

Administración GNU/Linux

Nivel I

UADER

Trabajo Práctico Final

VMD (Visual Molecular Dynamics)

Bustamante, Juan Pablo

`jpbioinformatico@gmail.com`

Fecha de entrega:

07 de agosto de 2009

Copyright (c) 2009 Bustamante, Juan Pablo. Permission is granted to copy, distribute and/or modify this document under the terms of the GNU Free Documentation License, Version 1.2 or any later version published by the Free Software Foundation; with no Invariant Sections, no Front-Cover Texts, and no Back-Cover Texts.

ÍNDICE

Introducción.....	4
Programa.....	4
Instalación.....	4
Características.....	5
Cuestiones esenciales de VMD.....	6
1. Cargando una molécula.....	6
2. Visualizando la proteína.....	7
3. Explorando las diferentes maneras de graficación.....	8
4. Diferentes selecciones.....	9
5. Múltiples representaciones.....	9
6. Visor de secuencias.....	10
7. Grabando el trabajo.....	11
8. Usando el menú principal.....	13
9. Menú de ayuda.....	14
10. Menú de extensiones.....	14
Algunas visualizaciones de la misma molécula.....	15
Licencia.....	17
Bibliografía.....	21

INTRODUCCIÓN

En este documento se aprenderán las cuestiones básicas de manejo de un software de visualización y de modelado molecular como es el VMD. El principal interés en el mismo surge porque que es uno de los programas más utilizados por investigadores nacionales e internacionales a la hora de presentar distintas gráficas y modelos biológicos.

PROGRAMA

VMD es un programa de visualización y de modelado molecular. Está diseñado para la visualización y el análisis de sistemas biológicos como proteínas, ácidos nucleicos, ensamblajes de bicapas de lípidos, entre otras. Puede ser usado para ver más moléculas en general, puede leer archivos del estándar Protein Data Bank (PDB) y mostrar el contenido estructural. VMD provee una amplia variedad de métodos para el renderizado o dibujado de una molécula. Además, puede ser usado para animar y analizar la trayectoria de simulaciones de dinámica molecular (MD). Puede manipular interactivamente moléculas que estén siendo simuladas en computadoras remotas. El sitio oficial del programa es el siguiente: <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>. Desde allí se puede bajar el código fuente.

INSTALACIÓN

1. Descargar el paquete “vmd-1.8.6.bin.LINUX.opengl.tar” para la arquitectura de máquina y el sistema operativo correspondientes.
2. Luego se debe descomprimir y desempaquetar el paquete descargado dentro del directorio de trabajo elegido.

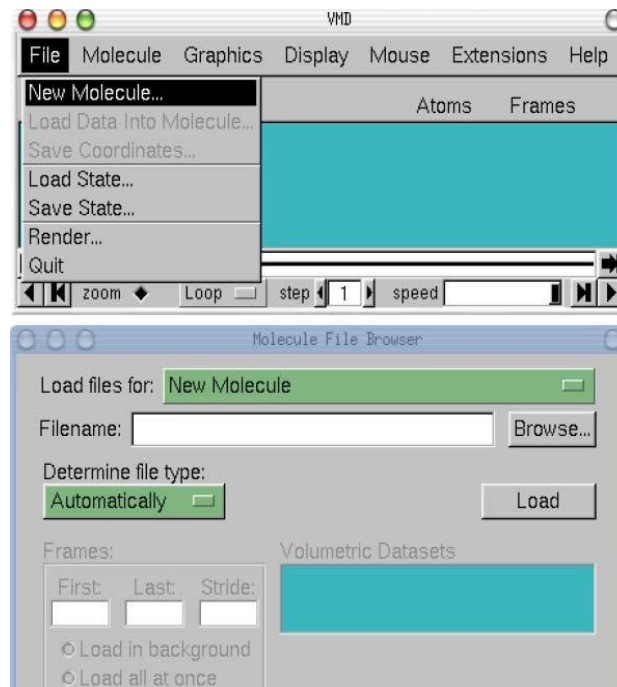
3. Editar el archivo “configure”, cambiar los valores de “\$install_library_dir” y “\$install_bin_dir” a los directorios en los cuales estarán los archivos ejecutables y de datos del programa.
4. Ejecutar “./configure” y se generará un Makefile en base a las variables configuradas.
5. Ingresar al directorio “src” y tipear “make install”.
6. Luego de la instalación, tipear “vmd” para iniciar el programa.

CARACTERÍSTICAS

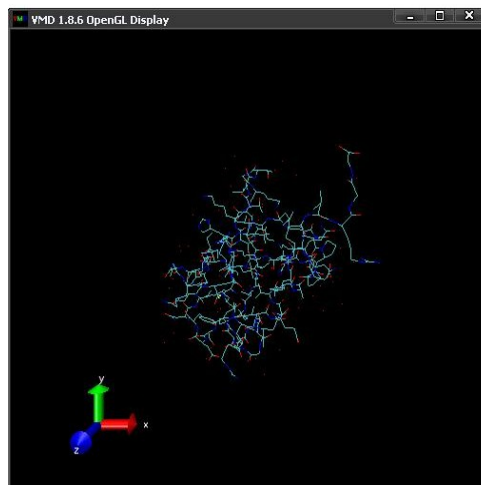
- No posee límites para la cantidad de moléculas, átomos, residuos o el número de imágenes (frames) por animaciones, excepto por la memoria disponible.
- Varios métodos para el renderizado o dibujado volumétrico y molecular.
- Sistema expandible de carga de plugins con soporte para formatos populares tales como AMBER, CHARMM, Gromacs, NAMD, PDB, X-PLOR y muchos más.
- Integración de herramientas de alineamientos múltiples de secuencias y de análisis evolutivos.
- Realización de simulaciones de dinámica molecular interactiva usando NAMD.

1. Cargando una molécula

El primer paso es cargar una molécula, un archivo *.pdb.

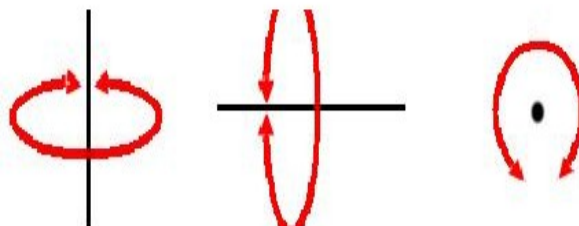


Luego de esto, se mostrará en la ventana de visualización la molécula cargada.

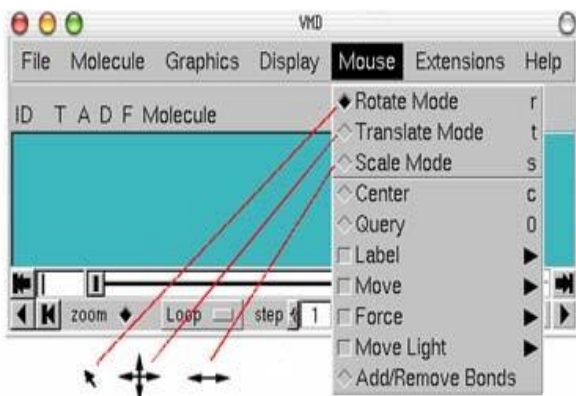


2. Visualizando la proteína

Para ver la estructura tridimensional de una proteína, se debe usar el mouse en múltiples modos.



Modos de rotación: permiten rotar la molécula a lo largo de un eje paralelo a la pantalla (a), se logra presionando el botón izquierdo y moviendo el mouse. Si presiona el botón derecho y repite el paso anterior, la rotación se hará alrededor de un eje perpendicular a la pantalla (b).



En VMD, se encuentra el menú Mouse. Aquí puede elegir el modo del mouse, rotación, traslación o escala.

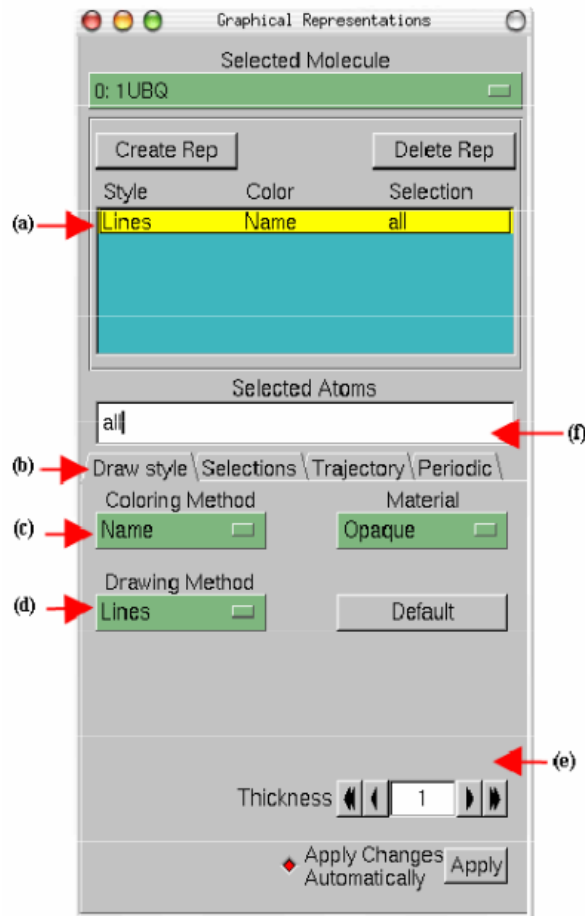
3. Explorando las diferentes maneras de graficación

VMD puede mostrar una molécula usando una gran variedad de maneras de graficación. Hay muchas formas interesantes para identificar distintas estructuras en la proteína que pueden configurarse y/o activarse yendo al menú Graphics -> Representations. Estas representaciones permiten ver los detalles micromoleculares de la proteína.

En amarillo se resalta la representación gráfica actual utilizada para mostrar la molécula (a).

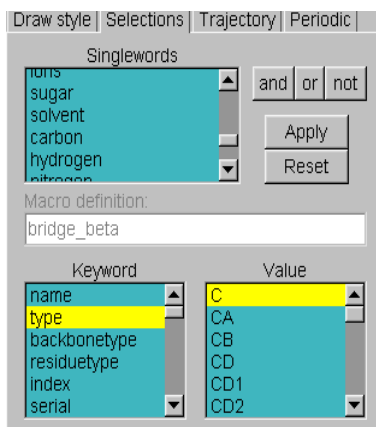
En la pestaña “Draw style”(b), se puede cambiar el modo (d) y el color (c) de la representación.

Cada método de graficación posee sus propios parámetros. Para el caso de la figura mostrada, el parámetro es el espesor de las líneas (e).



4. Diferentes selecciones

En la entrada de “Selected Atoms” (f) se pueden mostrar solamente los átomos que tengan una característica en particular o que formen alguna estructura específica. Estas características pueden seleccionarse en la pestaña “Selections”.

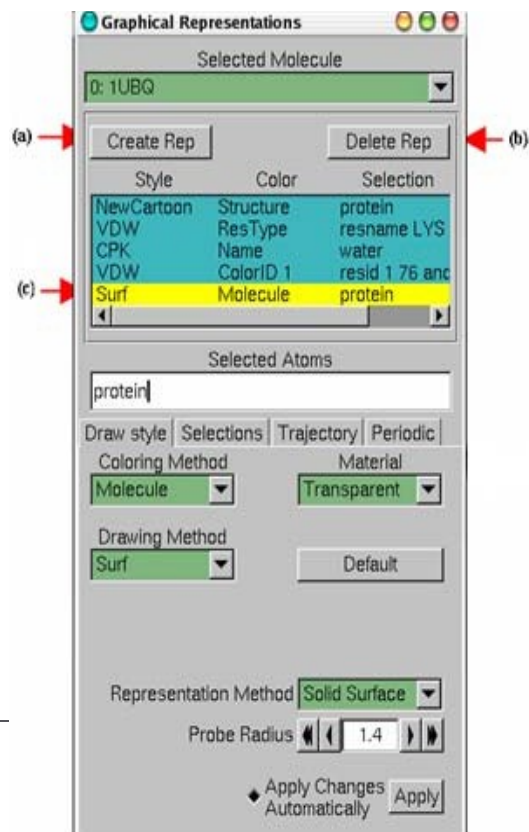


5. Múltiples representaciones

El botón Create Rep (a) permite crear múltiples representaciones. Así, se puede obtener una mezcla de diferentes selecciones con distintas características y colores, todos mostrados al mismo tiempo.

El botón Delete Rep (b) sirve para borrar la selección.

En (c) se muestran todas las selecciones creadas con sus respectivas configuraciones. Haciendo



doble click sobre cada una, se muestran o se ocultan.

6. Visor de secuencias

El visor de secuencias permite elegir y mostrar uno o más residuos fácilmente.

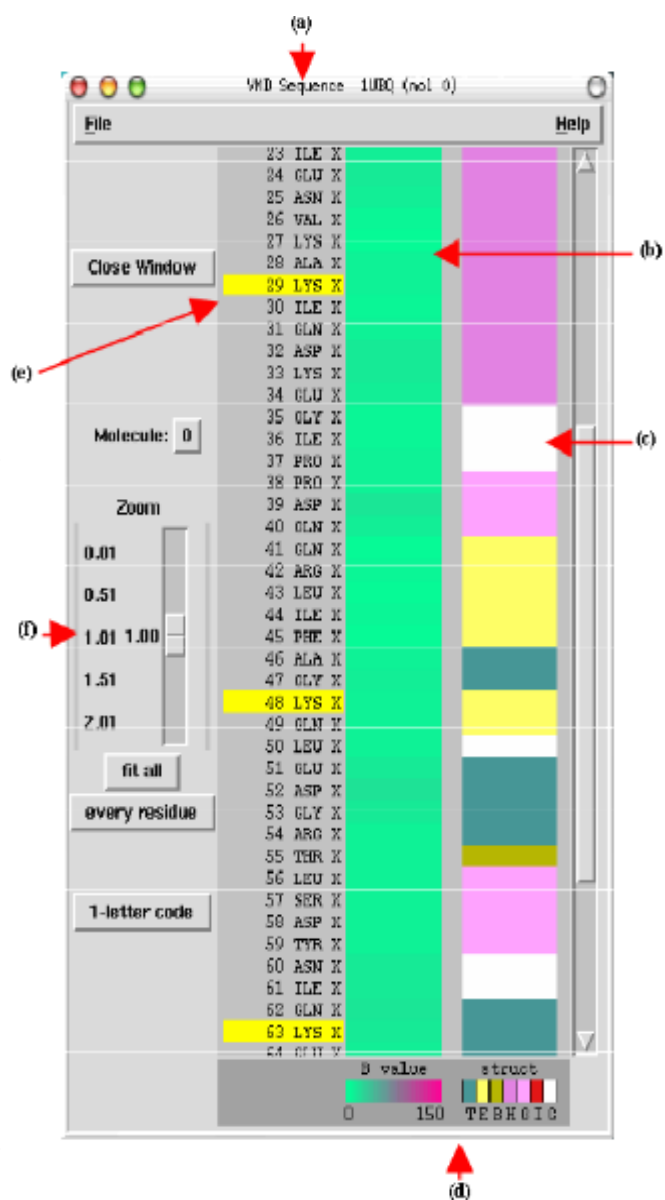
Se encuentra en el menú Extensions -> Analysis -> Sequence Viewer.

Se abre una ventana (a) que lista los aminoácidos (e) con sus propiedades (b y c).

Con el mouse, se pueden ir seleccionando los distintos residuos (e) que se verán resaltados en la graficación.

Utilizando el control de zoom (f) se puede mostrar la lista entera de residuos. Esto es muy importante para proteínas grandes.

En (d) se muestra la leyenda de la información acerca de los residuos, obtenida de STRIDE (programa que determina la estructura secundaria de la proteína). La columna del B-value (b) muestra el campo del B-value (factor



temperatura). Mientras que la columna de estructura muestra la estructura secundaria, siendo:

T: giro

E: conformación extendida (láminas β)

B: puente aislado

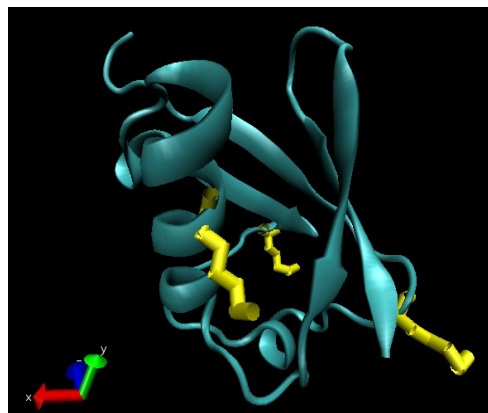
H: hélice α

G: hélice 3-10

I: Hélice π

C: cola

Con esta selección (e), habiendo mostrado la estructura secundaria en el modo NewCartoon, se verá lo siguiente:

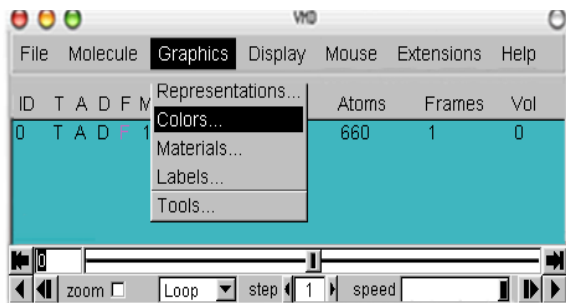


7. Grabando el trabajo

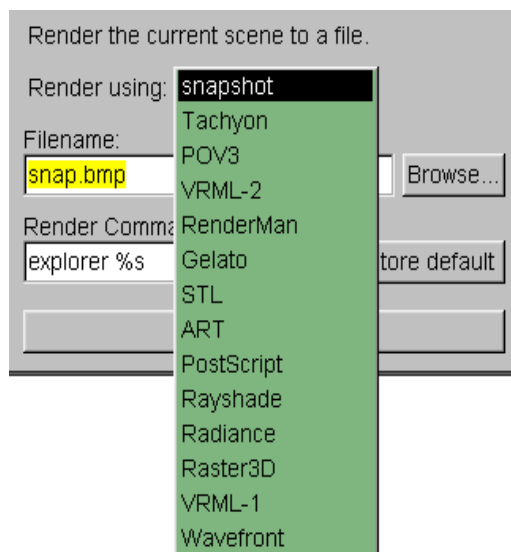
La imagen que se ha creado usando VMD puede grabarse, con todas las representaciones que se hayan creado, como un estado VMD (File -> Save State). Este estado VMD contiene toda la información necesaria para iniciar una nueva sesión de VMD, sin perder lo que se ha guardado.

Aunque el estado VMD permite trabajar con la imagen y explorar las propiedades de la molécula usando VMD, generalmente se necesitan las imágenes que puedan ser usadas en artículos o en otro tipo de documentos. VMD puede renderizar o dibujar la imagen creada y generar un archivo de imagen que puede ser utilizado en otras aplicaciones.

Antes de dibujar la imagen, se puede cambiar el color de fondo yendo a Graphics -> Colors.



Luego, para dibujarla, se debe ir a File -> Render. Se abrirá una ventana llamada "File Render Controls" que se muestra a continuación. Se puede dibujar la imagen utilizando diferentes modos:



Para ahorrar espacio, los archivos de salida de la simulación contienen sólo las coordenadas atómicas y no almacenan la información estática, tal como tipos de átomos, carga atómica, nombre de los segmentos y uniones. Esta última información se almacena en un archivo “de estructura” separado (archivo PSF). Para visualizar los resultados de una simulación, se necesita juntar ambos (el archivo de coordenadas con el de estructura) en la misma molécula.

8. Usando el menú principal

Se pueden dar nombres a las moléculas cargas haciendo doble click sobre el nombre de cada una (en la captura de pantalla se observan los nombres cambiados de dos moléculas cargadas).

La primera columna se refiere al ID (número de identificación) de la molécula.

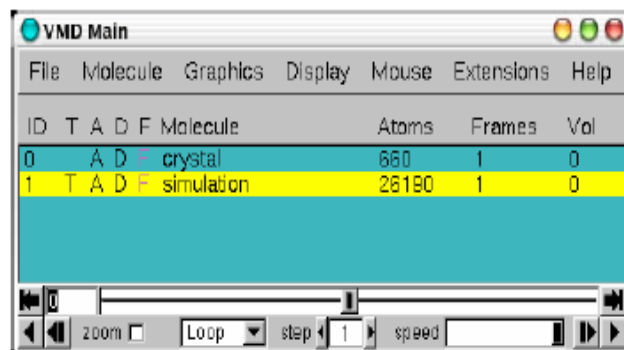
De la segunda a la 2da a la 5ta columna:

F: “fixed”, fijada. Deja fija la molécula a la hora de rotar la escena, trasladarla o escalarla.

D: “displayed”, visualizada. Muestra u oculta la molécula.

A: “active”. Establece si una molécula está activada o no, en función de eso, responderá o no a simulaciones y corridas.

T: “top”. Deja una única molécula como punto de referencia.

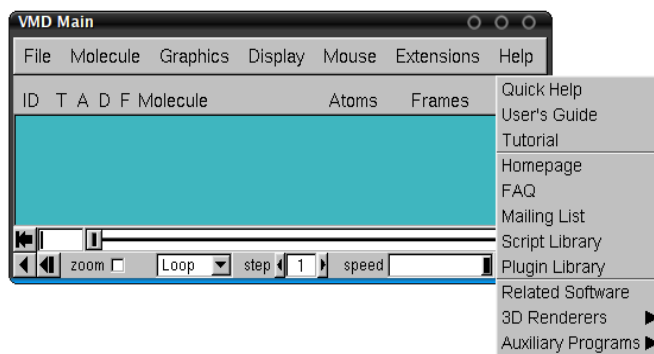


La 6ta columna muestra el nombre del archivo cargado (el cual puede cambiarse haciendo doble click).

La 7ma columna muestra la cantidad de átomos.

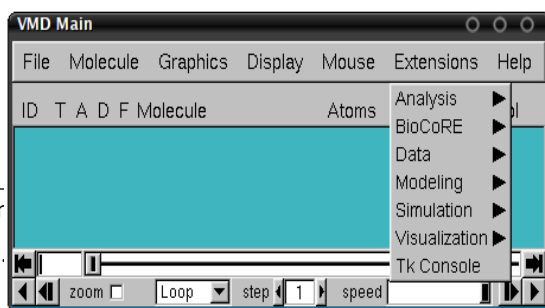
9. Menú de ayuda

Mediante el menú de ayuda se tiene acceso a una guía de usuario, a un tutorial, a enlaces web a programas auxiliares, entre otras.

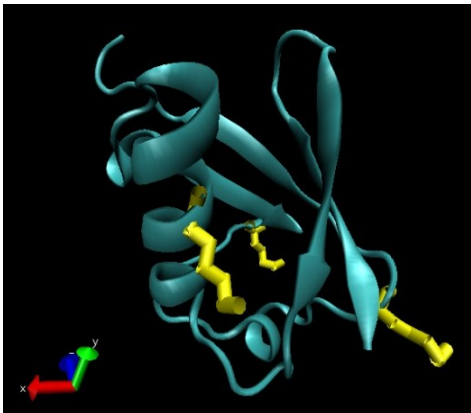


10. Menú de extensiones

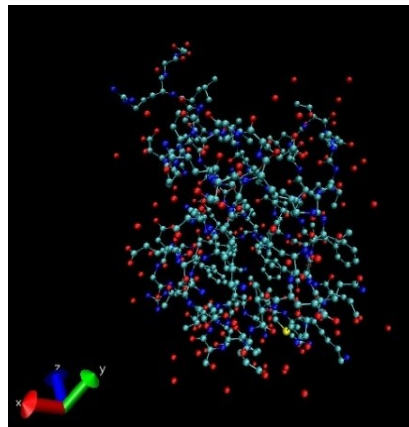
En este menú hay muchas herramientas disponibles que son interesantes. Hay herramientas para análisis (visor de secuencias, cálculo de errores, distintas gráficas), modelado (agregado de iones, constructores de membranas, parametrizaciones), simulación, obtención de datos (consultas en base de datos), visualización (distintas representaciones, animaciones), entre otras.



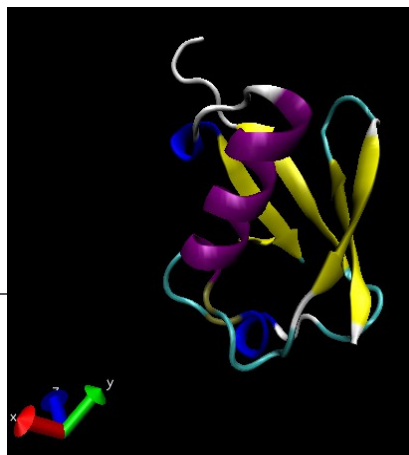
ALGUNAS VISUALIZACIONES DE LA MISMA MOLÉCULA



NewCartoon - Aminoácidos seleccionados

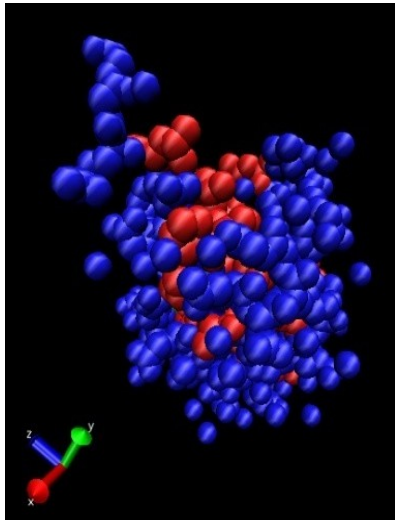


Bolas y bastones - Agua

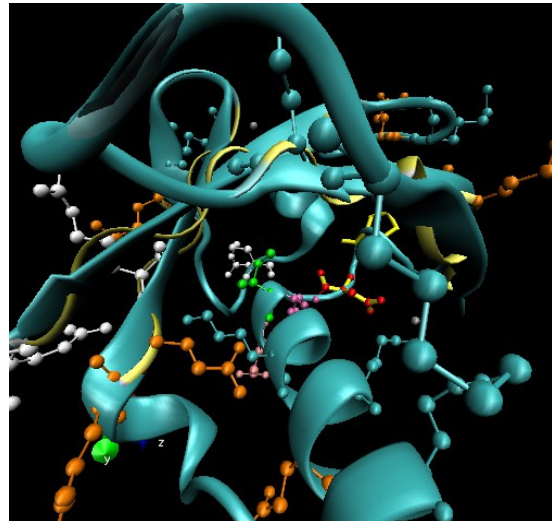


NewRibbons

Estructuras secundarias diferenciadas



Aminoácidos hidrofóbicos



Estr. Sec. – Aminoácidos seleccionados

Redistributions of source code must retain the above copyright notice, this list of conditions and the following disclaimers.

Redistributions in binary form must reproduce the above copyright notice, this list of conditions and the following disclaimers in the documentation and/or other materials provided with the distribution.

Neither the names of Theoretical and Computational Biophysics Group, University of Illinois at Urbana-Champaign, nor the names of its contributors may be used to endorse or promote products derived from this Software without specific prior written permission.

THE SOFTWARE IS PROVIDED AS IS, WITHOUT WARRANTY OF ANY KIND, EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO THE WARRANTIES OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE AND NONINFRINGEMENT. IN NO EVENT SHALL

THE CONTRIBUTORS OR COPYRIGHT HOLDERS BE LIABLE FOR ANY CLAIM, DAMAGES OR OTHER LIABILITY, WHETHER IN AN ACTION OF CONTRACT, TORT OR OTHERWISE, ARISING FROM, OUT OF OR IN CONNECTION WITH THE SOFTWARE OR THE USE OR OTHER DEALINGS WITH THE SOFTWARE.

Main VMD License

The main VMD program and its source code are governed by the license below.

University of Illinois

Visual Molecular Dynamics Software License Agreement

Upon execution of this Agreement by the party identified below ("Licensee"), The Board of Trustees of the University of Illinois ("Illinois"), on behalf of The Theoretical and Computational Biophysics Group ("TCBG") in the Beckman Institute, will provide the Visual Molecular Dynamics ("VMD") software in ExecutableCode and/or Source Code form ("Software") to Licensee, subject to

the following terms and conditions. For purposes of this Agreement, Executable Code is the compiled code, which is ready to run on Licensee's computer. Source code consists of a set of files which contain the actual program commands that are compiled to form the Executable Code.

1. The Software is intellectual property owned by Illinois, and all right, title and interest, including copyright, remain with Illinois. Illinois grants, and Licensee hereby accepts, a restricted, non-exclusive, non-transferable license to use the Software for academic, research and internal business purposes only, e.g. not for commercial use (see Clause 7 below), without a fee.

2. Licensee may, at its own expense, create and freely distribute complimentary works that interoperate with the Software, directing others to the TCBG server to license and obtain the Software itself. Licensee may, at its own expense, modify the Software to make derivative works. Except as explicitly provided below, this License shall apply to any derivative work as it does to the original Software distributed by Illinois. Any derivative work should be clearly marked and renamed to notify users that it is a modified version and not the original Software distributed by Illinois.

Licensee agrees to reproduce the copyright notice and other proprietary

markings on any derivative work and to include in the documentation of such work the acknowledgement:

"This software includes code developed by the Theoretical and Computational Biophysics Group in the Beckman Institute for Advanced Science and Technology at the University of Illinois at Urbana-Champaign."

Licensee may redistribute without restriction works with up to 1/2 of their non-comment source code derived from at most 1/10 of the non-comment source code developed by Illinois and contained in the Software, provided that the above directions for notice and acknowledgement are observed. Any other distribution of the Software or any derivative work requires a separate license with Illinois. Licensee may contact Illinois (vmd@ks.uiuc.edu) to negotiate an appropriate license for such distribution.

3. Except as expressly set forth in this Agreement, THIS SOFTWARE IS PROVIDED "AS IS" AND ILLINOIS MAKES NO REPRESENTATIONS AND EXTENDS NO WARRANTIES OF ANY KIND, EITHER EXPRESS OR IMPLIED, INCLUDING BUT NOT LIMITED TO WARRANTIES OR MERCHANTABILITY OR FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE, OR THAT THE USE OF THE SOFTWARE WILL NOT INFRINGE ANY PATENT, TRADEMARK, OR OTHER RIGHTS. LICENSEE ASSUMES THE ENTIRE RISK AS TO THE RESULTS AND PERFORMANCE OF THE SOFTWARE AND/OR ASSOCIATED MATERIALS. LICENSEE AGREES THAT UNIVERSITY SHALL NOT BE HELD LIABLE FOR ANY DIRECT, INDIRECT, CONSEQUENTIAL, OR INCIDENTAL DAMAGES WITH RESPECT TO ANY CLAIM BY LICENSEE OR ANY THIRD PARTY ON ACCOUNT OF OR ARISING FROM THIS AGREEMENT OR USE OF THE SOFTWARE AND/OR ASSOCIATED MATERIALS.

4. Licensee understands the Software is proprietary to Illinois. Licensee agrees to take all reasonable steps to insure that the Software is protected and secured from unauthorized disclosure, use, or release and will treat it with at least the same level of care as Licensee would use to protect and secure its own proprietary computer programs and/or information, but using no less than a reasonable standard of care. Licensee agrees to provide the Software only to any other person or entity who has registered with Illinois. If licensee is not registering as an individual but as an institution or corporation each member of the institution or corporation who has access to or uses Software must agree to and abide by the terms of this license. If Licensee becomes aware of any unauthorized licensing, copying or use of the Software, Licensee shall promptly notify Illinois in writing. Licensee expressly agrees to use the Software only in the manner and for the specific uses authorized in this Agreement.

5. By using or copying this Software, Licensee agrees to abide by the copyright law and all other applicable laws of the U.S. including, but not limited to, export control laws and the terms of this license. Illinois shall have the right to terminate this license immediately by written notice upon Licensee's breach of, or non-compliance with, any terms of the license. Licensee may be held legally responsible for any copyright infringement that is caused or encouraged by its failure to

abide by the terms of this license. Upon termination, Licensee agrees to destroy all copies of the Software in its possession and to verify such destruction in writing.

6. The user agrees that any reports or published results obtained with the Software will acknowledge its use by the appropriate citation as follows:

"VMD was developed by the Theoretical and Computational Biophysics Group in the Beckman Institute for Advanced Science and Technology at the University of Illinois at Urbana-Champaign."

Any published work which utilizes VMD shall include the following reference:

"Humphrey, W., Dalke, A. and Schulten, K., 'VMD -Visual Molecular Dynamics', J. Molecular Graphics, 1996, vol. 14, pp. 33-38."

Electronic documents will include a direct link to the official VMD page at <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

7. Commercial use of the Software, or derivative works based thereon, **REQUIRES A COMMERCIAL LICENSE**. Should Licensee wish to make commercial use of the Software, Licensee will contact Illinois (vmd@ks.uiuc.edu) to negotiate an appropriate license for such use. Commercial use includes:

- (1) integration of all or part of the Software into a product for sale, lease or license by or on behalf of Licensee to third parties, or
- (2) distribution of the Software to third parties that need it to commercialize product sold or licensed by or on behalf of Licensee.

8. Government Rights. Because substantial governmental funds have been used in the development of VMD, any possession, use or sublicense of the Software by or to the United States government shall be subject to such required restrictions.

9. VMD is being distributed as a research and teaching tool and as such, TCBG encourages contributions from users of the code that might, at Illinois' sole discretion, be used or incorporated to make the basic operating framework of the Software a more stable, flexible, and/or useful

product. Licensees who contribute their code to become an internal portion of the Software agree that such code may be distributed by Illinois under the terms of this License and may be required to sign an "Agreement Regarding Contributory Code for VMD Software" before Illinois can accept it (contact vmd@ks.uiuc.edu for a copy).

BIBLIOGRAFÍA

- <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>
- <http://www.theochem.ruhr-uni-bochum.de/~axel.kohlmeyer/cpmd-vmd/>
- <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/8744570>
- <http://www.linuxlinks.com/article/20080815185629556/VMD.html>