txt
- __pycache__/
- **common_tools.py**: 工具类, 将常用函数提取至此处, 提高代码维护性与可塑性
- README.md: 项目文件使用教程的Markdown文件
- 项目文件使用教程.pdf

注意事项

1. 在运行任何Python脚本文件前，一定要将root_dir的路径改为该项目所在路径，如：
C:\Users\297\Downloads\Cas13a_sensitivity_research，最后一个文件夹不用加\号。
2. 计算类代码（名字带有「cal」的）需要保证所需PDB文件在原目录中，若需要移动，则需要更改common_tools下对应的变量
3. 绘图类代码需要在计算类代码运行完成，并且生成数据后使用！
4. 如果代码长时间未响应，可使用断点调试查看变量的运行值，或者使用插入多个print方法确定进度，考虑运行时间与电脑配置和环境有关，
5. 如果需要运行「SASA计算平台」计算代码，则需要安装用于自动操控浏览器的Edge驱动。请到[Microsoft Edge WebDriver | Microsoft Edge Developer](#)下载Edge浏览器的webdriver，并且将其安装目录添加到环境变量后再运行相关的代码
6. 代码仅供学习，需要完成其他用途请联系本人

如果对代码有问题，可加QQ联系：3185639982，并备注来意「Cas13a」。