# Kumpulan Script Computational Chemistry

# Installation Conda

1. Download miniconda

2. bash Miniconda3-latest-Linux-x86\_64.sh

3. Make sure conda is already in the path with: nano ~/.bashrc

4. Restart terminal

# Installation Acpype

1. conda install -c conda-forge acpype

2. conda activate

3. acpype

# Installation gmx\_MMPBSA

1. sudo apt install git

2. conda update conda

3. conda create -n gmxMMPBSA python=3.9 -y -q

4. conda activate gmxMMPBSA

5. conda install -c conda-forge mpi4py=3.1.3 ambertools=21.12 compilers -y -q

6. python -m pip install gmx\_MMPBSA

7. python -m pip install pyqt5

8. python -m pip install gmx\_MMPBSA -U

# Pemisahan Receptor dan Ligand menggunakan Terminal

1. grep "JZ4" 3htb.pdb > ligand.pdb

2. grep "ATOM" 3htb.pdb > protein.pdb

# RMSF Calculation Using NAMD with spesific ligand namely PG4 in protein 6pib #

1. Running in VMD TkConsole

2. source rmsfPG4.tcl

# Pembuatan Environment di Conda #

1. conda create -n xxxx

2. conda activate xxxx

3. conda install numpy

4. conda install pip

5. pip install networkx==2.3

# Menghapus Environment di Conda #

1. Kembali ke posisi base

2. conda env list

3. conda env remove --name xxxx

# Instalasi networkx untuk menjalankan CHARMM General Force Field (CGenFF)/ Installing networkx to run CHARMM General Force Field (CGenFF)-Cara 1 #

1. Install conda python version 3.7 : https://repo.anaconda.com/miniconda/Miniconda3-py37\_4.12.0-Linux-x86\_64.sh

2. make sure it says base

3. conda install -c anaconda numpy

4. pip install networkx==2.3

5. run the following command: python cgenff\_charmm2gmx\_py3\_nx2.py JZ4 jz4\_fix.mol2 jz4.str charmm36-mar2019.ff

# Instalasi networkx untuk menjalankan CHARMM General Force Field (CGenFF)-Cara 2

1. conda create -n cgenff python=3.7 -y -q

2. conda activate cgenff

3. conda install -c anaconda numpy

4. pip install networkx==2.3

5. python cgenff\_charmm2gmx\_py3\_nx2.py JZ4 jz4\_fix.mol2 jz4.str charmm36-mar2019.ff

# Instalasi Gnina (Pastikan sudah install CUDA) untuk ubuntu 20.04, jika eror install versi dan dependesinya via docker

1. sudo apt-get install build-essential cmake git wget libboost-all-dev libeigen3-dev libgoogle-glog-dev libprotobuf-dev protobuf-compiler libhdf5-dev libatlas-base-dev python3-dev librdkit-dev python3-numpy python3-pip python3-pytest

2. git clone https://github.com/gnina/gnina.git

3. cd gnina

4. mkdir build

5. cd build

6. cmake ..

7. make

8. make install

9. sudo su

10. git config --global --add safe.directory /home/yss/Programs/gnina/build/libmolgrid-prefix/src/libmolgrid

# Instalasi NAMD #

1. Download software NAMD pda link berikut yang terintegrasi dengan CUDA dan Linux https://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=NAMD

2. Ekstrak file tersebut dengan perintah diterminal: \*tar -zxvf xxxx.tar.gz\*

4. Masuk kedirektori dengan mengetik diterminal: \*cd xxx\*

6. Akses Root pada linux dengan perintah:\*sudo su\*

8. Copy file eksekusi di bin dengan perintah:\*cp namd3 /usr/local/bin\*

10. Cek isntalasi dengan perintah: \*namd3\*

# Instalasi VMD #

1. Download software VMD pda link berikut: https://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?UserID=&AccessCode=&ArchiveID=1649

2. Ekstrak file tersebut dengan perintah diterminal: \*tar -zxvf vmd-1.9.4a55.bin.LINUXAMD64-CUDA102-OptiX650-OSPRay185-RTXRTRT.opengl.tar.gz\*

4. Masuk kedirektori folder

5. Selanjutnya ketik: \*./configure\*

6. ubah directory dengan perintah: \*cd src\*

7. Selanjutnya jalankan: \*sudo make install\*

# Gromacs dengan AMBER FF14SB Force Field

1. Download dan ekstrak file berikut https://github.com/purnawanpp/Rekap-script/blob/main/amber14sb\_parmbsc1.ff.zip

# Gromacs dengan Force Field OPLS

1. Download dan ekstrak file berikut https://github.com/purnawanpp/Rekap-script/blob/main/GMX\_OPLSAAM.zip

# Tutorial Gromacs dengan CHARMM36 Force Field

1. Tambahkan hidrogen dengan menggunakan Chimera UCSF

2. Jnkan perintah berikut: perl sort\_mol2\_bonds.pl jz4.mol2 jz4\_fix.mol2

# Jalankan perintah berikut

1. conda activate networkx

2. python3 cgenff\_charmm2gmx\_py3\_nx2.py JZ4 jz4\_fix.mol2 jz4\_fix.str charmm36-mar2019.ff

3. gmx editconf -f jz4\_ini.pdb -o jz4.gro

# Docking dengan Gnina (pastikan sudah install openbabel dan vina\_split yang bisa dieksekusi diterminal)

1. gnina -r Protein.pdb -l Ligand.pdb --autobox\_ligand Ligand.pdb -o docked.sdf --seed 0 > hasil.txt

2. obrms -firstonly Ligand.pdb docked.sdf > RMSD.txt

3. obabel docked.sdf -O docked.pdbqt

4. vina\_split --input docked.pdbqt

5. obabel docked\_ligand\_1.pdbqt -O docked\_ligand\_1.pdb

# Semua Script Amber pada link berikut

1. https://github.com/purnawanpp/Rekap-script/blob/main/catatan\_amber

2. https://github.com/purnawanpp/Rekap-script/blob/main/Input\_file\_amber.zip

# Instalasi Cmake

1. sudo apt install libssl-dev

2. sudo apt install cmake

# OPSI-1- Instalasi AMBER22, memakai cuda 11.6, gcc dan g++ versi 9 dan cmake 3.25.0 dan LUBUNTU 20.04

1. sudo apt install bc csh flex xorg-dev zlib1g-dev build-essential \

libbz2-dev patch cmake bison gfortran python

2. Ekstrak filenya kedalam folder yang sama

3. mkdir build

4. cd build

5. Edit file run\_cmake pada bagian -DCUDA=TRUE Untuk menjalankan CUDAnya# Assume this is Linux:

cmake $AMBER\_PREFIX/amber22\_src \

-DCMAKE\_INSTALL\_PREFIX=$AMBER\_PREFIX/amber22 \

-DCOMPILER=GNU \

-DMPI=FALSE -DCUDA=FALSE -DINSTALL\_TESTS=TRUE \

-DDOWNLOAD\_MINICONDA=TRUE \

2>&1 | tee cmake.log

menjadi

cmake $AMBER\_PREFIX/amber22\_src \

-DCMAKE\_INSTALL\_PREFIX=$AMBER\_PREFIX/amber22 \

-DCOMPILER=GNU \

-DMPI=FALSE -DCUDA=TRUE -DINSTALL\_TESTS=TRUE \

-DDOWNLOAD\_MINICONDA=TRUE \

2>&1 | tee cmake.log

6. ./run\_cmake

7. Jika terjadi eror saat insatalasi miniconda buka file CMakeFiles/miniconda/download/Miniconda3-latest-Linux-x86\_64.sh buka di text editor terus ganti #/bin/sh menjadi #/bin/bash.

8. make install -j 4

10. Buatkan path pada folder agar file dapat dieksekusi: \*\*export PATH=$PATH:/home/amber/Programs/Amber/amber22/bin\*\*

11. Buatkan path conda: \*\*export PATH=$PATH://home/amber/Programs/Amber/amber22/miniconda/bin/\*\*

# OPSI-2- Instalasi AMBER22, memakai cuda 11.6, gcc dan g++ versi 9 dan cmake 3.23.2 dan ubuntu 20.04

1. sudo apt install bc csh flex xorg-dev zlib1g-dev build-essential \

libbz2-dev patch cmake bison gfortran python

2. Ekstrak filenya kedalam folder yang sama

3. mkdir build

4. cd build

5. ./run\_cmake

6. Jika terjadi eror saat insatalasi miniconda buka file CMakeFiles/miniconda/download/Miniconda3-latest-Linux-x86\_64.sh buka di text editor terus ganti #/bin/sh menjadi #/bin/bash.

7. make install

8. cmake ../ \

-DCMAKE\_INSTALL\_PREFIX=~/Software/Amber22\_cuda \

-DCOMPILER=GNU \

-DMPI=FALSE -DCUDA=TRUE -DINSTALL\_TESTS=TRUE \

-DDOWNLOAD\_MINICONDA=TRUE -DMINICONDA\_USE\_PY3=TRUE

9. make install -j 4

10. Tes Gpu dengan source ~/Amber22\_cuda/amber.sh \

cd ~/Amber22\_cuda \

make test.cuda.serial \

make test.serial \

# Menjalankan Autodock di GPU (adgpu)

1. Install Cuda terlebih dahulu tutorialnya ada divideo ini: https://www.youtube.com/watch?v=snnej7icK\_Y&ab\_channel=PurnawanPontanaPutra

2. Download adgpu disini: https://github.com/ccsb-scripps/AutoDock-GPU/releases/download/v1.5.3/adgpu-v1.5.3\_linux\_ocl\_128wi

3. Rename file tersebut menjadi adgpu

4. Buka terminal lalu: chmod +x adgpu

5. Buatkan path dengan perintah: nano ~/.bashrc (pelajari cara pembuatan path di youtube/google)

6. Jalankan docking dengan perintah: adgpu --ffile 4ieh\_protein.maps.fld --lfile 4ieh\_ligand.pdbqt --nrun 100

# Instalasi Vina-GPU

1. install cuda

2. Install open cl nvidia dengan perintah : sudo apt-get install -y nvidia-opencl-dev

3. install clinfo dengan perintah: sudo apt-get install clinfo

4. make clean

5. make source

6. Buatkan path

7. rename Vina-GPU.exe menjadi vinagpu

8. jalankan dengan perintah: vinagpu --config 2bm2\_config.txt

# Masuk Gamess-us NVIDIA Gpu

1. docker run -it nvcr.io/hpc/gamess:17.09-r2-libcchem

2. Mengetahi id docker: docker ps

3. Masuk di spesifik id docker: docker exec -it 2f89329e4907 bash

# Memperbesar font pada tkconsule

1. Jalankan perintah berikut: tkcon font calibri 12

# Menjalankan Gnina, open babel dan XTB

1. obabel drug.pdb -O drug.xyz -h

2. Tambahkan hidrogen secara manual dengan chimera simpan dengan nama drug\_H.pdb

3. obabel drug\_H.pdb -O drug\_H.xyz

4. xtb drug\_H.xyz --opt

5. obabel xtbopt.xyz -O drug\_dock.pdb

6. gnina -r rec.pdb -l lig.pdb --autobox\_ligand lig.pdb -o docked.sdf --seed 0 > hasil.txt

7. gnina -r rec.pdb -l drug\_dock.pdb --autobox\_ligand lig.pdb -o docked.sdf --seed 0 > hasil.txt

# Preparasi reseptor dan ligand pada charmmgui

1. grep ATOM complex.pdb > rec.pdb

2. grep CODE\_LIGAND complex.pdb > lig.pdb

3. cat rec.pdb lig.pdb > hasil.pdb

# Merubah komma di grace agar menjadi otomatis titik

1. export LC\_ALL="en\_US.UTF-8"