

PyMOL的应用简介

Brief-instruction of PyMOL

报告人：王帅

组员：孙亮、高明、李倩倩、王帅(组长)

单位：CAAS.G13

研究所：哈尔滨兽医研究所

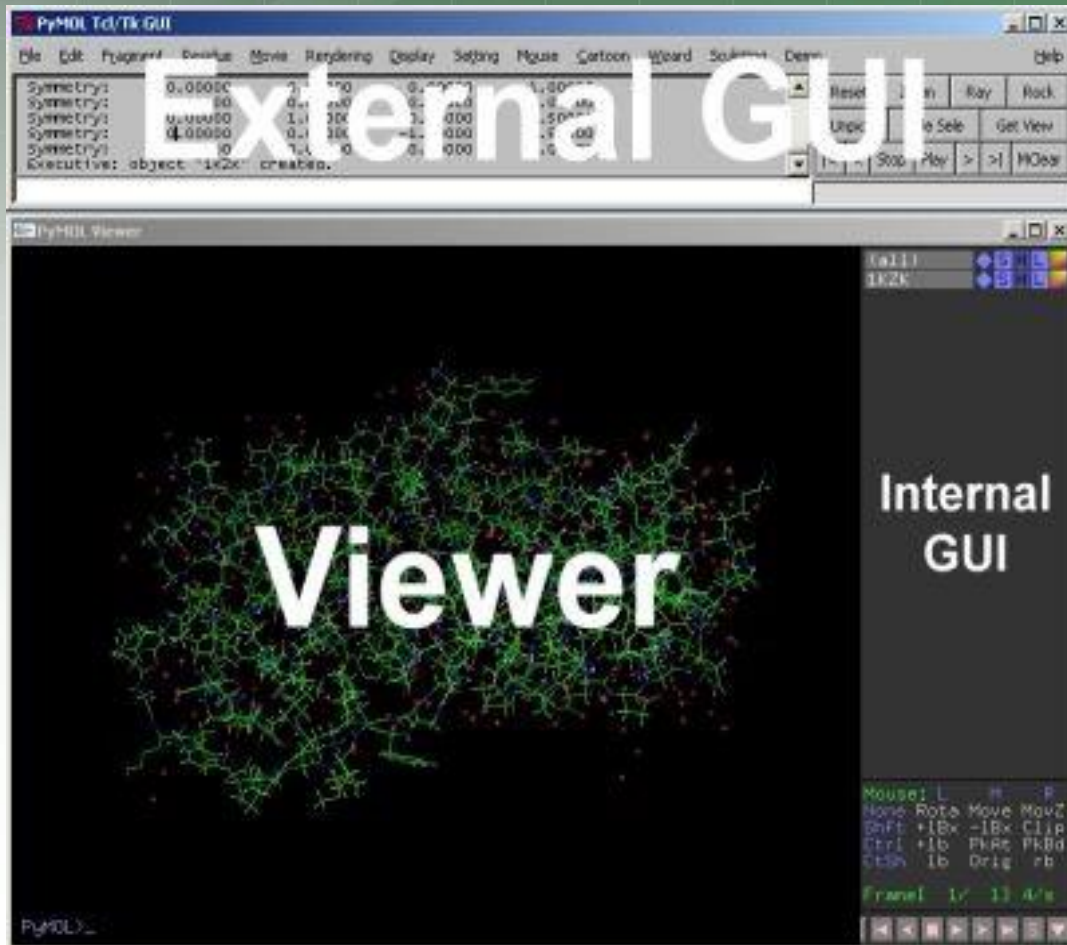
目录

- PyMOL的概述
- PyMOL的界面介绍
- PyMOL的基本界面操作
- PyMOL对蛋白质实例解析
- PyMOL命令操作简介

PyMOL的概述

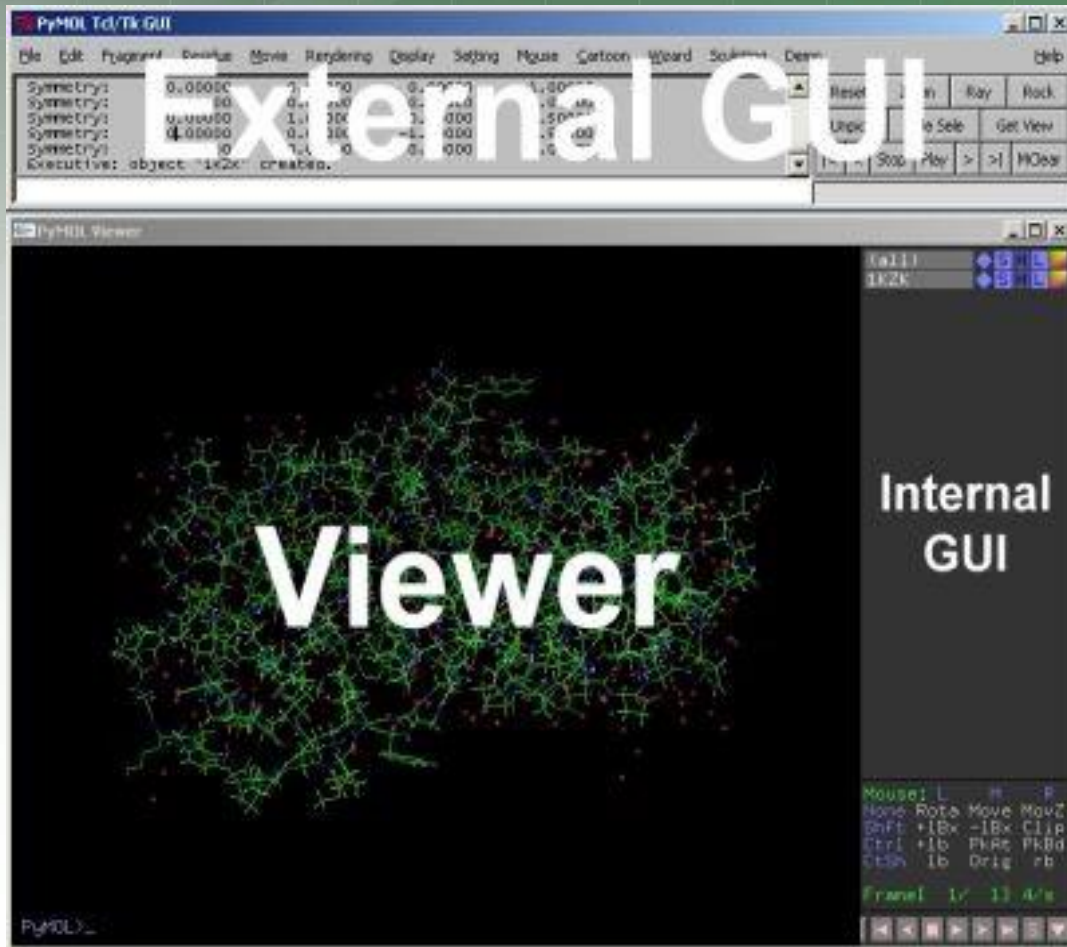
- PyMol是一款多平台分子三维图像显示软件，由Warren Lyford DeLano编写，被用来创作高品质的分子（特别是生物大分子如蛋白质）三维结构。Pymol名字的来源：“Py”表示该软件基于python这个计算机语言，“Mol”则是英文分子（molecule）的缩写，表示该软件用来显示分子结构。据软件作者宣称，在所有正式发表的科学论文中的蛋白质结构图像中，有四分之一是使用Pymol来制作的。

PyMOL的界面介绍



- PyMOL界面分为2个窗口，外部GUI窗口（External GUI）和Viewer Window。
- Viewer Window又分为左右两块，左边用来显示结构图像的（Viewer），右边则是一个内部GUI窗口（Internal GUI）。
- Viewer自身包含一个命令行（如图中左下方的PyMOL>提示符），可以用来输入Pymol命令；在Internal GUI中则可以选定一些特定的对象并完成一些操作。
- External GUI则包含一个标准菜单、一个输出区、一个命令行输入区以及右边的一些常用命令按钮。

PyMOL的界面介绍



- PyMOL界面分为2个窗口，外部GUI窗口（External GUI）和Viewer Window。
- Viewer Window又分为左右两块，左边用来显示结构图像的（Viewer），右边则是一个内部GUI窗口（Internal GUI）。
- Viewer自身包含一个命令行（如图中左下方的PyMOL>提示符），可以用来输入Pymol命令；在Internal GUI中则可以选定一些特定的对象并完成一些操作。
- External GUI则包含一个标准菜单、一个输出区、一个命令行输入区以及右边的一些常用命令按钮。

File Edit Build Movie Display Setting Scene Mouse Wizard Plugin

Help Tutorial

```

You clicked /1CH3//A/ASP'60/CA
Selector: selection "sele" defined with 8 atoms.
You clicked /1CH3//A/SER'58/CA
Selector: selection "sele" defined with 6 atoms.
You clicked /1CH3//A/LEU'49/CA
Selector: selection "sele" defined with 14 atoms.
You clicked /1CH3//A/LEU'49/CA
Selector: selection "sele" defined with 8 atoms.
You clicked /obj01
selector: select

```

Command line

Reset	Zoom	Draw	Ray	Rock
Unpick		Deselect		Get View
<	<	Stop	Play	>
Command			Builder	

Object List

PyMOL Viewer

Viewer Window



all	A	S	H	L	C
(sele)	A	S	H	L	C
1CH3	A	S	H	L	C
obj01	A	S	H	L	C
(pk1)	A	S	H	L	C
(pk2)	A	S	H	L	C
(pkset)	A	S	H	L	C
(pkmol)	A	S	H	L	C
(pkfrag)	A	S	H	L	C

Mouse Mode

```

Mouse Mode 3-Button Viewing
Buttons L M R Wheel
Keys Rotate Move MoveZ Slab
Shft +Box -Box Clip MoveS
Ctrl +/- PkAb Pk1 MoveZ
CtSh Sele Drag Clip MoveZ
SingleClick +/- Cent Menu
DoubleClick Menu - PkAt

```

Movie Player

Frame 1 / 11 40/sec

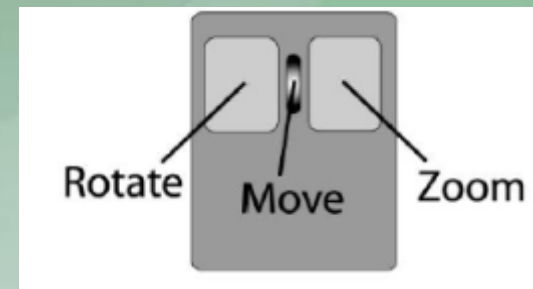
Command line

PyMOL>_


PyMOL基本界面操作

- Pymol的基本操作，包括窗口菜单、加载文件、图像的基本鼠标操作等等。
- 标准的“复制、剪切和粘贴”操作只能在External GUI中完成，并且必须使用“Ctrl+C、Ctrl+X以及Ctrl+V”来完成，这也是这个所谓的外部GUI的最重要的优点。
- 在PyMOL中，鼠标是主要的控制设备，键盘的修饰按键（SHIFT,CTRL,SHFIT+CTRL）在调整按钮操作时使用。

键盘	鼠标左键	中键	右键
	旋转图像（虚拟滚动球rotate）	在XY上移动图像（translate平移）	在Z上移动图像（zoom变焦）
Shift			移动截面
Ctrl			
2012/7/3 Shift+Ctrl		回到旋转起始	



PyMOL基本界面操作

- PyMol可以同时打开多个PDB文件，或者将复杂的PDB文件分解成几个单独成分。每一个打开的PDB文件在“Names Panel”中显示其名称。第一个名字总是“all”。点击名称会显示其对应的蛋白质分子构型。
- ASHLC菜单是  Action、Show、Hide、Lable、Color的简称。

"A" Actions menu

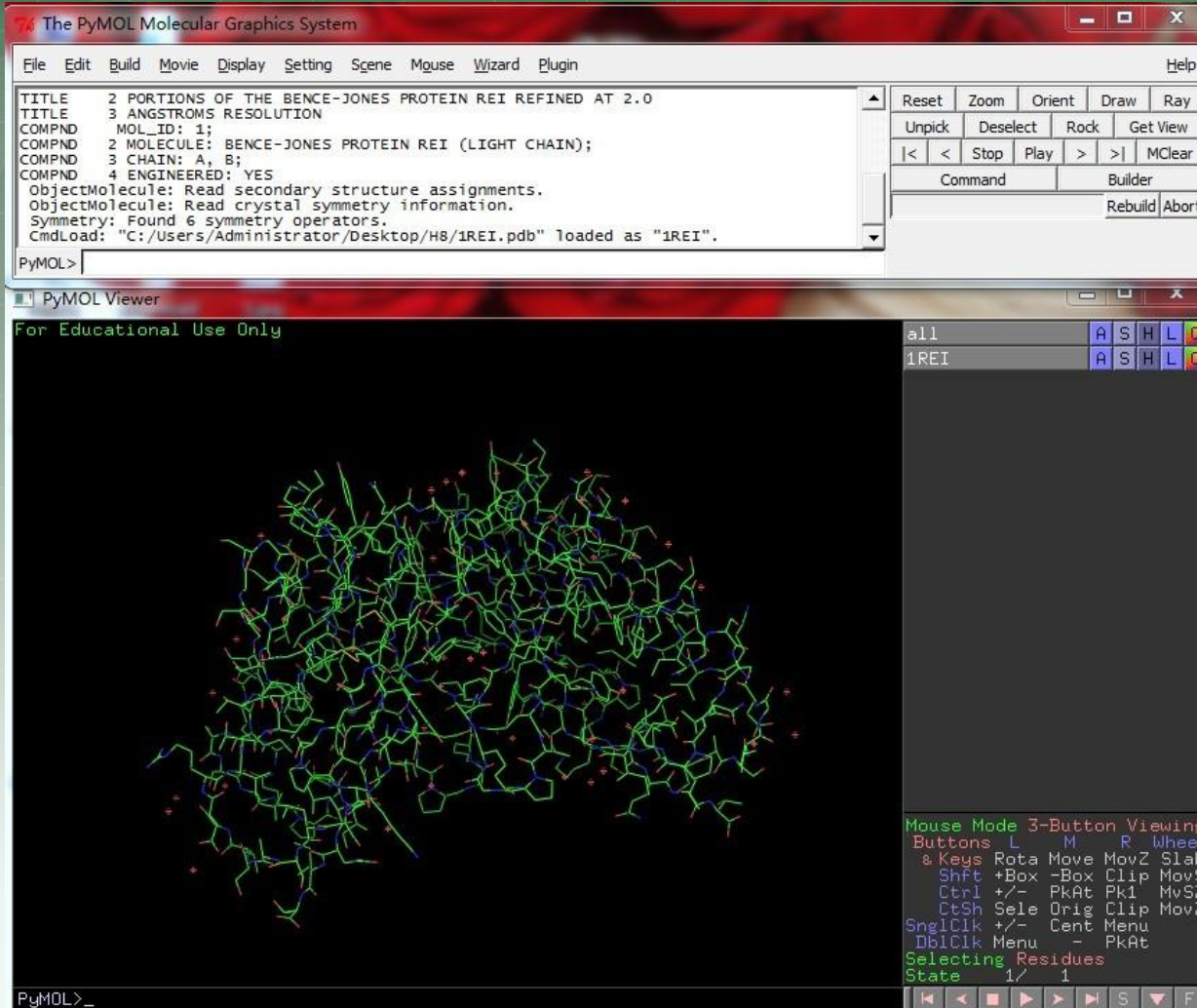
The screenshot shows the PyMOL Viewer interface. The main window displays a 3D molecular model of a protein backbone, colored by element (carbon in green, nitrogen in blue, oxygen in red). The 'A' Actions menu is open, showing a list of actions for the selected atoms. The menu is organized into columns: 'all', 'Atoms', and 'Color:'. The 'Color:' column is currently expanded, showing options like 'by element', 'by chain', 'by ss', 'spectrum', 'auto', 'reds', 'greens', 'blues', 'yellows', 'magentas', 'cyans', 'oranges', 'tints', and 'grays'. The 'Mouse Mode 3-Button Viewing' section is also visible, listing various mouse and keyboard shortcuts for navigation and manipulation. The PyMOL command prompt at the bottom left shows 'PyMOL>_'. The bottom of the image contains three overlapping zoomed-in snippets of the menu and command prompt.

all	Atoms	Color:
1CH3	Atoms	Color:
obj01	H NOS...	by element
(sele)	CH NOS...	by chain
	CH NOS...	by ss
	CH NOS...	spectrum
	CH NOS...	auto
	CH NOS...	reds
	CH NOS...	greens
	CH NOS...	blues
	CH NOS...	yellows
	set 2	magentas
	set 3	cyans
	set 4	oranges
	set 5	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 MovSZ
CtSh Sele Drig Clip MovZ
SnglClk +/- Dant Menu
DBlClk Menu - PkAt

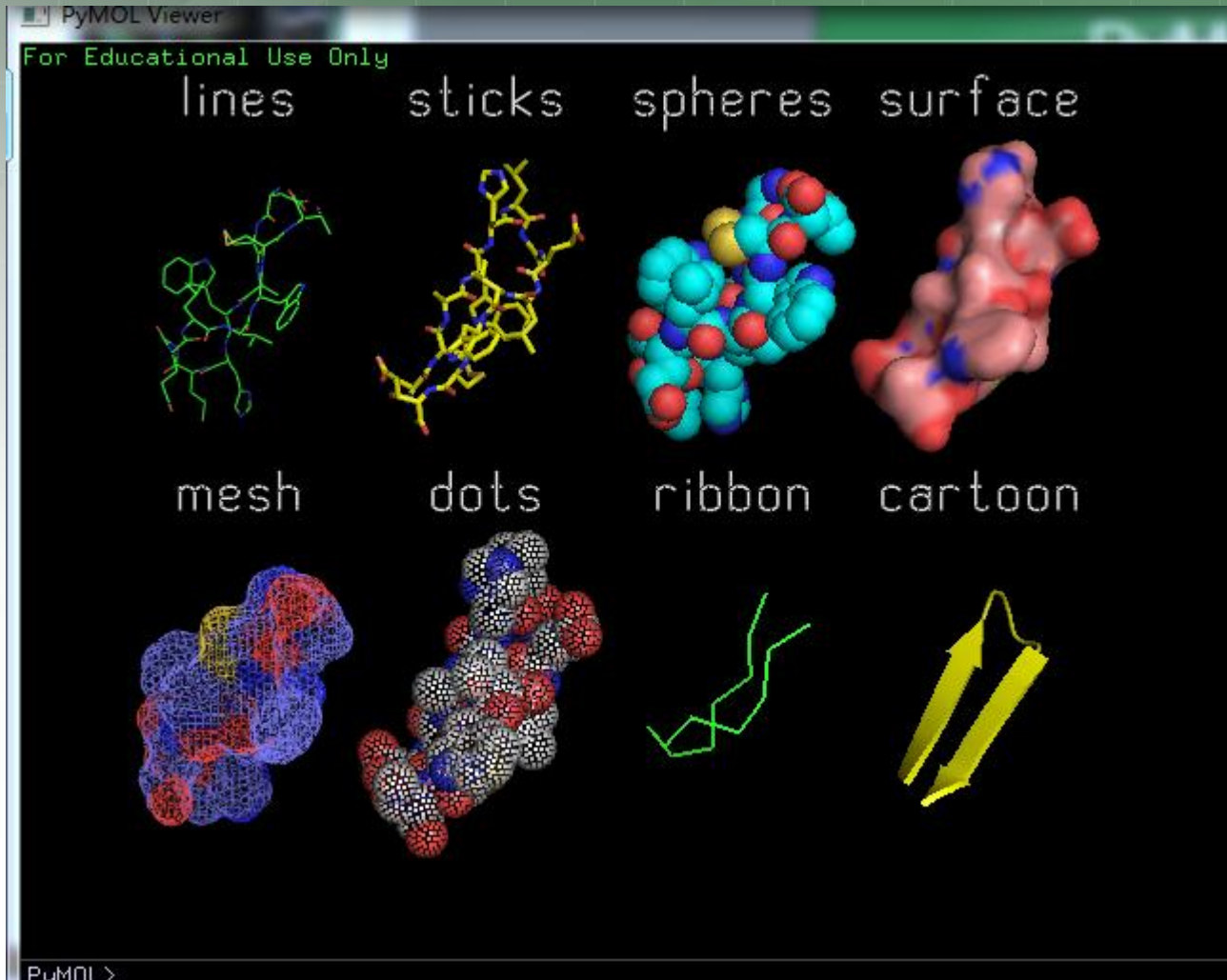
Selecting Atoms
Frame [1 / 1] 5/sec

PyMOL基本界面操作



PyMOL基本界面操作

PyMOL提供的可用图形画面包括以下几种：



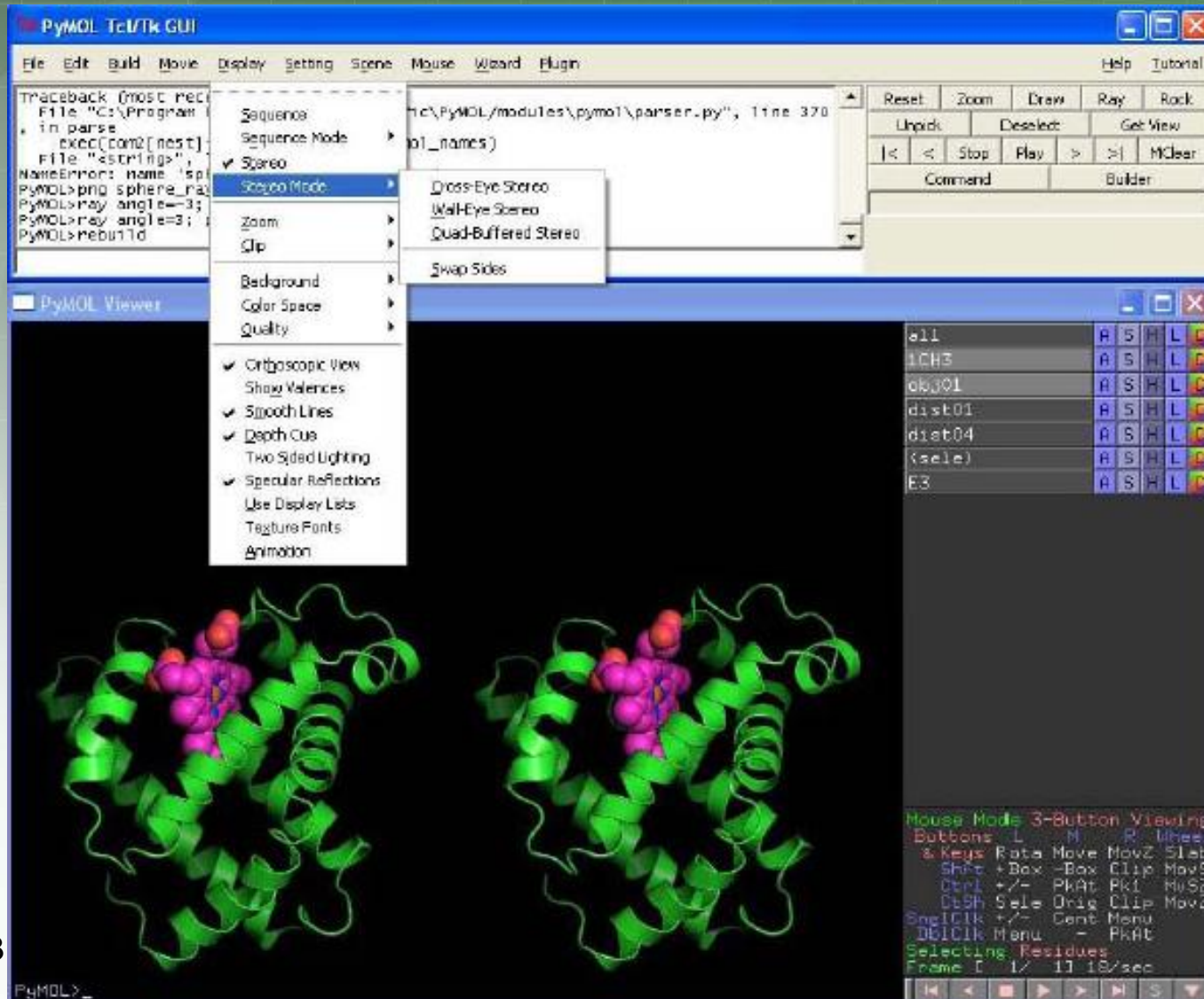
- Pymol> show representation

- Pymol> hide representation

- 其中representation可以为：cartoon, ribbon, dots, spheres, surface和mesh。

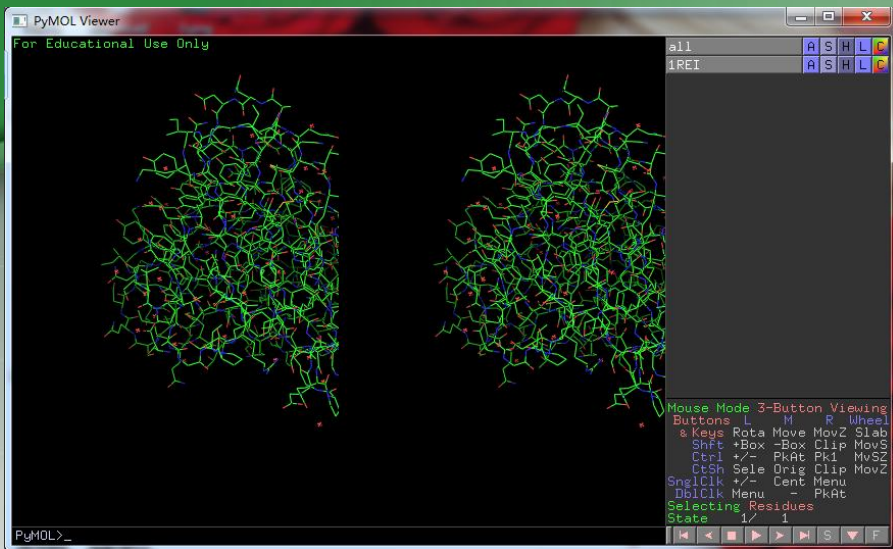
PyMOL基本界面操作

立体画面:

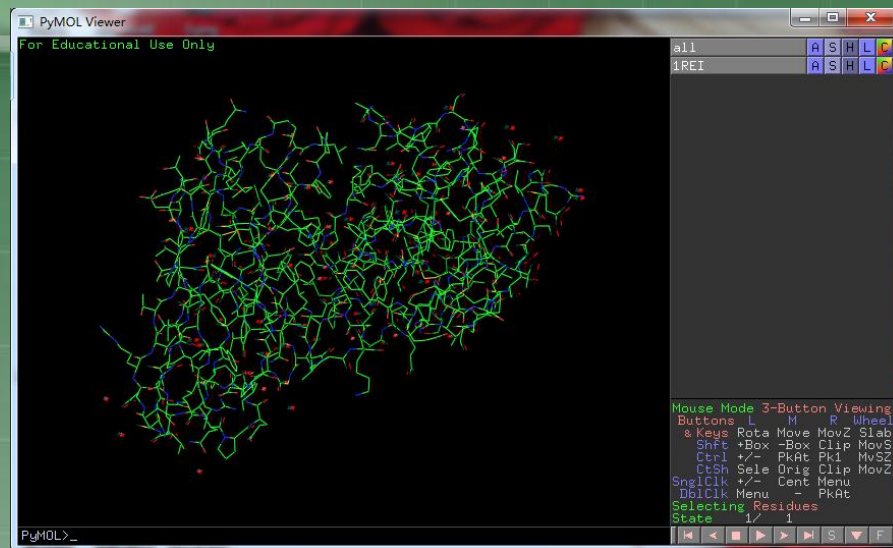


2012/7/3

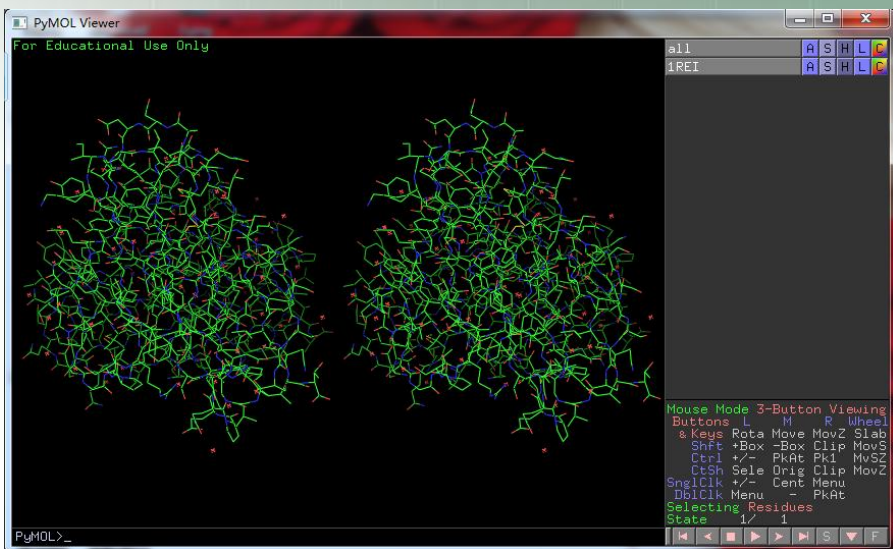
12



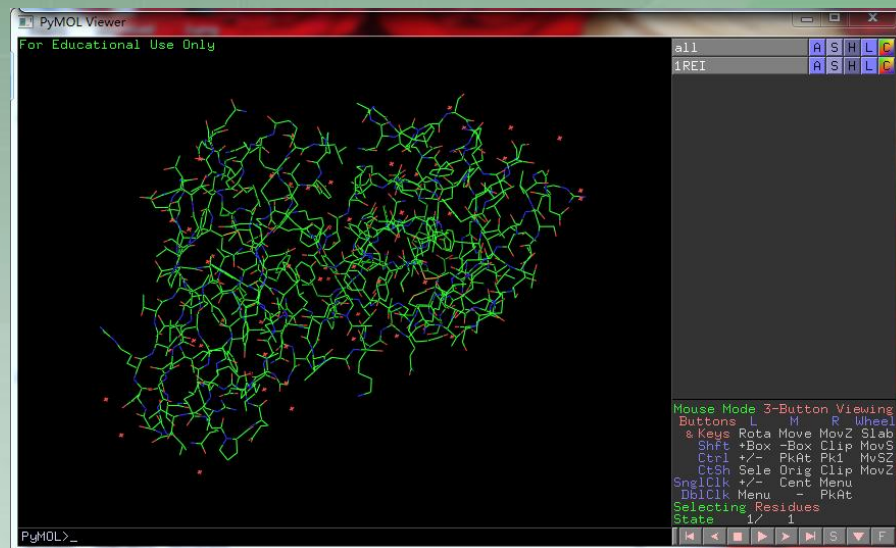
wall-eye stereo



Quad-Buffered Stereo




cross-eye stereo




Anaglyph stereo

PyMOL对蛋白质实例解析

在PDB数据库中下载编号为1REI、2QSQ两蛋白序列，并应用PyMOL软件进行分析。

RCSB **PDB** PROTEIN DATA BANK  A MEMBER OF THE **PDB**
An Information Portal to Biological Macromolecular Structures
As of Tuesday May 29, 2012 at 5 PM PDT there are 81957 Structures | [PDB Statistics](#) | [RSS](#) | [Facebook](#) | [Twitter](#) | [Print](#)

[All Categories](#) | [Author](#) | [Macromolecule](#) | [Sequence](#) | [Ligand](#) | [?](#)

Search | All Categories:  [Browse](#) [Advanced](#)

MyPDB [Hide](#)
Login to your Account
Register a New Account

Home [Hide](#)
News & Publications
Usage/Reference Policies
Deposition Policies
Website FAQ
Deposition FAQ
Contact Us
About Us
Careers
External Links
Sitemap
New Website Features

Deposition [Hide](#)
All Deposit Services
Electron Microscopy
X-ray | NMR
Validation Server
BioSync Beamlines/Facilities
Related Tools

Summary | [Sequence](#) | [Annotations](#) | [Seq. Similarity](#) | [3D Similarity](#) | [Literature](#) | [Biol. & Chem.](#) | [Methods](#) | [Geometry](#) | [Links](#)

1REI [Display Files](#) | [Download Files](#) | [Share this Page](#)

THE MOLECULAR STRUCTURE OF A DIMER COMPOSED OF THE VARIABLE PORTIONS OF THE BENCE-JONES PROTEIN REI REFINED AT 2.0 ANGSTROMS RESOLUTION

DOI:10.2210/pdb1rei/pdb

Primary Citation

The molecular structure of a dimer composed of the variable portions of the Bence-Jones protein REI refined at 2.0-A resolution.

Epp, O., Lattman, E.E., Schiffer, M., Huber, R., Palm, W.,

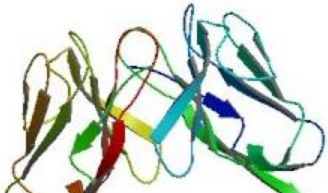
Journal: (1975) *Biochemistry* **14**: 4943-4952

PubMed: [1182131](#) [↗](#)
[Search Related Articles in PubMed](#) [↗](#)

PubMed Abstract:

The structure of the variable portions of a K-type Bence-Jones protein REI forming a dimer has been

Biological Assembly [?](#)



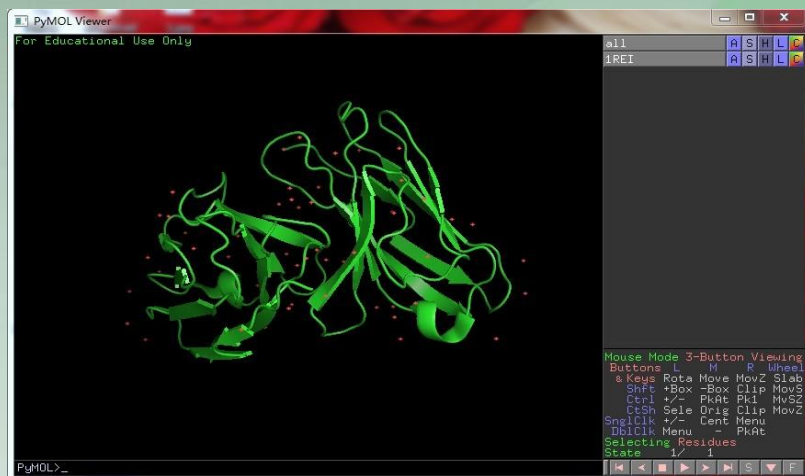
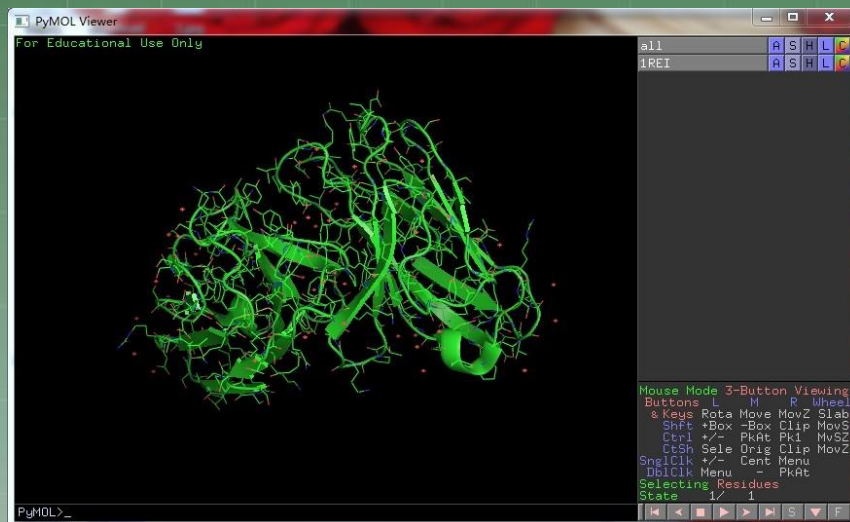
演示Cartoon图像

1. 点击S，选择cartoon。
图像中显示出cartoon和线框，结果如上图。

2. 去除线框：点击H，
选择lines，结果如下图。

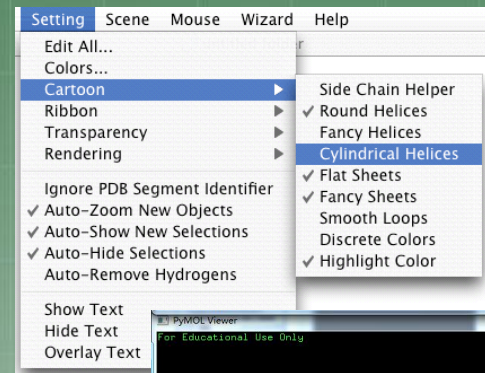
注：S和H是两个相反的功能，一个是显示相关属性，另一个则是关闭该属性。

2012/7/3



•在外部GUI窗口（External GUI）中，我们可以点击“setting”下拉菜单，选择“cartoon”对其进行显示设置。其它许多选项也可通过该下拉菜单进行自定义设置。

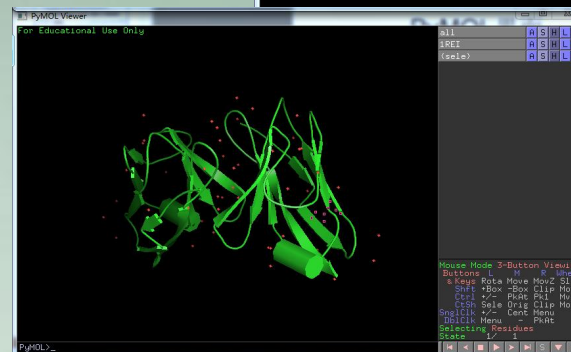
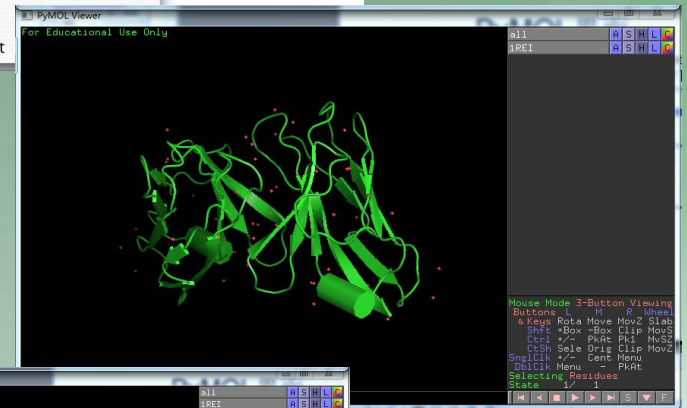
•很容易对图像中的alpha-helices、beta-sheets、loops的显示样式进行更改。



•举例：使所有alpha-helices显示柱状；简化图像。

1.点击“setting”，选择 Cartoon > Cylindrical Helices。重复该操作即可删除该显示效果。

2.点击“setting”，选择 Cartoon > Smooth Loops，即可简化图像。

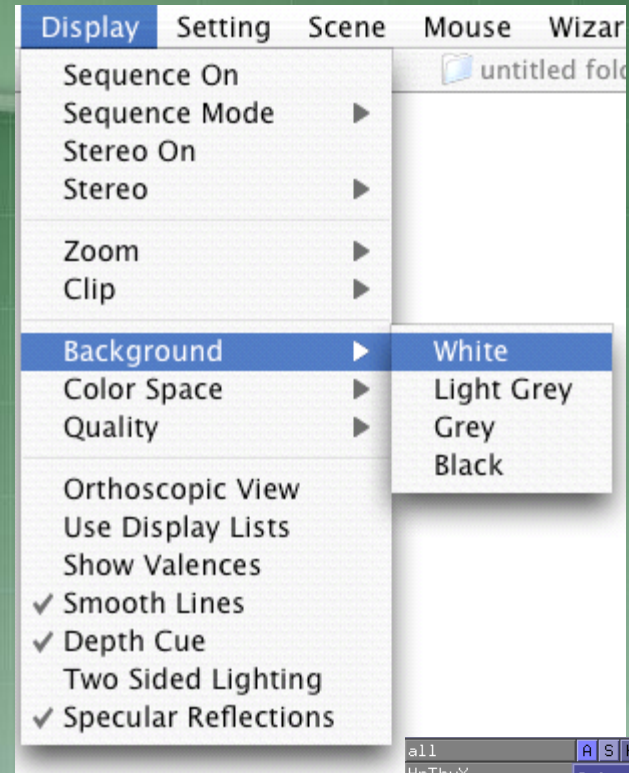


•黑色背景适于屏幕上观看图像，但并不适于打印出来作为文章打印图，将背景改为白色将更为适用些：

•在External GUI界面中，点击“Display”菜单，该菜单包含大部分PyMol viewer图像显示选项。

•改变背景色为白色的步骤：

Display > Background > White



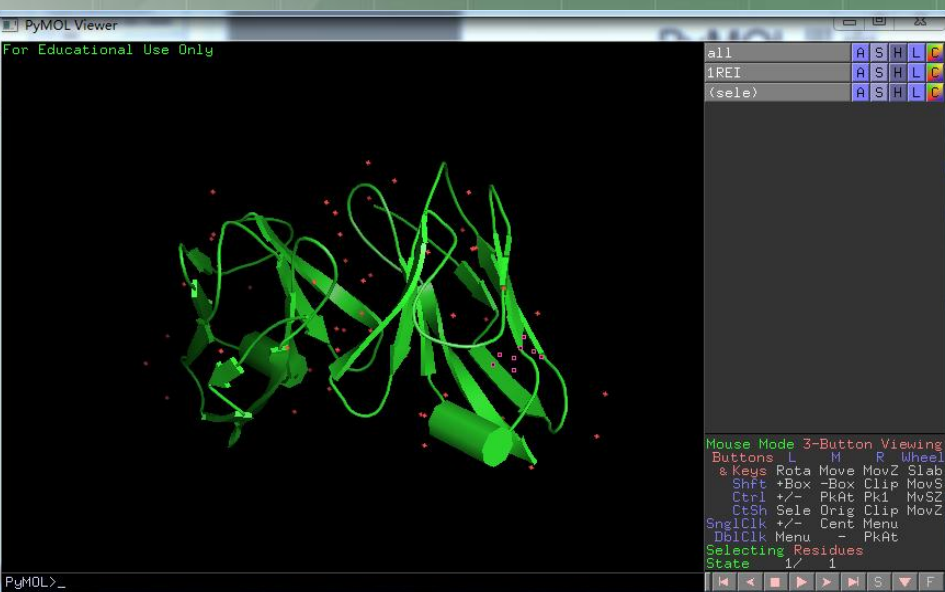
1.改变条带显示的颜色：在“Internal GUI”中的1REI菜单框中的C菜单中进行如下操作：1REI> C > chain。

2.我们也可以通过另一种方式来对该蛋白质构像的二级结构进行上色，其操作步骤如下：1REI> C > by ss > Helix Sheet Loop

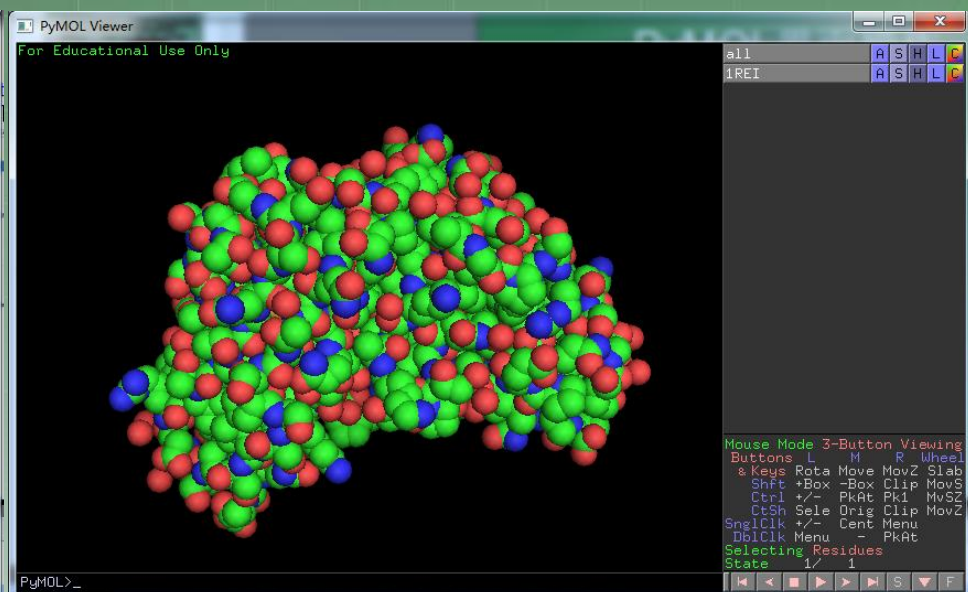


•显示该蛋白质构象的所有配位体，操作步骤：

1REI> S > spheres



Cartoon图



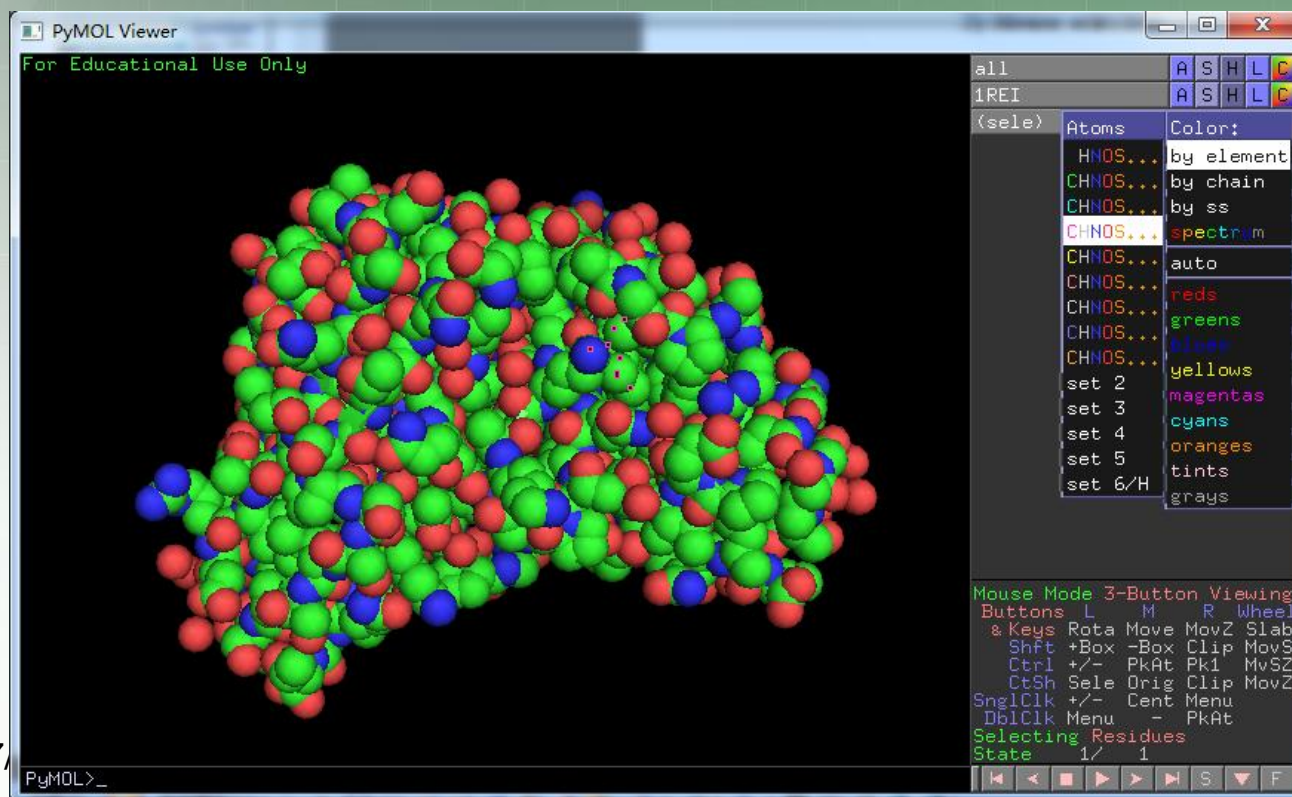
显示所有配位体图

注：在右图中，鼠标单击任意一个圆球体，即表示选中该配位体，再次单击可取消选中。

•若想改变配位体中**CHON**等各原子显示的颜色，我们可以通过如下操作实现：

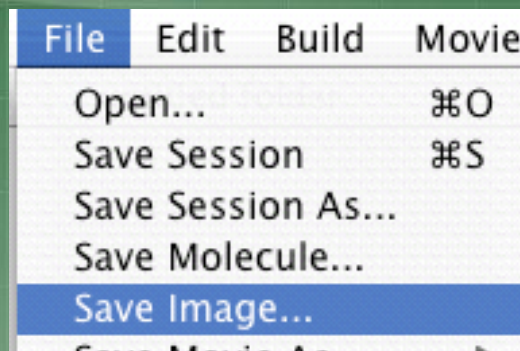
(sele) >C > by element > CHNOS....

结果显示如下：

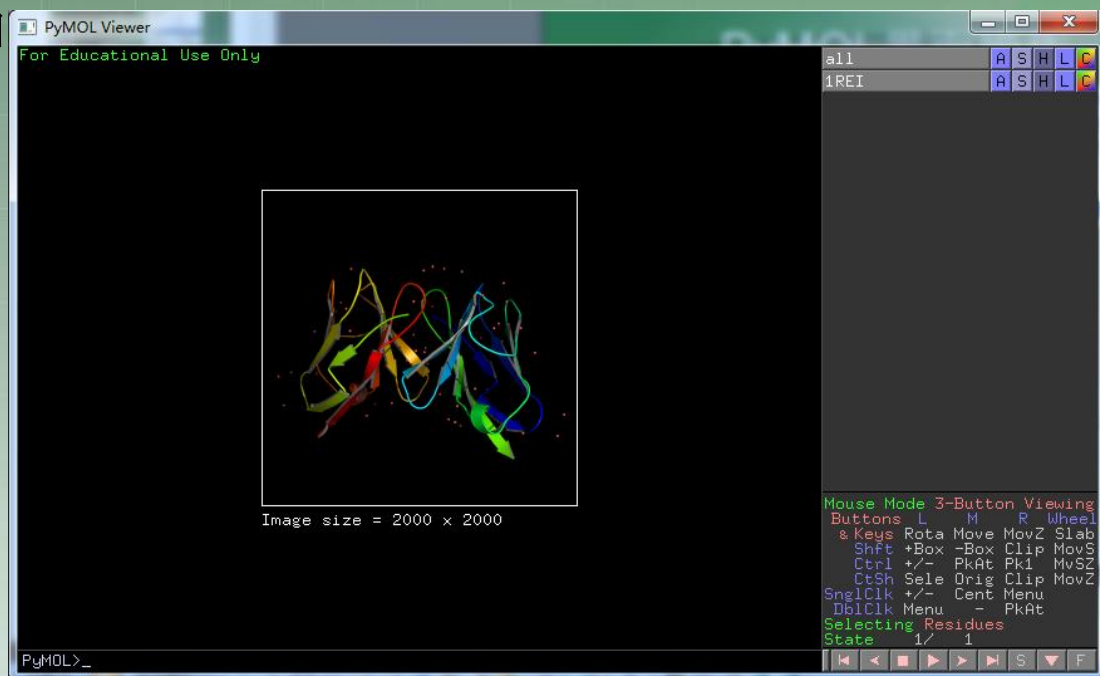


- 图片最终保存，其操作步骤：

File > Save Image...



- 然而此时获得的图像的分辨率和清晰度较粗糙；PyMOL提供了“ray tracer”，可形成高质量的画面，适用于发表。其操作步骤：点击“external GUI”右上角的“Ray”按钮，或者在 PyMOL> line command中输入“**ray 2000, 2000**”，即可得到最终的高质量的“ray tracer”图像了。

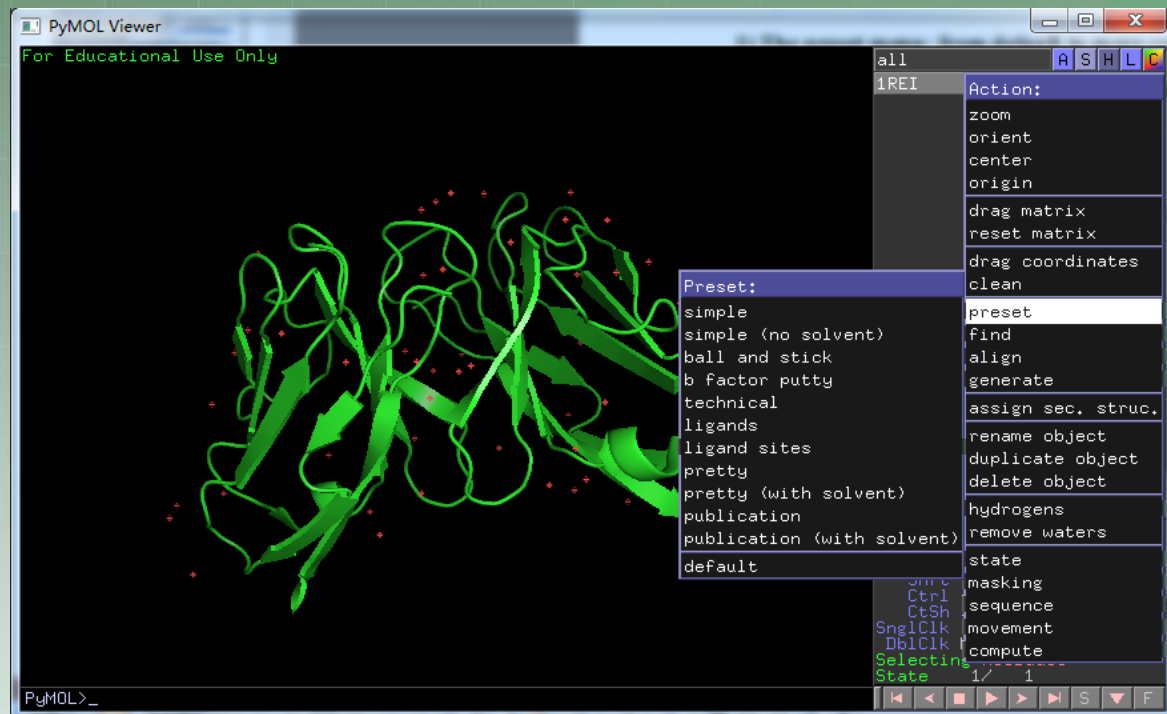


Preset 菜单：从默认到复杂

Preset菜单是用于调整蛋白质构象外貌的属性。其操作步骤：

1REI > A > preset > default

注：Preset选项可以对图像进行特定参数设定，并可进一步绘图。可以通过如下操作解除Preset的原有设置：A>preset>default，并可通过preset下拉菜单重新进行参数设置。



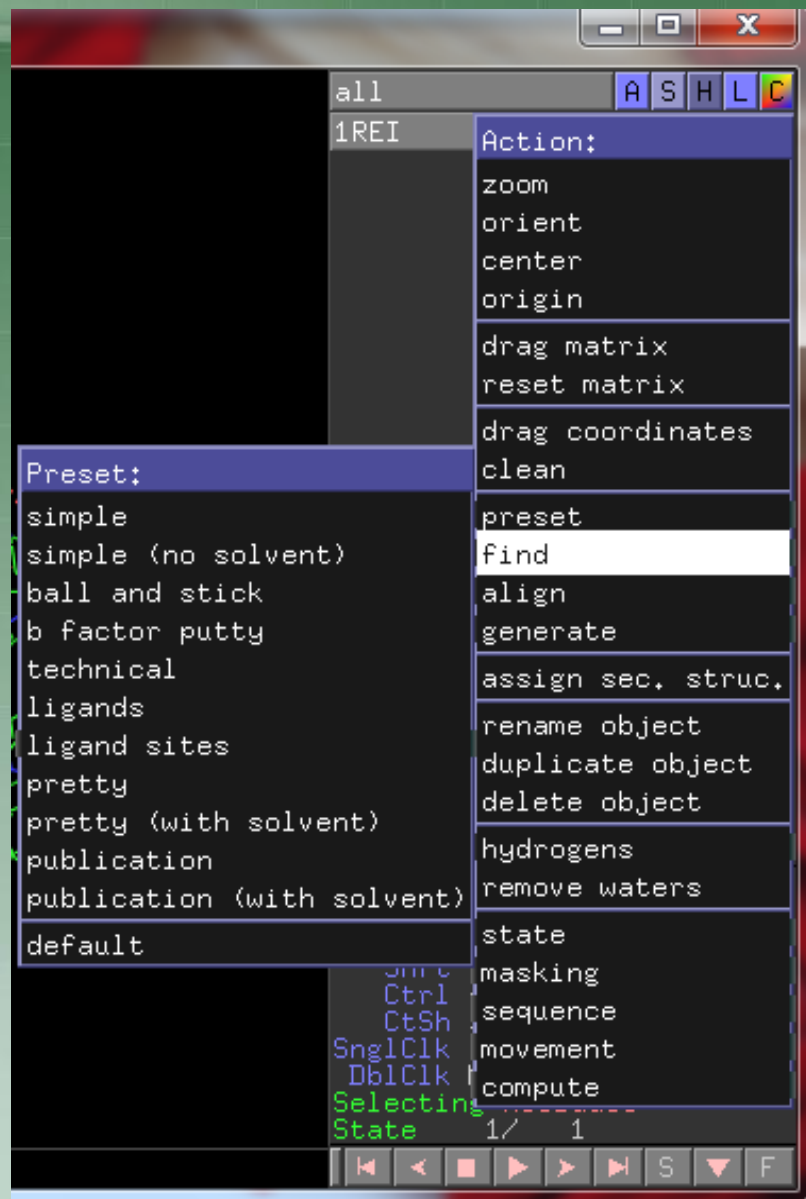
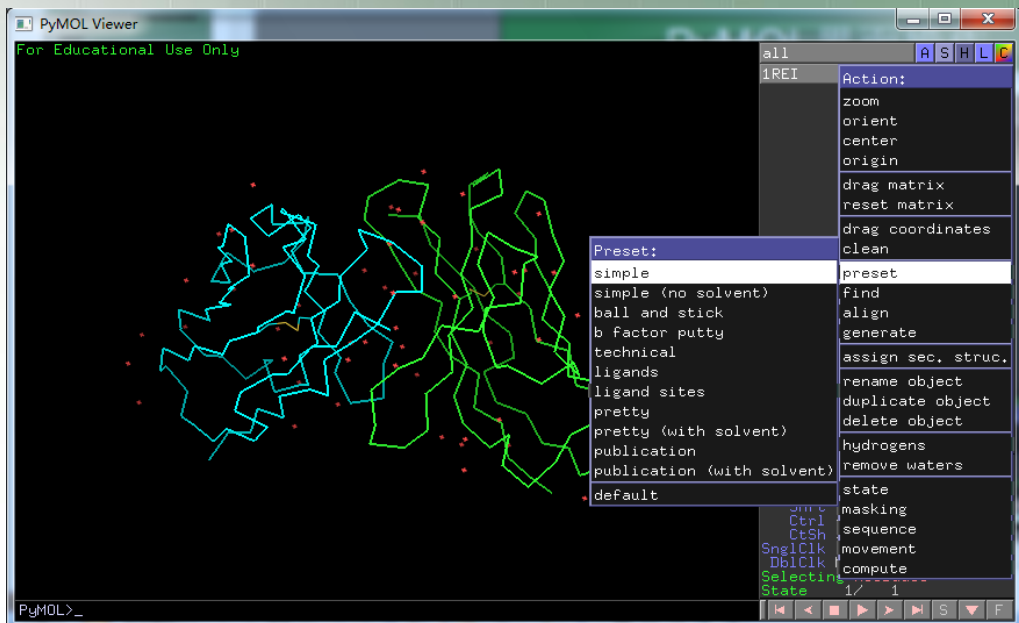
Preset 菜单：从默认到复杂

- 举例：Simple

操作步骤：

1REI > A > preset > simple

详见下图

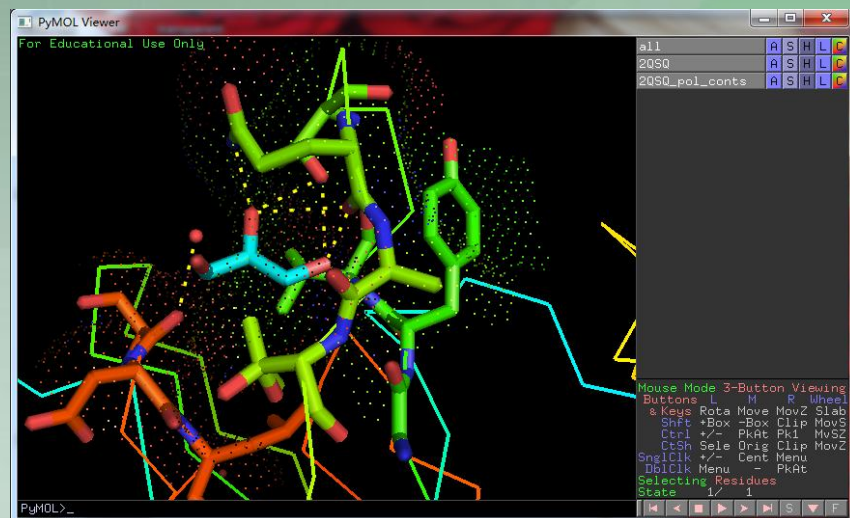
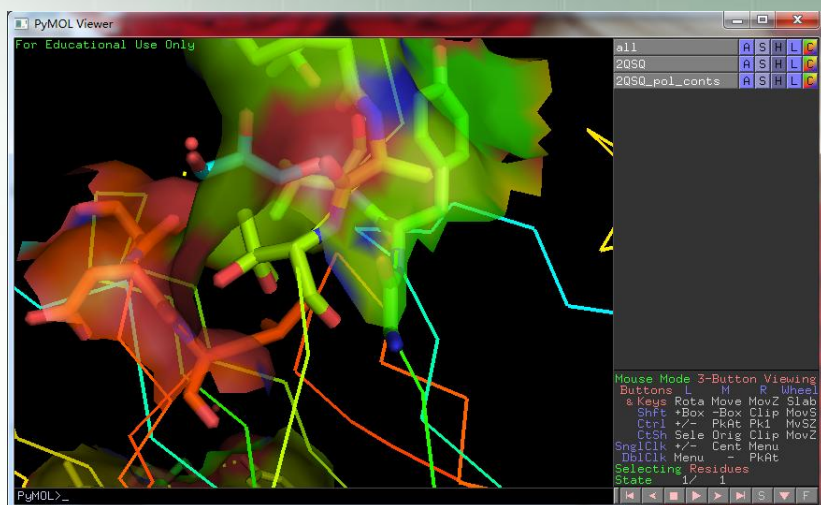
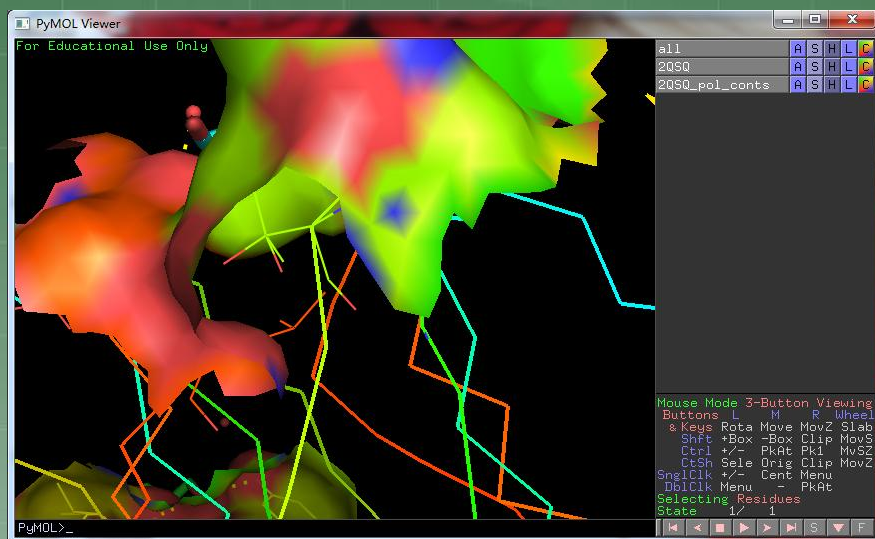


Preset 菜单：从默认到复杂

• 举例：Ligand Sites

操作步骤：

2QSQ > A > preset > Ligand Sites > Transparent(better)/solid surface/dot surface 详见下图



PyMOL命令操作简介

1. 记录结果

- 当在PYMOL上操作时，如果想记录下完成的操作步骤，可创建一个日志文件（log-file）：
- 语法

`log_open log-file-name`

例如

```
PyMOL> log_open log1.pml
```


2.载入数据

- 从文件中载入PDB，命令如下
语法

`load data-file-name`

例如

```
PyMOL>load$PyMOL_path/test/dat/pept.pdb
```

命令输入后，PYMOL会打开读“pept.pdb”，创建并命名相应的对象，在Viewer中显示图像并在控制板中添加对象。

2.载入数据

- 重命名对象:

语法: load data-file-name,object-name

例如: PyMOL>load

```
$PyMOL_path/test/dat/pept.pdb #对象命名为“pept”
```

#文件扩展名不会出现在对象名中

- PyMOL>load\$PyMOL_path/test/dat/pept.pdb,test #对象命名为“test” (“#”是注释标志, 在命令行中, #后输入任何信息都不会被PYMOL读取)

3.操控对象(manipulating object)

- 对象的操控既可用鼠标，也可用命令。例如，改变默认的表现形式（representation）lines到sticks，首先删除lines然后显示sticks:
- 语法
- `hide representation`
- `hide representation`
- 例如
- `PyMOL>hide lines` #以lines显示的对象消失
- `PyMOL>show sticks` #以sticks显示的对象出现
- 其他的表现形式还有
`cartoon,ribbons,dots,spheres,meshes`和`surfaces`等

1) 原子选择

- 原子选择 (**atom selections**) 可以操控分子中一部分原子或化学键。PyMOL 精于对原子或残基的选择、分组和命名。你可以只用一次选择，也可以重命名以便再次使用。
- 首先，命名选择：
- 语法
- `select selection-name,selection-expression`
- 例如
- `PyMOL>select boy007,resi 1-10 #选择残基并命名为“boy007”`
- 然后使用这个名称：
- 语法
- `zoom selection-name`
- `hide representation,selection-name`
- `show representation,selection-name`
- 例如
- `PyMOL>zoom boy007`
- `PyMOL>hide everything,boy007`
- `PyMOL>show spheres,boy007`

2) 对象和选择的着色

- 语法
- `color color-name` #整个object被着色
- `color color-name,selection-expression` #selection被着色
- 例如
- `PyMOL>color white`
- `PyMOL>color orange,pept`
- `PyMOL>color green,resi 50+35+56`
- `PyMOL>color yellow,resi 24-35`
- `PyMOL>color blue,boy007`
- `PyMOL>color red,ss h`
- `PyMOL>color red,ss s`
- `PyMOL>color green,ss l+' '`
- 最后三个例子中ss是二级结构的选择符，h表示helix，s表示beta sheet，l+' '表示loops和非特定结构。

3) 对象和选择的on/off

- PYMOL可同时呈现多个对象。disable和enable命令可以消除对象的显示，但仍能够通过命令控制它的属性。
- 语法
- `enable object-name`
- 例如
- `PyMOL>load $PyMOL_path/test/dat/fc.pdb`
- `PyMOL>load $PyMOL_path/test/dat/pept.pdb`
- `PyMOL>disable pept` #pept完全从viewer
中消失
- `PyMOL>color yellow,name c+o+n+ca` #在fc和pept
中的主链原子都被着色为黄色，但是pept的原子仍然是不可见的。
- `PyMOL>enable pept` #pept原子可见了并
显示为黄色

4.改变视点

- **Zoom**（变焦）命令可使对象或选择在视野中央显示：如果对象或选择没显示在当前的视野，命令会使它显示；如果当前视野仅显示了一小部分，命令会使它充满视野。
- 语法
- `zoom selection-expression`
- 当你想重新查看分子时，**Orient**命令是十分有用的。它会调整对象或选择，使其最大维度水平显示，次最大维度垂直显示：
- 语法 `orient selection-expression`

5. 保存工作

- PyMOL保存工作的种种过程：1.在给出的一系列命令前，启动进程把命令记录在纯文本日志中，并作为脚本使用。2.在会话的任何时候，都可以创建一个会话文件保存程序的内存状态，供以后调用此状态。3.创建图形文件保存viewer中的图像。

1) 脚本和日志文件

- 一旦你创建了日志文件，PyMOL将会记录保存所有的命令信息，不论是输入的命令还是点击的按钮。
- Windows系统下，可以双击脚本图标，点击“File”菜单的“Run”选项或者输入命令“@”打开一个脚本：
 - 语法
 - @script-file-name
 - 例如
 - PyMOL> @my_script.pml
- 通过命令启动PyMOL时可同时打开目标脚本（在“运行”或“命令提示符”中）
 - 语法
 - PyMOL script-file-name
 - 例如(Windows)
 - C:\>PyMOL.exe my_script.pml

2) 图像文件

- 当你想保存图片时，最好先光线追踪进行渲染来提高图片的质量。光线追踪（ray tracing）显示了在三维世界中光线是如何反射和影子是如何形成的。关键词ray要求PyMOL在viewer中重绘（redraw）和显示图片。
- 保存图片到文件，可点击“File”中的“Save image”或输入png命令：
- 语法
- `png file-name`
- 例如
- `PyMOL>png pep` #图片pep.png被保存在PyMOL安装默认的文件夹中。
- `PyMOL>png d:/boy/pep` #图片pep.png被保存在d盘的boy文件夹里。
- Png格式的图片还可通过ImageMagick等软件转换成其他格式。

3) 会话文件

- 如果想返回到PyMOL当前的状态，可通过创建会话文件实现（点击File菜单中的Save Session，命名以“.pse”为扩展名的文件）。PyMOL的会话文件是对PyMOL存储状态的符号记录，包括载入或创建的对象、创建的选择和viewer中的显示。
- 当打开保存的会话文件，PyMOL会返回到保存的状态。

会话文件和日志文件或脚本的差异

- 日志文件必须在你想保存给出的命令前创建，而会话文件可以在任何时候创建。
- 会话文件通过**File**菜单的**Open**选项调用，而日志文件被作为脚本通过**Run**选项启动。
- 会话文件不能被人工编辑，而日志文件和脚本却可以。

6. 命令行快捷键

1) 用TAB键完成命令

- 输入命令的前几个字母然后按Tab键，PyMOL就会自动完成命令或列出符合语法的命令表，例如：PyMOL>sel
- #按Tab键就会出现下面的显示：PyMOL>select
- 如果不输入命令直接按Tab键，那么PyMOL会输出全部命令的列表。

2) 用TAB键完成文件名

- 一些要载入的文件有非常长的路径和文件名，当你按Tab键，PyMOL会自动完成明确的路径和文件名，例如：
PyMOL>load cry
#如果cystal.pdb存在于当前工作目录中，按Tab键就会产生下面的命令行：PyMOL>load cystal.pdb
- 如果文件名含糊不清，PyMOL就会自动匹配并输出目录中匹配的文件名，然后选择一个输入。

7. 其他命令和帮助

- 在PyMOL中可输入help按回车查看全部关键词（keyword）的列表，如果想查看某个命令的帮助：
- 语法
- `help keyword`
- 例如
- `PyMOL>help load`
- PyMOL将会在外部GUI脚本语言和viewer中显示命令指南。

8.单字选择符

- PyMOL>color blue,all
- PyMOL>color blue,* #所有原子变成蓝色
-
- PyMOL>hide hydro
- PyMOL>hide h. #所有的氢原子的表示形式被隐藏
-
- PyMOL>show cartoon,hetatm #PDB输入文件中被定义为HETATM的
- PyMOL>show cartoon,het #所有原子显示为
cartoon

9.属性选择符

属性选择符	缩略形式	标识符和举例
symbol	e.	Chemical-symbol-list 单字母或双字母的化学元素符号 PyMOL>select polar,symbol o+n
name	n.	Atom-name-list 蛋白和核酸中至多4字母的原子符号 PyMOL>select carbons,name ca+cb+cg
resn	r.	Residue-name-list 3字母的氨基酸符号 PyMOL>select aas,resn asp+glu+asn+gln 或至多2字母的核苷酸符号 PyMOL>select bases,resn a+g
resi	i.	Residue-identifier-list 至多4位数的残基号 PyMOL>select boy,resi 1+10+100+1000 Residue-identifier-range PyMOL>select boy,resi 1-10
chain	c.	Chain-identifier-list 单字母或有时是数字 PyMOL>select 007,chain a
ss	ss	Secondary-structure-type 单字母 PyMOL>select allstrs,ss h+s+l+' ' ‘

10.选择代数

运算符	缩略形式	效果
not s1	! s1	选择不在s1中的原子 PyMOL>select sidechains,! bb
s1 and s2	s1 & s2	选择s1和s2中共有的原子 PyMOL>select far_bb,bb&farfrm_ten
s1 or s2	s1 s2	选择s1和s2中的所有原子 PyMOL>select all_prot,bb sidechain
s1 in s2	s1 in s2	选择s1中标识符name,resi,resn,chain,segi全匹配s2的原子 PyMOL>select same_atms,pept in prot
s1 around x	s1 a. x	选择中心在以s1任何原子为中心,以x埃为半径的范围内的所有原子 PyMOL>select near_ten,resi 10 around 5
s1 expand x	s1 e. x	通过在以s1任何原子为中心,以x埃为半径的范围内的所有原子扩充s1 PyMOL>select near_ten_x,near 10 expand 3
s1 within x of s2	s1 w. x of s2	选择s1中在s2 x埃范围内的原子 PyMOL>select bbnearten,bb w. 4 of resi 10
byres s1	br. s1	扩充s1到残基 PyMOL>select complete_res,br. bbnear10
byobject s1	bo. s1	扩充s1到对象 PyMOL>select near_obj,bo. Near_res
neighbor s1	nbr.s1	选择直接以化学键连接s1的原子 PyMOL>select vicions,neighbor resi 10

2012/7/3

41

虚设的变量s1和s2代表selection-expressions.

10.选择代数

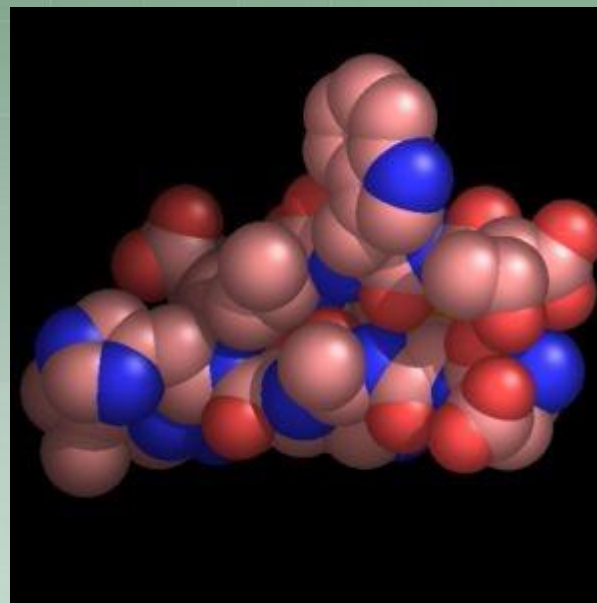
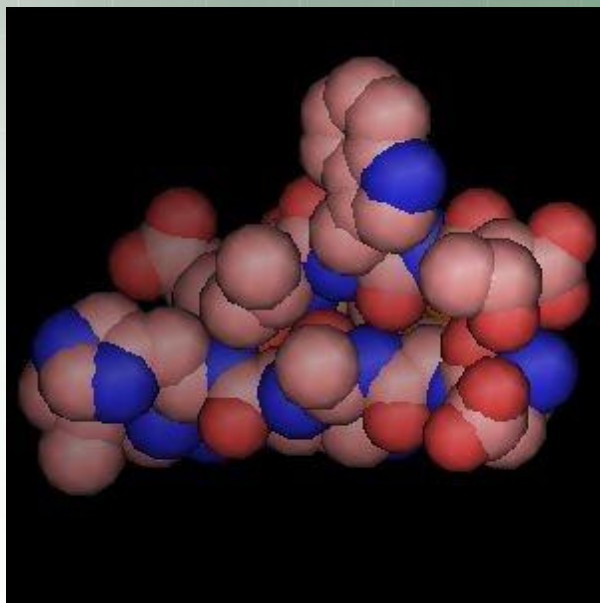
- 逻辑选择可被组合。例如，你可以选择部分链a的原子，但不包括残基125：
- `PyMOL>select 007,chain a and (not resi 125)`
- 逻辑运算像算术运算一样是有顺序的，为确保操作正确执行，必要时使用括号：
- `Byres((chain a or (chain b and (not resi 125))) around 5)`
- PyMOL是从最内的括号向外逻辑选择的。

11. 宏指令

- 宏指令使表达长复杂语句的原子选择成为可能,如:
- `PyMOL>select boy,pept and segi lig and chain b and resi 142 and name ca`
- 用精简方式表示:
- `PyMOL>select boy, /pept/lig/b/142/ca`
- 宏指令用正斜杠来界定标识符。
- 宏指令通过布尔算符“and”选择原子，也就是说，选择的原子必须全部匹配标识符：
- `/object-name/segi-identifier/chian-identifier/resi-identifier/name-identifier`
- PyMOL将宏指令当做一个词来识别，所以宏指令中不能有空格。

12.光线追踪（ray tracing）

- 光线追踪能制作出最高质量的分子图像。PyMOL是第一个拥有高速光线追踪器的全功能分子图像程序。
- 通过ray命令或点击“Ray Trace”按钮，可以光线追踪PyMOL内的任意图像。内置的光线追踪器也使组配高质量的动画成为可能。



12.光线追踪 (ray tracing)

- 所有的图片都能保存为PNG格式，通过"png"命令或"File"菜单的"Save Image"选项。图片通常被保存为和viewer 窗口一样的大小：
 - ray
 - png my_image.png
 -
- 通过下面的命令可改变图片大小：
- 语法
 - ray width,height #宽和高都必须是整数，它们的默认是零或当前窗口大小
- 例如
 - ray 1024,480

13.立体效果

- PyMOL能够支持几种不同的立体图形模式。
 - Crosseye stereo
 - Walleye stereo
 - Hardware stereo
 - Geowall stereo
 - Sidebyside stereo
 - Quadbuffer stereo
 - stereo on #开启立体效果
 - stereo off #关闭立体效果
 - stereo crosseye #开启crosseye立体模式,

参考文献

- PyMol user's Guide. Warren L. DeLano.

致谢

- 感谢亲爱的罗老师的谆谆教导!
- 感谢本组所有成员的精诚合作!
- 感谢在学习过程中给予我们帮助的所有同学!

谢谢！