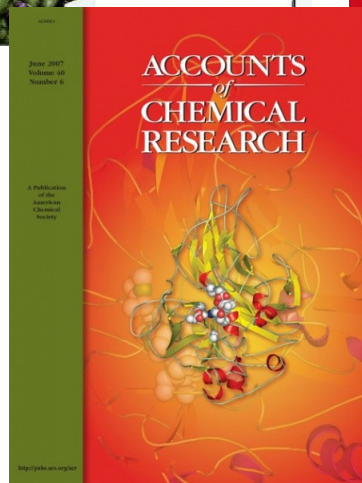
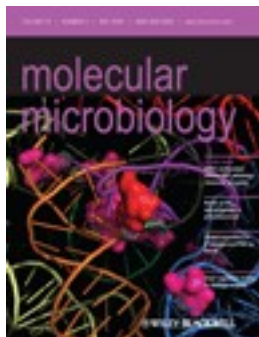
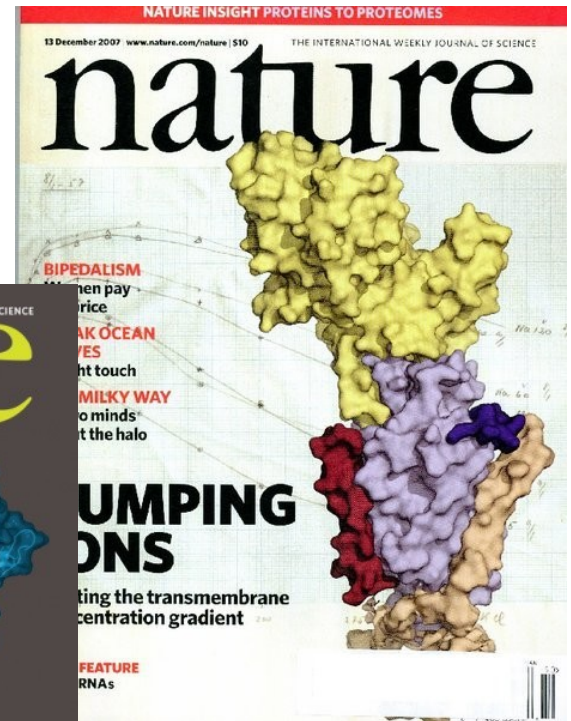
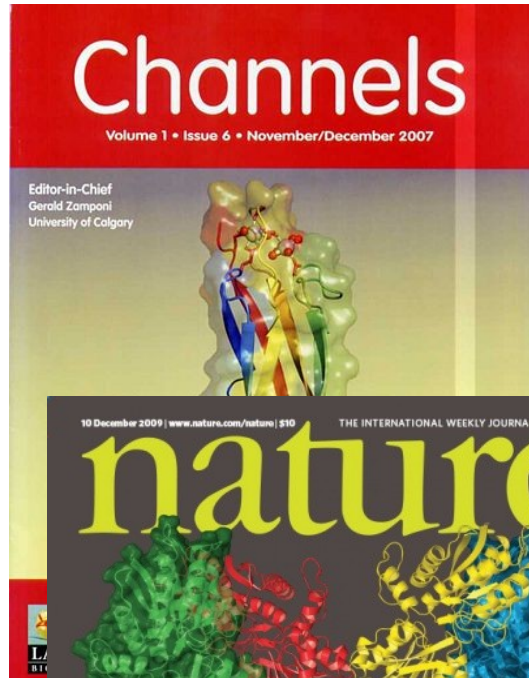


Визуализация третичных структур, PyMol

Формат PDB-файла

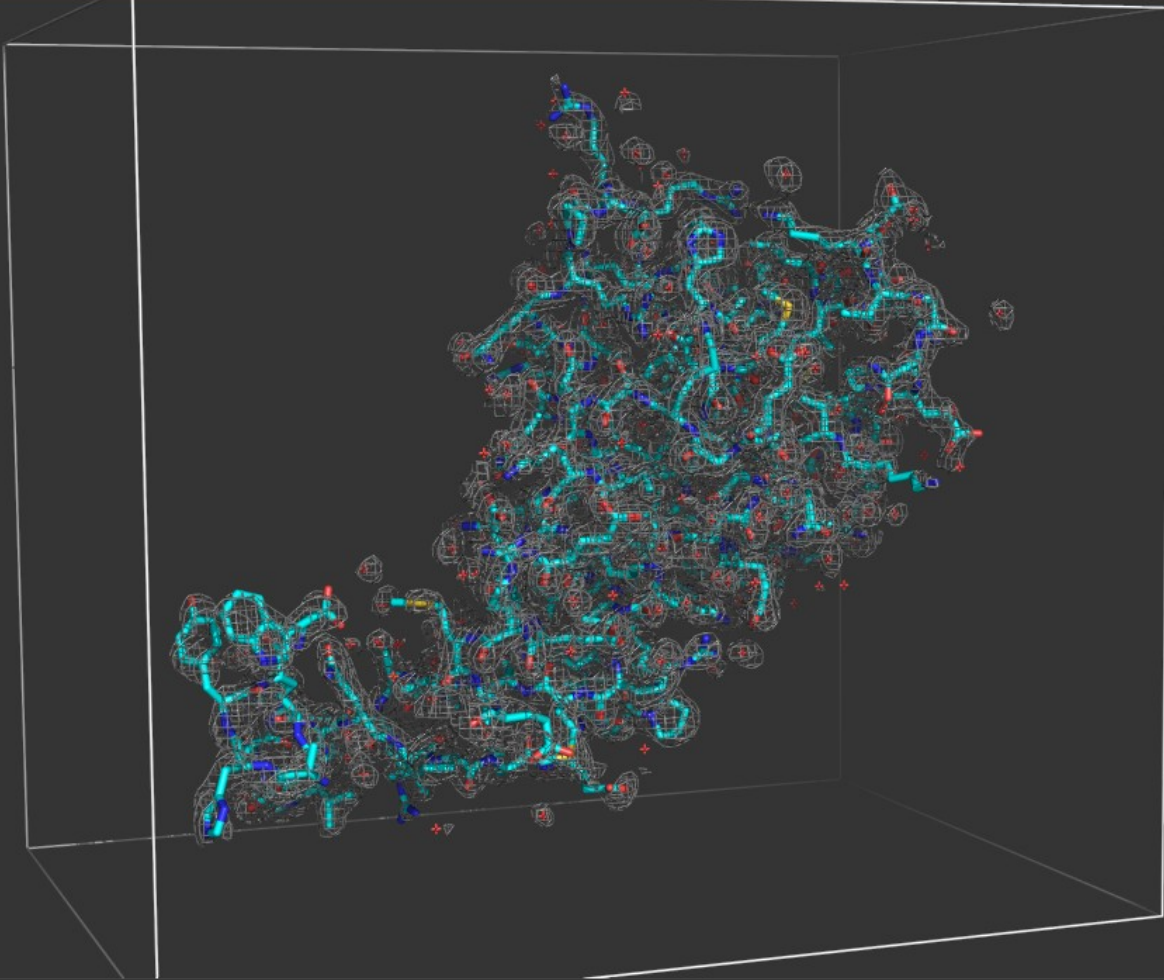
| | | | | | | | | | | | |
|------|----|-----|-----|---|---|--------|--------|--------|------|-------|---|
| ATOM | 1 | N | THR | A | 3 | 16.514 | -2.279 | 12.062 | 1.00 | 43.86 | N |
| ATOM | 2 | CA | THR | A | 3 | 17.180 | -2.102 | 13.371 | 1.00 | 45.43 | C |
| ATOM | 3 | C | THR | A | 3 | 16.995 | -0.675 | 13.903 | 1.00 | 48.26 | C |
| ATOM | 4 | O | THR | A | 3 | 16.888 | -0.476 | 15.109 | 1.00 | 56.27 | O |
| ATOM | 5 | CB | THR | A | 3 | 18.658 | -2.818 | 13.510 | 1.00 | 61.61 | C |
| ATOM | 6 | OG1 | THR | A | 3 | 18.953 | -3.305 | 14.848 | 1.00 | 40.35 | O |
| ATOM | 7 | CG2 | THR | A | 3 | 19.796 | -1.970 | 12.934 | 1.00 | 66.69 | C |
| ATOM | 8 | N | ILE | A | 4 | 16.880 | 0.318 | 13.028 | 1.00 | 35.25 | N |
| ATOM | 9 | CA | ILE | A | 4 | 16.614 | 1.653 | 13.545 | 1.00 | 31.81 | C |
| ATOM | 10 | C | ILE | A | 4 | 15.180 | 1.537 | 14.149 | 1.00 | 36.74 | C |
| ATOM | 11 | O | ILE | A | 4 | 14.824 | 2.204 | 15.125 | 1.00 | 23.77 | O |
| ATOM | 12 | CB | ILE | A | 4 | 16.557 | 2.686 | 12.441 | 1.00 | 32.25 | C |
| ATOM | 13 | CG1 | ILE | A | 4 | 16.613 | 4.069 | 13.040 | 1.00 | 32.26 | C |
| ATOM | 14 | CG2 | ILE | A | 4 | 15.242 | 2.611 | 11.664 | 1.00 | 22.31 | C |
| ATOM | 15 | CD1 | ILE | A | 4 | 16.468 | 5.127 | 11.966 | 1.00 | 56.11 | C |
| ATOM | 16 | N | LYS | A | 5 | 14.363 | 0.675 | 13.544 | 1.00 | 41.48 | N |
| ATOM | 17 | CA | LYS | A | 5 | 13.005 | 0.429 | 14.018 | 1.00 | 40.63 | C |
| ATOM | 18 | C | LYS | A | 5 | 13.126 | -0.115 | 15.426 | 1.00 | 43.60 | C |
| ATOM | 19 | O | LYS | A | 5 | 12.360 | 0.211 | 16.357 | 1.00 | 45.74 | O |
| ATOM | 20 | CB | LYS | A | 5 | 12.399 | -0.681 | 13.198 | 1.00 | 41.30 | C |
| ATOM | 21 | CG | LYS | A | 5 | 11.236 | -0.268 | 12.361 | 1.00 | 61.61 | C |
| ATOM | 22 | CD | LYS | A | 5 | 11.427 | -0.757 | 10.930 | 1.00 | 66.72 | C |
| ATOM | 23 | CE | LYS | A | 5 | 10.112 | -0.760 | 10.137 | 1.00 | 90.19 | C |
| ATOM | 24 | NZ | LYS | A | 5 | 10.059 | -1.825 | 9.080 | 1.00 | 69.42 | N |
| ATOM | 25 | N | ASP | A | 6 | 14.102 | -0.973 | 15.597 | 1.00 | 38.66 | N |

PyMol



PyMol

PyMOL Viewer



all A S H L C
1rss_map A S H L C
1rss A S H L C
m1 A S H L C

Mouse Mode 3-Button Viewing
Buttons L M R Wheel
& Keys Rota Move MovZ Slab
Shft +Box -Box Clip MovS
Ctrl +/- PkAt Pk1 MovSZ
CtSh Sele Orig Clip MovZ
SnglClk +/- Cent Menu
Db1Clk Menu - PkAt
Selecting Residues
State 1/ 1

PyMOL>_

EN 18:40

План рассказа

- Короткий обзор
- Введение в основы
- Как сделать изображение для публикации, скрипты
- Упражнения

Введение

Для чего нужен PyMol

- Визуализация pdb и прочих файлов с координатами атомов
- Изготовление высококачественных изображений
- Начальное редактирование структур

Системные требования

Компьютер: чем мощнее процессор и чем больше памяти, тем лучше

3D монитор не обязателен, но поддерживается

Операционная система: любая, под Linux проще установить, и он лучше работает с памятью.

Как установить?

- Компиляция из исходников:

<http://pymol.svn.sourceforge.net/>

- Установка бинарных пакетов в Ubuntu Linux: `sudo apt-get install pymol`

- Установка бинарных пакетов в Windows:

- Временный ресурс:

<http://www.lfd.uci.edu/~gohlke/pythonlibs/#pymol>

- Компиляция под Windows:

<http://arcib.dowling.edu/~darakevn/installerpaper.pdf>

GPL ли PyMol?

Да, PyMol это GPL-программа;
исходный код доступен на sourceforge.net

Бинарные пакеты для windows стоят
денег и продаются:

<http://pymol.org/academic.html>

Бинарные пакеты для Linux собираются
майтенерами

ОСНОВНОЙ ВИД

The screenshot displays the PyMOL Molecular Graphics System interface. The main window shows a 3D molecular model with a cyan ribbon structure and a gray mesh overlay. The command window at the top left contains the following text:

```
PyMOL>isomesh m1, 1rss_map, 1.0, 1rss, carve=1.6  
Isomesh: created "m1", setting level to 1.000  
ObjectMesh: updating "m1".  
PyMOL>color gray, m1  
Executive: Colored 1 object.  
PyMOL>ray  
Ray: render time: 28.38 sec. = 126.9 frames/hour (28.38 sec. accum.).  
PyMOL>bg_color gray20  
PyMOL>ray  
Ray: render time: 29.78 sec. = 120.9 frames/hour (58.16 sec. accum.).  
PyMOL>
```

The object list on the right side of the PyMOL Viewer window shows the following objects:

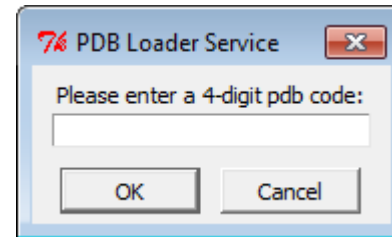
| Object Name | A | S | H | L | C |
|-------------|---|---|---|---|---|
| all | A | S | H | L | C |
| 1rss_map | A | S | H | L | C |
| 1rss | A | S | H | L | C |
| m1 | A | S | H | L | C |

The mouse mode settings are displayed at the bottom right of the PyMOL Viewer window:

```
Mouse Mode 3-Button Viewing  
Buttons L M R Wheel  
& Keys Rota Move MovZ Slab  
Shft +Box -Box Clip MovS  
Ctrl +/- PkAt Pk1 MovSZ  
CtSh Sele Orig Clip MovZ  
SnglClk +/- Cent Menu  
DblClk Menu - PkAt  
Selecting Residues  
State 1/ 1
```

The image size is 1146 x 698. The PyMOL Viewer window title is "PyMOL Viewer". The command window title is "The PyMOL Molecular Graphics System".

Как загрузить структуру?



Из интернет:

- в меню выбрать соответствующий plugin
- или в командной строке: *fetch 1xxx*

Локальный файл:

- File->Open

Использование мыши

- Левый клик + движение = вращение молекулы
- Средний клик + движение = перемещение молекулы
- Правый клик + движение верх/вниз = приближение/удаление молекулы
- Колесо = изменение уровня обрезания молекулы
- Все манипуляции относятся к камере, а не координатам структуры

Меню объекта/выборки

The screenshot shows the PyMOL Viewer interface. A 3D molecular model is displayed in the center. A context menu is open over the model, listing the following objects: all, 1rss_map, 1rss, and m1. Each object has a set of buttons labeled A, S, H, L, and C. A red arrow points from the menu to a specific atom in the model. The bottom right corner of the viewer shows the mouse mode settings: Mouse Mode 3-Button Viewing, Buttons L M R Wheel, & Keys Rota Move MovZ Slab, Shft +Box -Box Clip MovS, Ctrl +/- PkAt Pk1 MovSZ, CtSh Sele Drig Clip MovZ, SnglClk +/- Cent Menu, DblClk Menu - PkAt, Selecting Residues, State 1/ 1.

| Object | A | S | H | L | C |
|----------|---|---|---|---|---|
| all | A | S | H | L | C |
| 1rss_map | A | S | H | L | C |
| 1rss | A | S | H | L | C |
| m1 | A | S | H | L | C |

A,S,H,L,C

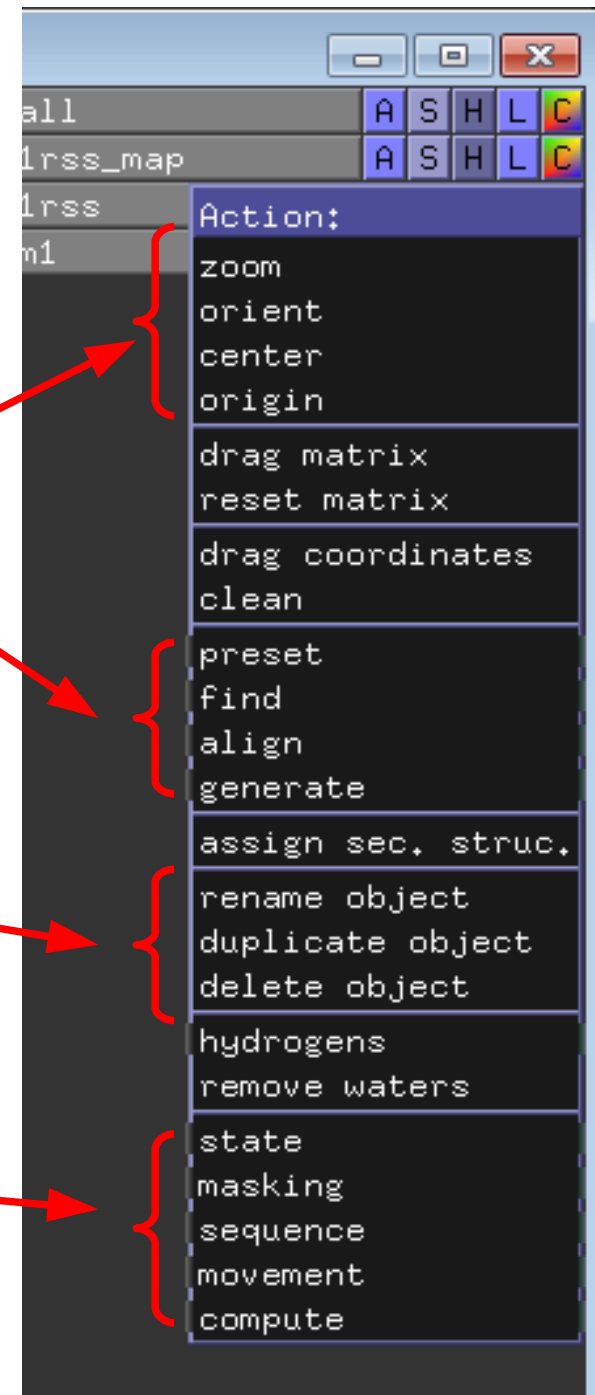
A=Action

Манипуляции с ориентацией

Предустановки изображения
и т.д.

Манипуляция с объектом

Прочее



S=Show, H=Hide

The image displays a molecular visualization software interface with a dark background. It features eight different representations of a protein structure arranged in a 2x4 grid. The top row shows 'lines' (a pink wireframe), 'sticks' (a yellow stick model), 'spheres' (a space-filling model with cyan, red, and blue spheres), and 'surface' (a red and blue surface representation). The bottom row shows 'mesh' (a blue and red wireframe mesh), 'dots' (a grey dot model with red and blue spheres), 'ribbon' (a pink ribbon model), and 'cartoon' (a yellow cartoon model). To the right of the grid is a command list with a 'Show:' menu. The 'Show:' menu is currently open, showing a list of display styles: 'as', 'lines', 'sticks', 'ribbon', 'cartoon', 'label', 'cell', 'nonbonded', 'dots', 'spheres', 'nb_spheres', 'mesh', 'surface', 'organic', 'main chain', 'side chain', and 'disulfides'. The 'lines' style is currently selected in the menu.

| Object | H | S | A | L | C |
|------------|---|---|---|---|---|
| all | | | | | |
| 1rss_map | A | S | H | L | C |
| 1rss | | | | | |
| m1 | | | | | |
| 1rss_e_chg | | | | | |
| 1rss_e_map | | | | | |
| 1rss_e_pot | | | | | |
| (bk) | | | | | |
| (sele) | | | | | |
| (bet) | | | | | |

Show:

- as
- lines
- sticks
- ribbon
- cartoon
- label
- cell
- nonbonded
- dots
- spheres
- nb_spheres
- mesh
- surface
- organic
- main chain
- side chain
- disulfides

L=Label

The image shows a screenshot of a molecular modeling software interface. On the left, a 3D molecular model is visible, showing a protein backbone with atoms colored by element (carbon in cyan, oxygen in red, nitrogen in blue). The background is dark with some numerical data points. On the right, a panel displays a list of labels and their associated properties. The labels are listed in a column, and their corresponding properties are listed in a second column. The 'Label:' property is highlighted in blue. Below the main list, there is a section titled 'Other Properties:' with a list of additional properties.

| | |
|----------|--------------------|
| all | A S H L C |
| 1rss_map | A S H L C |
| 1rss | Label: |
| m1 | clear |
| 1rss_e_c | residues |
| 1rss_e_m | chains |
| 1rss_e_p | segments |
| (bk) | atom name |
| (sele) | element symbol |
| (bet) | residue name |
| | residue identifier |
| | chain identifier |
| | segment identifier |
| | b-factor |
| | occupancy |
| | vdw radius |
| | other properties |
| | atom identifiers |

Other Properties:

- formal charge
- partial charge (0.00)
- partial charge (0.0000)
- elec. radius
- text type
- numeric type
- stereochemistry

C=Color

The screenshot shows a software interface with a list of entries on the left and a menu on the right. The list includes 'all', '1rss_map', '1rss', 'm1', '1rss_e_', '1rss_e_', '1rss_e_', '(bk)', '(sele)', and '(bet)'. The '1rss_e_' entry is selected, and a menu is open over it. The menu has two columns: 'Atoms' and 'Color:'. The 'Atoms' column contains 'HNOS...', 'CHNOS...', 'CHNOS...', 'CHNOS...', 'CHNOS...', 'CHNOS...', 'CHNOS...', 'set 2', 'set 3', 'set 4', 'set 5', and 'set 6/H'. The 'Color:' column contains 'by element', 'by chain', 'by ss', 'spectrum', 'auto', 'reds', 'greens', 'blues', 'yellows', 'magentas', 'cyans', 'oranges', 'tints', and 'grays'. The 'by element' option is highlighted.

| | Atoms | Color: |
|----------|----------|------------|
| all | | A S H L C |
| 1rss_map | | A S H L C |
| 1rss | | |
| m1 | HNOS... | by element |
| 1rss_e_ | CHNOS... | by chain |
| 1rss_e_ | CHNOS... | by ss |
| 1rss_e_ | CHNOS... | spectrum |
| (bk) | CHNOS... | auto |
| (sele) | CHNOS... | reds |
| (bet) | CHNOS... | greens |
| | CHNOS... | blues |
| | CHNOS... | yellows |
| set 2 | | magentas |
| set 3 | | cyans |
| set 4 | | oranges |
| set 5 | | tints |
| set 6/H | | grays |

Выборки

Можно задать с помощью кликов мыши,
удерживая SHIFT

Удобнее писать выражения в командной
строке

Например:

Select backbone, name ca+c+n

Операторы множеств

1. Логические операторы AND, OR, NOT

Операция OR может быть записана как ",".

Упражнение

Документ PDB содержит описание структуры, состоящей из белка, фрагмента ДНК и молекул воды. Что получится, если задать следующие команды ?

- *select protein or dna*
- *select protein and dna*
- *select not water*

2. Оператор WITHIN(...)

- *select all within 3.5 of resi 20*
- *select byres(n. ca) within 3.5 of resn LIG*

Help selections

Длинное

name <atom names>

resn <residue names>

resi <residue identifiers>

chain <chain ID>

id <original-index>

hydrogen

all

visible

hetatm

byres <selection>

byobj <selection>

around <distance>

expand <distance>

in <selection>

like <selection>

<selection> within <distance> of <selection>

<selection> w. <distance> of <selection>

Короткое

n. <atom names>

r. <residue names>

i. <residue identifiers>

c. <chain identifiers>

h.

*

v.

br. <selection>

bo. <selection>

a. <distance>

e. <distance>

l. <selection>

Примеры выборов

`sel=select`

sel s1, n. ca and c. A : все атомы CA в цепи A

sel s2, n. ca and (c. A or c. B) : атомы CA цепей A и B

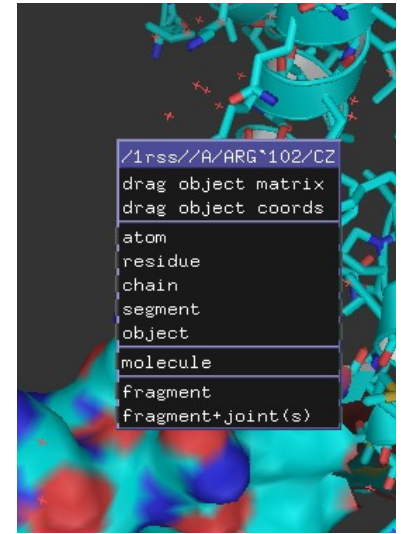
sel s3, resn GLU and resi 100 : остаток 100 если он GLU

sel s4, resi 100-120+130 : атомы остатков 100-120 и 130

sel s5, byres(name CG) : атомы остатков где есть CG

Иерархическое определение выборки

Легко увидеть иерархию правым
кликом по атому



sel s1, a/102/cz : атом cz в остатке 102

sel s2, 100-120/N and c. A : атомы N в
остатках 100-120 цепи a

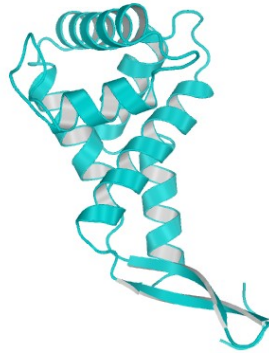
sel s3, a/100+120/ : все атомы остатков
100 и 120 в цепи A

Трассировка лучей, команда ray

<http://www.pymolwiki.org/index.php/Ray>



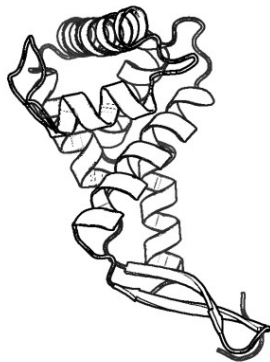
No ray



ray_trace_mode,0



ray_trace_mode,1



ray_trace_mode,2



ray_trace_mode,3

Настройки изображения

<http://www.pymolwiki.org/index.php/Category:Settings>

- PyMol содержит порядка 600 настроек
- Не все документированы
- Большинство интуитивно понятны
- Настройки доступны через меню и в командной строке набрать:
set {первые буквы имени опции} и клавиша `tab` для построения

Примеры

#initial setup

viewport 600, 600 --- размер графического окна

set auto_zoom, off --- не приближать новые объекты

set auto_show_lines, off --- не показывать линии автоматически

set auto_show_selections, off --- не показывать выборку автоматически

#cartoon parameters

set cartoon_fancy_helices, 1 --- изменение вида спиралей

set cartoon_highlight_color, grey60 ---цвет внутренней стороны спиралей

set cartoon_dumbbell_length, 1.0 ---ширина ленты в спирали

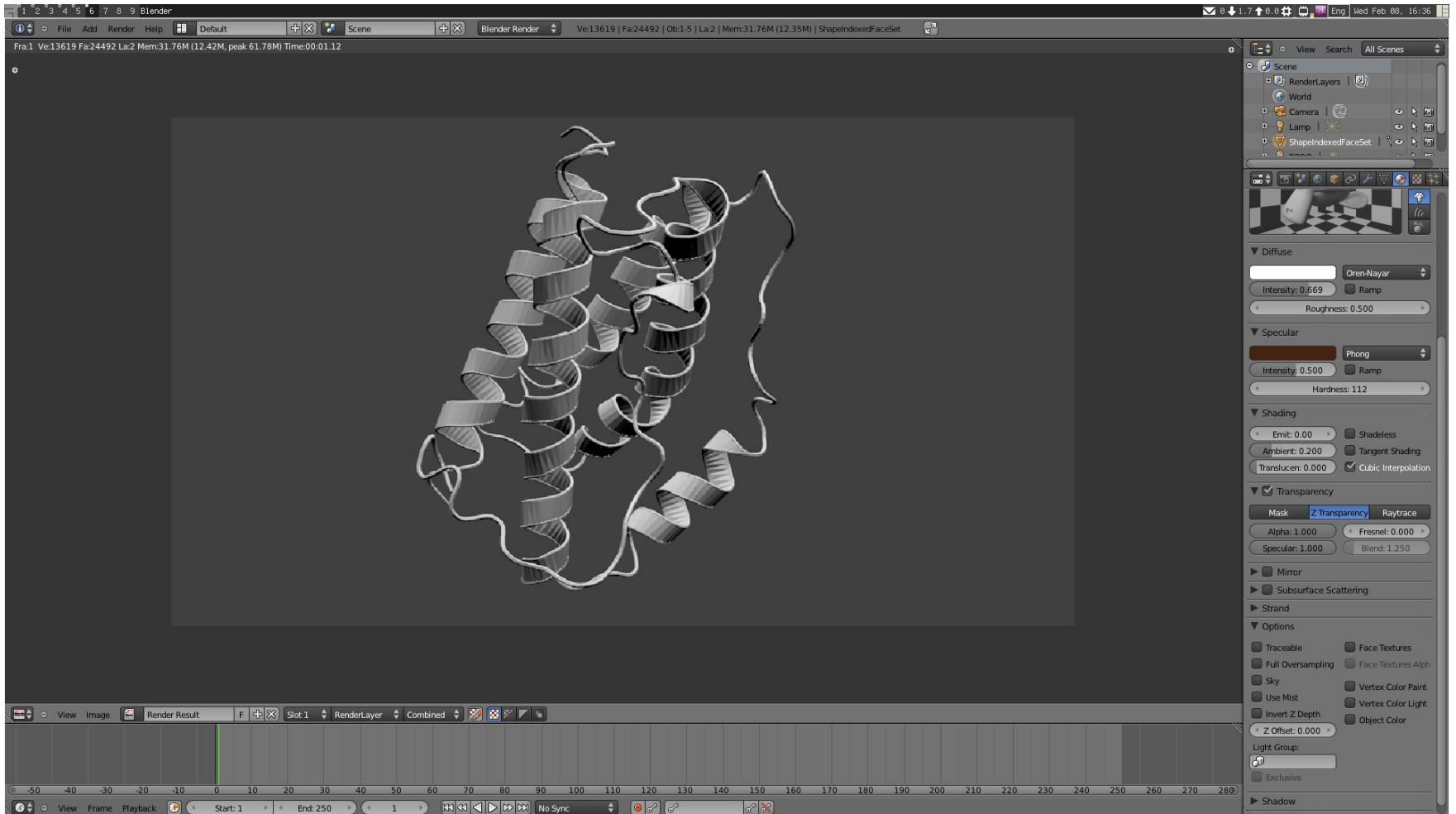
set cartoon_rect_length, 1.40000 --- ширина ленты в бета

set cartoon_loop_radius, 0.3 --- толщина неструкт. участка

set cartoon_smooth_loops=0 --- без сглаживания

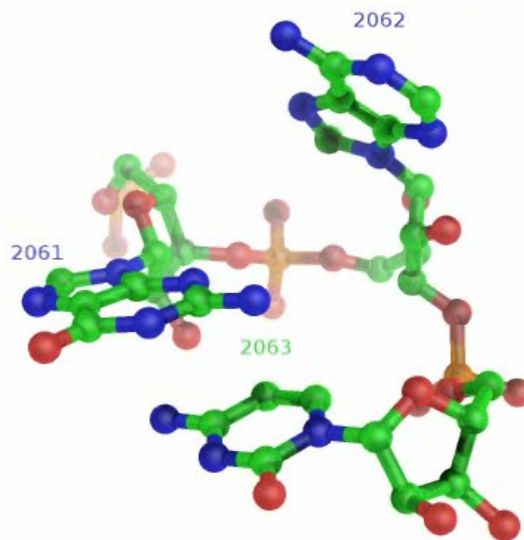
Blender

<http://www.pymolwiki.org/index.php/Blender>



Анимация в PyMol

Если структура содержит более чем одну модель, то в PyMol можно анимировать движение молекулы переходом от одной модели к другой



Анимация, основы

GUI :

Вращение вокруг объекта на N секунд:

Movie->Program->Camera->X-Roll->N Seconds

Movie->Program->Camera->Y-Roll->N Seconds

Покачивание:

Movie->Program->Camera->X-Rock->X-Degrees over
N-Seconds

Пример

Action->Preset->Technical (viewer gui)

Scene->Store->F1

zoom i. 90 # увеличение остатка 90

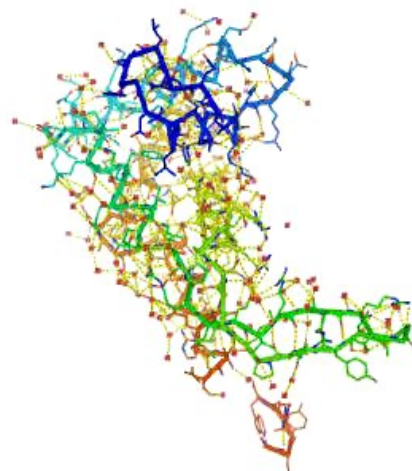
Scene->Store->F2

Movie->Program->Scene Loop->Y-Rock->4

Seconds Each

File-> Save movie

Результат



Анимация, терминология

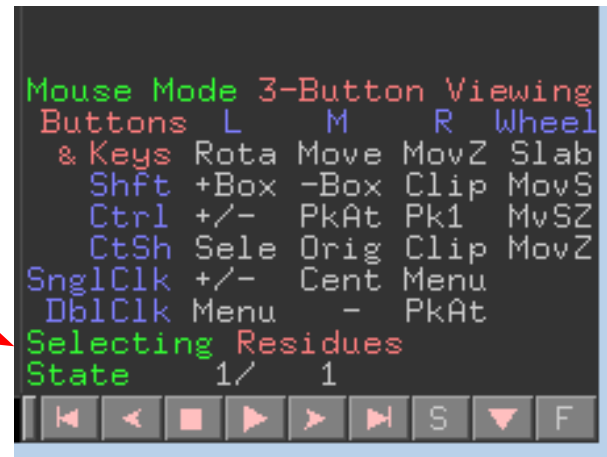
Объект и выборка : смотри выше

states: конформация или набор координат

scene: позиция камеры и отображение

frames: это кадры в анимации, содержит
state и scene

Movie panel:



Анимация, команды

mset 1 -55 : задать анимацию от 1 до 55 state на 55 кадров (frames)

mset 1 x90 : задать анимацию первого state от 1 до 90 кадров

mset 1 x30 1 -15 15 x30 15 -1 : первые 30 кадров state 1, следующие 15 кадров это состояния 1-15, следующие 30 кадров состояние 15, следующие 15 кадров состояния от 15 до 1

Анимация, команды

mview : команда для создания ключевых точек

Пример :

mset 1 x100

frag leu # создаём LEU

orient # ориентируем его

mview store # запоминаем ключевую точку

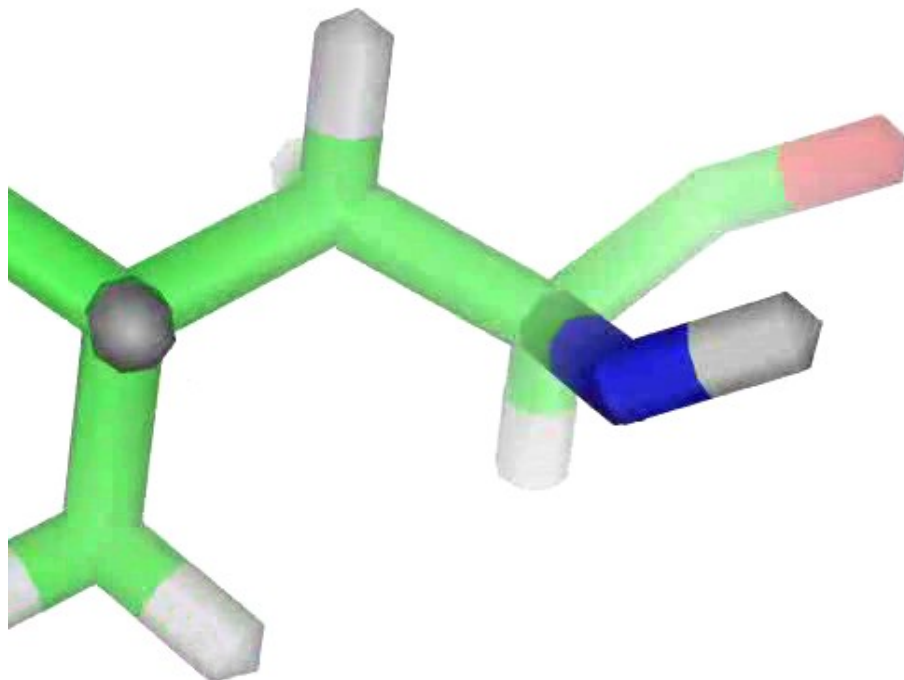
frame 100 # переходим в кадр 100

zoom ID 10 # увеличиваем атом №10

mview store # запоминаем ключевую точку

mview reinterpolate # делаем интерполяцию

Результат mview



Дополнительные команды

mmatrix : устанавливает вид для первого кадра

util.mrock : покачивание сцены на определённый угол

util.mrock(start, finish, angle, phase, loop-flag)

util.mroll : вращение вокруг оси Y

util.mroll(start, finish, loop-flag)

mdo : (устарело) запуск какой-либо команды в заданном кадре

Сохранение анимации

Старый путь:

set ray_trace_frames, 1

mpng mymovie

Нужны программы avidemux, Virtual Dub, mencoder для того, чтобы собрать ролик с нужным сжатием (кодек)

Новый путь: File->Save movie ; есть недостаток, старый офис понимает только avi с определённым кодеком

Моделирование и редактирование в PyMol

- Можно перемещать объекты и сохранять их новые координаты
- Можно рассчитать вторичную структуру
- Можно менять координаты отдельных атомов
- Можно вносить мутации в белок (но не НК)
- Можно конвертировать L->D аминокислоты
- Можно добавлять протоны
- Можно выравнивать в пространстве молекулы
- Можно добавлять некоторые фрагменты из библиотеки и собственные

Перемещение объектов

Рекомендуемый порядок действий:

Set retain_order # надо сохранить порядок атомов

create newobj, sele # создаём новый объект,
страховка

Translate [0,10,0], newobj # перемещаем

Rotate x,90,newobj # вращаем

Save newfile.pdb, newobj

Операции по перемещению и вращению можно
делать мышкой в режиме editing

Изменение координат отдельных атомов и объектов

alter_state 1, (pdb1cse), x=x-10.0

Или

Translate [0, 10, 0], A/100/NZ

Удаление связей, НО НЕ АТОМОВ

Выберите первый атом, ctrl+middle click,
выберите второй атом, ctrl+middle click
И *unbond* или ctrl+D

Внимание! Координаты атомов не
меняются, только исчезает
изображение связи

Мутация аминокислот

Запустите wizard->mutagenesis

Выберите аминокислоту для мутации

Справа выберите, на что мутировать

Выберите ротаметр с помощью
управления movie

Закончите процедуру с Apply

Добавление протонов

Работает с молекулами, т.е. объектами

create gln, A/101/

h_add gln

Или через меню action объекта.

Есть вероятность, что протоны будут добавлены неверно, если PyMol неправильно угадал валентность тяжёлых атомов.

Выравнивание в пространстве

Задача достаточно нетривиальная, и есть разные пути:

Белки:

align, super, fit

Другое:

pair_fit

Желательно указывать родственные атомы в молекулах

pair_fit (trna10 and resid 10:15 and name P), (ref4 and resid 10:15 and name P)

Добавление органических фрагментов или а.к.

- С помощью ctrl+middle click выделите шариком атом, к которому будет присоединяться фрагмент

В меню Build выберите нужный фрагмент

С помощью ctrl+left click выберите торсионный угол

Или

- Создайте свою молекулу (ChemSketch)

Сохраните как pk1 в

<pymol_path>/data/chempy/fragments

```
editor.attach_fragment('pk1','my_fragment_name',11,0)
```

11 - это номер атома в фрагменте для связи

Sculpting, что ЭТО?

Это похоже на real-time оптимизатор геометрии, но это алгоритм, который старается сохранить значения длины связей, углов, торсионных углов при изменении координат.

Как запустить sculpting?

У вас мощный компьютер? Тогда:

Переводим мышь в режим редактирования

Выбираем "auto-sculpting" из меню Sculpting

Выбираем Sculpting из меню Wizard

Выбираем центральный атом для модификаций

Ctrl-middle-click

Тянем атом в любую сторону ctrl-left-click-and-drag

Profit!

Скриптование в PyMol

Возможны как скрипты из команд, так и скрипты на Python

Запуск скриптов из команд:

@ myfile.pml

Запуск скриптов на питоне:

run myfile.py

Пример

```
fetch 1c1l, async=0
```

```
as lines, n. C+O+N+CA
```

```
zoom i. 4+5
```

```
mset 1 x1440
```

```
mview store
```

```
python
```

```
for x in range(0,144):
```

```
    cmd.frame((10*x)+1)
```

```
    cmd.zoom("n. CA and i. " + str(x) + "+" + str(x+1))
```

```
    cmd.mview("store")
```

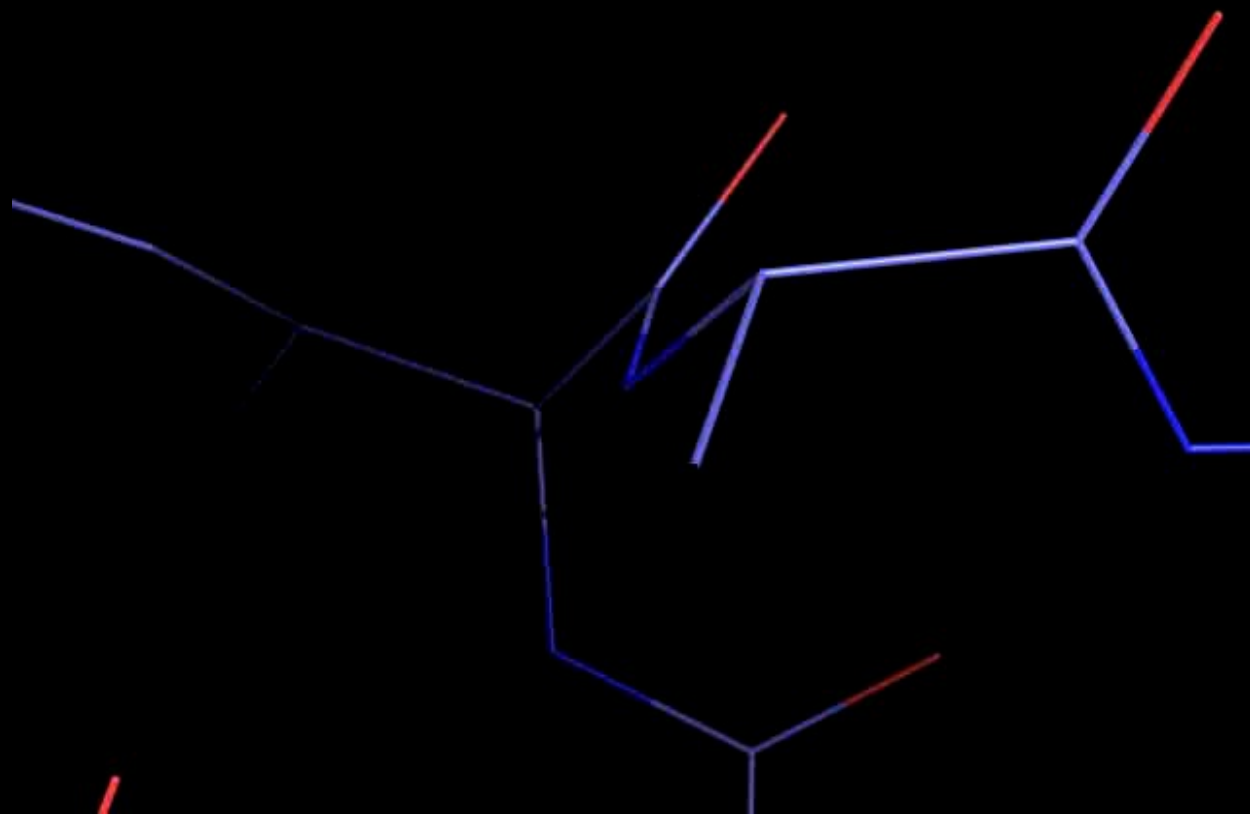
```
python end
```

```
frame 288
```

```
mview store
```

```
mview reinterpolate
```


Результат



Источники информации

www.pytolwiki.org

Internet