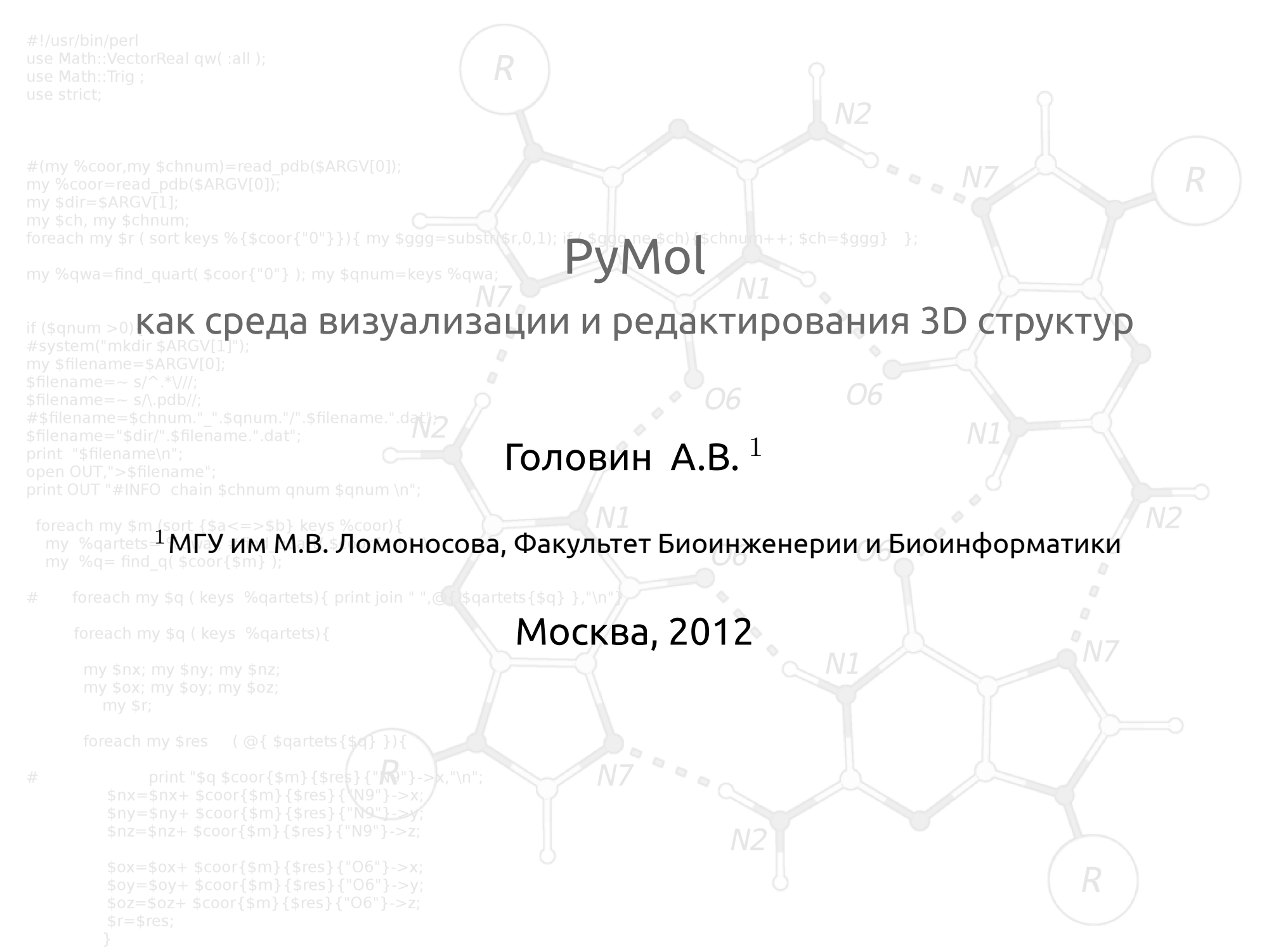


PyMol

как среда визуализации и редактирования 3D структур

Головин А.В. [1]

[1] МГУ им М.В. Ломоносова, Факультет Биоинженерии и Биоинформатики

Москва, 2012

Содержание:

Визуализация с PyMol

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?

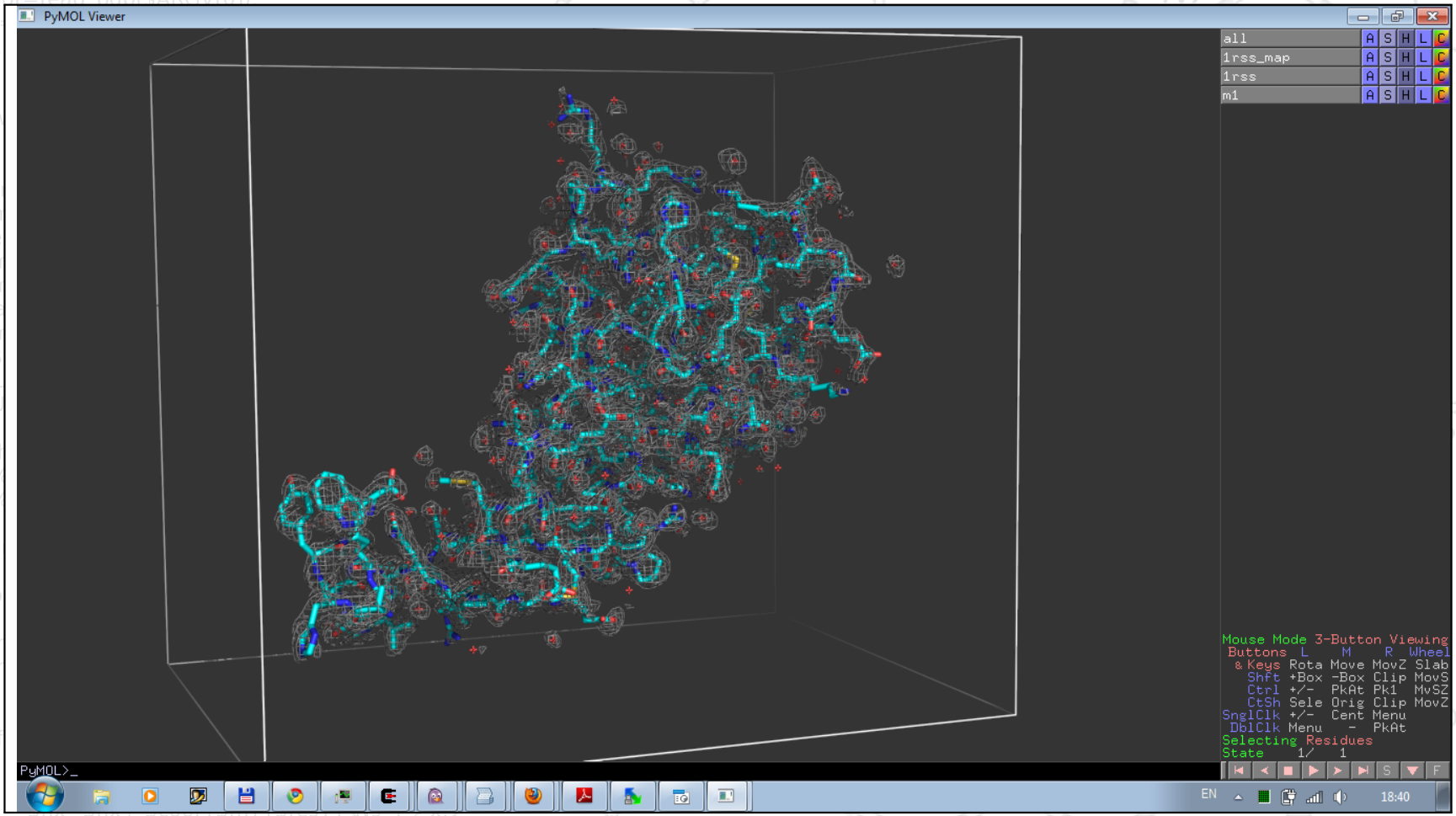
- Компиляция из исходников: http://pymol.svn.sourceforge.net/
- Установка бинарных пакетов в Ubuntu Linux: sudo apt-get install pymol
- Установка бинарных пакетов в Windows:
  - Ресурс для установки с python: `http://www.lfd.uci.edu/~gohlke/pythonlibs/#pymol`
  - Компиляция под Windows: `http://arcib.dowling.edu/~darakevn/installerpaper.pdf`

PyMol - это GPL программа?

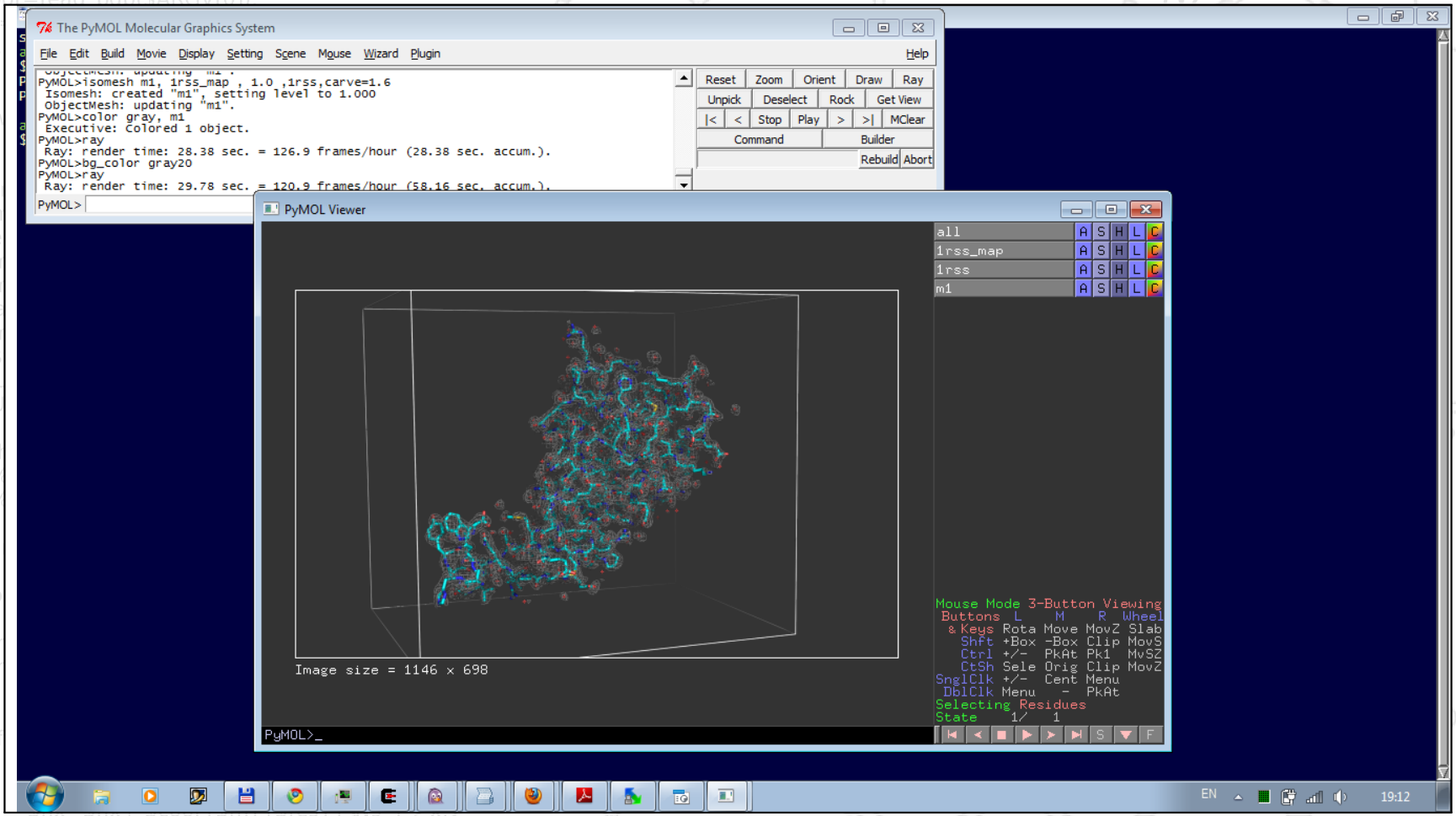
Да, PyMol это GPL-программа;

- 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

PyMol


PyMOL Viewer
all
1rss_map
1rss
m1
Mouse Mode 3-Button Viewing
Buttons L M R Wheel
& Keys Rota Move MovZ Slab
Shft +Box -Box Clip MovS
Ctrl +/- PkAt Pk1 MvSZ
CtSh Sele Orig Clip MovZ
SnglClk +/- Cent Menu
DblClk Menu - PkAt
Selecting Residues
State 1/ 1
PyMOL>_
EN
18:40

Основной вид



Как загрузить структуру?

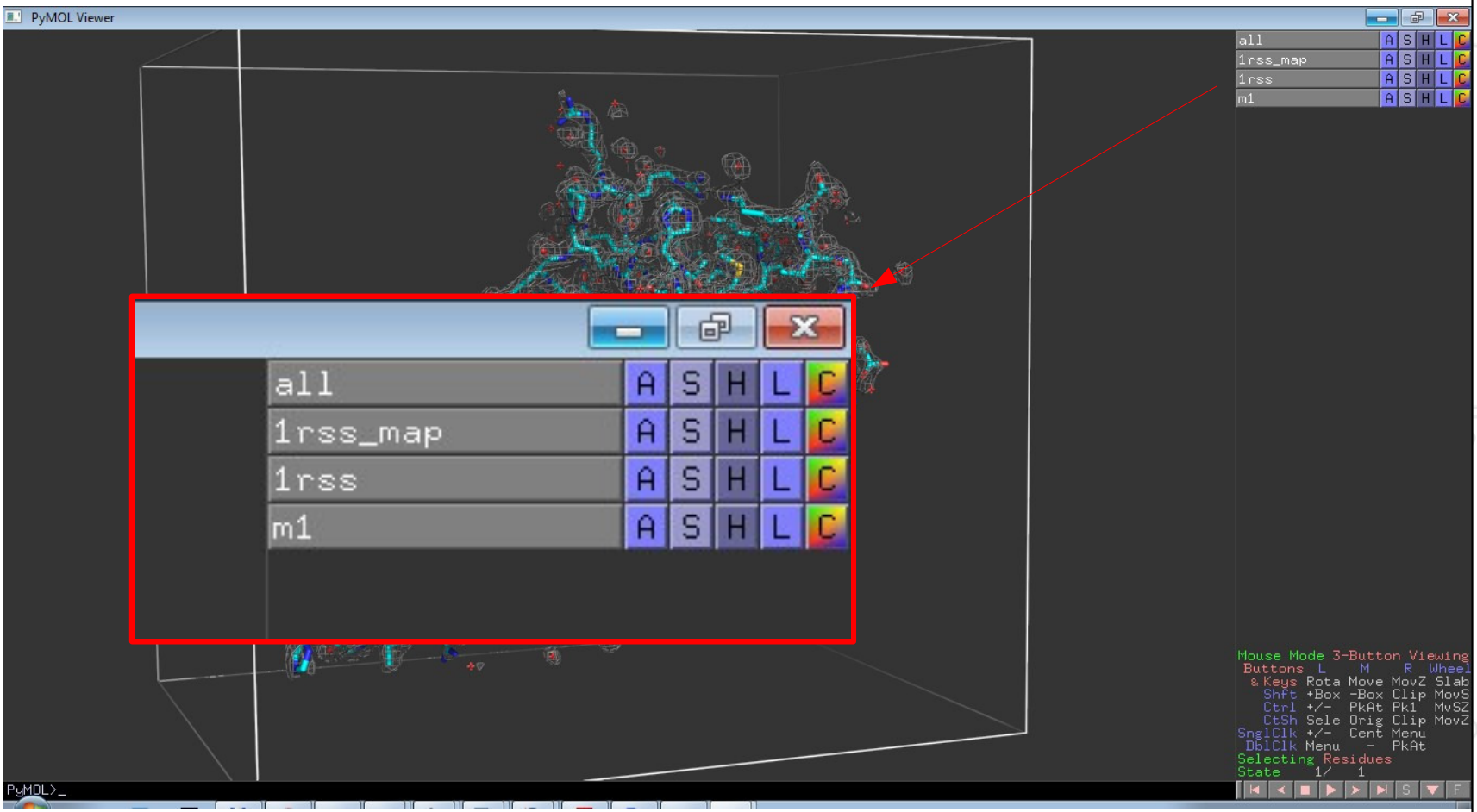
- Из интернет:
  - в меню выбрать соответствующий plugin
  - или в командной строке: fetch 1xxx

- 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



A,S,H,L,C

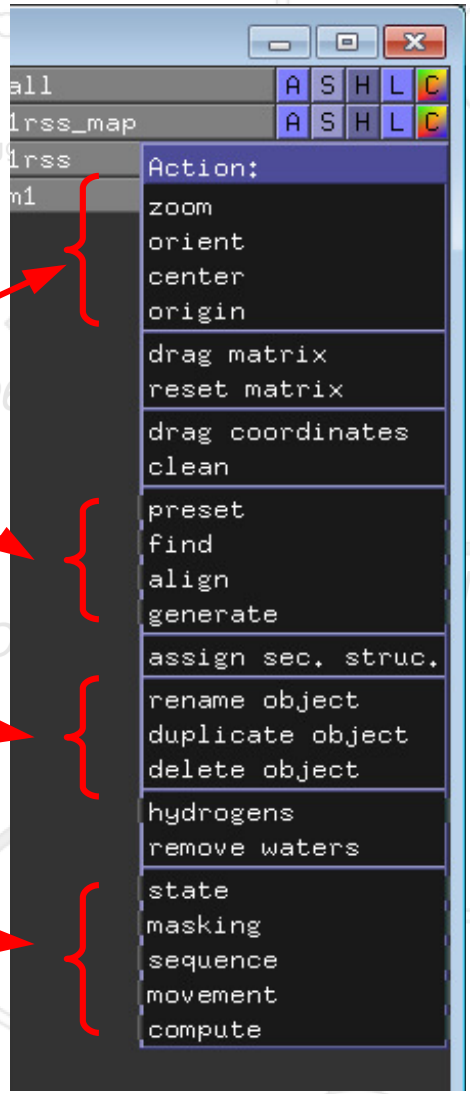
A=Action

Манипуляции с ориентацией

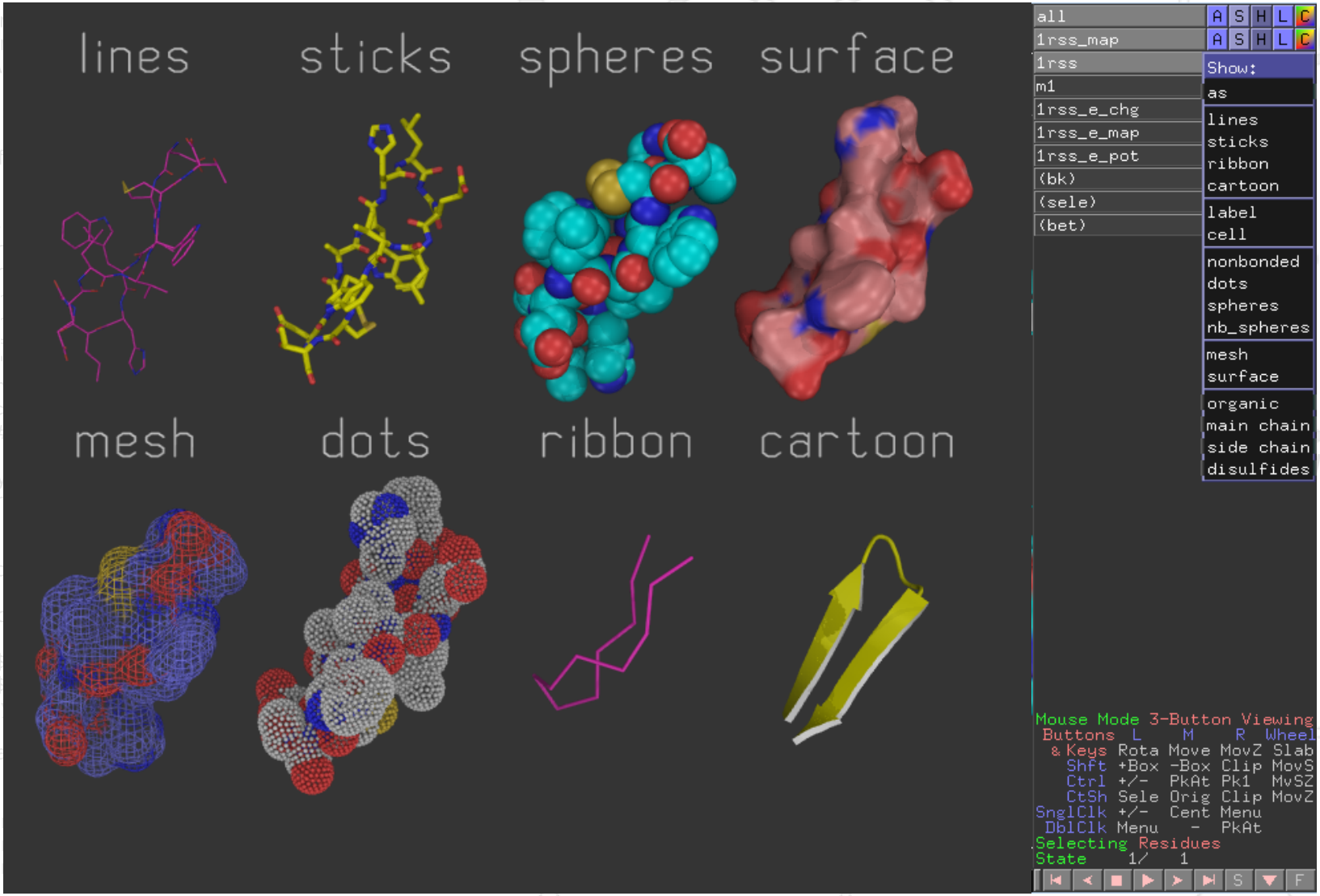
Предустановки изображения и т.д.

Манипуляция с объектом

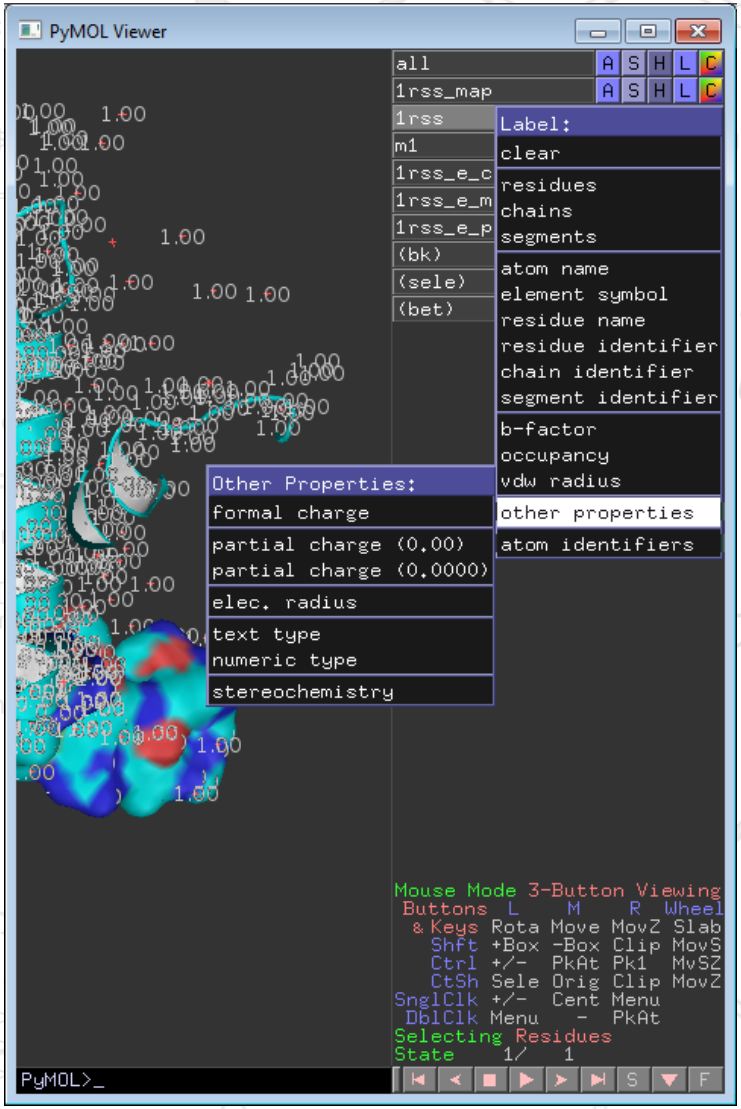
Прочее



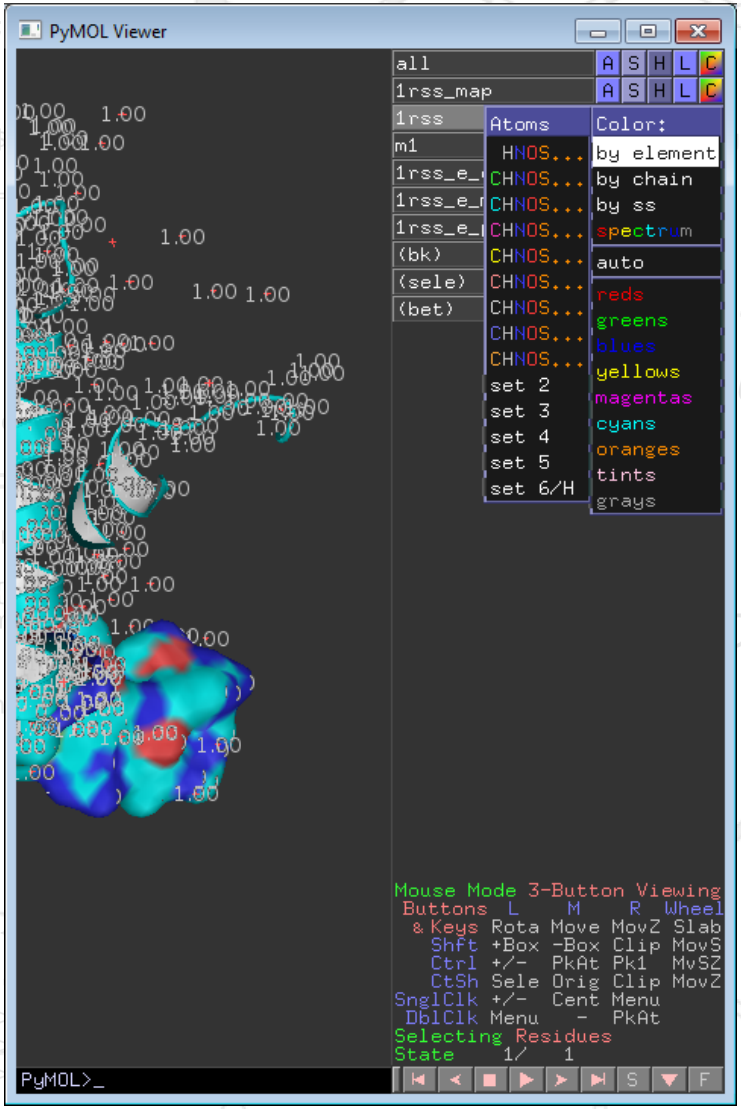
S=Show, H=Hide


lines
sticks
spheres
surface
mesh
dots
ribbon
cartoon
all
1rss_map
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
Mouse Mode 3-Button Viewing
Selecting Residues
State 1/ 1

L=Label


PyMOL Viewer
all
1rss_map
1rss
m1
1rss_e_c
1rss_e_m
1rss_e_p
(bk)
(sele)
(bet)
Label:
clear
residues
chains
segments
atom name
element symbol
residue name
residue identifier
chain identifier
segment identifier
b-factor
occupancy
vdw radius
Other Properties:
formal charge
partial charge (0.00)
partial charge (0.0000)
elec. radius
text type
numeric type
stereochemistry
other properties
atom identifiers
Mouse Mode 3-Button Viewing
Buttons L M R Wheel
& Keys Rota Move MovZ Slab
Shft +Box -Box Clip MovS
Ctrl +/- PkAt Pk1 MvSZ
CtSh Sele Orig Clip MovZ
SnglClk +/- Cent Menu
DblClk Menu - PkAt
Selecting Residues
State 1/ 1
PyMOL>_

C=Color


PyMOL Viewer
all
1rss_map
1rss
m1
(bk)
(sele)
(bet)
Atoms
HNOS...
CHNOS...
set 2
set 3
set 4
set 5
set 6/H
Color:
by element
by chain
by ss
spectrum
auto
reds
greens
blues
yellows
magentas
cyans
oranges
tints
grays
Mouse Mode 3-Button Viewing
Buttons L M R Wheel
& Keys Rota Move MovZ Slab
Shft +Box -Box Clip MovS
Ctrl +/- PkAt Pk1 MvSZ
CtSh Sele Orig Clip MovZ
SnglClk +/- Cent Menu
DblClk Menu - PkAt
Selecting Residues
State 1/ 1
PyMOL>_

Выборки

- Можно задать с помощью кликов мыши, удерживая SHIFT
- Удобнее писать выражения в командной строке

Например: *Select backbone, name ca+c+n*

Операторы множеств

- 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

- Оператор WITHIN(...)
  select all within 3.5 of resi 20
  select s1, (byres n. ca) within 3.5 of resn LIG

Help selections

Длинное	Короткое
name <atom names>	n. <atom names>
resn <residue names>	r. <residue names>
resi <residue identifiers>	i. <residue identifiers>
chain <chain ID>	c. <chain identifiers>
id <original-index>	
hydrogen	h.
all	*
visible	v.
hetatm	
byres <selection>	br. <selection>
byobj <selection>	bo. <selection>
around <distance>	a. <distance>
expand <distance>	e. <distance>
in <selection>	
like <selection>	l. <selection>

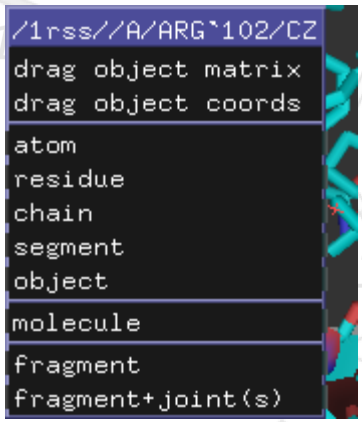
<selection> within <distance> of <selection>
<selection> w. <distance> of <selection>

Примеры выборок

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

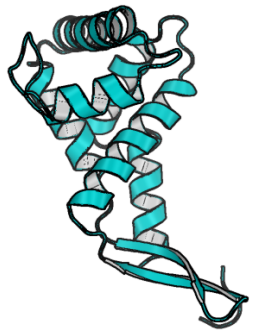
sel s3, a/100+120/ : все атомы остатков 100 и 120 в цепи A

Трассировка лучей, команда ray

Подробно: `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 или в командной строке набрать:
  set первые буквы имени опции и клавиша tab для достроения

Примеры

#initial setup
iewport 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

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

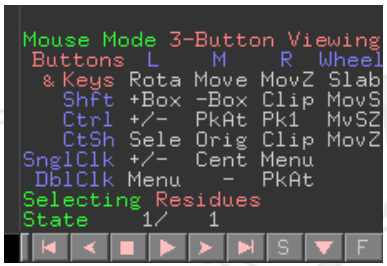
- Action->Preset->Technical (viewer gui)
- Scene->Store->F1
- zoom i. 90 # увеличение остатка 90
- Scene->Store->F2
- Movie->Program->Scene Loop->Y-Rock->4 Seconds Each
- File-> Save movie

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 ротамер 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.

Супераозиция 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 pkl 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 достаточно 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

Скриптование в PyMol

Возможны как скрипты из команд, так и скрипты на Python

Запуск скриптов из команд:

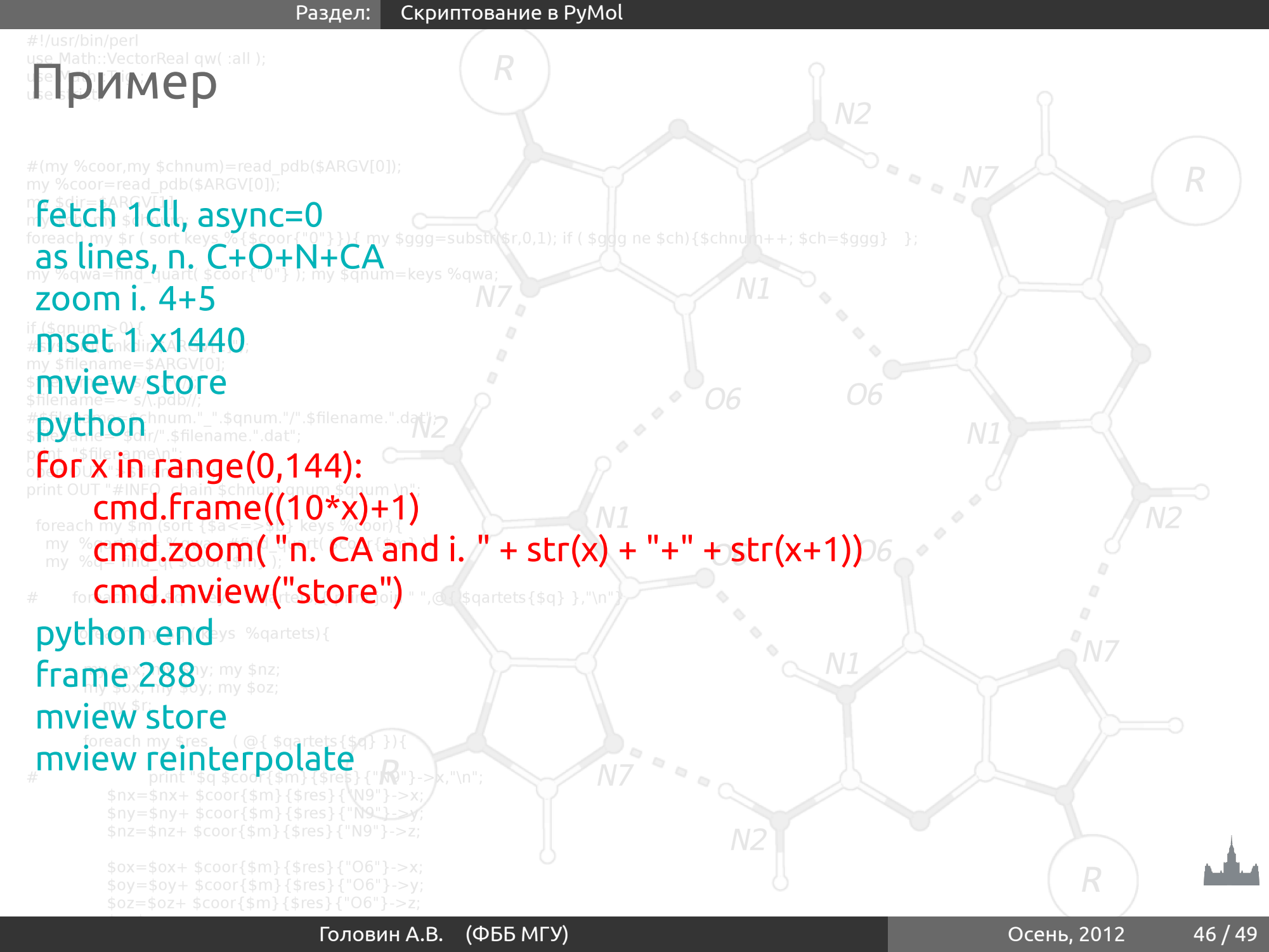
@ myfile.pml

Запуск скриптов на питоне:

run myfile.py

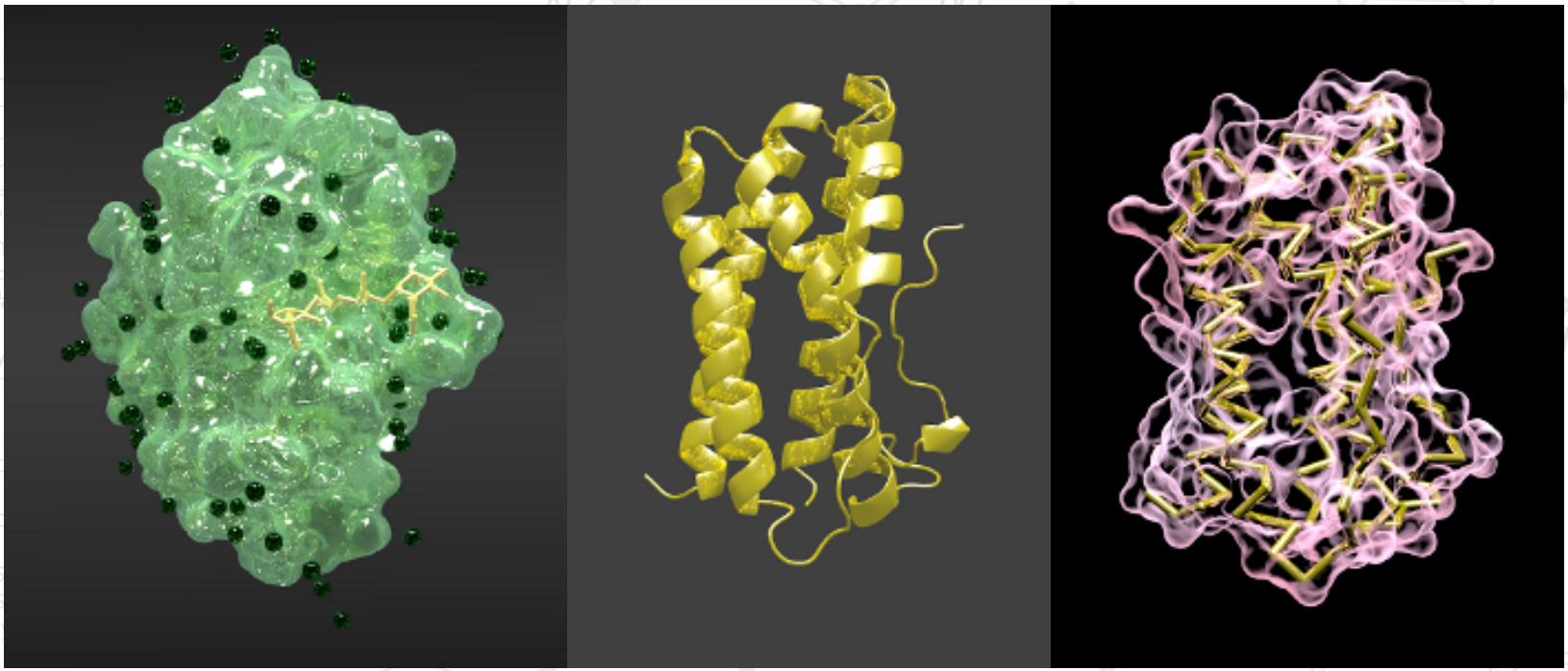
Пример

```
fetch 1cll, 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

Объекты из Pymol можно использовать в разных 3D программах



Анимации изображения наложенная на ролик из youtube