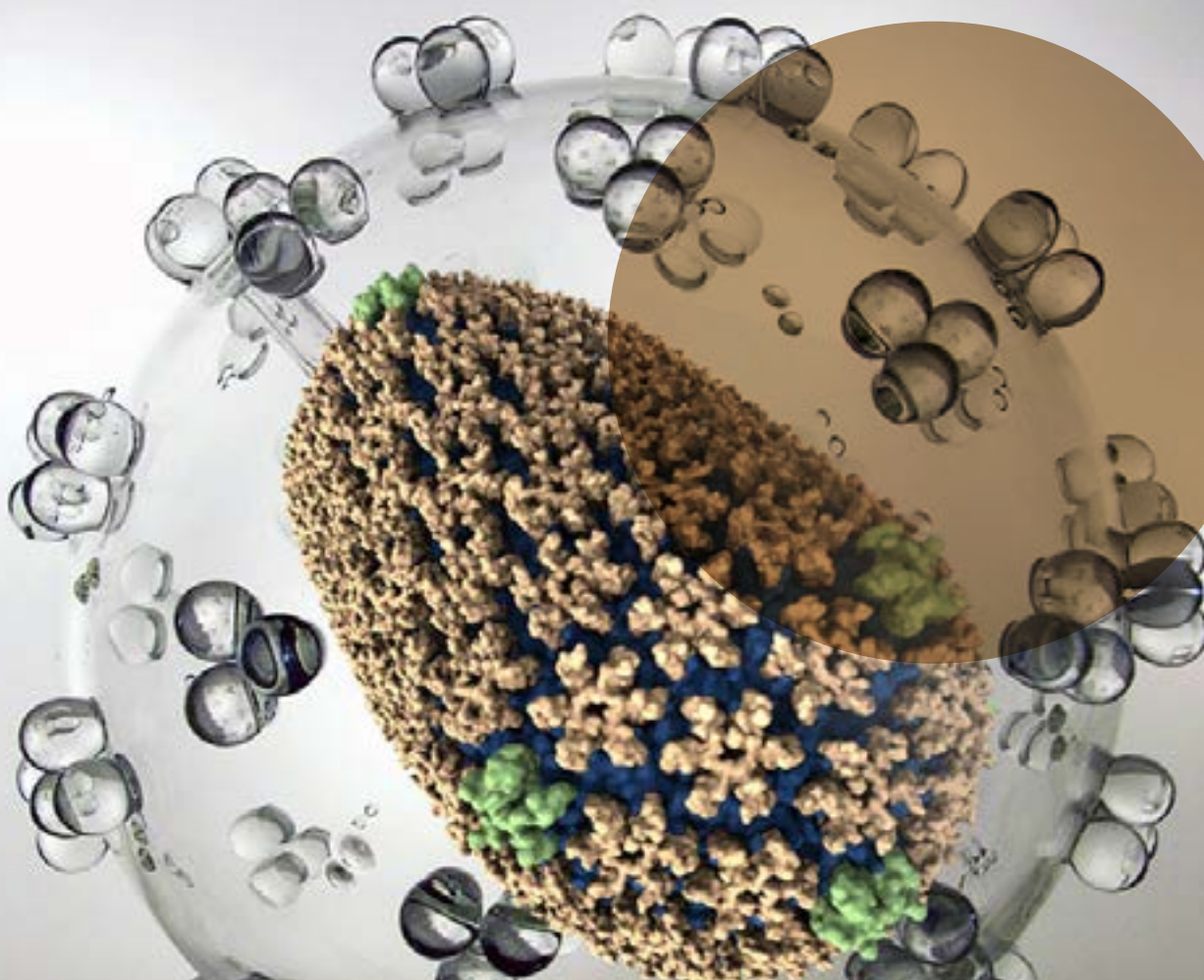


مصورسازی در ابعاد مولکولی

مروری بر قابلیت‌ها و کاربردهای ابزار مصورسازی دینامیک مولکولی (VMD)



دکتر علی علیزاده

عضو هیئت علمی دانشگاه علوم پزشکی تهران

محمدامین جدیدی کوهبنانی

فرحناز بهزاد



دانشگاه علوم پزشکی
و خدمات بهداشتی درمانی تهران

Visualization at the Molecular Scale

An Overview of the Capabilities and Applications of Visualization Molecular Dynamics (VMD)



سرشناسه	:	علیزاده، علی، ۱۳۶۲ شهریور -
عنوان و نام پدیدآور	:	مصورسازی در ابعاد مولکولی؛ مروری بر قابلیت‌ها و کاربردهای ابزار مصورسازی دینامیک مولکولی (VMD) / علی‌علیزاده، محمدامین جدیدی‌کوهبنانی، فرح‌ناز بهزاد؛ ویراستار علی‌علیزاده. تهران: دانشگاه علوم پزشکی و خدمات بهداشتی درمانی تهران، ۱۴۰۳.
مشخصات نشر	:	تهران: دانشگاه علوم پزشکی و خدمات بهداشتی درمانی تهران، ۱۴۰۳.
مشخصات ظاهری	:	۲۹۷ ص.: مصور.
شابک	:	۹۷۸-۶۰۰-۱۵۶-۱۱۳-۹
وضعیت فهرست‌نویسی	:	فیپا
یادداشت	:	واژه‌نامه.
یادداشت	:	کتابنامه: ص. ۲۸۸ - ۲۹۲.
موضوع	:	مصورسازی اطلاعات -- نرم‌افزار Information visualization -- software دینامیک مولکولی -- نرم‌افزار Molecular dynamics -- Software
شناسه افزوده	:	جدیدی کوهبنانی، محمدامین، ۱۳۷۲-
شناسه افزوده	:	بهزاد، فرحناز، ۱۳۶۸-
شناسه افزوده	:	دانشگاه علوم پزشکی و خدمات بهداشتی درمانی تهران
شناسه افزوده	:	Tehran University of Medical Sciences and Health Services
رده بندی کنگره	:	۹ / ۶ / OAY۶
رده بندی دیویی	:	۰۰۱ / ۴۲۲۶
شماره کتابشناسی ملی	:	۹۹۹۷۲۱۱
اطلاعات رکورد کتابشناسی	:	فیپا

عنوان	:	مصورسازی در ابعاد مولکولی؛ مروری بر قابلیت‌ها و کاربردهای ابزار مصورسازی دینامیک مولکولی (VMD)
مؤلفین	:	دکتر علی‌علیزاده، محمدامین جدیدی‌کوهبنانی، فرح‌ناز بهزاد
ویراستار علمی	:	دکتر علی‌علیزاده
صفحه آرای و طرح جلد	:	رضا جوادی
شابک	:	
ناشر	:	آفتاب
تیراژ	:	۱۰۰۰ نسخه
چاپخانه	:	ارژنگ
قیمت	:	۴۰۰ / ۳ ریال

مصورسازی در ابعاد مولکولی

مروری بر قابلیت‌ها و کاربردهای ابزار مصورسازی دینامیک مولکولی (VMD)

Visualization at the Molecular Scale

An Overview of the Capabilities and Applications of Visualization Molecular Dynamics (VMD)

دکتر علی‌علیزاده

عضو هیئت علمی دانشگاه علوم پزشکی تهران

محمدامین جدیدی کوهبنانی

فرحناز بهزاد

پیشگفتار

رشد و توسعه ابزار و روش‌های نوین آموزشی در کنار نیازمندی‌های عملی، فنی و تخصصی، لزوم بروزرسانی و ارتقای سطح کمی و کیفی منابع و محتوای درسی را بیش از پیش نمایان ساخته است.

از طرفی توسعه کاربردها و به کارگیری ابزارهای نوین و نرم‌افزارهای کارا در انتقال مفاهیم و افزایش کمی و کیفی فرایند یادگیری، عناوین و حوزه‌های نوپدید آموزشی مانند روش‌های نمایش داده و مطالعات آماری، ابزارهای مرتبط با نمایش تصاویر سه بعدی، واقعیت مجازی۱ واقعیت افزوده۲، نرم‌افزارهای با قابلیت نمایش ساختارهای اجسام مولکول ها همه و همه در کنار هم در مفهوم کلی روش‌های مصورسازی قابلیت ارائه سرفصل مدون و کاربردی را برای رشته‌های مختلف فنی مهندسی تا پزشکی و علوم اجتماعی مورد تاکید قرار می‌دهد.

بر این اساس از آنجائیکه بسیاری از رشته‌های تخصصی مانند داروسازی، شیمی، فیزیک، نانو تکنولوژی، بیوشیمی میکروب شناسی، بیوانفورماتیک و ... نیازمند استفاده از ابزار مصورسازی به ویژه در مقیاس مولکولی می‌باشند، دانشجویان، محققین و فعالین این حوزه‌های تخصصی، نیازمند استفاده از ابزارهای با قابلیت ایجاد نمایش سه بعدی۳ در اجزا و ریزترین بخش‌های در مقیاس اتمی و مولکولی هستند. همچنین درکنار این، انتقال درست مفاهیم و تصاویر منطبق بر واقعیت در دروس آموزشی مرتبط با این رشته‌ها می‌تواند به کمک این نرم‌افزارهای مصورسازی در مقیاس مولکولی و اتمی به بهترین شکل ممکن، محقق گردد.

از آنجائیکه دروس مختلف در رشته‌های مرتبط نیازمند جدی استفاده از نرم‌افزارهای مصورسازی در مقیاس مولکولی می‌باشند، ضمن بررسی نرم‌افزارهای مناسب که دارای قابلیت‌های ویژه و در عین حال امکانات استفاده آسان۴ می‌باشند مورد بررسی قرار گرفت که از این میان، نرم‌افزار مصورسازی دینامیک مولکولی۵ به عنوان مناسب‌ترین گزینه که دارای قابلیت‌های ویژه و در دسترس در کنار پشتیبانی مناسب تیم توسعه دهنده می باشد، جهت معرفی و ارائه قابلیت ها و امکانات تخصصی آن انتخاب شد.

کتاب حاضر با رویکرد کاربردی برای همه دانشجویان، اساتید و محققین حوزه‌های مرتبط با مطالعات ساختارهای مولکولی و بیولوژیکی و با تمرکز بر قابلیت‌ها و خصوصیات این نرم‌افزار، در کنار توضیح قابلیت‌ها و امکانات مختلف در مصورسازی انواع ساختارهای مولکولی و آموزش‌های متناسب با آن تدوین شده است.

لازم می‌دانم از زحمات آقای محمد امین جدیدی کوهبنانی و خانم فرح ناز بهزاد در همراهی در تدوین این کتاب و دقت و توجه به نکات و ظرایف کاربردی موضوع تشکر و قدردانی نمایم.
همینطور از واحد انتشارات معاونت تحقیقات و فناوری دانشگاه علوم پزشکی تهران برای چاپ این کتاب تشکر می کنم.

امیدوارم این تلاش موجبات گشودن دریچه ای هر چند اندک به سوی این عظمت الهی در خلقت که در مقیاس و ساختارهای مولکولی و اتمی نمایان است را فراهم آورد و مورد قبول درگاه حق تعالی قرار گیرد.

دکتر علی علیزاده
دانشگاه علوم پزشکی تهران
تابستان ۱۴۰۴

- . Virtual Reality (VR)
- . Augmented Reality (AR)
- . 3 Dimension (3D)
- . User Friendly
- . Visual Molecular Dynamics (VMD)

فهرست

فصل یکم

مقدمه و معرفی

مقدمه	۳	استفاده از پنجره گرافیکی	۲۵
لیست ویژگیهای کلیدی VMD	۳	استفاده از Spaceball در پنجره گرافیکی	۲۹
		استفاده از Joystick در پنجره گرافیکی	۳۰
		توضیحات مربوط به هر پنجره VMD	۳۱

فصل دوم

سخت افزار و نرم افزارهای مورد نیاز، نصب نرم افزار

سخت افزار و نرم افزارهای پایه ای مورد نیاز	۷	روش تفسیر	۴۵
CPU های چند هسته ای و شتاب دهنده GPU	۷	Coloring Methods	۶۰
محاسبات موازی روی کلاسترها و ابر کامپیوترها	۸	Selection Methods	۶۸
نصب VMD	۸		

فصل سوم

تئوریال

معرفی سریع VMD	۱۳	Perspective/Orthographic views	۸۳
به تصویر کشیدن یک مولکول: برای مثال میوگلوبی	۱۳	Monoscopic Modes	۸۳
ارائه تصویر	۱۵	Stereoscopic Modes	۸۳
ایجاد سریع یک انیمیشن	۱۵		
مقدمه ای بر انتخاب اتم	۱۶		
مقایسه دو ساختار	۱۷	Screen Capture Using Snapshot	۸۹
برخی از Representation های خوب	۱۸	Higher Ouality Rendering	۸۹
ذخیره کار خود	۱۹	Caveats	۹۰
ردیابی دستورات اسکریپت نسخه های عملکرد GUI	۱۹	One Step Printing	۹۲
		Making Stereo Images	۹۳
		Making a Movie	۹۳

فصل چهارم

بارگذاری یک مولکول

بارگذاری (Loading) یک مولکول	۲۱		
یادداشتهای مربوط به قالبهای رایج مولکولی	۲۱		
چه اتفاقی میافتد وقتی که یک فایل load میشود ؟	۲۲	Using text commands ۹٫۱	۹۷
واسطه‌های Babel	۲۳		
فرمت فایلهای ۳D Raster	۲۳	Tcl Text Commands ۹٫۳	۹۸

فصل پنجم

مؤلفه‌های رابط کاربر

		استفاده از موس در پنجره گرافیکی	۲۵
		استفاده از Spaceball در پنجره گرافیکی	۲۹
	۳	استفاده از Joystick در پنجره گرافیکی	۳۰
	۳	توضیحات مربوط به هر پنجره VMD	۳۱

فصل ششم

روش‌های ترسیم مولکولی

روش تفسیر	۷		۴۵
Coloring Methods	۷		۶۰
Selection Methods	۸		۶۸
	۸		

فصل هفتم

مدهای مشاهده

Perspective/Orthographic views	۸۳
Monoscopic Modes	۸۳
Stereoscopic Modes	۸۳

فصل هشتم

خروجی گرفتن از پروژه

Screen Capture Using Snapshot	۸۹
Higher Ouality Rendering	۸۹
Caveats	۹۰
One Step Printing	۹۲
Making Stereo Images	۹۳
Making a Movie	۹۳

فصل نهم

رابط متــــن Tcl

Using text commands ۹٫۱	۹۷
Tcl Text Commands ۹٫۳	۹۸

مقدمه

کتاب مصورسازی در ابعاد مولکولی روری بر قابلیت‌ها و کاربردهای ابزار مصورسازی دینامیک مولکولی بر اساس اطلاعات و مستندات مربوط به نرم افزار تولید شده و همچنین مثال‌ها و خودآموزهای مرتبط با مصورسازی و محاسبات در ابعاد مولکولی با استفاده از نرم افزار (VMD) که توسط تیم توسعه دهنده این نرم افزار در قالب عناوین و موضوعات مختلف در ۱۴ فصل تدوین شده است.

دراین کتاب، ابتدا به عنوان مقدمه، معرفی کلیات کاربردی و حیطه فعالیت نرم افزار توضیح داده شده است. در فصل دوم با اشاره به زیرساخت مورد نیاز برای راه اندازی و استفاده از این سامانه در قالب سخت افزار و نرم افزارهای مورد نیاز و همچنین روش های نصب نرم افزار در پلتفرم های مختلف توضیح داده شده است.

فصل سوم به صورت خلاصه مروری بر قابلیت‌ها و اجزا، دسترسی‌ها و امکاناتی که نرم افزار مصورسازی دینامیک مولکولی در اختیار قرار می‌دهد اشاره دارد. فصل چهارم ضمن توضیح نحوه بارگذاری مولکول در نرم افزار به عنوان ورودی نرم افزار، انواع قابلیت‌ها و حالت‌های نمایش مولکول، انتخاب‌هایی که در نرم افزار در اختیار قرار می‌دهد را توضیح داده است. در فصل ششم و هفتم روش های ترسیم مولکول و انواع مختلف نمایش آن بیان شده است.

در فصل هشتم نحوه دریافت خروجی از نتیجه اقدامات و تنظیمات مرتبط با تصاویر و انیمیشن های نهایی که می‌تواند در کاربردهای مختلف از جمله ارائه‌های علمی مقالات و کنفرانس‌ها و سایر موارد مورد نیاز جهت نمایشی از تصویر مولکولی مورد نیاز می‌باشد ارائه شده است.

فصل نهم به معرفی رابط دستوری که به زبان برنامه نویسی Tcl برای اجرای دستورات مرتبط با محاسبات و اندازه‌گیری‌های مربوط و مورد نیاز محقق پرداخته است و روش های مختلف استفاده از این زبان برنامه نویسی برای محاسبات را ارائه می‌نماید. فصل دهم رابطه متنی به زبان پایتون برای کد نویسی به منظور اندازه و دریافت داده‌ها و محاسبات مرتبط با آن را فراهم می‌نماید. فصل یازدهم ضمن اشاره به مبانی قابلیت‌های مرتبط با بردارها و ماتریس‌ها امکانات و قابلیت‌های آن را بیان می‌کند. فصل دوازدهم امکانات مرتبط با آنالیز مولکولی را ارائه نموده و در فصل سیزدهم به معرفی رابط متغیرهای جمعی می‌پردازد.

در آخر در فصل چهاردهم ضمن ارائه جمع‌بندی روش های سفارشی کردن قسمت‌های مختلف مورد نیاز در مصورسازی دینامیک مولکولی، ساختارهای مورد نظر از منظر استفاده از اجزا، قابلیت‌ها و امکانات اشاره شده در فصل‌های قبلی به صورت یک فعالیت تجمیعی و کامل ارائه شده است.

همچنین به منظور توضیحات تکمیلی و امکان یادگیری و تمرین هرچه بیشتر در استفاده کاربردی از این کتاب، ضمن اشاره به موارد مهم و پرکاربرد در هر یک از فصل‌های کتاب، در انتها ضمن ارائه مراجع عناوین و موضوعات مرتبط با آموزش و موارد و تمرین های انجام شده با استفاده از این نرم افزار برای مطالعه بیشتر در اختیار خواننده قرار داده شده است. علاوه بر این امکان دسترسی به فایل های تمرینی در پورتال نرم افزار برای ارزیابی و سنجش میزان یادگیری در اختیار قرار گرفته است.

ارائه نظرات و بازخوردهای خوانندگان در زمینه مثال‌ها و جزئیات مطالب مطرح شده و پیشنهادات مرتبط با ارتقای محتوا در مسیر کاربردی‌تر شدن هرچه بیشتر آن همواره مورد امتنان است. امیدوارم این تلاش بتواند در به کارگیری فناوری‌های نوین در یادگیری را برای موضوعات علمی و تحقیقاتی مرتبط با مصورسازی در مقیاس مولکولی هرچه بیشتر فراهم آورد.

۲۳۱ Collective variable components (basis functions)

۲۵۶ روش‌های آنالیز و بایاس

فصل چهاردهم

تنظیم بخش‌های VMD

۲۸۵ گزینه‌های خط فرمان VMD

۲۸۷ Environment Variables (متغیرهای محیطی)

۲۹۳ Startup Files

۲۹۵ Using VMD as a WWW Client

فصل دهم

رابط متن پایتون

۱۵۱ Using the Python interpreter within VMD

۱۵۱ Python modules within VMD

۱۵۲ انتخاب اتم در پایتون

۱۵۹ Python callbacks

۱۶۰ Controlling VMD from Python

فصل یازدهم

بردارها و ماتریس ها

۱۷۹ بردارها

۱۸۲ Matrix routines

۱۸۵ Multiplying vectors and matrices

فصل دوازدهم

آنالیز مولکولی

۱۸۹ با استفاده از دستور molinfo

۱۹۰ استفاده از دستور atomselect

۱۹۴ Analysis scripts

۱۹۹ RMS Fit and Extension Extension

۲۰۱ RMS and scripting

۲۰۳ VMD Script Commands for Colors

۲۰۳ تغییر تعاریف مقیاس رنگ

۲۰۴ ایجاد مجموعه ای از تعاریف رنگ سیاه و سفید

۲۰۴ تمام مقادیر RGB را به حالت پیش فرض برگردانید

۲۰۴ ترفند رنگ آمیزی - غلبه بر یک دسته بندی رنگ آمیزی

فصل سیزدهم

رابط متغیرهای جمعی (Colvars)

۲۰۹ General parameters and input/output files

۲۱۵ Defining collective variables & their properties

۲۲۴ Selecting atoms for colvars

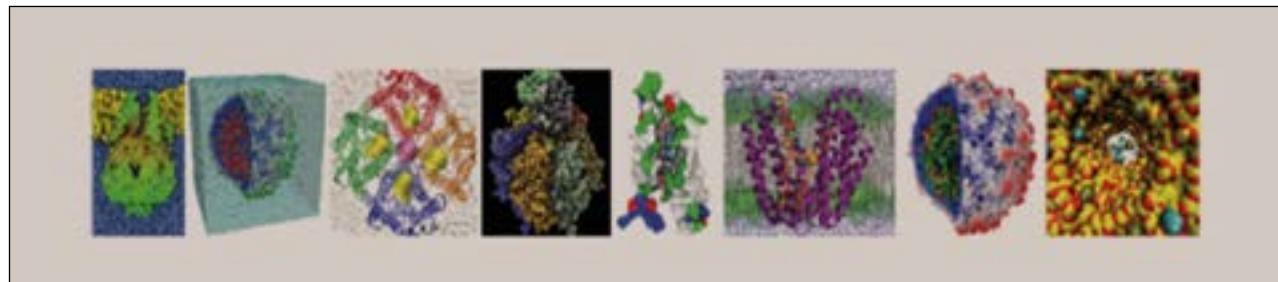
منابع

۳۰۵

مقدمه

VMD (Visual Molecular Dynamics) یک نرم افزار گرافیک مولکولی است که برای مدل سازی، تجزیه و تحلیل سیستم های بیولوژیکی از قبیل پروتئینها، اسیدهای نوکلئیک، لیپیدها و غشاهای طراحی شده است. در میان برنامه های گرافیکی مولکولی، VMD از لحاظ توانایی کارآمدی در ساختارهای های بزرگ بیومولکولی و مسیر دینامیک مولکولی با بازه زمانی طولانی، عملکرد متقابل آن با تعداد زیادی از ابزارهای شبیه سازی دینامیک مولکولی، ادغام آن در ساختار و اطلاعات توالی و ساخت داخلی آن بی نظیر است.

VMD قابلیت نصب بر روی تمام نسخه های Unix workstations, Apple MacOS X و Microsoft Windows را دارد. اطلاعات آنلاین درباره VMD از طریق سایت www.ks.uiuc.edu/Research/vmd موجود میباشد.



تصویر ۱-۱: مثال هایی از مدلسازی با VMD

لیست ویژگیهای کلیدی VMD

❖ تصویر سازی مولکولی کلی ۳ بعدی با روشهای طراحی و رنگ آمیزی گسترده و پشتیبانی قوی برای تصویر سازی دینامیک مولکولی

VMD یک کاربرد کلی برای نمایش مولکول های حاوی هر تعداد از اتمها است و قابلیت های اساسی آن مشابه سایر برنامه های شبیه سازی مولکولی است VMD. فایل های داده را با استفاده از یک سیستم افزونه توسعه یافته می خواند و از تبدیل سایر قالب ها پشتیبانی می کند. انتخاب های اتمی تعریف شده توسط کاربر می تواند در هر یک از بازمودهای مولکولی استاندارد نمایش داده شود. گرافیکهای نمایش داده شده می توانند به یک فایل تصویری، به یک فایل صحنه قابل استفاده توسط برنامه ردیابی پرتویی و یا به یک فایل توصیف هندسه مناسب برای استفاده با چاپگرهای سه بعدی به کار روند [۱].

❖ تصویر سازی دادههای دینامیک مولکولی (پشتیبانی از تمام فرمت های مهم فایل داده های مولکولی، بدون محدودیت در اندازه ساختار و یا مسیر به جز ظرفیت حافظه و آدرس دهی)

VMD میتواند مختصات اتمی از AMBER, Charmm, DLPOLY, Gromacs, MMTK, NAMD, X-PLOR و دیگر نرم افزارهای شبیه سازی را بارگذاری (load) کند. از این دادهها میتوان برای حرکت مولکولها و برای ترسیم تغییر در خصوصیات مولکولی از قبیل زاویه ها، دووجهی ها، مسافت های میان اتمی یا انرژی های در گذر زمان استفاده شود. ترکیب گسترده انتخاب اتم برای انتخاب زیرمجموعه های اتم ها برای انجام کارهای تحلیلی و برای نمایش گرافیکی از این نوع قابلیت های

Chapter 1

فصل یکم مقدمه و معرفی

Introduction

تصویرسازی داده‌های حجمی

VMD میتواند نقشه‌های حجمی را بارگذاری (load)، تولید و نمایش دهد. قالب‌های پشتیبانی نقشه شامل نقشه‌های CryoEM، نقشه‌های بالقوه الکترواستاتیک، نقشه‌های چگالی الکترونی و بسیاری دیگر از فرمت‌های نقشه است.

شبیه‌سازی تعاملات دینامیک مولکولی

VMD را می‌توان به عنوان یک پردازنده پیشرو گرافیکی برای یک برنامه دینامیک مولکولی زنده در حال اجرا بر روی یک ابر رایانه از راه دور یا ایستگاه کاری با قابلیت بالا استفاده کرد. VMD میتواند تعاملی اعمال کند و نیروها را در یک شبیه‌سازی MD با اجرای آن تجسم کند [۳].

ارائه تصاویر با کیفیت بالا و کیفیت تصاویر مولکول با وضوح بالا

فرمان‌های آنالیز مولکولی

بسیاری از فرمان‌ها برای تجزیه و تحلیل مولکولی ارائه شده‌اند. اینها شامل فرمان‌هایی برای استخراج اطلاعات از مجموعه‌های اتم‌ها و مولکول‌ها، روال‌های برداری و ماتریسی برای دستکاری مختصات و توابع برای مقادیر محاسباتی مانند مرکز جرم و شعاع چرخش هستند.

زبان‌های برنامه‌نویسی Tcl و Python

VMD از زبان‌های متنی پایتون و Tcl که به طور رایگان در دسترس هستند برای پردازش دستورها متنی استفاده می‌کند. این زبان‌های محبوب شامل متغیرها، حلقه‌ها و خیلی چیزهای دیگر هستند. VMD همچنین از جعبه ابزار Tk یک جعبه ابزار رابط کاربر ساده استفاده می‌کند که با Tcl ارتباط برقرار می‌کند.

گسترش آن آسان است (کد منبعی که با C و ++C نوشته شده است)

VMD در C و ++C نوشته شده و از طراحی شی گرا استفاده می‌کند. VMD یک رابط متصل شونده را برای گسترش پشتیبانی از قالب فایل و برای پسوند‌های هدف عمومی با قابلیت اجرا می‌کند [۴,۵].

پشتیبانی از ورودی چند وجهی و سیستم‌های نمایش مختلف

تعدادی از سیستم‌های نمایش و کنترل بصری مختلف علاوه بر مانیتور، صفحه کلید و ماوس معمولی پشتیبانی می‌شوند. کتابخانه VRPN برای دریافت اطلاعات موقعیت و جهت‌گیری از طیف گسترده‌ای از دستگاه‌های ورودی فضایی، از جمله ردیاب‌های مغناطیسی، دستگاه‌های لمسی (بازخورد نیرو)، توپ‌های فضایی و غیره استفاده می‌کند. VMD با WireGL و Chromium روی طبقه بندی نمایش دیوارها اجرا می‌شود و محیط‌های همه‌جانبه VR با تلفیق CAVE و FreeVR پشتیبانی میشوند [۶,۷].

تماس با نویسندگان

توسعه دهنده فعلی VMD، John E. Stone است. اگر شما هر گونه پیشنهاد، گزارش اشکال و یا توضیحات کلی در مورد VMD دارید، می‌توانید آن‌ها را از طریق نشانی الکترونیکی vmd@ks.uiuc برای نویسندگان بفرستید.

ثبت نام در سایت VMD

VMD از تمامی سیستم عامل‌های رایانه ای اصلی پشتیبانی می‌کند و به صورت رایگان برای تمام کاربران نهایی در دسترس است و می‌توانید از صفحه اصلی http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd بدست آورید. ثبت نام بخشی از روند دانلود نرم افزار است. زمانی که فرم‌های موجود در قسمت دانلود VMD را پر کرده و آن‌ها را خواندید و با مجوز موافقت کردید، روند ثبت نام شما تمام می‌شود. برای نصب VMD در رایانه خود، دستورالعمل آنلاین را دنبال کنید. نرم افزار VMD نسخه های ۳۲ و ۶۴ بیتی دارد که نصب نسخه ۶۴ بیتی این نرم افزار در کامپیوتر ۳۲ بیتی ممکن نمی باشد. این نرم افزار رایگان است و نیازی به لایسنس برای نصب ندارد.

مرجع رفرنس

نویسندگان و توسعه گران نرم افزار VMD درخواست میکنند که رفرنس دهی تصاویر و آنالیزهای بدست آمده با استفاده از این نرم افزار شامل مرجع زیر باشد:

Humphrey, W., Dalke, A. and Schulten, K., "VMD - Visual Molecular Dynamics" J. Molec. Graphics 1996, 14.1, 33-38.

الزامات سخت افزاری اولیه برای اجرای VMD بسته به نحوه تدوین و نحوه استفاده از آن متفاوت است. VMD دارای دو حالت اصلی عملیات، حالت گرافیکی کاملاً برجسته معمولی و حالت عملی کاملاً مبتنی بر متن مناسب برای آنالیز از راه دور روی ابر رایانه ها، تعبیه شده در سایر بسته ها و آنالیز عملیات دسته ای مشابه است. حالت ممتاز گرافیکی با قابلیت VMD بسیار مورد استفاده است و به یک شتاب دهنده گرافیکی با قابلیت OpenGL با راه اندازهای به روز نیاز دارد. برخی از چیپ های گرافیکی یا GPU ها دارای درایورهایی هستند که دارای قابلیت پایین هستند و قادر به اجرای VMD با قابلیت گرافیکی کامل نخواهند بود. این موارد یا به طور خودکار و یا در نتیجه متغیرهای محیطی تعریف شده توسط کاربر (به عنوان مثال VMDSIMPLEGRAPHICS)، از مد گرافیکی با قابلیت کاهش یافته در VMD استفاده می کنند. از آنجا که انتخاب چیپ یا کارت گرافیکی GPU بیشترین تأثیر را در قابلیت های تجسم و عملکرد VMD دارد، این جزء سخت افزاری است که اگر در ابتدا برای استفاده از VMD بر روی کارهای مربوط به تجسم تمرکز داشته باشد، ارزش هزینه کردن را دارد. VMD از ویژگیهای رندر پیشرفته ای برخوردار است که به وجود سخت افزار GPU و پشتیبانی از درایور وابسته است. در صورت امکان، این ویژگی ها VMD را قادر می سازند ساختارهای بسیار بزرگ یا پیچیده را به صورت تعاملی به نمایش بگذارند و از انواع نمایشگرهای ۳ بعدی مخصوص استریوسکوپی پشتیبانی کنند. بعنوان یک مزیت، GPU های اخیر هم اکنون می توانند برخی از وظایف محاسباتی را که در VMD انجام می شود، تسریع کنند، که جزئیات بیشتر در زیر مورد بحث قرار گرفته است. پس از انتخاب شتاب دهنده گرافیکی، مقدار حافظه سیستم در دسترس بیشترین تأثیر را بر عملکرد و قابلیت VMD خواهد داشت. هر چه حافظه یک ماشین بیشتر باشد، فریم های بیشتری می توانند همزمان از فایل های مسیر دینامیک مولکولی بزرگ بارگذاری شوند. برای کارهای تجزیه و تحلیل حالت دسته ای که در درجه اول از برنامه نویسی تشکیل شده اند، حافظه سیستم اغلب منبعی است که امکان انجام بسیاری از کارهای تجزیه و تحلیل را محدود می کند.

VMD از پردازنده های چند هسته ای و پردازنده های GPU چندگانه برای تسریع بیشتر انجام تجسم و آنالیز محاسبه شده از پردازشگر استفاده می کند CPU. های چند هسته ای ویژگی هایی از جمله دینامیک مولکولی تعاملی [۸، ۹]، تعیین پیوند، «در درون» اتمهای انتخابی و مشتقات آنها به اصطلاح تجسم خط یا خطوط میدان [۱۰]، توابع توزیع شعاعی [۱۱]، رندرینگ های با کیفیت بالا با استفاده از Tachyon [۱۲، ۱۳، ۱۴] OSPray [۱۵] موتورهای رهگیری پرتویی را تسریع می کنند. VMD همچنین از شتاب دهنده GPU با استفاده از CUDA پشتیبانی می کند و از هر دو پردازنده چند هسته ای CPU و GPU برای سرعت بخشیدن به الکترواستاتیک (یعنی "Volmap coulomb" و "Volmap coulombmsm" [۱۶، ۱۷]، ۱۸، ۱۹، ۲۰، ۲۱، ۲۲، ۲۳، ۲۴، ۲۵]، نمونه برداری لیگاند ضمنی (به عنوان مثال volmap ils)، محاسبه توابع توزیع شعاعی [۱۱]، کیفیت محاسبات متقابل برای روش های ترکیبی [۲۶، ۲۷]، آنالیز مسیر مولکولی [۲۸]، آنالیز خوشه ای مسیر محاسبه و ارائه اوربیتالهای مولکولی [۲۹، ۳۰، ۳۱، ۳۲]، سطوح مولکولی [۳۳، ۳۴، ۳۵، ۳۶] استفاده می کند. آخرین نسخه های VMD همچنین شامل یک دسته بندی شتاب یافته GPU و نسخه های تعاملی موتور رهگیری پرتویی Tachyon [۳۵، ۳۶]، ۳۷، ۳۸، ۳۹]، مبتنی بر NVIDIA OptiX و CUDA هستند. [۳۹]

فصل دوم

سخت افزار و نرم افزارهای مورد نیاز، نصب نرم افزار

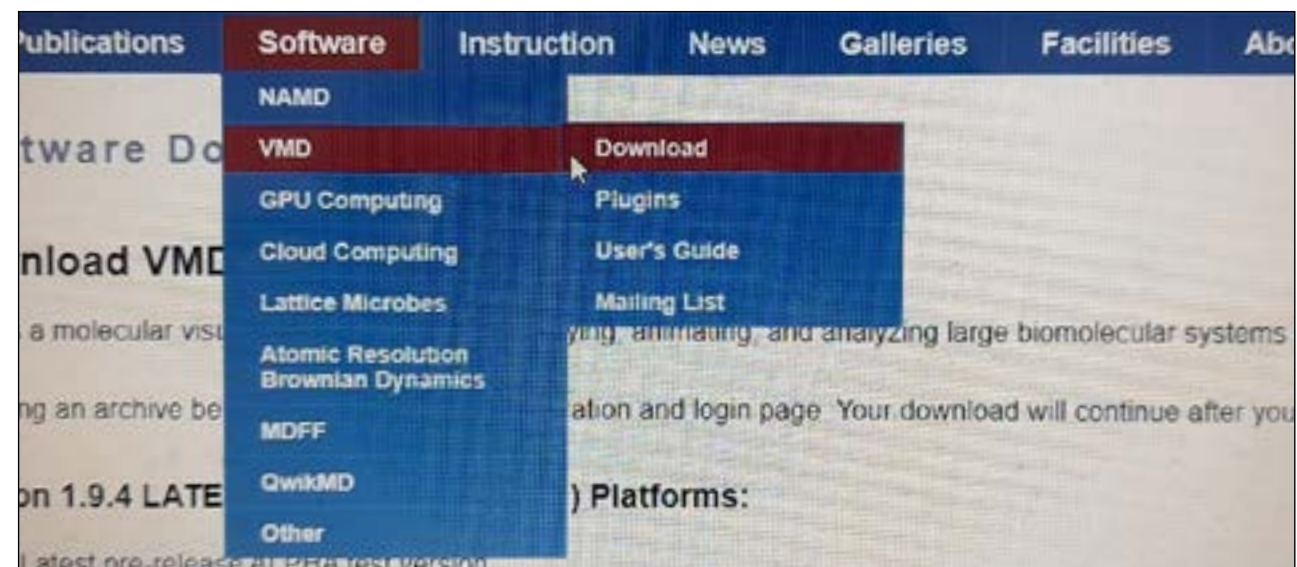
Hardware and software required,
software installation

VMD هنگامی که با MPI پشتیبانی می‌شود، از آنالیز موازی حالت دسته ای در مقیاس بزرگ و تجسم بر روی کلاسترها و ابر کامپیوترها پشتیبانی می‌کند [۱۴, ۳۵, ۲۶, ۴۰, ۴۱, ۳۶, ۳۷, ۳۸, ۴۲]. وقتی VMD را روی کلاسترها و کامپیوترهای موازی اجرا می‌کنیم، امکان اجرای یک مرتبه MPI برای هر هسته CPU وجود دارد، یا به احتمال زیاد، یک مرتبه MPI برای چندین هسته CPU، یا یک مرتبه MPI برای کل گره محاسباتی انجام میشود. اگر در هر گره محاسباتی بیش از یک نمونه VMD اجرا شود، به طور معمولاً لازم است که متغیرهای محیطی را محدود کنیم که کدام هسته CPU و / یا GPI ها هر نمونه VMD تلاش می‌کنند تا از ناهنجاری‌های عملکردی ناشی از رقابت در منبع جلوگیری کنند [۲۰].

۴-۲ | نصب VMD

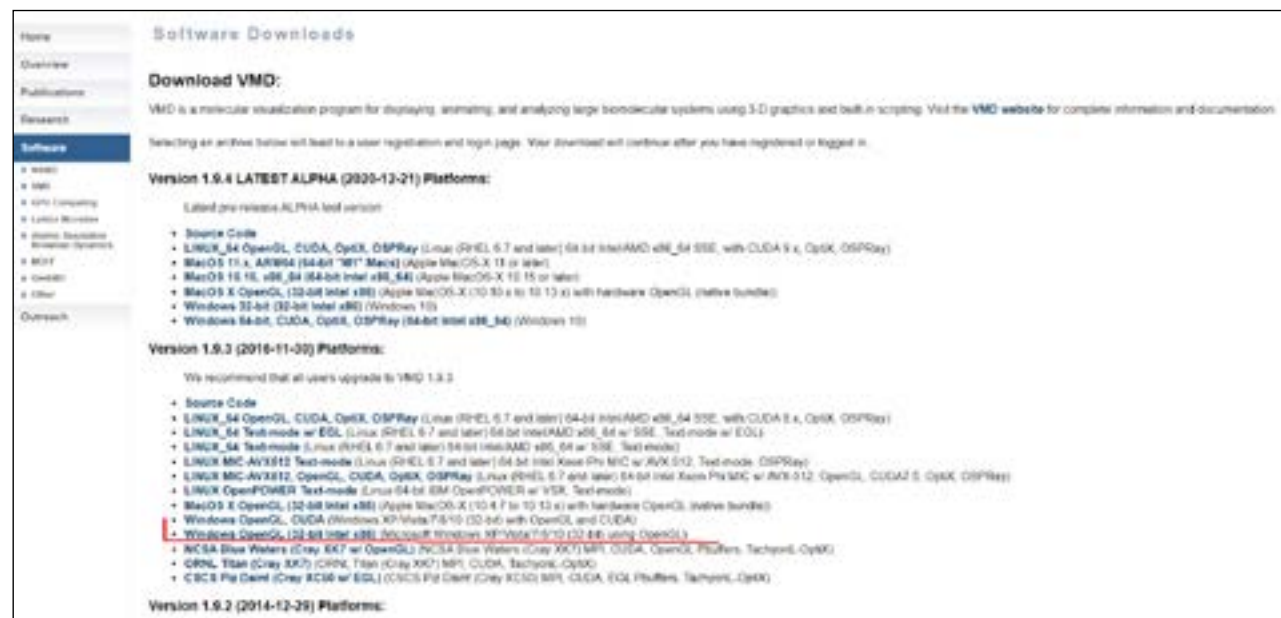
جهت نصب نرم افزار آدرس

https://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=VMD را در مرورگر وارد کنید یا وارد سایت https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/ شوید و از قسمت software وارد بخش VMD شده و بر روی Download کلیک کنید.



تصویر ۱-۲: نحوه ی ورود به بخش مربوط به دانلود نرم افزار VMD

بعد از این با نسخه های متعدد نرم افزار برای سیستم عامل های مختلف روبروی شوید. اگر از سیستم عامل ویندوز استفاده می‌کنید نسخه ی مربوط به آن را انتخاب کنید.



تصویر ۲-۲: انتخاب نسخه ی متناسب با سیستم عامل جهت نصب نرم افزار VMD

در مرحله ی بعد در صورتی که از قبل ثبت نام کرده اید نام کاربری و پسورد خود را وارد کنید در غیر این صورت نام کاربری و پسورد انتخاب کنید و بر روی Continue with registration or download کلیک کنید.



تصویر ۳-۲: وارد کردن نام کاربری و پسورد

در مرحله ی بعد همانطور که گفته شد در صورتی که از قبل ثبت نام نکرده اید، مشخصات لازم را وارد کنید و ثبت نام خود را تکمیل کنید. بعد از تکمیل اطلاعات خواسته شده بر روی Register کلیک کنید و در صورت صحیح وارد کردن اطلاعات ثبت نام شما با موفقیت به اتمام می رسد و بعد از آن به راحتی می توانید فایل را دانلود و نصب کنید.

First and Last Name:

Email Address:

Affiliation:

☐ Academic

☐ Government

☐ Industrial

☐ Other (specify)

The number of people using TCBG software at my site is:

☐ 1

☐ 2-4

☐ 5-10

☐ 11-20

☐ 21 or more

I use TCBG software primarily for:

☐ Research

☐ Teaching

☐ Commerce

☐ Personal

The work I do with TCBG software is funded (at least partially) by NIH:

☐ Yes

☐ No

Re-enter password for confirmation:

Register

تصویر ۴-۲: تکمیل مشخصات لازم جهت ثبت نام

در صورت استفاده از لینوکس، وابسته به نوع کامپیوتر، یکی از نسخه ها رو دانلود کنید، به عنوان مثال، LINUX OpenGL. سپس فایل را با دستور tar -xvzf vmd-1.8.4.bin.LINUX.opengl.tar.gz باز کنید. ابتدا باید آنرا configure کنید، وارد فولدر مربوطه شوید: cd vmd-1.8.4 و برای لینوکس این نرم افزار را آماده نصب کنید: configure LINUX سپس به فولد src رفته و نرم افزار را نصب کنید:

```
cd src
make install
```

دقت کنید برای قسمت آخر باید اختیارات روت داشته باشید تا نرم افزار نصب شود.

در ابتدا یک معرفی سریع از VMD می شود . مولکول ها و فایل های داده مورد استفاده در این برنامه آموزشی را می توان از صفحه اصلی سایت VMD از حوزه مستندات مرتبط با نسخه ی مربوطه دانلود کرد و به وضوح با عنوان داده های آموزشی راهنمای کاربر برچسب گذاری (User's Guide tutorial data) شده است یا از طریق <http://www.ks.uiuc.edu/Training/Tutorials/vmd> می توانید فایل های مربوط به چند پروتئین را جهت تمرین و آموزش دانلود کنید. در بقیه این برنامه آموزشی فرض می کند که شما این مجموعه داده را دانلود و باز کرده اید. برای شروع vmd، VMD را بر روی دستور خطی پوسته خودش (Unix) تایپ کنید، یا با کلیک روی آیکون VMD در دسکتاپ یا منوی استارت (Apple MacOS X) و (Microsoft Windows) آن را شروع کنید. VMD باید با یک پنجره با عنوان کنسول vmd، یک پنجره نمایش با نام VMD OpenGL Show و یک منوی main با نام VMD آغاز شود. دستورها متنی در پنجره کنسول تایپ می شوند، مولکول ها در پنجره گرافیکی نمایش داده می شوند، و دیگر رابط ها و پسوندها از menu رابط در دسترس هستند. تمام پنجره ها را می توان با استفاده از کنترل های پنجره ای استاندارد کامپیوتر یا دستور menu [۹.۳.۱۹] در کنسول متنی بست یا به حداقل رساند. اکثر توابع می توانند هم با منورابط و هم با کنسول متن اجرا شوند، اگرچه برخی از ویژگی های پیچیده نوشتار تنها به عنوان دستورها متنی در دسترس هستند.

۲-۳ | به تصویر کشیدن یک مولکول: برای مثال میوگلوبی

برای بارگذاری (load) یک مولکول جدید از منوی File در پنجره Main، این پنجره File مربوط به ملکول را باز خواهد کرد [۵.۴.۴]. برای مثال یک فایل PDB (بانک داده پروتئین) حاوی مختصات اتم ها در میوگلوبین را بارگذاری کنید (PDB تعریفی از جوئل برنزدن از آزمایشگاه ملی لاس آلاموس است). ابتدا Browse از پایین پنجره File انتخاب کنید تا فایل browser بالا بیاید. به فهرست proteins/ مجموعه داده های آموزشی که از وب سایت VMD دانلود کرده اید بروید. در آنجا، فایل mbco.pdb را در فایل browser انتخاب کرده و دکمه load را در فایل browser مولکول که در پایین پنجره File است، فشار دهید (دقت شود درمسیری که فایل مربوط به pdb ذخیره شده است از حروف فارسی استفاده نشود زیرا می تواند بارگیری را با مشکل روبرو کند). تصویر ۳-۱ مثالی از VMD در نمایش این پروتئین را نشان می دهد. می توانید از ماوس برای دستکاری ساختار در پنجره نمایش استفاده کنید. سه حالت اصلی ماوس وجود دارد: rotation, translation, scaling. این مدها را می توان از منوی mouse در پنجره اصلی، یا با فشار دادن r، t، یا s بر روی صفحه کلید در حالی که موس در پنجره گرافیکی است، تغییر داد. در حین امتحان، توجه داشته باشید که مکان نما چگونه برای نشان دادن حالت موس تغییر می کند. در حالت rotation، دکمه چپ ماوس چرخش حول محور موازی صفحه را کنترل می کند و دکمه میانی دوران حول محور عمود بر صفحه را کنترل می کند. در مد translation، دکمه سمت چپ ماوس translation را به موازات صفحه نمایش کنترل می کند، در حالی که دکمه وسط translation را در داخل و خارج از صفحه کنترل می کند. در نهایت، در حالت scaling، هر دو دکمه سمت چپ و وسط کنترل می کنند وقتی ماوس به سمت چپ یا راست حرکت می کند، مقیاس کلی را کنترل می کند، اما دکمه وسط باعث ایجاد تغییرات بزرگتر می شود.

Chapter 3

فصل سوم

توتوریال

Tutorial

۳-۳ | ارائه تصویر

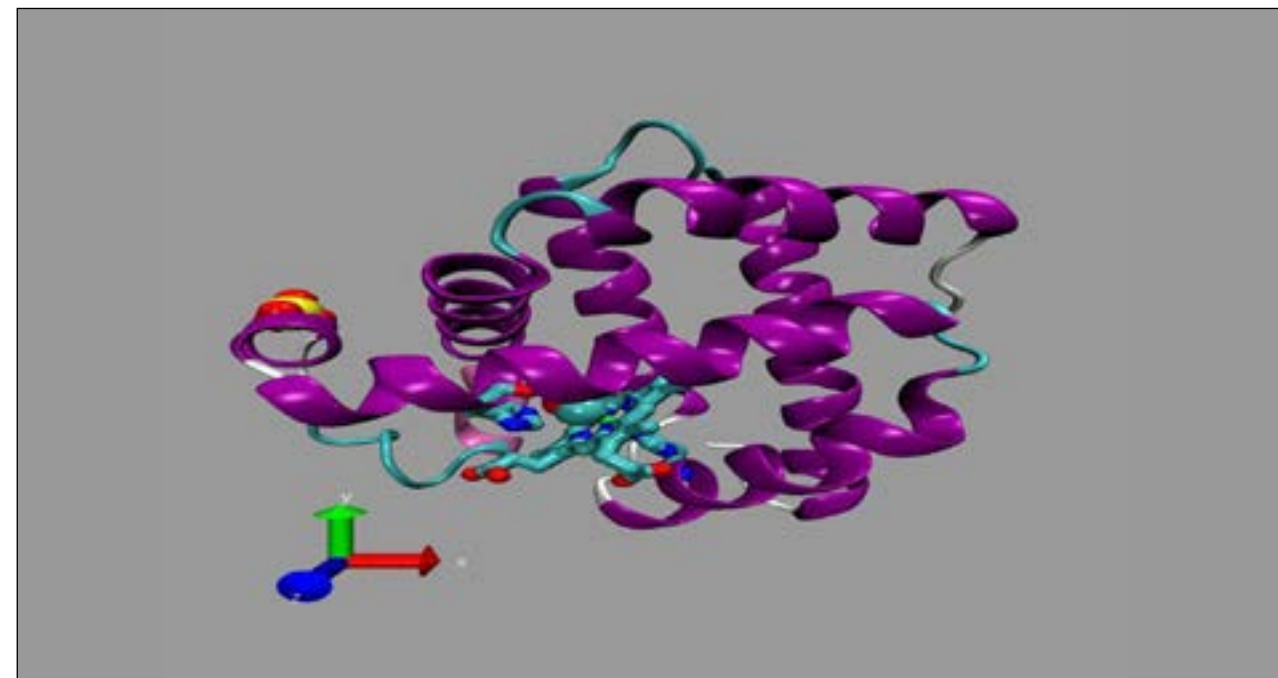
از آموزش قبلی نمایی جالب از این مولکول را پیدا کنید. فرض کنید می خواهید این دیدگاه را در یک ژورنال منتشر کنید و یک تصویر با کیفیت بالا می خواهید، یا می خواهید یک پوستر بزرگ درست کنید. گرفتن عکس از یک صفحه نمایش اغلب به یک تصویر نسبتاً دانه دانه منجر می شود چون اندازه پیکسلها آشکار می شود، بنابراین شما چیزی با وضوح بیشتر می خواهید. چندین برنامه در دسترس است که می توانند بر اساس یک سند ورودی، تصویر شفاف با کیفیت بالا ارائه دهند. VMD این امکان را دارد که کد نوشته های ورودی را برای بسیاری از این برنامه های پردازش تصویر ایجاد کند، که ممکن است برای ایجاد تصویر با کیفیت بالاتر از صحنه نمایش داده شده توسط VMD در زمانی که اسکرپت ایجاد شد، پردازش شود. برای توضیحات بیشتر در مورد نحوه عملکرد این بخش، به فصل ۸ مراجعه کنید. پنجره Render را باز کرده (از قسمت File می توانید Render پیدا کنید) و از منوی Render Using گزینه Tachyon را انتخاب کنید. هر دو جعبه متن دیگر با مقادیر پیش فرض پر شده است که برای اهداف این آموزش نیازی به تغییر آنها نیست. دکمه Start Rendering را فشار دهید. بعد از چند لحظه پردازش، می توانید پیام زیر را در پنجره کنسول VMD مشاهده کنید.

Rendering complete (Info).

اگر همه چیز به درستی پیش رفته باشد، در محیط کاری فعلی خود (Desktop) به یک فایل تصویری به نام plot.dat. اگر همه چیز به درستی پیش رفته باشد، در محیط کاری فعلی خود (Desktop) به یک فایل تصویری به نام plot.dat. اگر همه چیز به درستی پیش رفته باشد، در محیط کاری فعلی خود (Desktop) به یک فایل تصویری به نام plot.dat. اگر همه چیز به درستی پیش رفته باشد، در محیط کاری فعلی خود (Desktop) به یک فایل تصویری به نام plot.dat.

۳-۴ | ایجاد سریع یک انیمیشن

قدرت دیگر VMD توانایی آن در باز پخش نتایج مسیریابی ناشی از شبیه سازی های دینامیک مولکولی است. یک نمونه مسیریابی، alanin.dcd در فهرست پروتئین های موجود با VMD ارائه شده است. برای بارگذاری (load) آن، فایل مولکول را همانطور که قبلاً توضیح داده شد از قسمت browser باز کنید. سپس بر روی دکمه browser کلیک کنید و فایل alanin.psf را انتخاب کنید. پس از انتخاب، دکمه Load را فشار دهید تا فایل ساختاری بارگذاری شود. بعد، فایل alanin.dcd را انتخاب کنید و آن را بارگذاری کنید (به پسوند های فایل های انتخابی دقت داشته باشید). این کار چارچوب مسیریابی DCD را در یک مولکول با فایل alanin.psf که قبلاً بارگذاری شده می خواند. در پنجره display شما باید شبیه سازی alanin residue را در محدوده ببینید. اما به راحتی می توانید ببینید که ساختار در یک محیط مجزا کاملاً ناپایدار است. پس از بارگیری فایل DCD، انیمیشن متوقف می شود. برای دیدن دوباره آن یا تنظیم دقیق پخش، از کنترل های انیمیشن [۵/۴/۳] موجود در پایین پنجره VMD Main استفاده کنید که در تصویر ۲-۳ نشان داده شده است. دکمه ای را فشار دهید که به نظر می رسد انیمیشن را پخش می کند. از اسلایدر سرعت در پایین پنجره برای تغییر سرعت بازپخش استفاده کنید. برای تغییر سرعت پخش از نوار لغزنده سرعت در پایین پنجره استفاده کنید. با چرخش مولکول به اطراف و غیره شما باید در مورد چگونگی ناپایداری سیستم در طول شبیه سازی ایده ای به دست آورید. کنترل های انیمیشن عموماً مشابه آنچه در DVD یا CD player پیدا می کنید، هستند.

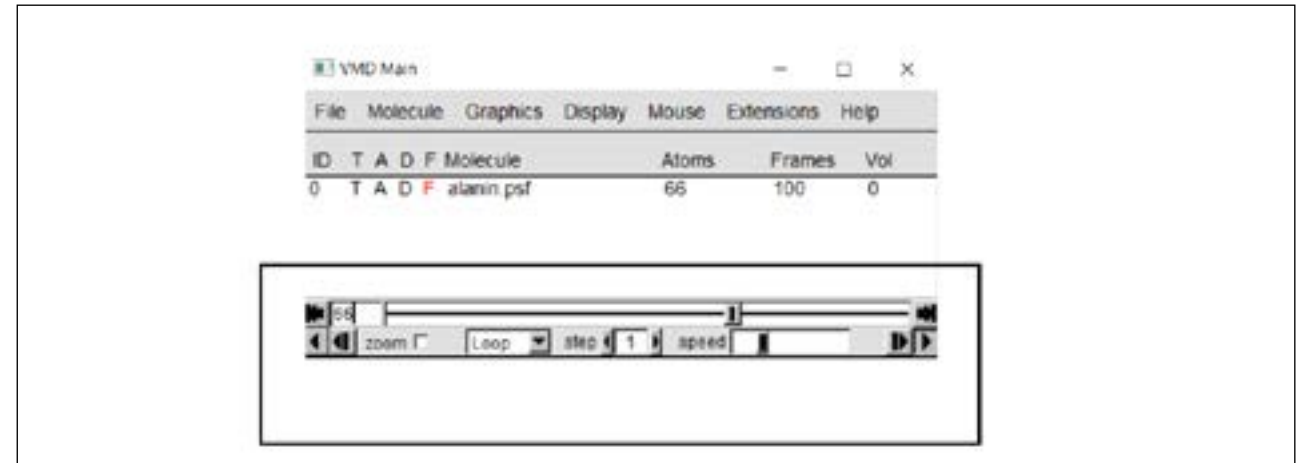


تصویر ۳-۱: مثالی از VMD در نمایش میوگلوبین را نشان می دهد.

اگر به طور پیش فرض، مولکول ها در نمایش به صورت «lines» نشان داده شوند، هر نوع اتم رنگ شده است. فرض کنید شما می خواهید ساختار میوگلوبین را با backbone پروتئین آن به عنوان tube نشان دهید، هم (heme) به عنوان licorice، مولکول یون SO₄ و CO که به عنوان کره های van der Waals نمایش داده می شود، و هیستیدین ۶۴ و ۹۳ به عنوان مدل های CPK معرفی می شوند. ابتدا پنجره Graphics را باز کرده، با انتخاب آیتم Representations در منوی graphics از پنجره VMD Main را انجام می دهیم. در قسمت Selected Atoms کلمه backbone را در ناحیه ورودی متن انتخاب کرده و «enter» می کنیم تا زنجیره اصلی میوگلوبین انتخاب شود. تمام پروتئینها به جز زنجیره اصلی حذف میشوند (به تغییراتی که در پنجره VMD OpenGL Show صورت می گیرد دقت نمایید). انتخاب NewCartoon در قسمت انتخابگر drawing method زنجیره اصلی را به صورت لوله ای (tube) نمایش می دهد. در قسمت انتخابگر coloring method برای رنگ ساختار لوله به صورت پیش فرض کلمه secondary structure را انتخاب کنید. بر روی گزینه کلیک کنید. این یک نمایه (representation) جدید در مرورگر ایجاد می کند، که مشابه با نمونه اصلی است. این representation جدید میتواند بدون تأثیر بر بقیه عوامل تغییر کند بنابراین قسمت نوشتاری atom selection را پاک کنید و نام HEM rename را وارد کنید تا heme انتخاب شود. در این مرحله هم قابل مشاهده نیست چون نمی توان آن را به عنوان یک cartoon نشان داد، پس برای این منظور در قسمت drawing method گزینه «Licorice» را برای ظاهر شدن آن انتخاب کنید. دوباره بر روی Create Rep کلیک کنید تا نمای جدید ایجاد شود، CO rename SO₄ را وارد کنید تا یون SO₄ و مولکول CO انتخاب کند، در قسمت drawing method گزینه «VDW» را انتخاب کنید تا آن ها به صورت کره های وان در والسی ارائه شوند. یکبار دیگر، دکمه Create Rep را فشار داده resid ۹۳ و ۶۴ را وارد کنید تا دو هیستیدین انتخاب شود و آنها را به صورت «CPK» معرفی کنید (یعنی در قسمت drawing method گزینه CPK را انتخاب کنید).

اگر همه این موارد را دنبال کردید، پس تبریک می گویم، شما تصویر قشنگی از myoglobin ایجاد کرده اید!

با آزمایش های بیشتر باید به خوبی در مسیر یادگیری نحوه استفاده از VMD قرار بگیرید.



تصویر ۲-۳: بخش موجود در پنجره ی اصلی مربوط به پخش وتنظیمات نمایش انیمیشن

۳-۵ | مقدمه ای بر انتخاب اتم

در این بخش فرض بر این است که شما ساختار میوگلوبین mbco.pdb را بارگذاری کرده اید و نظرات مورد بحث در بخش ۲-۳ ایجاد شده است. اگر این درست نیست، به عقب برگردید و روند توصیف شده در آنجا را تکرار کنید. VMD روش انتخاب اتم قدرتمندی دارد که در تولید گرافیک جذاب، آموزنده و پیچیده بسیار مفید است. در بخش قبلی شما از تعدادی از این ابزارهای انتخاب اتم استفاده کرده اید. در این آموزش فرض بر این است که شما قبلاً مولکول میوگلوبین را بارگذاری کرده اید، اما نیازی به ایجاد مجدد کلیه نمایش های گرافیکی نیست. برای تغییر اینکه کدام اتم ها برای نمایش در مولکول نشان داده شده در پنجره display مورد استفاده قرار می گیرند، پنجره Graphics را باز کنید [۵.۴.۷] و representation را که می خواهید تغییر دهید انتخاب کنید. سپس می توانید قسمت های مختلف (selection, coloring method, drawing method) را ویرایش کنید یا از دکمه Delete برای حذف کامل نما استفاده کنید. سعی کنید برخی از نماها را تغییر داده یا حذف کنید. وقتی کار تمام شد، تمام نمایش های ساختار میوگلوبین را حذف کنید. برای بازگشت به نمای پایه خط ترسیم، ناحیه ورودی متن انتخاب اتم را پاک کنید، all را وارد کنید و دکمه Create Rep را فشار دهید. اتم ها را می توان براساس یک ویژگی، یعنی protein یا water، not protein، nucleic backbone، انتخاب کرد. آنها همچنین ممکن است با نام اتم، مانند اتم C، با نام residue، مانند resname HEM یا توسط بسیاری از شناسه های دیگر انتخاب شوند. چندین اتم ممکن است با یک کلمه کلیدی مشخص شود. برای مثال، برای انتخاب back bone، name CCANO، اتمها انتخاب خواهد شد. (یک نتیجه مشابه را می توان با دستور protein backbone به دست آورد). VMD می تواند عبارات منظم را انجام دهد، بنابراین C"name* تمام اتم ها را با نام های شروع شده با C انتخاب می کند چندین معیار انتخاب انتزاعی دیگر در دسترس است. VMD همچنین عملگرهای بولی را می فهمد and، or یا not، بنابراین انتخاب "N"resname HEM and not name* تمام اتم های غیر نیتروژنی را در گروه همی میوگلوبین انتخاب می کند. چندین معیار انتخاب انتزاعی دیگر در دسترس است. به عنوان مثال، انتخاب تمام اتمها را با مختصات x بزرگتر از ۵ می یابد، در حالی که mass < ۱۲ و mass > ۱۴ همه اتم ها با جرم بیشتر از ۱۲ و کمتر از ۱۴ واحد جرم اتمی را انتخاب می کنند. بسیاری

۳-۶ | مقایسه دوساختار

از توابع ریاضی نیز فراهم شده است، بنابراین انتخاب $(\sqrt{\text{sqr}(x) + \text{sqr}(y) + \text{sqr}(z)}) > ۱۰$ اتمها در یک ناحیه کروی به شعاع ۱۰ در مرکز مبدا فضایی مختصات انتخاب خواهد شد. شما می توانید اتم های نزدیک یک انتخاب را با عبارت "within same <property> as <selection>" و همه residues با همان یک ویژگی انتخاب داده شده به عنوان same <property> as <selection>" را انتخاب کنید. برای توصیف کامل فرمان انتخاب به بخش ۶.۳ مراجعه کنید.

بباید با پاک کردن همه چیز از ابتدا شروع کنیم: از نوشتن متن در کنسول استفاده کرده و دستور mol delete all را وارد کرده و Enter را فشار دهید. این باعث حذف همه مولکولهای load شده می شود و در انتخاب آنها و حذف همه آنها به صورت یک به یک راحت تر است. روش دیگر، شما می توانید هر مولکول را در مرورگر مولکول هایلایت کنید، و از آیتم Delete Molecule در منوی Molecule استفاده کنید تا آنها را یک به یک حذف کنید. با بارگیری ساختار mbco.pdb از پنجره Files شروع کنید. فقط CO، heme و هیستیدینها را با استفاده از انتخاب فرمان های resname HEM CO or resid روشن کنید. نقطه (احتمالاً سبز) در وسط آهن است و می توانید با برداشتن آن با ماوس آن را تأیید کنید. این کار ۶۴ ۹۳ را با تغییر دادن «Object Mode» به پایین "Pick" و انتخاب "Atoms" برای حالت انتخاب در منوی ماوس انجام دهید. برچسب FE:HEM۱۵۴ باید هم در صفحه نمایش و هم در کنسول متنی ظاهر شود. pick mode را از فهرست ماوس به "Bonds" تغییر دهید. برای رسیدن به فاصله بین آهن و اکسیژن CO، ابتدا روی آهن و سپس روی اکسیژن با دکمه چپ ماوس کلیک کنید. با کلیک اول، برچسب FE روشن شد و دوم برچسب O را روشن کرد و یک خط بین دو اتم با فاصله در وسط و کمی به سمت راست کشیده شده است. فاصله بین دو اتم ۲/۹۴Å است، در حالی که در مقاله ۲/۹۳Å است. با این حال، فاصله بین FE و C از CO فاصله ۱/۹۱Å را نسبت به ۱/۸۵Å در مقاله نشان می دهد. این تفاوت که ساختارهای توزیع VMD است در واقع ساختارهای اولیه هستند که قبل از تعیین مختصات نهایی بدست آمده اند. برای آزمایش با حالت های پیچیده تر picking، زاویه ساخته شده توسط O از CO را با FE از heme و NE۲ با residue ۹۳ در نظر بگیرید (می توانید بر روی اتم ها کلیک کنید تا دریابید که کدام یک هستند). با استفاده از منوی ماوس، pick mode را به "Angles" تغییر دهید. این باید باعث شود مکان نما به صورت متقاطع قرمز تبدیل شود. با استفاده از دکمه سمت چپ ماوس روی هر یک از سه اتم کلیک کنید پس از انتخاب سوم، یک زاویه کم عمق ظاهر می شود که زاویه ۸/۷۱ درجه را بین سه اتم نشان می دهد. اکنون فایل star.pdb واسطه ای را بارگیری کنید که در فهرست پروتئین های توزیع شما نیز وجود دارد. برای این کار دوباره از پنجره Files استفاده کنید. هر دو مولکول کنار هم load می شوند. به پنجره Graphics بروید و انتخاب را تغییر دهید تا مانند اولین، resname HEM CO or resid، ۹۳ ۶۴ انتخاب شود. این دو مولکول تقریباً در کنار یکدیگر قرار دارند و تشخیص این دو مشکل دشوار است، بنابراین برای ساده تر کردن تشخیص، رنگ ها را تغییر دهید. ابتدا از پنجره Graphics، Coloring method را به Molecule تغییر دهید.

با استفاده از انتخاب گرمولکول mbco.pdb به "Molecule" تغییر دهید. پنجره Color را باز کنید و Category browser را به پایین حرکت دهید تا خط "Molecule" قابل رویت باشد. بر روی آن کلیک کنید و سپس بر روی خطی که می گوید mbco.pdb کلیک کنید. (اگر قبل از این File بارگیری شده باشد، ممکن است دو خط mbco وجود داشته باشد). مرورگر Colors را به بالا کلیک کنید تا بر روی «blue» کلیک کنید. با این کار باید یکی از مولکولهای موجود در نمایشگر

۸-۳ | ذخیره کار خود

پس از ایجاد مجموعه ای از representation های جذاب و آموزنده از مولکول، ممکن است بخواهید کار خود را ذخیره کنید تا بعداً بتوانید صحنه را بازسازی کنید. دورش برای انجام این کار در VMD وجود دارد: در پنجره ی main، دکمه Save State که در منوی File وجود دارد را فشار دهید. این یک پنجره مرورگر ایجاد می کند که می توانید نام File را برای ذخیره کردن کار خود وارد کنید. در کنسول متن، نام save state filename را ذخیره کنید، filename جایی است که نام فایلی که در آن می توانید کار خود را ذخیره کنید. برای بازگرداندن صحنه خود، همچنین سه انتخاب دارید: از گزینه Load State در Manu File استفاده کنید تا جلسه VMD که قبلاً ذخیره شده بود را انتخاب کنید و بارگذاری کنید. از خط فرمان، VMD را با گزینه های vmd -e filename شروع کنید، filename جایی است که نام فایلی که قبلاً ذخیره کرده اید. پس از شروع VMD، از کنسول متن، play filename را تایپ کنید. رایج ترین منبع مشکلات زمانی است که VMD نمی تواند پرونده هایی را که برای بارگذاری مولکول استفاده کرده اید پیدا کند. اگر این اتفاق بیفتد، سعی کنید دایرکتوری مورد نظر خود را که بار اول مولکول را بارگیری کرده اید، تغییر دهید یا state file را ویرایش کنید و از نامهای مسیر کامل در جایی که دستورات mol addfile، mol new یا mol load را می بینید، استفاده کنید (توجه: برای بارگیری یک ملکول سعی کنید در تمام مسیرومحل ذخیره ی پوشه ی مربوط به ملکول ها از حروف فارسی برای نام گذاری استفاده نکنید).

۹-۳ | ردیابی دستورات اسکریپت نسخه های عملکرد GUI

برای بیشتر اقدامات انجام شده از VMDGUI، یک فرمان کدنوشته معادل وجود دارد. VMD می تواند این دستورها را در یک فایل ثبتي یا کنسول چاپ کند. این راهی مناسب برای خودکار کردن فایل است. پردازش با انجام تمام مراحل به صورت تعاملی در حین ورود به یک فایل و سپس ویرایش فایل لاگ برای تبدیل آن به یک کدنوشته Tcl فعال در چندین فایل است. دوره برای انجام این کار در VMD وجود دارد: در پنجره ی Log TCL Commands to File، main، موجود در منوی File فشار دهید؛ این کار یک پنجره مرورگر ایجاد خواهد کرد که در آن می توانید نام فایلی را وارد کنید که در آن می توانید کد اسکریپت حاصل را ذخیره کنید. در کنسول متن، نام logfile filename را تایپ کنید، filename جایی که فایل log است. فایل حاصل شامل کد کدنوشته های Tcl خواهد بود که می تواند از دستور VMDcommand اجرا شود. دکمه Log TCL Commands to Console یا دستور logfile console به جای آن، دستورات Tcl را در پنجره کنسول چاپ می کند. اگر می خواهید بدانید که کدام فرمان برای انجام دستورات VMD مورد استفاده قرار می گیرد، این بسیار مفید خواهد بود. در نهایت، دستور logfile off یا کلیک بر روی log، Turn Off Logging را متوقف میکند و در صورت نیاز، پرونده log را می بندد.

را به رنگ آبی تغییر دهد. سپس بر روی آخرین خط Names chooser کلیک کنید که star.pdb است. این بار، «red» را از Colors chooser انتخاب کنید. درک این نمایشگر بسیار ساده تر است. میوگلوبین پیوند با CO به رنگ آبی و دروسط به رنگ قرمز است. در این مرحله می توان به صورت ساده با استفاده از دکمه وسط ماوس برای انتخاب اتم یکسان در دو ساختار، تغییر موقعیت بین دو حالت مختلف را انجام داد. پس از اتمام این کار، به راحتی می توان یکی از جنبه های جالب نحوه کار گرافیک با VMD را ذکر کرد. به پنجره main بروید، یکی از دو مولکول را انتخاب کنید و Toggle Fixed را فشار دهید. حالت translation را وارد کنید و مولکول دیگر را حرکت دهید. توجه کنید که عددی که فاصله بین دو اتم را نشان می دهد هرگز تغییر نمی کند و این که ماوس فقط در نحوه translation مختصات تصویر صفحه تأثیر می گذارد و این به هیچ وجه روی مختصات واقعی تأثیر نمی گذارد. تغییر مختصات در یک مولکول با استفاده از دستور متنی مربوطه یا با استفاده از حالت atom move و انتخاب pick انجام میشود. به هر حال، مولکول ها را جدا کرده و 'Reset View' را از منوی Display انجام دهید. ساختار سوم، deoxy.pdb را بارگذاری کرده و همان انتخاب دو مولکول دیگر را به آن بدهید. با این حال، این یکی رنگ سبز کنید. Nature v. ۳۷۱، Oct، ۲۷، ۱۹۹۴ استخراج کنید و به صفحه ۷۴۰ بروید. با کمی دستکاری باید بتوانید تصویری را که در آنجا ظاهر می شود از نو بسازید.

۷-۳ | برخی از Representation های خوب

دیدگاه های زیر برای نمایش پروتئین ها و نوکلئیک اسیدها بسیار خوب هستند:

- ▶ **selection:** all
- ▶ **drawing method:** tube
- ▶ **coloring method:** segname (or chain)

ویژگی: به نمایش گذاشتن backbone در نمایش پروتئین ها و نوکلئیک اسیدها

- ▶ **selection:** protein and (name CA or not backbone)
- ▶ **drawing method:** lines
- ▶ **coloring method:** segname (or chain)

ویژگی: نمایش زنجیره های جانبی بصورت نازک، در این مسیر backbone نیز هم چنان مشخص است و تصویر سریع به نمایش گذاشته می شود.

- ▶ **selection:** (numbonds = 0) and not waters
- ▶ **drawing method:** vdw
- ▶ **coloring method:** name

ویژگی: به نمایش گذاشتن یون ها، حذف اکسیژن های مربوط به ملکول های آب اما هیدروژن ها را باقی میگذارد.

- ▶ **selection:** not (waters or protein or nucleic)
- ▶ **drawing method:** lines
- ▶ **coloring method:** name

ویژگی: به نمایش گذاشتن آنچه باقی می ماند هم چون لیگاندها و عوامل تبلور

منوی File قسمت اصلی برای بارگذاری مولکولها و سایر دادهها به VMD است. در فایل خوان های تعبیه شده، ساختارهای مولکولی از ترکیب topology files, coordinate files و trajectory files بارگذاری میشود. فایل خوان هاهمچنین برای دادههایی از جمله نقشههای بالقوه، نقشههای چگالی الکترونی، دادههای سطح Grasp و دادههای هندسی 3D دلخواه از فایلهای صحنه Raster3D گنجانده شدهاند. VMD میتواند ساختارها را مستقیماً از Protein Data Bank از طریق اینترنت load کند، مشروط بر اینکه یک اتصال شبکه وجود داشته باشد. با وارد کردن four-character PDB accession code در file browser مولکول، بازیابی و بارگذاری ساختاربرروی شبکه انجام میشود.

۴-۱ | یادداشتهای مربوط به قالبهای رایج مولکولی

VMD بطور طبیعی چندین فرمت فایل داده مولکولی مشهور را تشخیص می دهد شامل: فایلهای مختصات PDB، فایلهای توپولوژی PSF سبک NAMMD، CHARMM و XPLOR، فایلهای توپولوژی PSF، CHARMM، NAMMD و XPLOR، فایلهای توپولوژی PSF، CHARMM، NAMMD و XPLOR سبک D XD، فایلهای راه اندازی مجدد باینری NAM (مختصات)، ساختار AMBER (PARM) و فایلهای مسیر (CRD) شامل قالب قدیمی و همچنین فرمتهای جدید مورد استفاده توسط AMBER ۷۰، و ساختارهای Gromacs به (عنوان مثال GRO، G9۶، XTC، TRR) و فایلهای مسیر. این فایلها ممکن است حاوی اطلاعات اضافی باشد و در ترکیبهای مختلف بارگذاری می شود. فایلهای PDB شامل اطلاعات مربوط به اتمها، residueها، نام قطعهها، عامل اشغال و فاکتور بتا و یک مجموعه مختصات است. فایلهای PSF و PARM شامل اتمها، residueها، نام قطعهها، انواع رزیدوها، جرم و بار اتمی و اتصال باند هستند VMD. از چهار فرمت فایل استفاده شده توسط Gromacs پشتیبانی میکند: GRO، TRR، XTC و فایلهای GRO و G9۶ حاوی اطلاعات مربوط به ساختار از جمله اتمها، دادههای رزیدوها و قطعه و یک مجموعه مختصات هستند. فایلهای PDB، TRR، DCD، CRD و XTC فقط شامل دادههای مختصات (فریمها) هستند. لازم به ذکر است که در حالی که فایلهای PDB، GRO و G9۶ برای ایجاد تنها یک مجموعه مختصات طراحی شده بودند، میتوان چندین فایل را در یک فایل بزرگتر الحاق کرد تا یک فایل مسیر پیش ساخته ایجاد شود که توسط VMD قابل بارگذاری باشد. هنگامی که VMD یک فایل را بارگذاری میکند، نیاز به اطلاعاتی در مورد نامهای اتمی و مختصات دارد و سعی می کند بقیه را پر کند. از آنجا که فایل PDB شامل تمام این اطلاعات است، دیگر نیازی به بارگذاری در فایلهای داده دیگر نیست. با این حال، فایل PDB شامل انواع اتم، جرم و بار نیست، بنابراین اینها حدس زده میشوند و یا مقادیر پیش فرض اختصاص داده شده را دارند. به طور خاص، اگر فایل حاوی اطلاعات شارژ صریح نباشد، به مقدار ۰ داده میشود. یک فایل PSF حاوی اطلاعات مختصات نیست بنابراین باید همراه با فایل PDB یا DCD بارگذاری شود. اگر PDB و PSF داده شده باشند، هیچ دادهای از دست رفته وجود ندارد و VMD هیچ گونه فرضی نمیکند. اگر PSF و DCD داده شود، فقط شناسه زنجیرهای و اشغال و ارزش بتا از دست میروند، بنابراین به آنها مقدار پیش فرض داده میشود. یک فایل PARM شبیه PSF است به این دلیل که هیچ اطلاعات مختصری نیز در آن وجود ندارد. باید همراه با یک فایل مسیر CRD بارگذاری شود. اگر یک فایل PARM و CRD با هم بارگذاری شوند، فقط نام و شناسه زنجیره برای اتمها خالی ماندهاند. یک فایل CRD یا DCD همراه با PDB مشخص میشود که در این صورت فایل PDB به صورت عادی خوانده میشود و سپس مجموعه مختصات از DCD یا CRD تا پایان فایل خوانده

Chapter 4

فصل چهارم بارگذاری یک مولکول

Loading of a Molecule

میشود. فایل‌های Gromacs GR و G۹۶ میتوانند به تنهایی بارگذاری شوند زیرا این اطلاعات شامل اطلاعات و مختصات اتمی لازم است. آنها همچنین میتوانند به همراه فایل‌های TRR و XTC بارگیری شوند تا داده‌های مسیر را بدست آورند. مختصات اضافی از فایل PDB، CRD یا DCD را میتوان با استفاده از File Browser Molecule به مجموعه مختصات فعلی وصل کرد.

۴-۲ | چه اتفاقی می‌افتد وقتی که یک فایل load میشود؟

هنگامی که یک فایل مختصات به خودی خود بارگذاری میشود (یعنی فقط یک PDB، بدون VMD (PSF) از اکتشافی استفاده میکنند تا مقادیر گمشده‌های را جایگزین کند که بطور معمول توسط یک ساختار تهیه میشود. در صورت نیاز، VMD یک جستجوی فاصله مبتنی بر پیوند را برای تعیین اتصال انجام می‌دهد. هر زمان که دو اتم در $(R_1 + R_2) * 0.6 \text{ \AA}$ از یکدیگر قرار بگیرند، در آنجا R_1 و R_2 شعاع مربوط به اتم‌های کاندید هستند. اگر فایل‌های مختصات و ساختار بارگذاری شوند، هیچ تخمین یا حدس زده نمی‌شود. پس از خواندن مولکول، نام‌های جدیدی به دسته‌های رنگ آمیزی و رنگ‌های اختصاص داده شده اضافه میشوند. در مرحله بعد، اتصال باند برقرار میشود و مولکول آنالیز میشود تا مؤلفه‌های آن مشخص شود، یعنی برای تعیین کدام رزیدوها پروتئین، اسیدهای نوکلئیک و آب‌ها و غیره است. سپس یک جستجوی برای اتصال این قسمت‌ها به قطعات بزرگتر از همان نوع انجام میشود و اطلاعات خلاصه ای بر روی صفحه چاپ میشود. یک مثال خروجی نمونه برای BPTI این است:

➤ Info 1)	Analyzing structure ...
➤ Info 1)	Atoms: 898 Bonds: 909
➤ Info 1)	Backbone bonds: Protein: 231 DNA: 0
➤ Info 1)	Residues: 58
➤ Info 1)	Waters: 0
➤ Info 1)	Segments: 1
➤ Info 1)	Fragments: 1 Protein: 1 Nucleic: 0

انواع مختلفی از قطعات وجود دارد. قطعات پروتئینی و هسته‌های یکدست هستند. یا تمام پروتئین‌اند یا تمام اسیدهای نوکلئیک. با این حال، این امکان وجود دارد که یک پروتئین به یک اسید نوکلئیک یا چند غیر پروتئین دیگر متصل شود. وقتی این اتفاق می‌افتد، پیام هشدار به صورت زیر چاپ می‌شود:

➤ Warning 1) Unusual bond between residues 1 and 2

این هشدارها با آمینواسیدهای انتهایی، انگشت روی، myristolated residues و ساختارهای ضعیف تعریف شده رخ می‌دهند.

۴-۳ | واسطه‌های Babel

VMD می‌تواند در صورت نصب از برنامه Babel استفاده کند تا طیف گسترده‌ای از فایل‌های مختلف داده‌های مولکولی را به فرمت PDB ترجمه کند. همه این موارد برای استفاده با VMD آزمایش نشده است، بنابراین ممکن است نتایج شما متفاوت باشد VMD. فقط از Babel برای خواندن فایل‌ها استفاده میکند و اجازه نمیدهد تا از Babel برای ذخیره فایل‌ها در قالب‌های دیگر استفاده کند. متغیر محیطی VMDBABELBIN که برای مشخص کردن مسیر مطلق Babel قابل اجرا (از جمله نام اجرایی) استفاده می‌شود. برای اطلاعات بیشتر در مورد Babel، به <http://smog.com/chem/babel/> مراجعه کنید VMD. در حال حاضر از نسخه ۶٫۸ از Babel پشتیبانی میکند.

۴-۴ | فرمت فایل‌های Raster3D

علاوه بر فرمت قالب‌های مولکولی، VMD میتواند فایل ورودی Raster3D را بخواند (Raster3D) برای استفاده در ساخت تصاویر با کیفیت بالا، یک فایل ورودی را به یک تصویر شطرنجی سایه‌دار تبدیل میکند. این اغلب با MolScript استفاده میشود). امکان خواندن Raster3D به شما امکان میدهد تا فایل‌های MolScript را به صورت سه بعدی مشاهده کنید و تصاویر خاصی را بدون نیاز به ویرایش کد VMD در صفحه نمایش وارد کنند. فرمت فایل، که بخشی از مستندات Raster3D است، مجموعه‌ای ساده از مثلث‌ها، کره‌ها و استوانه‌ها را با انتهای مسطح یا کروی شرح میدهد. هر شکل توسط یک RGB سه گانه رنگ می‌شود. برخی از اشیاء جدیدتر Raster3D مانند چهارچوب‌ها نادیده گرفته میشوند. همچنین تقریباً تمام اطلاعات مربوط به عنوان نادیده گرفته میشود - مهمترین آنها viewing matrix است. Raster3D از سیلندرهای زیادی با انتهای کروی (گرد) استفاده میکند VMD. عمده‌ای این انتهای گرد را از دست میدهد، زیرا تصویر حاصل برای ارائه تعاملی بسیار کند است. VMD از یک پالت اندازه ثابت استفاده میکند، هر سه گانه به «نزدیکترین» رنگ فهرستبندی شده خود تبدیل میشود.

فصل پنجم

مؤلفه‌های رابط کاربر

User Interface Components

VMD چندین روش برای کنترل و تعامل با صفحه نمایش مولکولی برای کاربر فراهم میکند. روش‌های اولیه با استفاده از موس، در پنجره گرافیکی یا در فرم‌های واسط گرافیکی مختلف ارائه شده (GUI) توسط برنامه است. علاوه بر موس، VMD از تعدادی دستگاه ورودی پیشرفته‌تر مانند Spaceball، Magellan و Phantom نیز پشتیبانی میکند که توانایی دستکاری مولکولها با شش درجه آزادی را دارند. برخی از دستگاه‌ها مانند Phantom همچنین می‌توانند بازخورد نیرو را فراهم آورند. VMD همچنین یک رابط کنسول متنی برای اجرای دستورها داخلی یا کدنوشته‌های در حال اجرا فراهم می‌کند. در این فصل نحوه استفاده از رابطهای کاربری مبتنی بر موس و برخی از دستگاههای ورودی پیشرفته پشتیبانی شده در VMD توضیح داده شده است. رابط متن و اسکریپتینگ به طور کامل در فصل ۹ شرح داده شده است.

۵-۱ | استفاده از موس در پنجره گرافیکی

استفاده از ماوس در پنجره گرافیکی دارای برچسب VMD OpenGL Display نمایش داده میشود. شامل نمایی از مولکولها و اشیاء دیگری است که صحنه را تشکیل میدهند. زمانی که ماوس در پنجره نمایش گرافیکی قرار دارد، می‌توان از آن برای انجام کارهای زیر استفاده کرد: چرخش، جابجایی یا مقیاس مولکول‌های نمایش داده شده.

➤ انتخاب و یا «pick» اتم‌ها یا اشیاء دیگر را به منظور حرکت دادن آن‌ها و یا برچسب زدن به آن‌ها

➤ ترجمه و چرخش مجموعه‌ای از اتم‌ها

➤ اعمال نیرو (شتاب) به مجموعه‌ای از اتم‌ها

➤ جابه‌جا کردن نور

شتاب دهنده صفحه کلید تعریف شده توسط کاربر یا کلیدهای فوری نیز در هنگام قرار گرفتن ماوس در پنجره نمایش گرافیکی در دسترس هستند. این کلیدها به دستورات متن VMD متصل هستند، که هنگام فشار دادن کلید، اجرا میشوند. در VMD بسیاری از دستورات کلید فوری به طور پیش فرض ساخته شده است (به جداول ۵-۱، ۵-۲، ۵-۳ و ۵-۴ مراجعه کنید). کاربران میتوانند کلیدهای فوری جدید را اضافه کنند و در صورت تمایل تنظیمات پیش فرض را نادیده بگیرند.

۵-۱-۱ | حالت‌های ماوس

موس در هر زمان در یکی از چندین حالت زیر است. حالت فعلی ماوس تأثیر فشار دادن ورها کردن دکمه‌ها یا چرخ ماوس را وقتی که ماوس در پنجره گرافیکی قرار دارد تعیین میشود. هر حالت ماوس به جز حالت نور نشانگر ماوس را به یک شکل مشخص تنظیم می‌کند. حالت ماوس از طریق منوی موس انتخاب میشود. حالت‌های ماوسی موجود به شرح زیر هستند

✓ Rotate Mode (کلید فوری "r")

هنگامی که ماوس در rotate mode است، با نگه داشتن دکمه سمت چپ ماوس به سمت پایین و حرکت دادن ماوس، با یک رفتار "trackball virtual"، مولکولهای مربوط به محورها را به موازات صفحه نمایش میچرخد. برای بدست آوردن چرخش حول محوهایی که از صفحه خارج میشوند (محور «z»)، دکمه وسط را پایین نگه دارید و موس را به سمت چپ یا راست حرکت دهید. می توانید مولکولها را بدون چرخش مداوم ماوس بچرخانید. همانطور که در بالا گفته شد، حرکت مولکول را با ماوس شروع کنید، سپس قبل از توقف حرکت ماوس، دکمه ماوس را رها کنید. با کمی تمرین، انتقال کمی چرخش روی مولکول یا چرخش دیوانه وار آن آسان می شود.

اتم های موجود در قطعه را حول اتم مورد نظر می چرخانیم. اگر به جای آن دکمه وسط ماوس پایین نگه داشته شود، اتم های موجود در قطعه حول خطی که از میان اتم چیده شده و موازی با خطی که مستقیما از صفحه خارج می شود، می چرخد. این رفتار شبیه حالت چرخشی معمول است، به جز اینکه مختصات اتم ها تغییر می کند.

✓ Molecule Move (کلید فوری ۸)

این حالت ممکن است برای حرکت دادن تمام اتم ها در یک مولکول انتخابی به طور همزمان به کار رود. یک اتم را در یک مولکول انتخاب کنید و آن را در حالی که دکمه موس را فشار می دهید به موقعیت جدید ببرید. تمام اتم های موجود در یک مولکول به همان مقدار حرکت خواهند کرد. با پایین نگه داشتن کلید شیف و دکمه چپ ماوس در حین حرکت، ماوس اتم های موجود در مولکول را حول اتم انتخابی می چرخاند. اگر به جای آن دکمه وسط ماوس پایین نگه داشته شود، اتم های مولکول حول خطی که از میان اتم چیده شده و موازی با خطی که مستقیما از صفحه خارج می شود می چرخد. این رفتار شبیه حالت چرخشی معمول است، به جز اینکه مختصات اتم ها تغییر می کند.

✓ Rep Move (کلید فوری ۹)

این حالت ممکن است برای حرکت دادن تمام اتم ها در یک representation انتخاب شده به طور همزمان استفاده شود. شما با کلیک روی یکی از Rep ها در پنجره browser پنجره Graphics یک representation انتخاب می کنید. برای حرکت دادن اتم ها در این نشانگر، اتمی که با ماوس انتخاب می کنید باید توسط آن نشانگر انتخاب شود. وقتی روی یک اتم در rep کلیک کردید، موس را در حالی که دکمه موس را فشار می دهید به موقعیت جدیدی ببرید. تمام اتم های انتخاب شده توسط highlighted rep به همان مقدار حرکت خواهند کرد. با پایین نگه داشتن کلید شیف و دکمه چپ موس در حین حرکت دادن موس، اتم های روی صفحه حول اتم rep انتخاب شده می چرخد. اگر به جای آن دکمه وسط ماوس پایین نگه داشته شود، اتم های صفحه حول خطی که از میان اتم چیده شده و موازی با خطی که مستقیما از صفحه خارج می شود، می چرخد. این رفتار شبیه حالت چرخشی معمول است، به جز اینکه مختصات اتم ها تغییر می کند.

۳-۱-۵ | کلیدهای فوری

وقتی ماوس در پنجره گرافیکی قرار دارد، بسیاری از دستورات از طریق کلیدهای فوری قابل برنامه ریزی قابل دسترسی هستند. کلیدهای فوری به شما امکان می دهند کارهایی مانند تغییر حالت های ماوس یا پیشبرد انیمیشن توسط یک قاب را با فشار دادن یک کلید انجام دهید. تعدادی کلید فوری از پیش تعریف شده وجود دارد، همانطور که در جداول ۱-۵، ۲-۵، ۳-۵ و ۴-۵ ذکر شده است. آنها را می توان با کلیدهای user print keys چاپ کرد. دستورات ذکر شده، دستورات متنی هستند که با فشار دادن کلید فوری، اجرا می شوند. این دستورات متنی در بخش ۳-۹ توضیح داده شده است. برای افزودن یا تغییر یک هات کلید یا کلید فوری، از دستور فرمان user add key کلید استفاده کنید. پارامتر کلیدی باید یک کارکتر واحد باشد. اگر دستور حاوی بیش از یک کلمه باشد، باید در پرانتز محصور شود تا کلمات فرمان بعدی نادیده گرفته نشوند. هنگامی که نشانگر موس در پنجره صفحه نمایش گرافیک است، آن کلید فشرده شود، فرمان مربوطه اجرا می شود. زمانی که مجموعه ای از فرمان ها را دارید که به خصوص برای شما مفید و آشنا هستند، این فرمان های کلید داغ را به طور خودکار در هر زمان که VMD را اجرا می کنید، در دسترس خواهید داشت. این کار را می توانید با قرار دادن فرمان ها برای اضافه کردن این موارد برای فایل vmdrc خودتان انجام دهید، این یک فایل حاوی دستورات متن VMD است که هر بار که VMD اجرا می شود آن نیز اجرا می شود. روش اصلی برای راه اندازی این فایل در بخش ۳-۳-۱۴ شرح داده می شود. زمانی که چنین فایلی دارید، آن را در دستور user add قرار دهید.

۵-۲ | استفاده از Spaceball در پنجره گرافیکی

VMD پشتیبانی اختیاری را برای Magellan، SpaceNavigator و Spaceball دستگاه‌های ورودی با شش درجه آزادی فراهم می‌کند. ممکن است از Spaceball برای چرخش، ترجمه و مقیاس مولکولها استفاده شود، با استفاده از حداکثر ۶ محور کنترل (۳ محور در جابجایی، ۳ در چرخش). Spaceball را می‌توان به طور مستقل و همزمان با ماوس استفاده کرد. با استفاده از فاصله یک فضا از یک طرف و ماوس در دست دیگر، کاربر می‌تواند عملیات پیچیده تر و شناسایی بیشتری را انجام دهد، زیرا ماوس را می‌توان در حالت انتخاب (به عنوان مثال) در حالت چپ انتخاب کرد در حالی که از Spaceball برای انجام چرخش ها، جابجایی ها و موارد دیگر استفاده می‌شود. عملیات مقیاس گذاری با دست دیگر Spaceball را می‌توان در یکی از چندین حالت درون VMD اجرا کرد. رابط Spaceball در حال حاضر دوش چرخش و جابجایی و حالت مقیاس گذاری را ارائه می‌دهد. رابط Spaceball در حال حاضر از دکمه ۱ (معروف به عملکرد ۱ در درایور SpaceWare) برای تنظیم مجدد نمای استفاده می‌کند، و دکمه ۲ برای چرخه از طریق رابط موجود Spaceball در دسترس است.

۵-۲-۱ | درایور Spaceball

VMD به یکی از دوش با Spaceball واسط می‌شود. یا از طریق ارتباط مستقیم با Spaceball با استفاده از نرم افزار داخلی رابط کاربری داخلی، یا فروشنده درایورها را فراهم می‌کند. نسخه های یونیکس و Mac OS X از VMD از درایور سریال Spaceball استفاده می‌کنند. در هنگام شروع، VMD وجود متغیر محیطی VMDSPACEBALLPORT را بررسی می‌کند. این متغیر محیط باید روی نام دستگاه یونیکس درگاه سریال که Spaceball به آن متصل است تنظیم شود. مجوزهای دستگاه پورت سریال باید تنظیم شده باشد تا کاربر VMD بتواند دستگاه را برای خواندن و نوشتن باز کند. برای استفاده معمولی، این کار معمولاً نیاز به اجرای یک `chmod ۶۶۶ /dev /awtyname` در دستگاه مناسب به عنوان ریشه دارد. یک محدودیت در استفاده از درایور داخلی Spaceball این است که فقط یک فرآیند VMD ممکن است با خیال راحت از Spaceball در یک زمان استفاده کند. اگر چندین جلسه VMD در همان دستگاه شروع شود و همه برای باز کردن Spaceball تنظیم شوند، بسیار نامنظم رفتار می‌کنند.

وقتی ماوس در پنجره گرافیکی قرار دارد، بسیاری از دستورات از طریق کلیدهای فوری قابل برنامه ریزی قابل دسترسی هستند. کلیدهای فوری به شما امکان می‌دهند کارهایی مانند تغییر حالت های ماوس یا پیشبرد انیمیشن توسط یک قاب را با فشار دادن یک کلید انجام دهید. تعدادی کلید فوری از پیش تعریف شده وجود دارد، همانطور که در جداول ۵-۱، ۵-۲، ۵-۳ و ۵-۴ ذکر شده است. آنها را می‌توان با کلیدهای `user print keys` چاپ کرد. دستورات ذکر شده، دستورات متنی هستند که با فشار دادن کلید فوری، اجرا می‌شوند. این دستورات متنی در بخش ۳-۹ توضیح داده شده است. برای افزودن یا تغییر یک هات کلید یا کلید فوری، از دستور فرمان `user add key` کلید استفاده کنید. پارامتر کلیدی باید یک کارکتر واحد باشد. اگر دستور حاوی بیش از یک کلمه باشد، باید در پرانتز

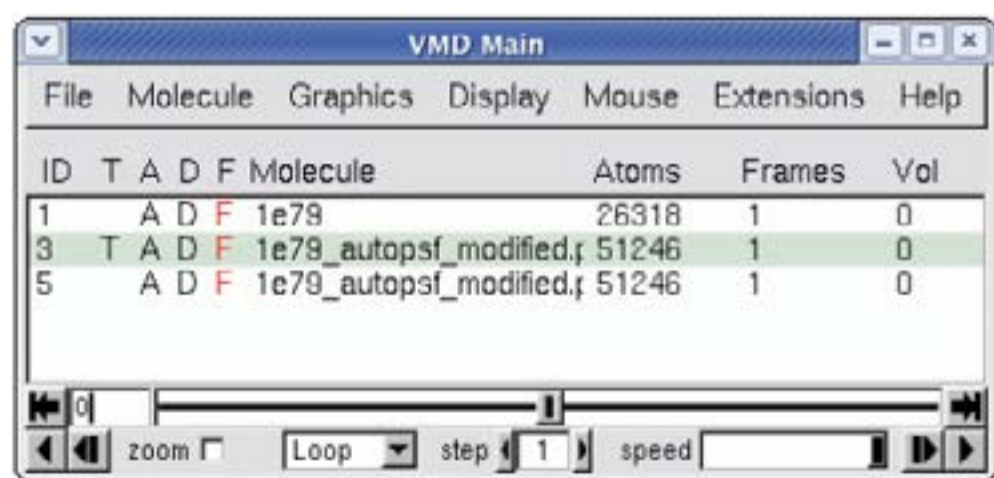
Hot Key	Command	Purpose
r, R	mouse mode 0 0	enter rotate mode; stop rotation
t, T	mouse mode 1 0	enter translate mode
s, S	mouse mode 2 0	enter scaling mode
0	mouse mode 4 0	query item
c	mouse mode 4 1	assign rotation center
1	mouse mode 4 2	pick atom
2	mouse mode 4 3	pick bond (2 atoms)
3	mouse mode 4 4	pick angle (3 atoms)
4	mouse mode 4 5	pick dihedral (4 atoms)
5	mouse mode 4 6	move atom
6	mouse mode 4 7	move residue
7	mouse mode 4 8	move fragment
8	mouse mode 4 9	move molecule
9	mouse mode 4 13	move highlighted rep
%	mouse mode 4 10	apply force on atom
^	mouse mode 4 11	apply force on residue
&	mouse mode 4 12	apply force on fragment

جدول ۵-۱: کلیدهای کنترلی فوری موس

۵-۴ | توضیحات مربوط به هر پنجره VMD

VMD از چندین ویندوز GUI مختلف استفاده می کند، هرکدام برای کنترل یک جنبه خاص از نمایشگر مولکولی (به عنوان مثال، برای کنترل ظاهر پنجره نمایش گرافیکی، یا تغییر رنگ اشیاء نمایش داده شده) طراحی شده است. در بخش های زیر توضیح مختصری از ویندوز موجود در VMD آورده شده است. فصلهای باقیمانده در کتاب، کارهایی را که این پنجره ها با جزئیات بیشتری در دسترس قرار می دهند، توصیف می کنند.

۵-۴-۱ | پنجره اصلی



تصویر ۵-۱: پنجره ی اصلی

پنجره اصلی راه اصلی دسترسی به سایر ویندوزها، بارگیری و ذخیره فایلها، کنترل پخش مسیر، تغییر تنظیمات مختلف برنامه جهانی، کمک به دسترسی و ترک برنامه است. بسیاری از این اقدامات همچنین با کلیدهای میانبر منو که در جدول ۵/۳ شرح داده شده قابل انجام است. مورد منو Ouit از VMD خارج می شود. این پنجره دیگری را ایجاد می کند که تأیید می کند شما واقعاً مایل به خروج هستید. برای ترک، یا خیر برای بازگشت به VMD، بله را فشار دهید.

🔗 کمک (Help)

آیتم های منوی راهنما هر مرورگر وب را برای نمایش اسناد راهنما VMD بر روی خط راه اندازی می کنند. مرورگر توسط متغیر محیطی VMDHTMLVIEWER [۱۴/۲\$] تعیین شده است. انتخاب یک مورد چند بار ممکن است چندین مرورگر را شروع کند. مرورگر پیش فرض وب Mozilla برای سیستم های Unix و پوسته داخلی Explorer برای سیستمهای ویندوز است. این فهرست شامل مواردی برای صفحه راهنمای سریع VMD، همچنین راهنمای کاربر فعلی، سؤالات متداول و پیوندهایی به

محمور شود تا کلمات فرمان بعدی نادیده گرفته نشوند. هنگامی که نشانگر موس در پنجره صفحه نمایش گرافیک است، آن کلید فشرده شود، فرمان مربوطه اجرا می شود. زمانی که مجموعه ای از فرمان ها را دارید که به خصوص برای شما مفید و آشنا هستند، این فرمان های کلید داغ را به طور خودکار در هر زمان که VMD را اجرا می کنید، در دسترس خواهید داشت. این کار را می توانید با قرار دادن فرمان ها برای اضافه کردن این موارد برای فایل vmrc خودتان انجام دهید، این یک فایل حاوی دستورات متن VMD است که هر بار که VMD اجرا می شود آن نیز اجرا می شود. روش اصلی برای راه اندازی این فایل در بخش ۳-۳-۱۴ شرح داده انجام دهید. تعدادی کلید فوری از با قرار دادن فرمان ها برای اضافه کردن این موارد برای جرا می شود. روش اصلی برای راه اندازی این فایل در بخش ۳-۳-۱۴ شرح داده می شود. زمانی که چنین فایلی دارید، آن را در دستور useradd قرار دهید

۵-۳ | استفاده از Joystick در پنجره گرافیکی

نسخه ی ویندوز از VMD پشتیبانی از درایور TheWindowsjoystick را فراهم می کند، و کلیه دستگاه های جوی استیک موجود را در زمان راه اندازی ذکر می کند. رابط جوی استیک بکار رفته در VMD بسیار ساده است و امکان استفاده از سه محور کنترل را برای جابجایی، چرخش و مقیاس مولکول فراهم می آورد. رابط جوی استیک دستگاهی را با حداقل دو دکمه فرض می کند. اولین دکمه جوی استیک نمای را در پنجره نمایش تنظیم می کند و دکمه دوم از طریق هر یک از حالت های جوی استیک موجود، چرخش می کند. وقتی VMD برای اولین بار به هر یک از جوی استیک ها متصل می شود، در ابتدا غیرفعال می شوند تا جوی استیک های اشتباه نتوانند روی جلسه VMD تأثیر منفی بگذارند. ابتدا با فشار دادن دکمه دوم خود برای تغییر حالت ها، هر جوی استیک فعال می شود. همه ی جوی استیک ها بطور مستقل کنترل می شوند به گونه ای که چندین جوی استیک می توانند محورهای کنترل مختلف را کنترل کنند و چندین کاربر می توانند با کنترل های جداگانه با برنامه در تعامل باشند.

۲-۴-۵ | مرورگر فهرست مولکول پنجره اصلی

پنجره اصلی وضعیت جهانی مولکولهای بار شده را نشان می دهد. هر تعداد مولکول ممکن است به طور همزمان توسط VMD نمایش داده شود. هر مولکول می تواند به طور جداگانه از منظره مخفی شود یا در جای خود ثابت شود (به عنوان مثال، مانع از تحت تأثیر قرار گرفتن در دستورات چرخش ماوس). پنجره شامل کنترل هایی است که می تواند وضعیت مولکول ها را بصورت جداگانه یا گروهی تغییر دهد.

مرورگر اطلاعات مربوط به هر مولکول را نشان می دهد. شناسه عدد صحیح و منحصر به فرد در زمان بارگذاری توسط VMD به هر مولکول اختصاص می یابد. Molecule نام پرونده ای است که شامل اطلاعات توپولوژی است. اتم ها تعداد اتم های موجود در مولکول را نشان می دهد و فریم ها تعداد فریم های مرتبط با پرونده را نشان می دهد.

✓ T (Top)

Top نشانگر مولکول پیش فرض مورد استفاده در دستورات متن است که هیچ چیز برای دستور متن mol مشخص نشده است. همچنین در برخی اشکال (مانند Graphics و Animate) برای تعیین مقادیر خاص استفاده می شود. در هر زمان فقط یک مولکول برتر وجود دارد.

✓ A (Active)

چندین دستور و عمل در VMD بر روی بسیاری از مولکول ها کار می کند. این دستورات، مگر اینکه به طور خاص مشخص شده باشد، عمل خود را برای تمام مولکولهای فعال انجام می دهد. کاربرد اصلی این کنترل جلوگیری از متحرک شدن برخی مولکول ها است. با فشار دادن دکمه پخش، مولکول های غیرفعال متحرک نمی شوند.

✓ D (Drawn)

اگر یک مولکول ترسیم شود، در پنجره نمایش گرافیکی نمایش داده می شود. این برای مخفی کردن موقت از یک مولکول بدون حذف آن مفید است.

✓ F (Fixed)

مولکولهای ثابت تحت چرخش، ترجمه یا مقیاس گذاری قرار نمی گیرند. توجه داشته باشید که اگرچه به نظر می رسد که یک مولکول نسبت به دیگری منتقل شده است، تفاوت آن فقط آشکار

است. مختصات داخلی در هنگام چرخش استاندارد با استفاده از مثلاً ماوس تغییر نمی کنند. با این وجود امکان تغییر مختصات اتم در یک مولکول، با استفاده از رابط فرمان متن و با استفاده از حالت های انتخاب حرکت حرکت اتم وجود دارد.

✓ تغییر وضعیت مولکول

با انتخاب مولکول موجود در مرورگر و دو برابر شدن پرچم مناسب، می توان وضعیت یک مولکول معین را تغییر داد. در هر زمان فقط یک مولکول می تواند بالا باشد، بنابراین مولکول بالا وضعیت را تغییر می دهد.

✓ ذخیره فریم های مسیر

با استفاده از Save Coordinates... آیتم منو، می توانید فریم های مسیر را در یکی از چندین قالب پرونده از جمله PDB، DCD، Amber CRD و غیره روی یک پرونده بنویسید این ویژگی ممکن است بعد از جمع آوری بسیاری از فریم ها از منابع مختلف برای نوشتن یک مسیر جدید در یک فایل واحد استفاده شود (مانند پرونده های DCD، PDB CRD یا Gromacs یا حتی از یک شبیه سازی از راه دور). شما همچنین می توانید با استفاده از مرورگر پرونده مولکول به عنوان روشی برای ساخت فایلهای PDB از مسیر DCD / CRD از این فایل استفاده کنید.

شما می توانید با استفاده از انتخابگر مقدار، کل مسیر ذخیره شده یا بخشی از داده ها را ذخیره کنید [۵/۴/۴]. سپس نوع انتخاب خروجی مناسب را در گزینه File Type انتخاب کنید و دکمه Save را در گوشه پایین سمت راست فشار دهید. این مرورگر فایل را به وجود می آورد، که می توانید از آن برای ورود نام پرونده جدید استفاده کنید. پس از فشردن دکمه ذخیره در مرورگر، پرونده بدون تأیید بیشتر نوشته خواهد شد. برای اطلاعات در مورد چگونگی نوشتن مختصات اتم برای انتخاب اتم در یک پرونده PDB، به بخش مربوط به دستور atxselect writexxx [۹/۳/۲] مراجعه کنید.

✓ حذف فریم های مسیر

می توانید فریم ها را از حافظه از طریق کادر محاوره حذف کنید. برای به وجود آوردن آن، با انتخاب یک مولکول و انتخاب Delete Frames شروع کنید. . . از منوی Molecule یا با دوبار کلیک کردن روی ستون Frames برای آن مولکول در مرورگر Molecule این کار را انجام دهید. در این مرحله، با استفاده از کنترل های اول و آخر، فریم هایی را که می خواهید حذف کنید، انتخاب کنید و سپس دکمه Delete را بزنید. هیچ تأییدی در مورد حذف وجود ندارد.

کنترل Stride به شما امکان می دهد با استفاده از فاصله زمانی مشخص، برخی فریم ها را در محدوده خود نگه دارید. به عنوان مثال، اگر دامنه شما شامل ۱۰ فریم با برچسب ۰ تا ۹ باشد، و از یک گام ۴ استفاده می کنید، فریم های با شماره ۰، ۴ و ۸ حفظ می شوند. گام ۰ (صفر) دلالت بر حذف همه فریم ها دارد.

✓ حذف یک مولکول

گزینه menu Molecule تمام مولکولهای انتخاب شده را حذف می کند. تأیید حذف سریع وجود ندارد، بنابراین مراقب باشید. اگر یک مولکول حذف شده مولکول برتر باشد، یک مولکول برتر جدید از ساختارهای رزیدو تنظیم می شود.

✓ میانبرهای GUI

چند میانبر مفید مبتنی بر ماوس وجود دارد که می توانید در مرورگر Molecule List استفاده کنید. در اینجا لیستی آورده شده است:

کلیک بر روی نام مولکول، دوبار کلیک کردن کادر گفتگو را تغییر نام می دهد.

با دوبار کلیک بر روی تعداد فریم های مولکول، کادر محاوره ای Delete Frames را نشان می دهد.

با کلیک بر روی سه گانه روی T (بالای) در مقابل یک مولکول با ساختن آن تنها مولکولی که نمایش داده می شود (D) و فعال (A) بر روی آن مولکول متمرکز می شود. علاوه بر این، نمای مجددا تنظیم می شود و مولکول در پنجره ی Representations انتخاب می شود.

۳-۴-۵ | کنترل اصلی انیمیشن پنجره



تصویر ۲-۵: کنترل های انیمیشن در پنجره ی اصلی

هر مولکول در VMD می تواند شامل چندین مجموعه مختصات اتمی باشد که ممکن است برای نشان دادن حرکت خود در طول زمان متحرک شوند. مجموعه مختصات می تواند از یک شبیه سازی دینامیک مولکولی یا به سادگی نسخه های متعدد از ساختار مشابه مولکولی ناشی شود. پنجره اصلی شامل کنترل هایی برای پخش متحرک این مسیرها است. کنترل ها حاوی چندین دکمه هستند که مانند دکمه های پخش کننده VCR یا DVD پخش می شوند. دکمه ها راهی برای پخش مسیر، قدم به جلو، متوقف کردن، رفتن به یک قاب خاص و رفتن به آغاز یا پایان ارائه می دهند. پیش فرض های وضعیت و قاب نشان داده شده در کنترل انیمیشن وضعیت مولکول برتر را نشان می دهد. با این حال، دستورات وارد شده از طریق این کنترل، بر تمام مولکول های فعال [۵/۴/۲]، نه تنها مولکول بالا، اجازه می دهد تا انیمیشن همزمان از مولکول های متعدد استفاده کند.

✓ سرعت انیمیشن

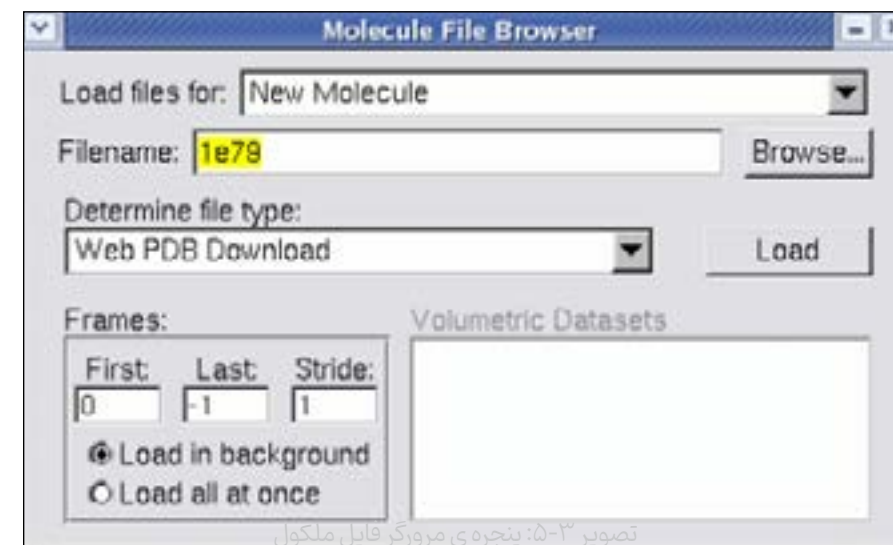
میزان پخش را می توان از دو طریق کنترل کرد. کنترل مرحله اندازه مرحله انیمیشن را تغییر می دهد. به طور پیش فرض، مرحله فریم ۱ است، بنابراین هر مرحله از پخش تعداد قاب انیمیشن را یک به یک افزایش می دهد (یا کاهش می دهد). اگر مرحله فریم ۵ باشد، انیمیشن پنج برابر سریعتر پیش می رود زیرا فقط یک پنجم قاب ها نشان داده می شوند. نوار لغزنده سرعت در پایین پنجره نیز بر سرعت پخش تأثیر می گذارد. از نظر داخلی، این کنترل است که چه تعداد به روزرسانی صفحه نمایش بین هر مرحله مورد نیاز است. به طور پیش فرض، نوار لغزنده در سمت راست قرار دارد و نشان می دهد که برای هر بارگیری مجدد صفحه یک مرحله انجام شده است. حرکت کشویی به سمت چپ، حداقل زمان لازم بین بروزرسانی ها را افزایش می دهد.

✓ پرش به قاب های خاص

دکمه های شروع و پایان برای ساده سازی مقایسه بین ساختارهای اولیه و نهایی استفاده می شود. دکمه شروع انیمیشن فعلی را به قاب اول تنظیم می کند، و پرش های انتهایی به آخرین قاب. اگر می خواهید به یک قاب خاص پرش کنید، شماره قاب را در قسمت متن پیشخوان قاب در کنار دکمه شروع وارد کنید و enter را فشار دهید. نکته ای که باید در نظر داشته باشید این است که تعداد فریم از ° شروع می شود، بنابراین برای پرش به قاب ۵، در واقع باید ۴ را در اینجا وارد کنید. کنترل های انیمیشن همه نسبت به مولکول برتر [۵/۴/۲] است.

✓ سبک های حلقه زدن

هنگامی که انیمیشن در حال پخش به جلو است و به انتهای داده های موجود برای مولکول برتر می رسد، یکی از سه عمل ممکن انجام می شود، همانطور که در انتخاب سبک مشخص شده است. پیش فرض "حلقه" است، که مولکول های فعال را به قاب اول بازنشانی می کند و پخش را به جلو ادامه می دهد. "Once" با رسیدن به آخرین قاب، انیمیشن را متوقف می کند، و "Rock" جهت انیمیشن را برعکس می کند. هنگامی که انیمیشن به صورت معکوس پخش می شود، عمل متقارن است.



از پنجره Files برای بارگذاری پرونده از دیسک به یک مولکول جدید یا موجود VMD استفاده می‌شود. با انتخاب New Molecule از منوی File یا با هایلایت کردن یک مولکول در پنجره اصلی (۴/۵) و انتخاب Load Data Into Molecule آن را مطرح کرد. پس از نمایش پنجره، با استفاده از مرورگر فایل یا با وارد کردن نام پرونده در قسمت ورود متن، پرونده مورد نظر خود را انتخاب کنید. به طور پیش فرض VMD سعی خواهد کرد با تطبیق پسوند پرونده با یکی از افزونه های خواننده پرونده در لیست نوع فایل، نوع پرونده ای را که بارگیری می‌کنید حدس بزند (انواع پرونده های موجود در فصل ۴ توضیح داده شده است). اگر VMD قادر به حدس زدن نوع پرونده مناسب یا حدس نادرست نیست، شما باید آن را از لیست به صورت دستی انتخاب کنید.

می‌توانید با انتخاب آن از منوی Load for for: menu popup در بالای پنجره، مولکول VMD مورد نظر خود را بارگذاری کنید. اگر پرونده در حال بارگذاری برای یک مولکول جدید در نظر گرفته شده است، به جای آن، New Molecule را انتخاب کنید. اگر پرونده در حال بارگذاری حاوی قاب های مختصات اضافی، نقشه چگالی الکترونی یا سایر داده های کمکی برای یک مولکول موجود است، در قسمت بالای پنجره، مولکول مناسب را از لیست انتخاب برگزینید. اگر پرونده در حال بارگذاری حاوی فریم های مسیر است، شما می‌توانید بارگیری زیر مجموعه ای از محدوده پرش مسیر یا فریم های فریم را به جای کل موضوع انجام دهید. همچنین می‌توانید قبل از ادامه بار، برای VMD بارگذاری کنید، یا بارگیری همه آنها در پس زمینه، به گونه ای باشد که بتوانید در حالی که فریم های اضافی را بارگیری می‌کنند، به تعامل با منوها و ویندوزها ادامه دهید. اگر پرونده در حال بارگذاری شامل چندین داده حجمی باشد، می‌توانید مجموعه های داده مورد نظر را برای بارگذاری انتخاب کنید. پس از انتخاب فایل بارگیری، نوع فایل مناسب و نحوه بارگیری آن، دکمه Load را فشار داده و VMD فایل انتخابی را بارگیری می‌کند. هر پیام، اطلاعات یا خطای اطلاعاتی در هنگام بارگیری پرونده در پنجره متن ظاهر می‌شود.

✓ قاب خواندن مسیر

VMD می‌تواند در مجموعه مختصات جدید یکی از چندین قالب پرونده مانند PDB، CRD، DCD یا Gromacs را بخواند. مجموعه مختصات جدید در انتهای فریمهای ذخیره شده برای مولکول انتخابی ضمیمه شده است. بارگیری داده های مختصات مانند بارگذاری هر پرونده دیگر است، آن را با مرورگر پرونده انتخاب کنید تا مطمئن شوید که نوع فایل برای بارگذاری پرونده به درستی تنظیم شده است، و سپس دکمه Load را فشار دهید.

به طور پیش فرض، VMD تمام فریم های موجود در یک فایل مختصات یا مسیر را بارگیری می‌کند. بعضی اوقات ممکن است بخواهید در یک فایل مختصات یا مسیر کامل بخوانید. به عنوان مثال، شما ممکن است فقط قاب آخر یا هر قاب دهم را بخواهید. می‌توانید با تغییر گزینه ها در پنجره Frames control of Files این کار را انجام دهید. کنترل های فریم شامل سه قسمت ورودی عددی با برجسب Last، First، و Stride می‌باشد. اینها باعث می‌شود از زیر مجموعه فریم ها استفاده کنید، از ابتدا شروع می‌شود و هر فریم Stride را تا رسیدن به آخرین انتخاب می‌کنید. به عنوان مثال، برای انتخاب هر پنجمین قاب بین قابهای ۱۴ و ۹۸، تنظیم کنید:

• First to 14

• Last to 98

• Stride to 5

(به یاد داشته باشید که تعداد فریم ها در VMD از ۰ شروع می‌شوند، بنابراین قاب ۰ اولین قاب است.) مقدار '۱-' یک عدد ویژه است. تنظیم First to ۱- برابر با شروع در اولین قاب است، Last = ۱- همان پایان دادن به آخرین قاب است و Stride = ۱- همان گام برداشتن است.

۵-۴-۵ | منوی ماوس

در هنگام حرکت و کلیک ماوس در پنجره گرافیکی، منوی ماوس ماوس را نشان داده و کنترل می‌کند. کلیک و کشیدن ماوس از طریق دوروش بر VMD تأثیر می‌گذارد. این می‌تواند منظره صحنه را تغییر دهد، یا با چرخش، ترجمه و یا مقیاس گذاری. همچنین می‌تواند اشیاء موجود در صحنه را انتخاب کرده و باعث شود اقدامات بعدی انجام شود. این رفتارها همه در حالت منوی ماوس منعکس شده است. در زیر قسمت های اصلی منوی ماوس را شرح می‌دهیم.

✓ **حالت های ماوس -** سه مورد از فهرست های منو، هنگامی که کاربر با کلیک بر روی دکمه سمت چپ ماوس، می‌چرخد، ترجمه می‌کند یا صحنه را مقیاس می‌کند، انتخاب می‌کند.

❖ حالت ها را انتخاب کنید

این حالت ها که دقیقاً در زیر حالت های ماوس در منوی ماوس قرار دارند، نحوه کنترل ماوس بر روی اشیاء موجود در صحنه را کنترل می کنند (بر خلاف نحوه تغییر ماوس نمای این اشیاء). توجه داشته باشید که هر زمان که حالت انتخاب جدیدی را انتخاب کنید، حالت موس فعلی به «چرخش» تغییر می کند.

❖ **Center** - نحوه چرخش و مقیاس گذاری صحنه را تغییر می دهد. برای اینکه احساس خوبی در مورد نحوه عملکرد آن داشته باشید، از «منو» موس «مرکز» را انتخاب کرده و روی اتم موجود در صحنه کلیک کنید. اگر اکنون صحنه را با کلیک و کشیدن با دکمه سمت چپ ماوس بچرخانید، صحنه باید در مورد اتم برداشت شده بچرخد. اگر با استفاده از منوی نمایش «حالت نمایش» حالت نمایش را به «مقیاس» تغییر دهید، در حین نگه داشتن منظره اتم برداشت شده، صحنه گسترش می یابد. اتم برداشت شده تا زمانی که یک اتم جدید به عنوان «مرکز» انتخاب شود، دکمه «نمایش مجدد» فشار داده می شود، یا یک مولکول جدید بارگذاری می شود، اتم مرکز باقی می ماند.

❖ **Query** - اطلاعات مربوط به مورد (مانند نام اتم) را در پنجره کنسول متن چاپ می کند.

❖ **Label** - برچسبها به اتمهای موجود در صحنه می افزاید. برچسب ها شامل اتم ها، پیوندها، زاویه ها و دیهدرال ها هستند. این برچسب ها به ترتیب نیاز به انتخاب یک، دو، سه و چهار اتم دارند. برای سه نوع برچسب دوم، مقدار عددی برچسب هندسی به همراه یک خط مشخص شده که اتمهای برداشت شده را به هم وصل می کند نمایش داده می شود. واحدهای مربوط به «Bonds» با هر واحدی که پرونده مختصات در آن نوشته شده است مطابقت دارد. «Angles» و «Dihedrals» در درجه اندازه گیری می شوند. سپس برچسب ها می توانند از طریق پنجره Labels دستکاری شوند.

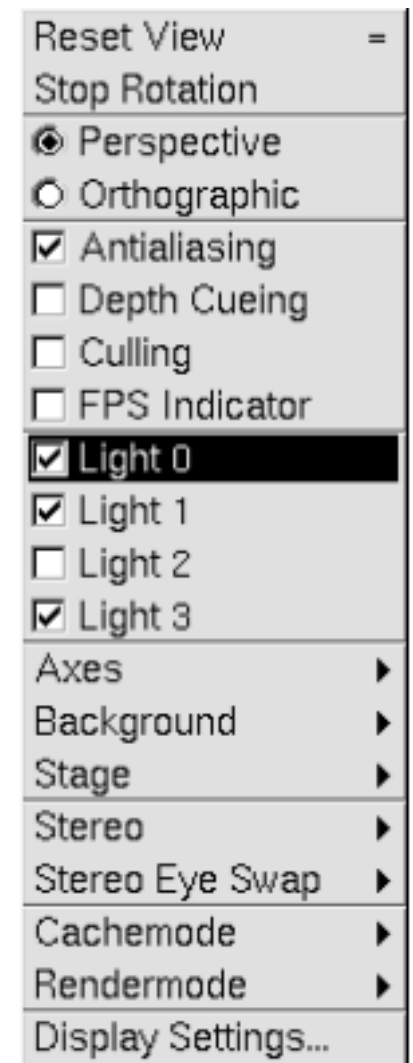
❖ **Move** - مختصات واقعی اتم ها را در صحنه تغییر می دهد. توجه داشته باشید که این با تغییر دادن منظره متفاوت است. با کلیک بر روی یکی از دکمه های موجود در فهرست حالت Mode، گروهی از اتم ها برای حرکت انتخاب می شوند. «Atom» فقط اتم انتخاب شده را حرکت می دهد. «Residue» تمام اتمها را در همان رزیدو (به عنوان مثال، اسید آمینه یا نوکلئوتید) به عنوان اتم انتخاب شده منتقل می کند. «Fragment» تمام اتمهای مرتبط با پیوندی به اتم برداشت شده را جابجا می کند. «Molecule» هر اتم را در ساختار مولکولی حرکت می دهد. «Highlighted Rep» انعطاف پذیر است؛ تمام اتمها را در نمای برجسته در پنجره مرورگر پنجره Graphics جابجا می کند. ❖ اتم ها با کلیک و کشیدن با دکمه سمت چپ ماوس حرکت می کنند. اگر کلید تغییر در حین حرکت ماوس نگه داشته شود، اتمهای تأثیر دیده در مورد اتم انتخاب شده چرخانده می شوند. چرخش اتم ها با دکمه سمت چپ، حول x یا y محور صفحه می چرخد. چرخش با دکمه وسط یا راست در حدود یک محور عمود بر صفحه می چرخد.

❖ توجه داشته باشید که در حال حاضر راهی برای خنثی کردن عملیات انتقال وجود ندارد، بنابراین مختصات اتمی ابتدا باید در یک پرونده ذخیره شود.

❖ **Force** - نیرویی را برای اتمهای انتخاب شده در یک شبیه سازی در حال اجرا اعمال می کند. این نیروها فقط در صورت برقراری اتصال IMD قابل مشاهده خواهند بود. با کلیک و کشیدن با دکمه سمت چپ ماوس، نیرویی را در حالت انتخابی Atom، Residue یا Fragment انتخاب خواهید کرد. با کلیک بر روی دکمه وسط یا راست نیروی موجود در اتمهای منتخب را لغو خواهید کرد.

❖ **MoveLight** - اجازه می دهد تا چراغ ها در اطراف صحنه قرار بگیرند. چراغ های مجزا در پنجره Display روشن یا خاموش می شوند. با انتخاب یکی از چراغ ها در منوی MoveLight، چراغ منتخب در مورد مبدا چرخانده می شود. حالت تغییر حالت نور نیز می تواند با تغییر در حالت انتخاب دیگر یا حالت ماوس لغو شود.

❖ **Add/Remove Bonds** - اگر موجود نباشد، یک اتصال بین دو اتم کلیک کرده و اضافه می کند، و در غیر این صورت پیوند را حذف می کند. هر دو اتم باید به یک مولکول یکسان تعلق داشته باشند.



تصویر ۴-۵: منوی نمایش (Display)

منوی Display بسیاری از مشخصات پنجره نمایش گرافیکی را کنترل می کند. خصوصياتی که ممکن است اصلاح شوند عبارتند از:

✓ **Reset View** - این مورد از منوی تواند برای مجبور کردن VMD برای تنظیم مجدد صحنه به سمت جهت گیری و مقیاس مشاهده پیش فرض استفاده شود، همانطور که هنگام بارگذاری یک مولکول انجام می شود.

✓ **Stop Rotation** - این مورد از منو، خودکارسازی صحنه را متوقف می کند. صحنه را می توان با کشیدن سریع ماوس و در حالی که به طور خلاصه فشار داده و دکمه ماوس را رها می کنید، چرخانده می شوید، صحنه را ترک می کنید تا اینکه توسط این مورد از منو یا با تعامل بیشتر ماوس متوقف شود.

✓ **Perspective** - نمای صحنه می تواند پرسپکتیو یا Orthographic باشد. در نمای چشم انداز (پیش فرض)، اشیاء که بسیار دور هستند کوچکتر از موارد نزدیک هستند. از نظر ارتوگرافی، هر دوشیء در همان مقیاس ظاهر می شوند. توجه داشته باشید که چندین برنامه رندر خارجی پشتیبانی شده از ارائه دهی ارتوژی

پشتیبانی نمی کنند. به همین ترتیب، ممکن است لازم باشد با ترجمه صحنه دور از دوربین، آن را جعلی کنید و یک عامل بزرگنمایی را اعمال کنید. این به معنای کاهش چشمگیر چشم انداز است، در حالی که واقعاً از نظر ارتوگرافی نیست.

✓ **Antialiasing** - هموار سازی را خاموش یا روشن میکند. Antialiasing به صاف کردن ظاهر متراکم هندسه نمایش داده شده ناشی از پیکسل های ذاتی گسسته در دستگاه نمایش کمک می کند. ویژگی هموار سازی فقط در سیستم عامل هایی وجود دارد که از هموار سازی تمام صفحه پشتیبانی می کنند، که گاهی به عنوان «هموار سازی چند نمونه» نیز شناخته می شوند. در سیستم عامل های فاقد قابلیت چند نمونه، با انتخاب گزینه ای در تنظیم درایور صفحه نمایش، می توانید روش های متفاوتی برای انجام هموار سازی تمام صفحه وجود داشته باشد. دستگاههای ویندوز معمولاً این کنترل ها را در پنل تنظیمات درایور صفحه نمایش قرار می دهند.

✓ **Depth Cueing** - روشن یا خاموش کردن عمق. نشانه گذاری عمق باعث می شود تا اشیاء دوردست در رنگ پس زمینه مخلوط شوند تا به درک عمق ۳ بعدی کمک کنند. تنظیمات cueing عمق در پنجره Display Settings کنترل می شود. پارامتر Cue Mode کنترل می کند که از چه نوع معادله ای استفاده می شود. حالت cueing عمق Linear یک شیب عمق ساده با یک نقطه شروع و نقطه پایانی تعریف شده را فراهم می کند. حالت cueing عمق Exp و Exp2 از پارامتر چگالی استفاده می کند، و به طور کلی تندتر از حالت cueing عمق خطی به رنگ پس زمینه می آمیزد. افزایش مقیاس مولکول باعث افزایش مقدار اثر عمیق ترقی که قابل مشاهده است، می شود زیرا دامنه عمق بیشتری را اشغال می کند. مقیاس کوچک کردن اندازه مولکول از اثر عمق جابجایی کاسته می شود. انتقال مولکول به داخل و خارج از صفحه باعث می شود که آن را به داخل و خارج از رنگ پس زمینه مخلوط کنید.

✓ **Culling** - خاموش یا روشن شدن قسمت پشتی را کنترل می کند. این ویژگی در درجه اول برای سرعت بخشیدن به عملکرد رندر بر روی پیاده سازی های مبتنی بر نرم افزار OpenGL مانند Mesa استفاده می شود. کشیدن Backface در واقع عملکرد برخی از رندهای سخت افزاری را کاهش می دهد، بنابراین باید در مورد استفاده از سیستم رایانه خاص خود از بهترین قضاوت خود استفاده کنید.

✓ **FPS** - این گزینه نمایش در پرواز از نرخ فریم رندر VMD بدست آمده را فعال یا غیرفعال می کند. نرخ قاب در گوشه سمت راست بالای پنجره گرافیکی هنگام فعال کردن نمایش داده می شود.

✓ **Lights** - پنجره نمایش گرافیکی می تواند از چهار منبع نور جداگانه استفاده کند تا جلوه ای واقع گرایانه به اشیاء گرافیکی نمایش داده شود. مرورگر Lights On این منابع نور را روشن یا خاموش می کند. در صورت برجسته شدن شماره، چراغ روشن می شود و با کلیک بر روی آن، چراغ خاموش می شود. برای بحث بیشتر در مورد چراغ ها به بخش ۵/۱/۵ مراجعه کنید.

✓ **Axes** - مجموعه ای از محورهای XYZ ممکن است در هر یک از پنج مکان روی صفحه نمایش (هر یک از گوشه ها یا مرکز) نمایش داده شود یا خاموش شود. این توسط انتخابگر Axes کنترل می شود.

✓ **Background** - زمینه نمایشگر می تواند در کل صحنه بر روی یک رنگ یکنواخت تنظیم شود، یا یک گرادیان عمودی را می توان با یک تغییر رنگ خطی از بالای منظره به پایین تنظیم کرد.

✓ **Stage** - مرورگر Stage مرحله را کنترل می کند، یعنی یک صفحه checkerboard است که می تواند در هر یک از شش مکان قرار داشته باشد یا خاموش شود.

✓ Stereo, Eye Sep, and Focal Length - این کنترل ها در پنجره Display Settings مشاهده

می شوند. این کنترل ها حالت و پارامترهای استریو را تنظیم می کنند. استریو به طور کامل در فصل ۷ مورد بحث قرار گرفته است. انتخاب کننده استریو حالت استریو را تغییر می دهد، در حالی که کنترل های Eye Sep و Focal Length به ترتیب فاصله جدایی چشم و فاصله کانونی را تغییر می دهند. کنترل استریو چشم مبادله به طور اختیاری هنگام نمایش در پروژکتورها یا دستگاههای دیگر که به دلایلی یا دیگری وظایف صحیح چشم چپ و راست را حفظ نمی کنند، چشم چپ / راست را برعکس می کند.

✓ Cachemode - سوئیچ Cachemode کنترل می کند که آیا VMD از مکانیزم ذخیره فهرست

نمایشگر برای تسریع در ارائه هندسه استاتیک استفاده می کند یا خیر. این ویژگی می تواند برای دستیابی به عملکرد خوب صفحه نمایش تعاملی در دیوارهای صفحه نمایش کاشی شده و برای نمایش از راه دور از طریق شبکه بسیار مفید باشد. حافظه پنهان را نمی توان در حالی که مسیرهای انیمیشن را انجام می دهد انجام داد، بنابراین مزیت عملکرد فقط چرخش تعاملی و بزرگنمایی ساختارهای مولکولی استاتیک ممکن است.

✓ Rendermode - انتخاب کننده Rendermode از کدام روش رندر سطح پایین استفاده می کند و

از VMD استفاده می کند. حالت رندرال عادی الگوریتم رندر پیش فرض VMD مبتنی بر OpenGL با عملکرد ثابت استاندارد است. حالت ارائه GLSL با استفاده از زبان سایه قابل برنامه ریزی OpenGL برای پیگیری ردیابی اشعه در زمان واقعی، شفافیت آلفا مخلوط، و نورپردازی با کیفیت بالا در هر پیکسل برای همه هندسه است. در دستگاه های دارای تابلوهای گرافیکی با کارایی بالا که از سایه قابل برنامه ریزی پشتیبانی می کنند، حالت ارائه GLSL با بسیاری از رندهای نرم افزاری خارجی که توسط VMD پشتیبانی می شوند اما با نرخ نمایشگر تعاملی، کیفیت خوبی را ارائه می دهند.

فصل ششم

روش‌های ترسیم مولکولی

Molecular drawing methods

هر مولکول در VMD به عنوان مجموعه‌ی چندین نمایش از مولکول ترسیم می‌شود. یک نمایش فقط یک روش خاص ترسیم مولکولی است و شامل چندین ویژگی است:

- انتخاب اتمی، که مشخص می‌کند کدام اتم‌ها در مولکول نمایش داده بشوند. این انتخاب در قسمت ورودی متن در انتهای پنجره Graphics وارد می‌شود. انتخاب اتم هنگام ترسیم داده‌های حجمی مانند نقشه تراکم الکترونی، نقشه پتانسیل الکترواستاتیک و غیره اعمال نمی‌شود. بخش ۶٫۳ نحوه استفاده شده برای انتخاب اتم را توصیف می‌کند.
- روش ترسیم (سبک نمایش) است که تعیین می‌کند چه شکلی برای ترسیم اتم‌ها، پیوندها و سایر مؤلفه‌های مولکول بکار رود. بخش ۶٫۱ روش‌های ارائه موجود در VMD را شرح می‌دهد.
- روش رنگ آمیزی، که نحوه رنگ آمیزی هر یک از اتم‌ها و پیوندهای موجود در نمایه را تعیین می‌کند. پنجره Graphics شامل کنترل‌هایی برای تنظیم روش رنگ آمیزی در سمت راست پنجره است. بخش ۶٫۲ روش‌های رنگ آمیزی VMD را تشریح می‌کند.

ماده ای که میزان درخشندگی، کدورت و سایر ویژگی‌های نورپردازی و سایه زنی را که هنگام تفسیر مولکول مورد استفاده قرار می‌گیرد، تعیین می‌کند.

یک مولکول می‌تواند هر تعداد نمایش‌های مختلفی را در خود جای دهد و تصاویر پیچیده‌ای از یک مولکول می‌تواند با ایجاد نمایه‌های با انتخاب‌های مختلف، طرح‌های رنگ آمیزی و روش‌های ارائه ایجاد شود. به عنوان مثال، ستون فقرات پروتئین را می‌توان به عنوان یک لوله صاف از یک منظر رسم کرد، و رزیدوهای مهم پروتئین را می‌توان به صورت کره یا پیوند licorice در سایر نماها ترسیم کرد. هنگامی که یک مولکول برای اولین بار بارگذاری می‌شود، یک نمایش "پیش فرض" داده می‌شود، که تمام اتم‌ها را به صورت خط و نقطه ترسیم می‌کند و هر اتم را با توجه به نوع عنصری آن رنگ می‌کند.

۶٫۱ روش تفسیر

تمام روش‌های مختلف تفسیر پارامترهای مختلفی دارد که نحوه ترسیم آنها را تعیین می‌کند. برای هر روش، کنترل‌هایی در پنجره Graphics وجود دارد که پارامترهای مرتبط، مانند عرض خط و وضوح کره را تنظیم می‌کند (کنترل‌های گرافیکی در بخش ۵٫۴٫۷ شرح داده شده است). در جدول ۶٫۱ روش‌های ارائه‌ی موجود و بخش بعدی این روش‌ها و پارامترهای تغییر ظاهر آنها را توصیف می‌کند.

Representation styles	Description
Lines	simple lines for bonds, points for atoms
Bonds	lighted cylinders for bonds
DynamicBonds	dynamically calculated distance-based bonds
HBonds	display hydrogen bonds
Points	just points for atoms, no bonds
VDW	solid van der Waal spheres for atoms, no bonds
CPK	scaled VDW spheres, with cylinders for bonds
Licorice	spheres for atoms, cylinders for bonds, same radius
Polyhedra	polyhedra connecting atoms within a cutoff radius
Trace	connected cylindrical segments through C α atoms
Tube	smooth cylindrical tube through the C α atoms
Ribbons	flat ribbon through the C α atoms
NewRibbons	smooth ribbon through the C α atoms
Cartoon	cartoon diagram (cylinders and ribbons) based on secondary structure
NewCartoon	smooth cartoon diagram (smooth ribbons) based on secondary structure
PaperChain	display ring structures as polygons, colored by ring pucker
Twister	flat ribbon tracing glycosidic bonds, with twists oriented by sugar residues
QuickSurf	molecular surface (Gaussian density surface)
MSMS	molecular surface as determined by the program MSMS
Surf	molecular surface as determined by SURF
VolumeSlice	display a texture mapped slice from a volumetric data set
Isosurface	display an isovalue surface from a volumetric data set
FieldLines	field lines generated by integrating particles by volume gradient vectors
Orbital	molecular orbital selected by wavefunction type, spin, excitation, and orbital ID
Beads	per-residue approximate bounding spheres
Dotted	dotted van der Waals spheres for atoms, no bonds
Solvent	dotted representation of the solvent accessible surface

جدول ۱.۶: سبک‌های نمایش مولکولی

۶٫۱٫۱ خطوط

نمایه پیش فرض "خطوط" است، که به "wireframe" نیز معروف است. این بین هر اتم و اتم‌هایی که به آن وصل می‌شوند، یک خط رسم می‌کند. هر دو اتم باید قبل از ترسیم پیوند انتخاب شوند. نیمه اول هر پیوند به طور مناسب برای اتم اول رنگ می‌شود، در حالی که رنگ نیمه پایانی با اتم دوم مطابقت دارد. تنها پارامتر نمایش خطوط، ضخامت خط است.

۶٫۱٫۲ پیوندها

تقریباً همه چیز در مورد این گزینه همانند "خطوط" است [۶٫۱٫۱§] به جز اینکه به جای ترسیم پیوند به عنوان خط بین دو اتم، یک استوانه به جای آن کشیده می‌شود. برای خاص‌تر بودن، یک منشور n-وجهی را ترسیم می‌کند، که در آن تعداد وجوه در پنجره Graphics [۵٫۴٫۷§] توسط کنترل Bond Resolution مشخص می‌شود، و شعاع آن توسط مقدار شعاع پیوند، به آنگستروم داده می‌شود. اگر شعاع یا تعداد وجوه خیلی کوچک شود، پیوندها به صورت خط کشیده می‌شوند. به منظور تنظیم دقیق نمایش پیوندها، VMD مقدار کمی از خطاهای احتمالی منشورها را انجام می‌دهد. یعنی دو استوانه توخالی را تصور کنید که به هم نزدیک میشوند به طوریکه مرکز مواجه (یا اتصال) یک استوانه در همان موقعیتی است که مرکز مواجه استوانه دیگر قرار دارد. همچنین فرض کنید این دو استوانه در ۹۰ درجه کنارهم قرار گرفتند. اگرچه بیشتر این دو استوانه با هم همپوشانی دارند، در آنجا به نظر می‌رسد که شکافی در تقاطع آنهاست. برای اصلاح این مشکل، VMD هر دو استوانه را تا حدودی گسترش می‌دهد تا لبه‌های انتهایی متصل شوند. اگر از نزدیک به دقت نگاه کنیم، این عمل بیشتری از همپوشانی ایجاد می‌کند، اما بسیار بهتر از شکاف است. هنگامی که سه یا بیشتر از پیوندها در یک اتم بپیوندند، VMD کمترین پیوند شماره گذاری شده را انتخاب می‌کند و تمام دیگر پیوندها را برای برآورد با آن یکی گسترش می‌دهد. سپس کمترین پیوند شماره را برای برآورد با پایین‌ترین شماره دوم گسترش می‌دهد.

۶٫۱٫۳ پیوندهای پویا

نمایش "DynamicBonds" به طور خودکار جستجوی پیوند مبتنی بر مسافت را برای انتخاب اتم فعال و قاپ مسیر ۲ فعال انجام می‌دهد. این نمایش روش اصلاح نقطه پایانی که در بالا توضیح داده شده است را برای نمایش منظم "پیوندها" [۶٫۱٫۲§] به طور منظم انجام نمی‌دهد. در عوض، قرار است این تناسب با نمایش 'VDW' [۶٫۱٫۶§] برای نشان دادن پیوندهایی که در طول مسیر ایجاد شده و

از بین رفته مورد استفاده قرار گیرد. اگر اتمها در فاصله cutoff یکدیگر باشند، پیوند ترسیم می شود.

۶٫۱٫۴ پیوند هیدروژن

در صورت وجود پیوند هیدروژن احتمالی بین آنها، نمایش "HBonds" یک خط هاشور بین دو اتم رسم خواهد کرد. پیوند هیدروژن احتمالی با معیارهای زیر تعریف می شود:

به یک اتم D با هیدروژن متصل به آن و یک اتم A که به اتم D پیوند ندارد داده می شود، یک پیوند هیدروژنی بین A و H وجود دارد اگر فاصله $\|D-A\| >$ فاصله و زاویه D-H-A $>$ زاویه باشد، جایی که زاویه و فاصله توسط کاربر تعریف می شود.

فقط اتم های انتخاب شده جستجو می شوند، بنابراین برای ترسیم پیوند هم دهنده و هم پذیرنده باید انتخاب شوند. همچنین، توجه داشته باشید که موارد فوق نوع اتمی دهنده یا پذیرنده را بررسی نمی کند. تنها معیار این است که آیا در حال حاضر هیدروژن دارد یا ندارد. یکی از مشکلات موجود در انجام اجرای کنونی این است که جستجوی n^۲ اتم های انتخاب شده را انجام می دهد، بنابراین شما احتمالاً نمی خواهید تمام پیوندهای هیدروژنی یک ساختار بسیار بزرگ را نشان دهید. به دنبال بهبود عملکرد در نسخه های بعدی VMD باشید.

اگر نمایش پیوندهای هیدروژن را انتخاب می کنید اما هیچ نوع پیوند هیدروژنی را مشاهده نمی کنید، ممکن است به این دلیل باشد که مقیاس پیش فرض Cutoff زاویه و Cutoff فاصله در VMD بسیار کوچک است، بنابراین ممکن است بخواهید مقدار زاویه را از ۲۰ تا ۳۰ درجه و مقدار فاصله را از ۳ تا ۴ افزایش دهید.

HBonds به صورت هاشور با عرض مشخص ترسیم می شود. ضخامت خط پیش فرض ۱ است اما احتمالاً باید آن را به ۲ افزایش دهید. در اکثر SGI ها، آنطور که در صفحه برای عرض خط شرح داده شده است، نمی توانید آن را وسیع تر از آن کنید. پیوند به وسیله رنگی است که با پذیرنده مرتبط است رنگ دار می شود.

۶٫۱٫۵ نقاط

"نقاط" هر اتم را به عنوان یک نقطه ترسیم می کند و هیچ یک از پیوندها را ترسیم نمی کند. این گزینه هنگام ارائه مولکول های بسیار بزرگ حاوی میلیون ها اتم مفید است، به خصوص برای ارائه آب یا دیگر سازه هایی که جزئیات هندسی برای آن ممکن است لازم نباشد. اندازه نقاط قابل تغییر است. هنگامی که حالت رندر VMD روی GLSL تنظیم شده باشد، نمایش نقاط باعث ایجاد فضاهای پر از فضا با اندازه متناسب با پارامتر اندازه و با عملکردی برابر با نقاط غیر سایه ای می شود که در سایر حالت های رندر کشیده شده است.

۶٫۱٫۶ VDW

"VDW" اتم ها را به عنوان کره ترسیم می کند. مقیاس کروی استفاده شده شعاع واندروالسی ضرب شده توسط یک فاکتور مقیاس پذیر قابل انتخاب توسط کاربر است.

رزولوشن کروی در هنگام استفاده از حالت های رندر و ابزارهای رندر خارجی که فقط می توانند هندسه چند ضلعی را ترسیم کنند، چگونگی پوشش دهی کره هایی که ترسیم می شوند را تعیین می کند. عملکرد ارائه کره چند ضلعی به صورت معکوس با تعداد مثلث های تولید شده توسط فروش سازی به مثلثها متفاوت است. تعداد مثلث در هر کره به نسبت متناسب با مقدار پارامتر رزولوشن کره متغیر است. برای حالت های رندر مانند GLSL و برای ابزارهای رندر خارجی که می توانند به طور مستقیم کره ها و سایر سطوح چهارگانه را نمایان کنند، پارامتر رزولوشن کره هیچ تأثیری ندارد.

نکته: با توجه به تغییرات در قراردادهای نامگذاری اتم، در موارد نادر VMD ممکن است به طور نادرست شعاع VDW را به اتم های خاص اختصاص دهد، زیرا VMD هر نوع اتم را بر اساس حرف اول تشکیل دهنده نام خود تعیین می کند. به عنوان مثال، VMD اتمی به نام "HG" را فرض می کند که یک هیدروژن باشد نه جیوه. اگر این اتفاق بیفتد، شما همیشه می توانید شعاع را مجدداً تعریف کنید، با استفاده از نحو بسیار شبیه به آنچه در زیر است:

```
set sel [atomselect top "name HG"]
$sel set radius 1.۹
```

۶٫۱٫۷ CPK

"CPK" ترکیبی از هر دو "پیوندها" [۶٫۱٫۲] و "VDW" [۶٫۱٫۶] است زیرا اتم ها را به عنوان کره ها و پیوندها به عنوان استوانه ترسیم می کند. وضوح و شعاع را می توان به طور مستقل اصلاح کرد. اندازه کره ترسیم شده در حالت CPK بطور پیش فرض شعاع VDW مقیاس پذیر است، اما با تنظیم پارامتر Sphere Scale می توان این فاکتور اندازه گیری را تغییر داد. از آنجا که برای هر اتم یک کره ترسیم می شود، همیشه از گزینه "VDW" کندتر است. اگر شعاع برای یک کره یا پیوند خیلی کوچک باشد، کشیده نمی شوند.

۶٫۱٫۸ Licorice

"Licorice" اتم ها را به عنوان کره و پیوندها را به عنوان استوانه ترسیم می کند. تفاوت بین این و "CPK" [۶٫۱٫۷] در این است که شعاع کره قابل کنترل نیست. در عوض، به اندازه ی پیوند ساخته می شود. این امر یک انتقال خوب و یکنواخت را ایجاد می کند و یکی از نمایشگرهایی است که اغلب مورد استفاده قرار می گیرد. این می تواند برای مولکول های بزرگ بسیار کند باشد.

"Polyhedra" مجموعه ای از مثلث ها را ترسیم می کند که تمام قطعات گروه های اتم را در شعاع تعریف شده کاربر متصل می کند. این معمولاً در ارتباط با انتخاب های اتمی خاص برای تجسم ساختارهای نانواپزار سیلیکونی آمورف و موارد مشابه استفاده می شود. در حال حاضر، یک انتخاب اتم واحد برای همه اتمهای کاندیدا استفاده می شود و فقط پارامتر شعاع قابل تغییر است.

۶٫۱٫۱۰ ردیابی

این نمایش بیشتر روشهایی را که برای ساختن "لوله" استفاده می شود، اعمال می کند [۶٫۱٫۱۱]. در پایان، اتمهای کربن آلفا رزیدوهای پشت سر هم را توسط بخش های استوانه ای با عرض قابل تنظیم متصل می کند. در مورد اسیدهای نوکلئیک، این اتمهای ستون فسفر P هستند که به هم وصل می شوند. مثل همیشه، قطعات آن بخش با توجه به اتمی که با آنها در ارتباط هستند رنگ می شوند. اگر شعاع استوانه ۰٫۰۰ ساخته شود، سپس قسمت های استوانه با خطوط جایگزین می شوند.

توجه: گزینه Trace برای افرادی که نخ کشی ۳ یا فولدینگ پروتئین ها را انجام می دهند، که فقط به مختصات Cα و نام رزیدوها نگاه می کنند، مفید است، زیرا در این صورت مجبور نیستند زنجیره های جانبی را در ساختار خود بسازند. همچنین، افرادی که روی پلیمر کار می کنند می توانند ساختار خود را با نامگذاری همه چیزی با "CA" در فایل PDB و سپس با استفاده از Trace جعل کنند.

۶٫۱٫۱۱ لوله

دوروش برای ترسیم نمایه 'لوله وجود دارد، یکی برای پروتئین ها و دیگری برای اسیدهای نوکلئیک. لوله پروتئینی یک منحنی صاف از طریق موقعیت های کربن آلفا انتخاب شده است و لوله اسید نوکلئیک یک منحنی صاف از طریق فسفات های رشته اسید نوکلئیک است.

لوله پروتئینی یک منحنی افقی است که از تمام اتمهای کربن آلفا در یک قطعه پروتئین عبور می کند. پنج نقطه درون یابی به طور مساوی فاصله در امتداد منحنی یافت می شوند تا منحنی اتصال دو اتم کربن آلفا به شش بخش خط را در هم بشکنند. اگر اولین کربن آلفا انتخاب شود، سه بخش اول توسط رنگی اختصاص داده شده به آن کربن آلفا رنگ می شوند. اگر دومین کربن آلفا انتخاب شود، سه بخش آخر با رنگ کربن آلفا دوم رنگ می شوند. لوله اسید نوکلئیک به همین روش ساخته می شود به جز اینکه از اتم های فسفات استفاده می شود.

این دو کنترل شعاع و وضوح اسپلین را تنظیم می کنند و معنای مشابهی را در کنترل 'باند [۶٫۱٫۲] دارند. اما اگر شعاع باند ۰ یا رزولوشن ۲ یا کمتر شود، اسپلین به عنوان یک خط ساده ترسیم می شود. این

باعث می شود تصویر سریعتر چرخش و چرخش یابد. می توان باموس کربن آلفایی را که لوله را مشخص می کند بوسیله کلیک کردن نزدیک وسط شش قطعه لوله که با آن اتم مرتبط می شوند، انتخاب کرد.

۶٫۱٫۱۲ نوارها

نمایه "نوارها" به "لوله" شبیه [in ۶٫۱٫۱۱] است به این دلیل که از همان پروتئین و اسیدهای نوکلئیک همان منحنی spline را دنبال می کند. با این حال، از اطلاعات اضافی (اکسیژن از رشته های پروتئین یا برخی از اکسیژنهای فسفات اسیدهای نوکلئیک) برای یافتن نرمال برای ترسیم نوار جهت یابی شده استفاده می کند. (ممکن است در تعریف روبان برای اسیدهای نوکلئیک مشکلاتی وجود داشته باشد زیرا ممکن است برای روال تشخیص اسید نوکلئیک اسید رزیدو را به عنوان یک اسید نوکلئیک برچسب گذاری کند حتی اگر فاقد اکسیژن فسفات باشد.)

با توجه به مختصات هر اتم و بردار افسست ۵ برای بردار نواری، کد رسم منحنیهای spline را برای قسمت بالا و پایین نوار پیدا می کند. دو اسپلین به صورت مثلث به هم متصل شده و هر دو اسپلین به صورت لوله های کوچک کشیده شده اند. همانند نمایش "لوله"، شش بخش نوار نزدیکترین اتم مشخص شده با رنگی اختصاص داده شده به آن اتم ترسیم می شوند و اتم را می توان با کلیک کردن در نزدیکی مرکز آن شش عنصر انتخاب کرد.

شعاع پیوند و رزولوشن لوله هایی را که در بالا و پایین نوار تشکیل شده است، اصلاح می کنند. اگر شعاع یا وضوح خیلی کوچک شود، لوله ها کشیده نمی شوند (این باعث افزایش زمان ترسیم با مقدار قابل ملاحظه می شود). عرض، عرض نوار را کنترل می کند و باعث می شود شبیه همه چیز از رشته فرنگی گرفته تا لازانیا به نظر برسد. علاوه بر این، قندها با مثلث پر شده اند. این به برجسته کردن قالب کمک می کند.

با تشکر از اتان مریت برای الگوریتم طراحی روبان برگرفته شده از Raster3D.

۶٫۱٫۱۳ NewRibbons

نمایه "NewRibbons" به "لوله" [۶٫۱٫۱۱] شبیه است به این دلیل که از منحنی spline برای هم پروتئین هم اسیدهای نوکلئیک پیروی می کند. با این حال، از اطلاعات اضافی (اکسیژن رشته های پروتئین یا برخی از اکسیژنهای فسفات برای اسیدهای نوکلئیک) برای یافتن نرمال برای ترسیم نوار استفاده می کند. (ممکن است در تعریف نوار برای اسیدهای نوکلئیک مشکلاتی وجود داشته باشد زیرا ممکن است برای روال تشخیص اسید نوکلئیک، رزیدو را به عنوان یک اسید نوکلئیک برچسب گذاری کند حتی اگر فاقد اکسیژن فسفات باشد.)

4 . Ribbons
5 . offset vector

نمایه NewRibbons از آلفا کربن ها به عنوان نقاط کنترل برای یک spline استفاده می کند که ستون فقرات ۶ نوار را مشخص می کند. این نوار با ایجاد یک سطح مقطع دو بعدی در طول جهت گیری spline که با اشاره به موقعیت های اکسیژن ها بر روی ستون فقرات پروتئین قرار دارد، ترسیم می شود. همانند نمایش "لوله"، شش بخش نوار نزدیکترین اتم مشخص شده با رنگی اختصاص داده شده به آن اتم ترسیم می شوند و اتم را می توان با کلیک کردن در نزدیکی مرکز آن شش عنصر انتخاب کرد. پارامتر نسبت ابعاد^۷، عرض یک نوار را نسبت به مقدار ضخامت به عنوان یک عامل ضربی کنترل می کند. نسبت ابعاد^۸ نمایش شبه لوله را نشان می دهد. پارامتر Resolution درجه ای از سطح نوار که با مثلث مفروش می شود را کنترل می کند. تنظیمات پیشرفته تر تصاویراز نظر دیداری بهتر را به تناسب عملکرد رندر تعاملی بدست می آورد. نقاط را می توان با یک Catmull Rom یا B-Spline با تغییر مقدار Spline Style درون یابی کرد. توجه داشته باشید که B-Spline همیشه از موقعیت های کربن آلفا عبور نمی کند، زیرا یک Spline صاف تر است.

۶٫۱٫۱۴ Cartoon

گزینه "Cartoon" نمایش ساده ای از پروتئین را بر اساس ساختار ثانویه ی آن تولید می کند. هلیکس ها به صورت استوانه، صفحات بتا به عنوان نوار های ثابت کشیده می شوند و سایر ساختارها (کوئل ها و چرخش ها) شبیه لوله نمایش داده می شوند. اگر ساختار ثانویه هنوز مشخص نشده باشد، به طور خودکار توسط برنامه STRIDE محاسبه شود.

استوانه هلیکس با پیدا کردن کمترین مربعات خطی در امتداد مختصات اتمهای کربن آلفا مارپیچ ساخته می شود. در صورت انتخاب کربن آلفا رزیدو، سیلندر کوچک (که با درون یابی خطی در امتداد خط بهترین جا یافت می شود) با شعاع مشخص شده با پارامتر شعاع کشیده می شود. از آنجا که این روش بهترین تناسب را محاسبه می کند، مارپیچ قبل از ترسیم باید حداقل ۳ رزیدو داشته باشد (آن مارپیچ ها با یک یا دورزیدو به عنوان coil کشیده می شوند). می توان کربن آلفا را برای هر بخش سیلندر انتخاب کرد، اما آنها در محل C قرار دارند، که در نزدیکی استوانه محور نیست. نتایج جالب وقتی اتفاق می افتد که کل پروتئین به صورت هلیکس تعریف شده و به صورت Cartoon ترسیم شود. نوار بتا ثابت بوسیله ایجاد یک spline در امتداد نقاط مرکزی بین هر رزیدو صفحات بتا ساخته می شود. مجدداً، spline به صورت خطی درج می شود تا نقاط شروع و انتهای هر رزیدو را پیدا کند. اینها برای ساخت گوشه های یک نوار با سطح مقطع مستطیل گسترش یافته اند (مقدار وسعت با پارامتر ضخامت تعیین می شود). در صورت انتخاب اتم کربن آلفا مربوطه، از یک قسمت روبان استفاده می شود. توجه داشته باشید که از آنجا که این روش فرض می کند که پروتئین در ترکیب بتا است، یک نوار خیلی صاف تر از گزینه "روبان" استاندارد [۶٫۱۲/۶]، نوار را با نوسان در امتداد ورق رسم می کند. شکل های دیگر به صورت لوله کشیده می شوند. از آنجا که نقاط انتهایی استوانه مارپیچ و صفحات

6 . backbone
7 . Aspect Ratio

Cartoon در مختصات کربن آلفا نیستند، روش لوله اندکی تغییر یافته است تا لوله به سمت مکان های جدید برود. این همیشه کار نمی کند، در نتیجه لوله کاملاً به یک استوانه وصل نمی شود.

۶٫۱٫۱۵ NewCartoon

نمایه "NewCartoon" نوعی متفاوت از "کارتون" اصلی است که با ظاهر و ویژگی های "NewRibbons" نمایش داده می شود. تفاوت اصلی بین نمایش اصلی "Cartoon" و "NewCartoon" بدین معنی است که مارپیچ ها در نمای نوار رزیدوها هستند که از ساختارهای خمیده بسیار دقیق تر از استوانه های مستقیم استفاده شده در "Cartoon" اصلی پیروی می کنند. پارامتر نسبت ابعاد عرض یک نوار را نسبت به مقدار ضخامت، به عنوان یک عامل ضربی کنترل می کند. نسبت ابعاد^۹ بازنمایی شبه لوله را نشان می دهد. پارامتر Resolution درجه ای از سطح نوار با مثلث را کنترل می کند. تنظیمات پیشرفته تر تصاویراز نظر دیداری بهتر را به تناسب عملکرد رندر تعاملی بدست می آورد. نقاط را می توان با یک Catmull Rom یا B-Spline با تغییر مقدار Spline Style درون یابی کرد. توجه داشته باشید که B-Spline همیشه از موقعیت های کربن آلفا عبور نمی کند، زیرا یک Spline صاف تر است.

۶٫۱٫۱۶ PaperChain

نمایه «PaperChain» با حرکت کردن بر روی توپولوژی مولکولی، تمام حلقه ها را تا حداکثر اندازه تعریف شده توسط کاربر می یابد، سپس با قرار دادن یک چند ضلعی به اتم های درگیر و مرکز سلول حلقه، هر حلقه را ارائه می دهد. حلقه ها به صورت bipyramids با ارتفاع کنترل شده توسط کاربر ترسیم می شوند. حلقه ها با استفاده از دامنه pucker Cremer-Pople، که توسط همه حلقه های سه اتم یا بیشتر تعریف شده است، توسط pucker رنگی می شوند.

۶٫۱٫۱۷ Twister

نمایه "Twister" پیوندهای گلیکوزیدی را با یک روبان مسطح نشان می دهد که مطابق جهت گیری نسبی رزیدوهای قند متوالی پیچ می دهد. این مفهوم شبیه به نمایش های نوارهای آشنای استفاده شده از VMD برای پروتئین ها است. مسیرهای اتصال حلقه های جهت دار توسط نوارهای نازک با عرض و ضخامت قابل تنظیم کاربر و با وضوح هندسی قابل تنظیم متصل می شوند و نمایش ساختارهای شاخه دار را به عهده دارد.

نمایه "QuickSurf" یک ایزوسطحي ۸ استخراج شده از نقشه چگالی گاوسی حجمی ۹ محاسبه شده از اتمها یا ذرات مجاور هر نقطه شبکه [۳۳، ۳۴، ۱۴، ۳۵، ۴۳، ۲۶، ۳۶] محاسبه می کند. الگوریتم تولید نقشه چگالی گاوسی را در یک شبکه سه بعدی یکنواخت تعریف شده در یک جعبه محدود کننده جمع می کند که به اندازه کافی بزرگ است و تمام اتم ها یا ذراتی را که به عنوان بخشی از سطح ارائه شده انتخاب شده اند، جمع می کند. بالشتک کافی در لبه های حجم اطمینان می دهد که سطح استخراج نشده از هم جدا نمی شود. الگوریتم تولید نقشه چگالی

$$\rho(\vec{r}; \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sum_{i=1}^N e^{-\frac{|\vec{r}-\vec{r}_i|^2}{2\alpha^2}}, \quad (6.1)$$

جایی که، چگالی p در موقعیت با جمع بندی همه اتم های N ارزیابی می شود. هر اتم i در موقعیت مکانی i قرار دارد و دارای یک فاکتور وزنی مربوط به α است که با ضرب شعاع آن با فاکتورهای وزنی و مقیاس بندی تعریف شده توسط کاربر تعیین می شود که تجسم با بصری سازی را برای ایجاد یک سطح با سطحی از جزئیات تعریف شده توسط کاربر تعریف می کند.

نمایش QuickSurf شامل چندین کنترل است که پارامترهای معادله ی ۶٫۱ را برای تولید سطحی که مطابق با صحت مکانی لازم و عملکرد رندر تعاملی باشد، اصلاح می کند.

✓ Resolution - نوار لغزنده تقریب کلی وضوح مکانی، که به طور خودکار مقادیر پارامترهای دقیق را در زیر تنظیم می کند.

✓ Radius Scale - یک عامل مقیاس گذاری شعاع قبل از محاسبه سهم نقشه تراکم آنها برای همه اتم ها اعمال می شود.

✓ Density Isovalue - چگالی مقدار برابر هنگام استخراج isosurface تولید شده، استفاده می شود.

✓ Grid Spacing - پارامتر فاصله شبکه یکنواخت نقشه چگالی

✓ Surface Quality - حداکثر فاصله قطع برای استفاده هنگام جمع آوری سهم چگالی گاوسی از اتمها یا ذرات در مجاورت هر نقطه شبکه

عوامل مختلفی در محاسبه تعاملی و عملکرد صفحه نمایش نماینده QuickSurf تأثیر می گذارد. نسخه CPU الگوریتم QuickSurf چند رشته ای است، اما به دلیل پتانسیل استفاده قابل توجه از حافظه در ارتباط با هسته CPU، تعداد هسته های CPU استفاده شده توسط الگوریتم ممکن است به حداکثر هشت برسد، و برای حجم نقشه های چگالی نزدیک به ۱ گیگابایت در اندازه یا بزرگتر، الگوریتم ممکن است تعداد هسته های پردازنده مورد استفاده را به چهار یا کمتر کاهش دهد تا از وقوع خارج از حافظه در زمان اجرا جلوگیری شود.

در دستگاههای مجهز به سخت افزار GPU مناسب، نماینده QuickSurf از اجرای شتابدهنده GPU

استفاده می کند که یک یا دو مرتبه بزرگتر از نسخه CPU اجرا می شود. سرعت الگوریتم GPU تا حدودی به ظرفیت حافظه GPU های هدف بستگی دارد، زیرا نقشه های چگالی بزرگتر از ظرفیت GPU باید در چند مسیر محاسبه شوند.

Surf ۶٫۱٫۱۹

این گزینه از حل کننده سطح مولکولی، نوشته ی آمیتاب ورشنی^{۱۰} در زمان حضور در دانشگاه کارولینای شمالی، استفاده می کند. در صورت استفاده از این گزینه، شعاع ها و مختصات به پرونده موقت نوشته می شوند و اجرای "surf" با پارامتر Probe Radius اجرا می شود. پس از اتمام، خروجی به فایل موقت دیگری نوشته می شود، سپس توسط VMD خوانده شده، رنگ و نمایش داده می شود. مقدار شعاع کاوشگر^{۱۱} توسط شعاع کره کنترل می شود و این با اندازه کاوشگر در درجه A یکسان است.

✓ Probe Radius - شعاع کاوشگر برای ساخت سطح مولکولی استفاده می شود.

✓ Representation Method - سطح به صورت اختیاری می تواند با استفاده از خطوط به

جای مثلثهای ثابت کشیده شود.

این سطح از نظر تولید و نمایش برای سیستم های بیش از چند صد اتم نسبتاً کند است. محاسبه SURF کاملاً دقیق است و حتی در صورت لزوم جزئیات کاملی را نشان می دهد. استفاده از فضای دیسک به عنوان یک وسیله ارتباطی میان پردازشی تقریباً نیمی از زمان اجرا را به خود اختصاص می دهد. یک متغیر محیطی [۱۴/۲] وجود دارد که می تواند گزینه نمایش سطحی را تحت تأثیر قرار دهد:

✓ SURF BIN - محل باینری SURF (پیش فرض SURF \$ ARCH همانطور که در قسمت راه

اندازی vmd تعریف شده است)

یک ترفند مفید در هنگام ساخت سطوح استفاده از کلید Apply Changes Automatic toggle روی پنجره گرافیکی است. بدین معنی که از آنجا که سطوح اغلب مدت زمان طولانی برای ساختن نیاز دارند، تغییر پارامترهای مشاهده مانند شعاع پروب می تواند باعث تاخیرهای طولانی شود. به طور پیش فرض، هر بار که به کلید شعاع کاوشگر ضربه می زنید، VMD سطح را مجدداً بازسازی می کند. اگر می خواهید شعاع کاوشگر را با چندین افزایش کاهش یا بزرگ کنید، در نهایت می توانید چندین بار سطح را دوباره بسازید. با ضربات کلید فوق، می توانید VMD را مجبور کنید فقط در دستور خود بروزرسانی کند. این ترفند گاهی برای دیگر نمایش ها نیز مفید است.

برای یک روش رندر سطح بسیار سریع تر، به توضیحات "MSMS" مراجعه کنید [۶٫۱٫۲۰]. "Quick-Surf" [۶٫۱٫۱۸].

10 . Amitabh Varshney
11 . probe radius

8 . isosurface
9 . volumetric Gaussian density

MSMS ۶٫۱٫۲۰

یکی دیگر از رندهای سطح مولکولی "MSMS" است، برنامه ای که توسط مایکل سانر^{۱۲} از آزمایشگاه اولسن در اسکریپتس نوشته شده است. این برنامه بسیار سریعتر از Surf است و بسته به نحوه استفاده از آن می تواند انتخاب بهتری باشد. برای اطلاعات بیشتر به صفحه وب <http://www.scripts.edu/pub/olsonweb/people/sanner/html/msms/home.html> مراجعه کنید.

گزینه های موجود شامل

✓ Which Atoms - باید سطح انتخاب (°) باشد یا سهم این انتخاب در سطح تمام اتم ها

باشد؟ (۱)

✓ Sample Density - چگالی مثلث بر روی سطح (مقادیر معمولی ۰٫۱ برای مولکولهای دارای بیش از هزار اتم و ۳٫۰ برای مولکولهای کوچکتر)

✓ Probe Radius - شعاع کاوشگر برای ساخت سطح مولکولی استفاده می شود

✓ Representation Method - سطح به صورت اختیاری می تواند با استفاده از خطوط به جای مثلثهای جامد کشیده شود

یک متغیر محیطی [۱۴٫۲] وجود دارد که می تواند گزینه نمایش MSMS را تحت تأثیر قرار دهد:

✓ MSMSERVER - محل قرارگیری باینری MSMS (پیش فرض msms (فرض شده در مسیر کاربر)) در دستگاه های ویندوز، این را به عنوان متغیر محیطی سیستم در پنجره متغیرهای محیط موجود در پانل کنترل خواص سیستم تنظیم می کند.

VolumeSlice ۶٫۱٫۲۱

نمایه "VolumeSlice" بافتی را که برش دو بعدی از یک مجموعه داده حجمی که قبلاً با استفاده از دستور mol volume [۹٫۳٫۲۰] یا با دستورهای دیگر در VMD بارگذاری شده است به تصویر می کشد. رنگ ها دامنه مقیاس مجموعه داده ها را نشان می دهند، با رنگ قرمز مقادیر کم و رنگ آبی نشانگر مقادیر زیاد در داده ها است. برش به صورت یک صفحه عمود بر محور X، Y یا Z کشیده شده است و می تواند در هر مکانی در داخل سیستم مختصات مجموعه داده های حجمی قرار گیرد. این ویژگی در حال حاضر فقط در ماشینهایی موجود است که پشتیبانی کاملی از نقشه برداری بافتی ۳ بعدی دارند. در دستگاه های فاقد بافت ۳ بعدی، هیچ چیزی نمایش داده نمی شود. نسخه های آینده VMD رابط کاربری و قابلیت های این ویژگی را تا حد زیادی بالا می برد.

انتخاب کننده های زیر نمایه VolumeSlice را کنترل می کنند:

Data Set - این کنترل ها که به مجموعه داده های حجم در نمایه ارجاع می شود، زیرا چندین مجموعه داده حجمی برای یک مولکول واحد بارگیری می شود.

✓ Slice Offset - تنظیم برش موقعیت برش حجمی را در امتداد محور انتخابی نشان می

دهد، در سیستم مختصات داده های حجمی، از ۰ تا ۱ را نشان می دهد.

✓ Slice Axis - محور قائم که صفحه برش در طول آن حرکت می کند، می تواند X، Y یا Z باشد.

✓ Render Quality - کیفیت را می توان روی Low یا متوسط تنظیم کرد. تنظیم پایین باعث

می شود نقشه بافت برش با استفاده از رنگی که نزدیکترین نقطه نمونه است، ارائه شود.

سطح کیفی متوسط نشان می دهد که نقشه بافت برش با استفاده از درون یابی دوقطبی ارائه می شود.

Isosurface ۶٫۱٫۲۲

نمایه "Isosurface" سطح را در یک قسمت داده حجمی محاسبه و ترسیم می کند، روی یک سطح سه بعدی که مربوط به نقاط با یک شاخص مقیاس واحد است. چندین تنظیمات وجود دارد که کنترل نحوه نمایش isosurface را کنترل می کند.

✓ Data Set - این کنترل انتخاب می کند که مجموعه داده های حجم برای محاسبه isosurface استفاده می شود، زیرا یک مولکول معین می تواند شامل چندین مجموعه داده حجمی باشد.

✓ Isovalue - کنترل Isovalue مقداری را برای آن isosurface محاسبه انتخاب می کند. در رابط کاربری گرافیکی، هنگام کشیدن نوار لغزنده isosurface، isovalue های کشیده شده به طور موقت در وضوح پایین تر برای بهبود تعامل محاسبه می شوند. برای جلوگیری از این رفتار، می توانید هنگام کشیدن نوار لغزنده، از دکمه وسط یا راست (یا کلیدهای اصلاح گر control/shift/alt) استفاده کنید.

✓ Draw - این را می توان در نقاط، Shaded Points، Wireframe یا Solid Surface تنظیم کرد. حالت ترسیم پیش فرض نقاط است. هنگام مشاهده فضاهای بسیار متراکم از نقشه های حجمی عظیم، روش ترسیم Shaded Points می تواند یک سازش عالی بین سرعت روش Points و کیفیت روش Solid Surface باشد.

✓ Boundary- تنظیم مرز روی Box باعث می شود Box محدودیت داده حجم و محورهای مختصات به جای isosurface برای داده ها کشیده شوند. این کار معمولاً هنگام کار با داده های حجمی و بررسی اینکه سیستم های مختصات داده های حجم و مولکول ها مطابقت دارند مفید است.

✓ step- با رد کردن voxels می توانید از این تنظیم برای کاهش بسیار زیاد وضوح isosurface تولید شده استفاده کنید.

✓ size- این ضخامت نقطه و خط بر اساس نمایه isosurface را تعیین می کند.

این و سایر ویژگی های نمایش حجمی در نسخه های بعدی VMD بسیار گسترش خواهد یافت.

نمایه "FieldLines" خط‌هایی را محاسبه می‌کند که نتیجه ادغام حرکات ذرات بدون جرمی است که توسط بردارهای گرادیان حجمی مرتبط با هر مکان در یک مجموعه داده حجمی ردیابی می‌شوند. VMD هنگامی که یک مجموعه داده حجمی در ابتدا بارگیری می‌شود، نقشه گرادیان حجمی را محاسبه می‌کند و روش‌های انتقال ذرات با استفاده از یک درون‌یابی سه‌جانبه ساده از شیب‌های حجم همراه با یک برنامه سریع (اما ساده) از روش اویلر ۱۳ هستند تا بتوانند ذرات را در هر مرحله یکپارچه سازی کنند. کنترل بزرگی گرادیان قابل تنظیم کاربر بر نقاط موجود در مجموعه داده‌های حجمی که کاندیداهای seeds خط میدانی محسوب می‌شوند، موثر است. مجموعه حاصل از نقاط seed اولیه ای است که ذرات از آن شروع به جابه‌جایی / ادغام می‌کنند. کنترل طول min و max بر حداقل و حداکثر طول خطوط میدانی حاصل که برای نمایش انتخاب خواهند شد، تأثیر می‌گذارد. خطوط میدان کوتاه‌تر از حداقل یا طولانی‌تر از حداکثر نمایش داده نمی‌شوند. به طور مشابه، خطوط میدانی که در ابتدای ادغام آنها با یک نقطه بحرانی در مجموعه داده برخورد می‌کنند دور انداخته می‌شوند.

نمایه 'Orbital' یک سطح ویژه مداری مولکولی مربوط به یک دامنه عملکرد موج تعریف شده توسط کاربر محاسبه شده بر روی یک شبکه بطور منظم فاصله دار، که ناشی از نوع عملکرد موج انتخابی، چرخش، برانگیختگی و شاخص مداری است، ترسیم می‌کند [۲۹، ۳۰]. پارامتر اندازه ضخامت نقاط و بازنمایی isosurface خط را کنترل می‌کند، و پارامتر فاصله شبکه تراکم شبکه منظم را که بر روی آن دامنه عملکرد موج محاسبه می‌شود، کنترل می‌کند.

در انتخاب اتم، یک کره محدود به جای هر رزیدو ترسیم می‌شود. این نمایه می‌تواند به عنوان ابزاری خام برای ترسیم سازه‌های بسیار بزرگ در نمای پر از فضا مورد استفاده قرار گیرد و می‌تواند برای مسیرهای انیمیشن سازی بسیار مفید باشد.

مشابه با "VDW" [۶٫۱٫۶] با این تفاوت که کره به جای solid به صورت نقطه ترسیم می‌شوند. یعنی یک نقطه در هر یک از رئوس مثلث قرار می‌گیرد و هر کره را می‌سازد. برای مثال می‌توان از این سطح برای تقلید از نمایه سطح استفاده کرد.

این روش در راستای نمایه "Dotted" [۶٫۱٫۲۶] مشابهت دارد به این دلیل که با مجموعه ای از نقاط تخمین سریع سطح مولکولی را می‌دهد. با این حال، با دادن پوشش یکنواخت تر سطح، از گزینه Dotted بالاتر رفته و فراتر می‌رود. روشی که VMD برای بررسی همپوشانی استفاده می‌کند از نظر فنی صحیح نیست، اما سریع است و بسیار خوب کار می‌کند. شرح فنی الگوریتم به شرح زیر است: برای هر نقطه از توزیع سطح (شعاع ۲ = شعاع اتم + شعاع پروب) اتم i، هر یک از اتم‌های z که با آن از نظر کووالانسی باند شده است را بررسی کنید. اگر نقطه خیلی نزدیک به اتم z نیست، آن را نمایش ندهید. همچنین، اگر این نقطه به هریک از اتم‌های k از $K \neq i$ نزدیک باشد، پس آن را ترسیم نکنید. این دارای سرعت بالایی است زیرا اتم‌های مجاور زیادی برای بررسی وجود ندارد، اما قسمت‌هایی از سطح را در تماس با اتم‌هایی که یک یا دو پیوند ندارند حذف نمی‌کنند. این می‌تواند یک عمل خوب محسوب شود زیرا ممکن است شما از سطح تماس ایده بهتری بگیرید. سه پارامتر برای این گزینه وجود دارد. یکی شعاع کاوشگر است که به تفصیل بیاد شد. اگر شعاع کاوشگر خیلی بزرگ باشد، مشکل تداخل صفحات بین اتم‌های غیر مرتبط خیلی آشکار می‌شود. دومی، سطح جزییات است که احتمالاً باید به چگالی تغییر نام داده شود زیرا آن چگالی سطحی توزیع‌ها را تعیین می‌کند. جزییات بیشتر، چگالی بالاتر. گزینه انتهایی روش نمایش است. به صورت پیش‌فرض، سطح با اجتماع نقاط ترسیم می‌شود، اما یک نقطه اندازه پیکسل صرف نظر از مقیاس مولکولی است. بنابراین وقتی مقیاس کوچک شود، چگالی سطحی بزرگ به نظر می‌رسد و زمانی که مقیاس بزرگ می‌شود، چگالی کوچک به نظر می‌آید. روش ۲ علامت مثبت کوچکی به جای نقطه قرار می‌دهد که درجه بهتری است و بنابراین محتوی چگالی بیشتر به نظر می‌رسد. روش ۳ خطوط را بین نقاط سطحی که روی اتم یکسان هستند، می‌کشد. اما دو کره را به هم متصل نمی‌کند. باتشکر از Jan Hermans برای نشانگرهای اجرایی و تشکر دوباره از Jon Leech برای کد محاسبه توزیع نقاط یکنواخت. این کد به عنوان بخشی از توزیع x.۱ درج شده است.

VMD یک بانک اطلاعاتی از رنگ های مورد استفاده برای مولکول ها و سایر اشیاء گرافیکی را که در پنجره نمایش قابل مشاهده هستند، نگه می دارد. VMD نظارت دارد بر

✓ تعاریف نام رنگ - مقدار RGB آن؛

✓ برآورد یک طیف رنگ به نام رنگ - بنابراین نام رزیدو MET به رنگ زرد است

✓ مقیاس رنگ فعلی - قرمز تا سفید به آبی و چندین پارامتر مرتبط

۱۰۵۷ رنگ در VMD وجود دارد که رنگهای آن از ۰ تا ۱۰۵۶ است. ۳۳ رنگ اول به ترتیب: آبی، قرمز، خاکستری، نارنجی، زرد، برنز، نقره ای، سبز، سفید، صورتی، فیروزه ای، بنفش، آهکی، بنفش مایل به ارغوانی سیر، اخره ای، آبی یخی، سیاه، زرد ۲، زرد ۳، سبز ۲، سبز ۳، فیروزه ای ۲، فیروزه ای ۳، آبی ۲، آبی ۳، بنفش، بنفشه ۲، سرخابی، سرخابی ۲، قرمز ۲، قرمز ۳، نارنجی ۲ و ۳ نارنجی. گروه بعدی از ۱۰۲۴ رنگ (از ۳۳ تا ۱۰۵۶) رنگ هایی هستند که در نقشه رنگ استفاده می شوند، این ها را می توان با پنجره Color یا دستور متن رنگ به یکی از چندین محدوده تنظیم کرد: آبی → سبز → قرمز، آبی → سفید → قرمز یا سفید → سیاه، و غیره. هیچ نامی برای رنگ های خاص وجود ندارد. در بخش های بعدی، نقشه رنگی با جزئیات بیشتری مورد بحث قرار می گیرد.

Color categories ۶٫۲٫۱

VMD یک دیتابیس از رنگ های مورد استفاده برای مولکول ها و سایر اشیاء گرافیکی در پنجره نمایش نگه می دارد. این پایگاه داده از چندین طیف رنگ تشکیل شده است. هر دسته از رنگ ها شامل لیستی از اسامی است و به هر اسم یک رنگ اختصاص می یابد. به عنوان مثال، یک دسته رنگ Resname وجود دارد، و در این دسته نام های زیادی وجود دارد؛ یکی برای هر یک از نامهای موجود در دسترس است. برخی از اینها CYS، ALA و PRO هستند. به هر نام می توان از لیست ۳۳ رنگ موجود به نام نقشه رنگ، رنگی اختصاص داد. مقدار RGB هر رنگ را می توان مستقیماً در پنجره رنگها [۵٫۴٫۹] اصلاح کرد. برای رنگ آمیزی موارد به روش درجه بندی، ۱۰۲۴ رنگ اضافی وجود دارد که در مقیاس رنگ استفاده می شود [۶٫۲٫۴].

دسته های مختلف رنگ در VMD در جدول ۶٫۲ آورده شده است. از پنجره Color می توان برای تغییر تخصیص رنگ به نام ها در هر یک از این دسته ها استفاده کرد. به عنوان مثال، برای تغییر رنگ استفاده شده برای ترسیم رزیدو آرژنین در هنگام رنگ آمیزی مولکول ها، از پنجره Color استفاده می کنید، دسته "Resname" را انتخاب می کنید، نام "Arg" را در آنجا انتخاب می کنید، و سپس رنگ را برای استفاده از اسم آرژنین از لیست رنگ های کنار اسامی انتخاب می کنید.

Coloring Methods ۶٫۲٫۲

همانطور که در فصل ۶ توضیح داده شده است، هر نمایه برای یک مولکول از روش رنگ آمیزی خاصی برخوردار است. روش رنگ آمیزی تعیین می کند که چگونه رنگ برای هر اتم در بازنمایی (نمایه) تعیین می شود. این روش های مختلف از رنگ های اختصاص یافته به نام ها در دسته های ذکر شده در بالا استفاده می کنند و از آنها برای رنگ آمیزی اتم ها استفاده می کنند. روشهای ترسیم مولکولی که پیوندهای بین اتمها را نیز ترسیم می کنند، همیشه با استفاده از رنگ نزدیکترین اتم برای هر نیم پیوند، نیمی از پیوند را جداگانه رنگ می کنند. در جدول ۶٫۳ روشهای مختلف رنگ آمیزی موجود ذکر شده است. توضیحات مربوط به هر روش منبع اطلاعات مورد استفاده برای تعیین رنگ را توضیح می دهد.

Coloring by color categories ۶٫۲٫۳

روش پیش فرض رنگ آمیزی با نام اتم است. روش کار این است که یک گروه رنگی به نام "نام" وجود دارد که لیستی از تمام اسم های اتم ها (به عنوان مثال CA، N، O و H) که در VMD بارگذاری شده است را شامل می شود. به هر نام یکی از ۱۶ رنگ اصلی (به عنوان مثال، فیروزه ای، آبی، قرمز و سفید) اختصاص داده می شود. وقتی نمایش نقاشی برای یک اتم خاص به رنگی احتیاج دارد، در گروه رنگ مناسب قرار می گیرد و می فهمد که CA به صورت رنگ فیروزه ای، N آبی و غیره است.

۶,۲,۴ Color scale

چندین روش رنگ آمیزی، از جمله "Charge"، "Beta" و "Occupancy"، طیف وسیعی از مقادیر نقطه مختلفی را به جای مجموعه ای از نام ها توصیف می کنند. اینها از طریق مقیاس رنگی، که لیستی از ۱۰۲۴ رنگ است که به راحتی تغییر می کند، رنگ می شوند. درجه بندی رنگ های زیادی در دسترس است. همه آنها از تحولات سه رنگ تشکیل شده است. به عنوان مثال، "RGB" کوچکترین مقدار قرمز را رنگ می کند، مقادیر نزدیک وسط سبز و بزرگترین مقادیر آبی هستند. رنگ های میان هم مخلوط های خطی از دو رنگ هستند. لیست درجه بندی موجود در زیر آورده شده است.

حداقل دامنه مقادیر به صورت خطی مقیاس بندی شده و تغییر یافته است تا از ۰ شروع شود و در ۱ پایان یابد. فرض کنید مقیاس رنگ RGB است. برای مقدار معین x در دامنه مقیاس [۰..۱]، مقدار RGB ابتدا از مقیاس خطی بر اساس نقطه میانی یافت می شود. اگر $x = 0$ باشد، R برابر ۱ (برای حداکثر قرمز) است. این به صورت خطی تا $x = \text{midpoint}$ ، که در آن نقطه، R صفر است و ۰ باقی می ماند ادامه می یابد. مؤلفه سبز ۰ است در هر دو $x = 0$ و $x = 1$ و در نقطه میانی است. مقیاس بندی خطی در بین رخ می دهد. مؤلفه آبی ۰ برای $x \leq \text{midpoint}$ و ۱ برای $x = 1$ است.

اصطلاح اضافی "min" قبل از ادغام، به هر یک از اصطلاحات عناصر اضافه می شود. این رنگ های نهایی را بیشتر به سمت سفید یا سیاه تغییر می دهد. "min" می تواند مقادیر را از ۱- تا ۱ به دست آورد.

Category	contents
Display	Color of background, gradient, depth cueing, text
Axes	The components of the axes
Name	The available atom names (color by Name)
Type	The available atom types (color by Type)
Element	Atomic elements (color by Element), with "X" for unknown
Resname	The residue names (color by ResName)
Restype	The residue types (color by ResType)
Chain	The one-character chain identifier.
Segname	The segment names (color by SegName)
Conformation	The available conformation codes (color by Conformation)
Molecule	The names assigned to each molecule (color by Molecule)
Highlight	The protein, nucleic, and non-backbone colors
Structure	The secondary structure type (helix, sheet, coil) (color by Structure)
Surface	The surface types
Lables	The different labels (atoms, bonds, etc.)
Stage	The colors for the checkboard stage

جدول ۶.۲: دسته بندی رنگ مورد استفاده در VMD

اکثر روش های رنگ آمیزی بر اساس دسته بندی رنگ ها انجام می شود، بنابراین رنگ آمیزی "ResName" هر رزیدو را متفاوت رنگ آمیزی می کند، "SegName" هر بخش را به طور متفاوتی رنگ می کند و غیره. برآورد بین یک مورد خاص در یک گروه رنگ و یک رنگ که می تواند با استفاده از پنجره Color [۵/۴/۹] قابل تغییر باشد.

این به کاربران اجازه می دهد تا اتم هایی با نام CA سیاه رنگ و رزیدو CYS زرد باشند. توجه خاصی به منطقی بودن رنگ ها شده است، به طوری که اکسیژن ها قرمز، نیتروژن های آبی، گوگرد و سیستئین های زرد و غیره هستند.

فقط از یک مقیاس رنگ استفاده می شود در یک زمان، بنابراین نمایش اشیاء رنگی توسط مقیاس های مختلف رنگی غیر ممکن است.

Materials ۶,۲,۵

VMD به کاربران اجازه می دهد تا یک خاصیت مواد را در مدل های مولکولی ایجاد شده اعمال کنند. این ماده مواردی را تعیین می کند که یک شیء چقدر شفاف است، یا چقدر براق است، یا بازتاب های آن چقدر بزرگ است. ساختن اشیاء نیمه شفاف یک وسیله بالقوه قدرتمند برای مشاهده همزمان چندین لایه از مولکول است. پروتئینی را روی سطح غشایی تصور کنید و بخشی از آن را گسترش دهید. یکی از راه های تجسم میزان نفوذ، نشان دادن چربی ها به عنوان "باند" و شفاف سازی آنها است. این امر غشا را بدون اینکه بطور کامل برای مشاهده پروتئین مانع ایجاد کند، نشان می دهد. VMD بانک اطلاعاتی از مواد را که می تواند برای هر بازنمایی در سیستم استفاده شود، دقیقاً مانند بانک اطلاعاتی رنگ ها، در اختیار دارد. دو ماده پیش فرض وجود دارد، "Opaque" و "Transparent" که قابل اصلاح نیستند. هر ماده با پنج وضعیت به شرح زیر تعریف می شود:

Method	Description
RWB	small=red, middle=white, large=blue
BWR	small=blue, middle=white, large=red
RGryB	small=red, middle=gray, large=blue
BGryR	small=blue, middle=gray, large=red
RGB	small=red, middle=green, large=blue
BGR	small=blue, middle=green, large=red
RWG	small=red, middle=white, large=green
GWR	small=green, middle=white, large=red
GWB	small=green, middle=white, large=blue
BWG	small=blue, middle=white, large=green
BlkW	small=black, large=white
WBlk	small=white, large=black

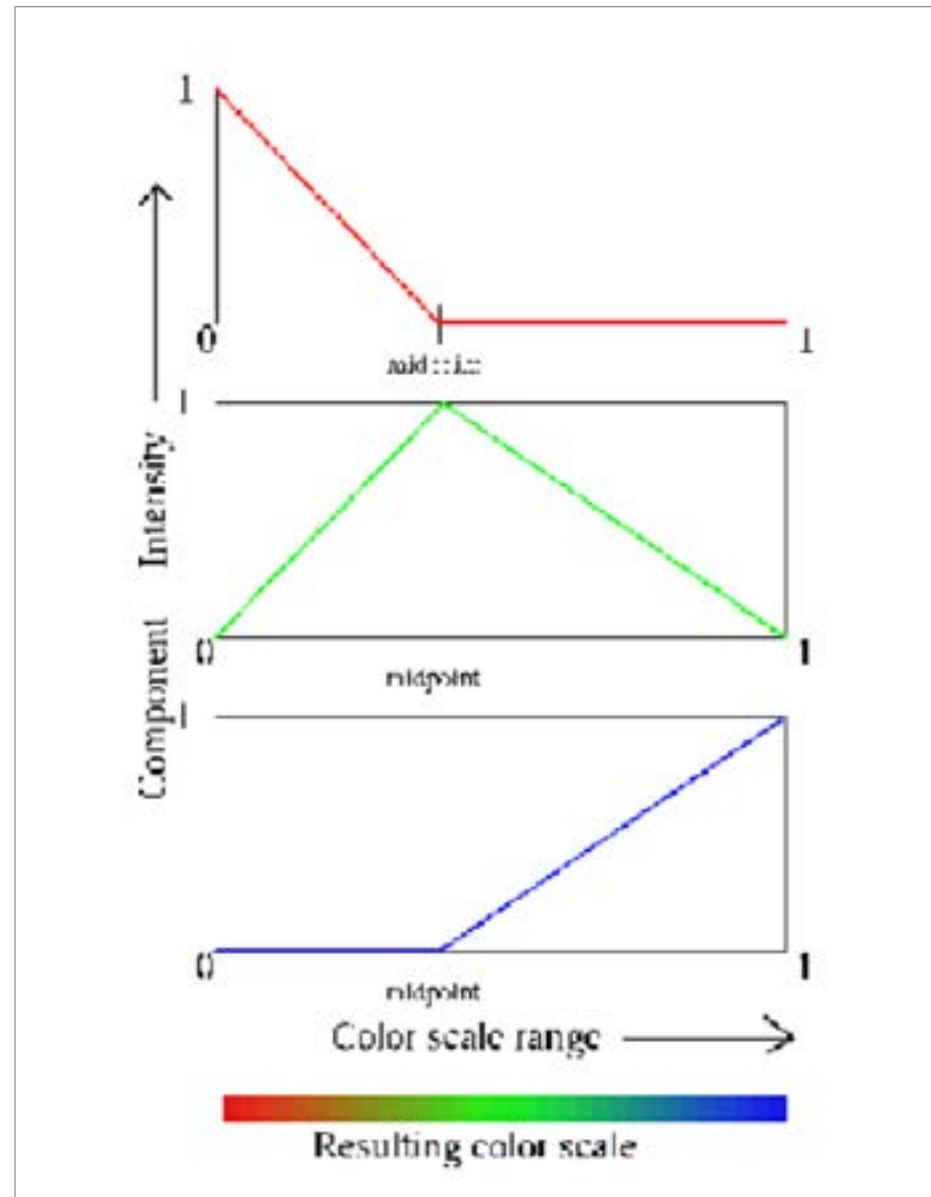
جدول ۶.۴: درجه بندی مقیاس رنگ در دسترس

Ambient: ضریب محیط اینکه چقدر قوی آن مواد نور محیط را منعکس می کند، توصیف می شود.

Method	Description
Name	Atom name, using the Name category
Type	Atom type, using the Type category
Element	Atomic element, using the Element category
ResName	Residue name, using the Resname category
ResType	Residue type, using the Restype category
ResID	Residue identifier, using the resid mod 16 for the color
Chain	The one-character chain identifier, using the Chain category
SegName	Segment name, using the Segname category
Conformation	Conformation, e.g. PDB alternate location identifier
Molecule	Molecule all one color, using the Molecule category
Structure	Helix, sheet, and coils are colored differently
ColorID	Use a user-specified color index (from 0 to 15)
Beta	Color scale based on beta value of the PDB file
Occupancy	Color scale based on the occupancy field of the PDB file
Mass	Color scale based on the atomic mass
Charge	Color scale based on the atomic charge
Pos	Color scale based on radial distance from the molecule center
PosX, PosY, PosZ	Color scale based on axial distance from the molecule center
User, User2, User4	Color scale assigned by per-atom values for each timestep
PhysicalTime, Timestep	Color scale based on the physical (simulation) time or timestep index associated with the displayed trajectory frame
Velocity	Color scale based on the per-atom velocity value associated with the displayed trajectory frame
Fragment	Color scale based on the VMD fragment index
Index	Color scale based on the VMD atom index
Backbone	Backbone atoms green, everything else is blue
Throb	Color scale animated by the current wall clock time
Volume	Surfaces are colored by the linked volumetric data set

جدول ۶.۳: روش های رنگ آمیزی مولکولی

نور محیط یک نور یکسان از اشیاء با نور پس زمینه از رنگ جسم را ارائه می دهد. به طور کلی ضریب نور محیط برای تعدیل اثر سایه ها از روشنایی مستقیم استفاده می شود و سایه ها کمتر از آنچه خواهند بود تاریک می شوند.



تصویر ۶-۱: مثال‌ها نشان دهنده‌ی شیب رنگ‌های قرمز / سبز / آبی است که برای تولید مقیاس رنگ خلاصه می‌شود.

✓ Diffuse: بازتاب‌های پراکندگی مستقل از جهت مشاهده هستند، اما با توجه به سطح شیء نمایش داده شده به جهت منبع نور بستگی دارند.

✓ Specular: ضریب Specular شدت نقاط انتخاب شده Specular را توصیف می‌کند. هرچه مقدار Specular بیشتر باشد، نقاط انتخابی روشن‌تر می‌شوند.

✓ Shininess: ضریب درخشندگی وسعت زاویه بازتاب specular را توصیف می‌کند. هرچه این عدد کوچکتر باشد، زاویه آن نیز گسترده‌تر و اجسام سخت‌تر ظاهر می‌شود. هرچه مقدار درخشندگی بیشتر باشد، زاویه بازتاب specular باریک‌تر و سطح آن صاف‌تر می‌شود. پیش فرض با نمایه Phong^{۴۰} مطابقت دارد.

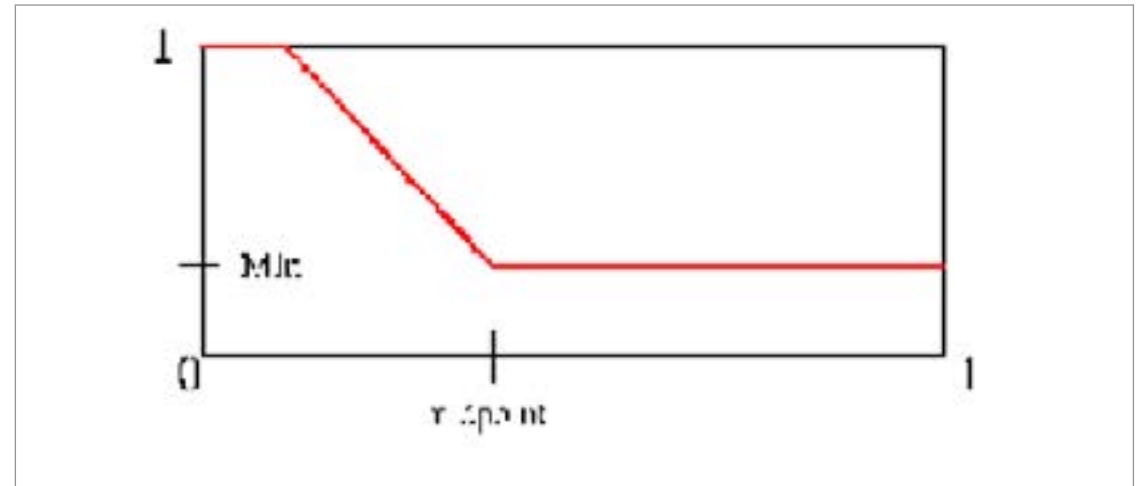
✓ Mirror: ضریب آینه بازتاب پذیری آینه یک سطح را توصیف می‌کند. هنگامی که صحنه با استفاده از ردیابی اشعه ارائه می‌شود، سطوح دارای بازتاب پذیری آینه انعکاس‌هایی شبیه به سطح فلزی براق و آینه مانند نشان می‌دهند.

✓ Opacity: ضریب کدورت اینکه چقدر سطح مات است را توصیف می‌کند. ۱ جامد است، ۰ شفاف است. به طور پیش فرض، اشیاء شفاف با کدورت ۰٫۳ رسم می‌شوند.

✓ Outline: ضریب outline، سایه‌های لبه‌های بصورت یکدست سیاه شده را کنترل می‌کند، لبه‌های قابل مشاهده سطوح را تاریک می‌کند که تقریباً عمود بر جهت مشاهده دوربین است. پارامتر outline میزان سایه زنی لبه‌ها (تیرگی) را نشان می‌دهد.

✓ OutlineWidth: ضریب پهنای باند، عرض زاویه‌ای که حدوداً عمود بر لبه محیط مرئی که سایه دار است، کنترل می‌کند.

برای جزئیات بیشتر در مورد این خواص مواد، از کتاب گرافیک مقدماتی مانند Foley & Van Dam (گرافیک رایانه) راهنمایی بگیرید.



تصویر ۶-۲: تغییر در مولفه‌ی قرمز رنگ مقیاس RGB بر حسب مقدار "min"

۶,۳ Selection Methods

VMD یک زبان انتخاب نسبتاً قدرتمند در دسترس اتم دارد. این فرض بر پایه این است که هر اتم مجموعه‌ای از مقادیر مرتبط با آن را دارد که از طریق کلمات کلیدی قابل دستیابی است. این مقادیر می‌توانند بولین باشند (آیا این یک اتم پروتئین است؟)، عددی (مانند شاخص اتم یا جرم اتمی) یا رشته (نام اتم). مقادیر را می‌توان حتی از طریق یک آرایه Tcl ارجاع داد. برای شروع، در اینجا چند نمونه از دستورات انتخاب معتبر در VMD آورده شده است. در ادامه این موارد توضیحات عمیق‌تری درباره نحوه عملکرد انتخاب‌ها ارائه می‌شود.

```
name CA
resid 35
name CA and resname ALA
backbone
not protein
protein (backbone or name H)
name 'A 1'
name 'A *'
name "C.*"
mass < 5
numbonds = 2
abs(charge) > 1
x < 6 and x > 3
sqr(x-5)+sqr(y+4)+sqr(z) > sqr(5)
within 5 of name FE
exwithin 3 of protein
protein within 5 of nucleic
same resname as (protein within 5 of nucleic)
protein sequence "C..C"
name eq $atomname
```

دو نوع حالت انتخاب وجود دارد. اولین کلمه کلیدی است که به دنبال آن لیستی از مقادیر یا طیف وسیعی از مقادیر قرار دارد. مثلاً،

name CA

تمام اتم‌ها را با نام CA انتخاب می‌کند (که می‌تواند C آلفا یا کلسیم باشد).

resname ALA PHE ASP

همه اتم‌ها را در آلانین، فنیل آلانین یا آسپاراژین انتخاب می‌کند.

index 5

اتم ششم را انتخاب می‌کند (در طرح شماره گذاری داخلی VMD). VMD همچنین می‌تواند انتخاب‌های محدوده‌ای را انجام دهد، شبیه به نماد ':' در X-PLOR's

mass 5 to 11.5

اتم‌هایی با جرم بین ۵ تا ۱۱٫۵ را شامل می‌شود،

resname ALA to CYS TYR

اتم‌های آلانین، آرژنین، آسپاراژین، اسید آسپارتیک، سیستین و همچنین تیروزین را انتخاب می‌کند.

انتخاب کلید واژه با چک کردن هر اصطلاح در لیست زیر کلمه کلیدی کار می‌کند. این اصطلاح یا یک کلمه واحد است (به عنوان مثال، نام CA) یا یک دامنه (به عنوان مثال ۳۵ تا ۹۰).

روش تعیین دامنه از نوع داده کلمه کلیدی تعیین می‌شود. مقایسه عددی متفاوت از مقایسه رشته است. مقایسه باید مطابق آنچه انتظار می‌رود عمل کند به گونه‌ای که "۸" بین "۱" و "۱۱" در یک زمینه عددی امانه در یک رشته باشد. این ممکن است منجر به برخی از مشکلات عجیب و غریب شود. برخی از کلمات کلیدی، مانند segname، می‌توانند مقادیر رشته‌ای را بدست آورند، اما می‌توانند توسط بعضی از افراد به عنوان فیلد شماره استفاده شوند. فرض کنید شخصی زمینه segname با اعداد ۱ تا ۱۲ به فرض اینکه عدد باشد، برچسب گذاری کند. آن شخص نسبت به این موضوع سردرگم می‌شود که می‌گوید segname ۱ تا ۱۱ فقط دو بخش را برمی‌گرداند. همچنین، رشته‌ها (از طریق atof()) به یک عدد تبدیل می‌شوند بنابراین اگر رشته عددی نباشد، مقدار ۰ داده می‌شود. می‌توان با اعمال جستجو در یک رشته یا زمینه عددی را انجام داد با استفاده از عملگر رابطه‌ای که در ۶-۳ بحث شده است.

انتخاب‌ها را می‌توان با عملگرهای بولی ترکیب کرد و یا در داخل پرانتز جمع‌آوری کرد و توسط آن اصلاح نکرد، زیرا

(name CA or name CB) and mass 12 to 17

در آن همه اتم‌ها به نام CA یا CB انتخاب می‌شوند و دارای توده‌هایی بین ۱۲ تا ۱۷ amu هستند (این می‌تواند برای تشخیص کربن آلفا از یک کلسیم استفاده شود). VMD تقدم عملگر مشابه C دارد، بنابراین پرانتز را از عبارت قبلی خارج می‌کند، مانند:

name CA or name CB and mass 12 to 17

در واقع تمام اتم‌هایی به نام CA یا آن‌هایی که CB نامیده می‌شوند را انتخاب می‌کنند و از جرم مناسبی برخوردار هستند.

۶,۳,۱ Definition of Keywords and Functions

کلمات کلیدی موجود برای انتخاب اتم ها در VMD در جدولهای ۶,۵ و ۶,۶ در انتهای این فصل آورده شده است. اگر تعریف کلمه کلیدی توسط bool دنبال شود، این یا خاموش است یا روشن. اگر توسط str دنبال گردد به عنوان یک شاخص در زمینه رشته فهمیده می شود. اگر توسط num دنبال گردد به عنوان یک شاخص در زمینه عدد درک می گردد. جدول ۶,۷ توابع داخلی را که ممکن است در عبارات انتخاب اتم استفاده شود با کلمات کلیدی که دارای عددی هستند، آورده است. در جدول ۶,۸ کلمات کلیدی انتخاب اتم موجود است که ممکن است در عبارات انتخاب اتم مورد استفاده قرار گیرد تا از مقادیر نقشه حجمی زمینه ای در همان مولکول پرسیده شود. اینها فقط خواندنی هستند.

۶,۳,۲ Boolean Keywords

برخی از انتخاب ها هیچ ارزشی ندارند. به عنوان مثال، backbone اتم های محور پروتئین و اسیدهای نوکلئیک را انتخاب می کند و پروتئین اتم های پروتئین را انتخاب می کند. ارائه گزینه ها به این انتخاب ها یک خطا است. این انتخاب ها می توانند مانند روش های دیگر مورد استفاده قرار گیرند، مانند:

protein and backbone
nucleic or protein

بعلاوه، اگر بعد از یک کلمه کلیدی بولین and و or قرار نگرفته باشند، پس یک and ضمنی درج می شود، به گونه ای که موارد زیر معتبر است:

protein name CA (same as: protein and name CA)
nucleic backbone

۶,۳,۳ Short Circuiting

منطق بولین در VMD، ارزیابی مدار کوتاه را بر اساس اصول انجام می دهد. به عنوان مثال، با توجه به یک اتم، اگر X صحیح باشد، X یا Y بدون توجه به مقدار Y، واقعی خواهند بود، بنابراین نیازی به ارزیابی آن نیست. به طور مشابه، اگر X نادرست باشد، X و Y نیز نادرست خواهند بود، بنابراین مجدداً نیازی به ارزیابی نمی باشد. دانستن نحوه عملکرد چرخش کوتاه می تواند انواع مختلف انتخاب ها را سرعت ببخشد. سیستمی را با تعداد زیادی آب و پروتئین در نظر بگیرید. عبارت پروتئین و segname > ۱۰ سریعتر از segname > ۱۰

و پروتئین است زیرا در انتخاب اول فقط اتمهایی که پروتئین هستند، نام علامت را به یک عدد تبدیل می کنند، در حالی که در انتخاب دوم، تمام نامهای بخش تبدیل می شوند. انتخاب درونی شکل کوتاه اتصال خود را دارد. این دستور را می توان به عنوان "اتمهای A که فاصله معینی از B دارند، پیدا کرد" تعبیر کرد و اگر A داده نشده باشد، تمام اتم ها را جستجو کنید. جستجوی انجام شده در VMD زمان تقریباً متناسب با تعداد اتم های A ضرب شده توسط تعداد اتم های B می گیرد، بنابراین کاهش تعداد اتم ها در A (یعنی با آزمایش نکردن هر اتم) جستجو را سریعتر می کند. با استفاده از سیستم با آب و پروتئین زیاد، انتخاب را با هم مقایسه کنید

protein within 5 of resid 1

به

(within 5 of resid 1) and protein.

مورد اول بسیار سریع است زیرا بین تمام اتمهای پروتئین و تمام اتمهای رزیدو فاصله دارد. با این حال، انتخاب دوم تمام اتمها را برای آنهایی که در ۵ درجه A رزیداند جستجو می کند و سپس می یابد که کدام یک از اینها اتمهای پروتئینی هستند.

۶,۳,۴ Quoting with Single Quotes

VMD به دو نوع مکانیسم اقتباس، اقتباس های تکی و دوتایی اجازه می دهد. اقتباس های تکی برای فضاها و سایر کاراکترهای غیر الفبایی استفاده می شود. باور کنید یا نه، برخی از اسامی رزیدو با فضایی در آنها وجود دارد، بنابراین می توان به آنها اشاره کرد، به عنوان مثال،
resname 'A 1'
از همه مهمتر، می توان به اتم های ریبوز نام هایی مانند C۵ و یا C۵* (بسته به دوره ی ثبت PDB) داد. واژگان در VMD اصلاح شده است به گونه ای که می توان C۵، O، ' و N' را بدون نشانه ۱۴ استفاده کرد، اما نمی تواند یک ستاره بدون نشانه را کنترل کند (*) در تضاد با ضرب است و بخش تحلیل کننده قادر به حل اختلاف نیست). مثالها عبارتند از:

name 'O5*'
segname 'A *'
name O5'

همچنین ممکن است از نشانه ها برای یافتن کلمه انتخابی رزرو شده مانند x استفاده شود. فرمان انتخاب گزینه segname x خطایی به شما می دهد زیرا x کلمه کلیدی دیگری است. در عوض، از 'segname' X استفاده کنید. مکانیسم فرار برای گنجاندن اقتباس های واحد در داخل یک رشته اقتباس منفرد وجود دارد که از backslash ("") قبل از اقتباس واحد استفاده می کند. این اجازه می دهد تا نامهای غیر معمول مانند C به عنوان "\C" ذکر شود.

```
segname x <---- error; conflicts with the 'x' keyword
segname 'x'
name 'O5\'
```

همچنین، از اکتباس های مضاعف (در قسمت بعدی مورد بحث قرار می گیرد)، مانند "C" یا "C" استفاده می شود.

Double Quotes and Regular Expressions ۶,۳,۵

برای تعیین یک جستجوی منظم عبارت (برای سازگاری با Perl ۵.۰۰۵، با استفاده از کتابخانه عبارات منظم سازگار با پِریل که توسط فیلیپ هازل ۱۵ نوشته شده است) از دو اکتباس در اطراف یک رشته استفاده می شود. اگر نمی دانید چگونه از آنها استفاده کنید، برای ed، egrep، vi یا regex با اومشورت کنید. اگر اینطور نیست، اسناد مربوط به پِریل را بخوانید، یا به تعدادی از کتاب ها از جمله کتاب O'Reilly and Associates Sed and Awk بروید. مثال های زیر فقط چند روش را نشان می دهد که می توان از عبارات عادی در VMD استفاده کرد.

انتخاب همه اتمها با نامی که از C شروع می شود:

```
name "C.*"
```

نام علامت شامل یک شماره:

```
segname "[0-9]+.*"
```

چندین اصطلاح را می توان در لیست کلمات کلیدی مطابق ارائه داد. این مثال رزیدو از A، رزیدوهای گلیسین و رزیدوهای T را انتخاب می کند. مانند یک رشته، یک عبارت معمولی در یک زمینه عددی به یک عدد صحیح تبدیل می شود که همیشه صفر خواهد بود:

```
resname "A.*" GLY ".*T"
```

انتخاب های حاوی کاراکترهای خاص مانند +، -، یا * باید با کاراکتر \ اصلاح شوند. برای انتخاب اتمهایی به نام Na+، از این انتخاب استفاده می شود:

```
name "Na\+"
```

به طور خلاصه، یک انتخاب منظم، به جای فقط یک کاراکتر، امکان تطبیق با چندین فرصت را فراهم می کند. در جدول ۶/۹ برخی از روش هایی که قابل استفاده هستند نشان می دهد.

روش های زیادی برای انجام برخی انتخاب ها وجود دارد. به عنوان مثال، انتخاب اتمهایی با نام CA یا CB به روش های زیر قابل انجام است:

```
name CA CB
name "CA|CB"
```

```
name "C[AB]"
name "C(A|B)"
```

چندین احتیاط برای کسانی که قبلاً عبارات منظم را درک می کنند. VMD به طور خودکار "^(را اضافه می کند و "\$ را به رشته انتخاب اضافه می کند. این باعث می شود که انتخاب O فقط با O مطابقت داشته باشد و نه OG یا PRO. از طرف دیگر، قرار دادن ^ و \$ در دستور واقعاً بر هر چیزی تأثیر نمی گذارد، انتخاب هایی که با یک بستر مطابقت دارند باید از قبل آن و بعد آن توسط ""* مانند O.*. آن استفاده شوند و بعضی از انتخاب های غیرمجاز به طور صحیح می توانند دنبال شوند، اما عجیب و غریب، مانند (O)|(C)، که به ^ (O)|(C) تبدیل می شود و با هر چیزی که از C شروع می شود یا با O پایان می یابد مطابقت دارد.

یک عبارت منظم شبیه به تطبیق علائم هماهنگی در X-PLOR است. جدول ۶/۱۰ لیستی از تبدیل علائم هماهنگی X-PLOR به معادل آن عبارت منظم است.

Comparison selections ۶,۳,۶

از مقایسه هایی می توان در VMD برای انجام انتخاب اتم ها مانند جرم >۵ استفاده کرد، که اتم هایی با جرم کمتر از ۵ amu را انتخاب می کنند و معادل CA را نام می برند، که روش دیگری برای انتخاب اتم های CA است. ایده اصلی برای انتخاب مقایسه نیز مبتنی بر این مفهوم است که هر اتم دارای خاصیتی است که توسط یک کلمه کلیدی مشخص شده است. هنگامی که کلمه کلیدی در عبارت آورده شده است، آرایه (یا بردار) مقادیر مربوطه ساخته می شود و اندازه آرایه همان تعداد اتم های موجود در مولکول است. (اگر به جای یک کلمه کلیدی یک عدد یا رشته داده شده باشد، آرایه از نسخه هایی از آن مقدار معین تشکیل شده است.) عملیات مانند اضافه کردن، ضرب، تطبیق رشته و مقایسه، سپس در طول آرایه به صورت ابتدایی انجام می شوند. این نوع انتخاب مشابه جمله بردار در X-PLOR است.

از جرم نمونه >۵ در هنگام استفاده بر روی آب استفاده کنید، که اکسیژن جرم ۱۵/۹۹۹۴ دارد و دو هیدروژن جرم ۱/۰۰۸ دارد. VMD کلمه کلیدی را می بیند و آرایه را می سازد [۱۵/۹۹۹۴، ۱/۰۰۸، ۱/۰۰۸]، سپس "۵" را می بیند و آرایه را می سازد [۵، ۵، ۵]. سپس هر اصطلاح آرایه را با هم مقایسه می کند و با آرایه بولی [False، True، True] باز می گردد (از آنجا که از ۱۵/۹۹۹۴ کمتر از ۵ نیست بلکه ۱/۰۰۸ است). سپس این آرایه بولی نهایی برای تعیین اینکه کدام اتم انتخاب شده اند، استفاده می شود. در این حالت، هیدروژن ها.

انتخاب های مقایسه پیچیده تر، می توانند از طریق عملیات محاسبات یا با استفاده از برخی از توابع ریاضی استاندارد ساخته شوند (توابع در جدول ۶/۷ ذکر شده اند). احتمالاً بیشترین کاربرد تابع sqr است که هر عنصر آرایه را مربع می دهد. بنابراین، دستور انتخاب همه اتم ها در ۵ درجه A از یک نقطه (x,y,z) = (۵,۳,۴) در فضا است:

$\text{sqr}(x-3)+\text{sqr}(y-4)+\text{sqr}(z+5) \leq \text{sqr}(5)$
6.3.7 Comparison Operators

دو نوع عملگر مقایسه وجود دارد - عددی و رشته ای - که به کاربر امکان می دهد عملکرد مقایسه مناسب را مشخص کند. فرض کنید نام علامت، که یک مقدار رشته را شامل می شود، دارای اسامی '۱۱' و '۸' است. VMD نمی تواند تشخیص دهد که آیا '۸' باید کمتر از '۱۱' (به معنای عددی) یا بیشتر از '۱۱' باشد (به معنای واژه گرافی). به جای تلاش برای حل این مشکل از طریق نوعی اکتشاف داخلی، VMD آن را در اختیار کاربر قرار می دهد تا $8 < 11$ اما $8 \text{ Lt } 11$. (کاربران Perl باید این راه حل را تشخیص دهند.) مقایسه عددی نمونه های استاندارد است: $>$ ، $=>$ ، $=$ یا $==$ ، $<$ ، $<=$ ، و $!$. مقایسه رشته مربوطه عبارتند از: `ne`، `lt`، `le`، `eq`، `ge`، `gt`. همانطور که در perl یک اپراتور "معادل" وجود دارد، $\sim$ ، بنابراین معتبر هستند. `'CA' =~ "C.*"` `segname =~ "VP[1-4]"` (matches VP1, VP2, VP3, and VP4, present in some virus structures)

هیچ تفاوتی بین نشانه تکی و دوتایی وجود ندارد.

Other selections ۶,۳,۸

توالی

VMD از انتخاب بر اساس توالی تک حرفی اسید آمینه با کلید واژه انتخاب توالی پشتیبانی می کند. این امر امکان انتخاب فرم را فراهم می آورد

sequence APD
sequence "C..C" (might be used to pick out zinc fingers)
sequence AATCGGAT

بر خلاف دستورات انتخاب رشته دیگر که یکی از سه نوع رشته را به خود اختصاص می دهند، تمام رشته های دنباله به صورت عبارات منظم گرفته می شوند (اگرچه برای بدست آوردن از تجزیه کننده ورودی، رشته ها با حروف غیر الفبایی هنوز هم باید اقتباس شوند). این روش با گرفتن هر یک از قطعات پروتئین و اسید نوکلئیک (pfrag و nfrag) به نوبه خود و ساخت توالی اسید آمینه یک حرف می باشد. اگر یک عبارت منظم با هر یک از دنباله ها مطابقت داشته باشد، اتم های موجود در رزیدوهای مطابق انتخاب می شوند. مطابقت های چندگانه اجازه داده می شود، اگرچه نمی توانند همپوشانی داشته باشند. مطابق معمول با عبارات معمولی، بیشترین تطبیق ممکن انجام می شود، بنابراین به عباراتی مانند `C.*` دقت کنید.

within and same

دو نوع مفید از مکانیسم های انتخاب موجود در VMD عبارتند از: در `<number>` از `<selection>` و همان `<کلید واژه>` به عنوان `<انتخاب>`. اول همه اتم ها را در فاصله مشخص (در $^{\circ}$ A) از یک انتخاب،

از جمله خود انتخاب، انتخاب می کند. بنابراین، دستور:

FE within 5 of name

تمام اتم ها را در 5° درجه A از اتم های FE انتخاب می کند. یکی از کاربردهای رایج برای این دستور محدود کردن ناحیه اتمهای نمایش داده شده روی صفحه است. دیگری یافتن اتمهایی که ممکن است در تعامل باشند. برای مثال:

protein within 5 of nucleic

اتمهای پروتئینی را که در نزدیکی اسیدهای نوکلئیک قرار دارند پیدا می کند. برخی از انتخاب ها ممکن است با اتصال کوتاه سرعت بیشتری پیدا کنند [۳/۳,۶].

یک ساختار انتخاب اتم مربوطه exwithin، اختصاری برای 'exclusive within' است. انتخاب اتم (within 3° protein) and not protein within 3° of protein) معادل با exwithin 3° of protein است.

همان `<keyword> as <selection>` تمام اتمهایی را که دارای همان "کلمه کلیدی" هستند به عنوان اتم های انتخاب شده پیدا می کند. این می تواند برای انتخاب هایی مانند

same fragment as resid 35

که تمام اتم های متصل به رزیدو 35° را می یابد، استفاده شود. از هر کلید واژه ای می توان استفاده کرد، بنابراین انتخاب هایی مانند

same resname as (protein within 5 of nucleic)

هرچند عجیب و غریب هستند خوب هستند. شاید مفیدترین کلید واژه برای این دستور، residue باشد شما می توانید بگویید ...same residue as

Finding contact residues

فرض کنید می خواهید اتمهای "A" را که با اتمهای "B" در تماس هستند مشاهده کنید. از دستور `<distance>` درون گزینه انتخاب `<selection>` استفاده کنید. برای اهداف نمایشی، بگذارید A پروتئین باشد، B نوکلئیک اسید باشد و تماس معین را به عنوان اتمی که در آن A در 2° A اتم B قرار دارد، تعریف کنیم. پس دستور انتخاب هست

protein within 2 of nucleic

اگر می خواهید تمام رزیدوهای A که حداقل با یک اتم B تماس دارند را ببینید، استفاده کنید از

same residue as (protein within 2 of nucleic)

radius	float	x, y, or z coordinates
beta	float	atomic radius
occupancy	float	atomic mass
user	bool	atomic charge
at	bool	time-varying user-specified value
acidic	bool	residues named ADA A THY T
acyclic	bool	residues named ASP GLU
aliphatic	bool	“protein and not cyclic”
alpha	bool	residues named ALA GLY ILE LEU VAL
amino	bool	atom’s residue is an alpha helix
aromatic	bool	a residue with atoms named C, N, CA, and O
basic	bool	residues named HIS PHE TRP TYR
bonded	bool	residues named ARG HIS LYS
buried	bool	atoms for which numbonds > 0
cg	bool	residues named ALA LEU VAL ILE PHE CYS MET TRP
charged	bool	residues named CYT C GUAG
cyclic	bool	“basic or acidic” 85
hetero	bool	residues named HIS PHE PRO TRP TYR
hydrogen	bool	“not (protein or nucleic)”
large	bool	name “[O-9]?H.*”
medium	bool	“protein and not (small or medium)”
neutral		residues named VAL THR ASP ASN PRO CYS ASX PCA HYP
	bool	residues named VAL PHE GLN TYR HIS CYS MET TRP ASX GLX PCA
polar	bool	HYP
purine	bool	“protein and not hydrophobic”
pyrimidine	bool	residues named ADE A GUAG
small	bool	residues named CYT C THY T URI U
surface	str	residues named ALA GLY SER
rasmol	bool	“protein and not buried”

Keyword	Arg	Description
all	bool	Everything
none	bool	Nothing
name	str	Atom name
type	str	Atom type
index	num	the atom number, starting at 0
serial	num	the atom number, starting at 1
atomicnumber	num	atomic number (0 if undefined)
element	str	atomic element symbol string ('X' if undefined)
altloc	str	alternate location/conformation identifier
chain	str	the one-character chain identifier
residue	num	a set of connected atoms with the same residue number
protein	bool	a residue with atoms named C, N, CA, and O
nucleic	bool	a residue with atoms named P, O1P, O2P and either O3', C3', C4', C5', O5' or O3*, C3*, C4*, C5*, O5*. This definition assumes that the base is phosphorylated, an assumption which will be corrected in the future.
backbone	bool	the C, N, CA, and O atoms of a protein and the equivalent atoms in a nucleic acid.
sidechain	bool	non-backbone atoms and bonds
water,	bool	all atoms with the resname H2O, HH0, OHH, HOH, OH2, SOL, WAT,
waters	num	TIP, TIP2, TIP3 or TIP4
fragment	num	a set of connected residues
pfrag	num	a set of connected protein residues
nfrag	str	a set of connected nucleic residues
sequence	num	a sequence given by one letter names
numbonds	str	number of bonds
resname	num	residue name
resid	str	residue id
segname	float	segment name
x, y, z	float	

Function	Description
sqr(x)	square of x
sqrt(x)	square root of x
abs(x)	absolute value of x
floor(x)	largest integer not greater than x
ceil(x)	smallest integer not less than x
sin(x)	sine of x
cos(x)	cosine of x
tan(x)	tangent of x
atan(x)	arctangent of x
asin(x)	arcsin of x
acos(x)	arccos of x
sinh(x)	hyperbolic sine of x
cosh(x)	hyperbolic cosine of x
tanh(x)	hyperbolic tangent of x
exp(x)	"e to the power x"
log(x)	natural log of x
log10(x)	log base 10 of x

جدول ۶.۷: توابع انتخاب اتم

Function	Arg	Description
volN	float	value of the voxel of the volumetric data of ID N nearest to the atom
interpvolN	float	interpolated value of the voxels of the volumetric data of ID N around the atom

جدول ۶.۸: کلمه کلیدی‌های انتخابی اتم فقط خواندنی ۱۶ که برای مقادیر مورد سوال نقشه حجمی پایه‌ای در مولکول یکسان ممکن است استفاده شود. میزان N، که می‌تواند به طور کلی از ۰ تا ۷ باشد، اشاره به volID اطلاعات حجمی پایه‌ای (به عنوان مثال، می‌توانید interpvol۲ را تایپ کنید.) کلمات کلیدی انتخابی اتم فقط خواندنی برای اطلاعات حجمی مورد جستجو

alpha helix	bool	translates Rasmol selection string to VMD
pi helix	bool	atom's residue is in an alpha helix
helix 3-10	bool	atom's residue is in a pi helix
helix	bool	atom's residue is in a 3-10 helix
extended beta	bool	atom's residue is in an alpha or pi or 3-10 helix
bridge beta	bool	atom's residue is a beta sheet
sheet	bool	atom's residue is a beta sheet
turn	bool	atom's residue is a beta sheet
coil	str	atom's residue is in a turn conformation
structure	float	atom's residue is in a coil conformation
phi, psi	str	single letter name for the secondary structure
within		backbone conformational angles
	str	selects atoms within a specified distance of a selection (i.e within 5 of
exwithin	str	name FE).
same		exclusive within, equivalent to (within 3 of X) and not X.
	num	selects atoms which have the same keyword as the atoms in a given
ufx, ufy, ufz		selection (i.e. same segname as resid 35)
		force to apply in the x, y, or z coordinates

جدول ۶.۶: کلمه کلیدی‌های انتخابی اتم‌ها

Symbol	Example	Definition
.	., A.C	match any character
[]	[ABCabc], [A-Ca-c]	match any char in the list
[~]	[~Z], [~XYZ], [^x-z]	match all except the chars in the list
^	^C, ^A.*	next token must be the first part of string
\$	[CO]G\$	prev token must be the last part of string
*	C*, [ab]*	match 0 or more copies of prev char or regular expression token
+	C+, [ab]+	match 1 or more copies of the prev token
\	C\ O	match either the 1st token or the 2nd
\(\)	\(CA\)+	combines multiple tokens into one

جدول ۶.۹: روش های بیان منظم

X-PLOR Wildcard	Description	Regular Expression
*	matches any string	.*
%	matches a single character	.
+	matches any digit	[0-9]
#	matches any number	[0-9]+

جدول ۶.۱۰: مبدل های بیان منظم

مدها یا حالت های مشاهده (Viewing Modes) مختلف زیادی در دسترس است. این حالت ها را در نماهای ارتوگرافیک یا چشم انداز و در چندین نمایش تک و استریوگرافیکی نشان می دهد. حالت استریو را می توان با استفاده از ورودی stereo در منوی Display یا با وارد کردن دستور متن display stereo mode تغییر داد.

۷,۱ Perspective/Orthographic views

در نمای سه بعدی (پیش فرض)، اشیاء ای که بسیار دور هستند، کوچکتر از موارد اطراف هستند. از نظر ارتوگرافی، همه اشیاء در همان مقیاس ظاهر می شوند. از آنجا که بعضی های یکی دیگر را ترجیح می دهند، هر دو گزینه در دسترس هستند. نماهای سه بعدی اطلاعات بیشتری در مورد عمق ارائه می دهد و اغلب مشاهده آنها ساده تر است زیرا از نماهای سه بعدی در زندگی واقعی استفاده می کنید. دیدگاه های ارتوگرافیک، مقایسه دو بخش از مولکول را بسیار ساده تر می کند، زیرا هیچ تردیدی در مورد چگونگی تأثیر این دیدگاه بر درک فاصله وجود ندارد.

۷,۲ Monoscopic Modes

هنگامی که به طور معمول به اشیاء نگاه می کنید، دو چشم شما تصاویر را کمی متفاوت مشاهده می کنند (زیرا در نقطه های مختلفی قرار دارند). مغز شما تصاویر را در کنار هم قرار می دهد تا یک دید کلیشه ای ایجاد کند. هنگام تولید یک تصویر واحد برای نمایشگر رایانه، محاسبات پیش فرض (حالت استریو خاموش) فرض می شود که یک چشم با محوریت بین دو نقطه وجود دارد. برای استریو، باید دید چشم چپ و راست به طور مستقل تولید شود. انتخاب حالت سمت چپ، دید چشم چپ را ایجاد می کند، در حالی که سمت راست دید چشم راست را ایجاد می کند. حالت های یکپارچه چپ و راست در هنگام صادر کردن صحنه ها به ردیاب های پرتوهای خارجی، بسیار مفید هستند.

۷,۳ Stereoscopic Modes

مولکول ها ممکن است به صورت استریو ارائه شوند، که می تواند ظاهر و محتوای بصری سیستم های نمایش داده شده را تا حد زیادی بالا ببرد. چندین قالب استریو در دسترس است:

- ✓ استریو چهار گانه، (با نام CrystalEyes در نسخه های قدیمی تر)، که به مانیتور با قابلیت استریو، صفحه ویدیوی استریو چهار گانه یا GPU، فرستنده های استریو و شیشه های استریو مجهز به لنزهای کریستال مایع یا قطبی نیاز دارد.
- ✓ استریو بالا / پایین؛
- ✓ استریو جانبی برای تصاویر چاپ شده از کاغذ؛
- ✓ HDTV استریو جانبی در کنار صفحه نمایش برای صفحه نمایش استریو تخت و تلویزیون
- ✓ استریو آنالیف (به مانیتور با قابلیت استریو، برد ویدیویی با استریو چهار گانه و عینک استریو سبک فیلم ترسناک نیاز دارد).

Chapter 7

فصل هفتم

مدهای مشاهده

Observed material

- ✓ تابلوی Checkerboard که به عنوان استریو خالی کردن خط نیز شناخته می شود، با شیشه های کرکره سازگار و پروژکتور DLP کار می کند.
- ✓ ستون لایه شده، با عینک کرکره سازگار و نمایشگرهای پانل LCD کار می کند.
- ✓ ردیف لایه شده، که به عنوان استریو خالی کردن خط نیز شناخته می شود، با شیشه های کرکره سازگار و نمایشگرهای پانل LCD کار می کند.

۷,۳,۱ Quad-buffered Stereo

استریو چهارگانه (با نام CrystalEyes) نامی است که در VMD برای حالت نمایش استریو چهارگانه با قالب بندی خودکار که در ایستگاه های کاری گرافیکی حرفه ای یافت می شود مورد استفاده قرار می گیرد. استریو چهارگانه معمولاً بالاترین کیفیت خروجی را دارد و بنابراین مطلوب ترین حالت استریو برای استفاده در صورت وجود است. از آنجا که استریو چهارگانه به حافظه ویدئویی بیشتری نیاز دارد و مدارهای همگام سازی نمایشگر ویژه، این حالت معمولاً فقط در GPU های حرفه ای مانند AMD FireGL، NVidia Quadro و محصولات مشابه موجود است. به طور معمول از این حالت برای هدایت شیشه های دیافراگم LCD با نمایشگر CRT، پنل های LCD ۱۲۰Hz یا انواع سیستم های پیشرفته استریو با کارایی بالا استفاده می شود.

حالت استریوی چهارگانه قالب چپ و راست چشم را فراهم می کند. این اجازه می دهد تا یک پنجره در استریو نشان داده شود، در حالی که تمام پنجره های دیگر به صورت عادی ظاهر می شوند. قبل از شروع VMD، صفحه نمایش باید در حالت استریو تنظیم شده باشد، با استفاده از ابزارهای مناسب سیستم عامل، می توانید قبل از راه اندازی VMD، حالت فیلم را تنظیم کنید. پس از تنظیم حالت نمایش مناسب، VMD را به صورت عادی شروع کنید و 'QuadBuffered stereo' را از منوی Display انتخاب کنید. تصویر باید به دو تصویر تاحدی بالای تصویر منتقل شود اما کمی متعادل شود.

۷,۳,۲ Side-By-Side and Cross-Eyed Stereo

استریو کنارهم به این معنی است که صفحه نمایش معمولی به دو نیمه تقسیم می شود، یک نمای چپ و یک نمای راست، هر یک نیمی از ناحیه نمایشگر اصلی را اشغال می کنند. هر نمایه، مولکولهای فعلی را از یک منظره اندک متفاوت، مطابق با چشم چپ و راست بیننده نشان می دهد. با این حال، تصاویر از هم جدا شده اند، بنابراین برای دیدن یک شیء سه بعدی باید چشم خود را تا زمانی که دو تصویر در بالای یکدیگر قرار دارند هدایت کنید و سپس بر روی تصویر حاصل تمرکز کنید تا زمانی که بتوانید آن را به صورت سه بعدی ببینید.

دو روش برای قرار دادن تصاویر وجود دارد. در wall-eyed استریو، تصویر چشم چپ در سمت چپ نمایشگر قرار دارد و تصویر چشم راست در سمت راست است. این یک روش استاندارد برای نمایش تصاویر استریو در نشریات است زیرا وقتی نمایشگر (در این حالت قطعه کاغذ) نزدیک به چشم است،

به خوبی کار می کند. به دلیل چشمان شما به همان روشی که اگر به دیوار دوردست نگاه کنید، به آن wall-eyed می گویند. در VMD، این روش به عنوان استریو "SideBySide" گفته می شود. در استریو با چشم متقاطع، تصویر چشم چپ در سمت راست نمایشگر قرار دارد و تصویر چشم راست در سمت چپ و از این رو نام متقابل است. این بیشتر برای نمایشگرهای دوردست (مانند طرح های در بالای سر) استفاده می شود زیرا عبور از چشم در آن محدوده بسیار ساده تر از استفاده از روش wall-eyed است - شما در حال مشاهده دیوار هستید. در VMD، این روش به عنوان استریو "CrossEyes" گفته می شود. این حالت توسط همه GPU پشتیبانی می شود.

۷,۳,۳ HDTV Side-by-side Stereo

این حالت استریو همان حالت استریوی جانبی به طور منظم است به جز اینکه نسبت ابعاد تصویر نمایش داده شده برای کار صحیح روی HDTV ها و نمایشگرهای صفحه صاف استریو مانند نمایشگرهای LCD DTI autostereoscopic تنظیم شده است. این حالت توسط همه GPU پشتیبانی می شود.

۷,۳,۴ Checkerboard Stereo

استریو Checkerboard با الحاق نمایش چشم چپ و راست روی هر پیکسل دیگر در صفحه نمایش، در یک الگوی checkerboard کار می کند. این نوع حالت نمایش استریوسکوپی با طیف وسیعی از پروژکتورهای DLP و تلویزیون در کنار شیشه های دیافراگم سازگار است. تنها مورد نیاز ویژه برای شتاب دهنده گرافیک این است که بافر استنسیل را ایجاد می کند که برای تولید ستون های متناوب در تصویر نهایی استفاده می شود. این حالت معمولاً توسط GPU های بازی ارزان قیمت پشتیبانی می شود.

۷,۳,۵ Column Interleaved Stereo

استریو Interleaved Stereo با درهم ریختن نماهای چشم چپ و راست در هر ستون عمودی دیگر در صفحه نمایش کار می کند. سخت افزار استریو آنها را به دو نمایشگر جداگانه تقسیم می کند یا ستون های یکنواخت یا عجیب را در همگام سازی با شیشه های دیافراگم جدا می کند، یا در غیر این صورت باعث می شود که در صورت نمایشگرهای اتوستروسکوپی، آنها فقط در یک یا چشم دیگر قابل مشاهده باشند. تنها مورد نیاز ویژه برای شتاب دهنده گرافیک این است که بافر استنسیل را ایجاد می کند که برای تولید ستون های متناوب در تصویر نهایی استفاده می شود. این حالت معمولاً توسط GPU های بازی ارزان قیمت پشتیبانی می شود.

۷,۳,۶ Row Interleaved Stereo

استریو Row Interleaved Stereo، همچنین به عنوان استریو لایه لایه شده یا استریو خالی کردن خط نیز گفته می شود، با درهم آمیختن نماهای چپ و راست چشم هر نمایشگر دیگری را در صفحه نمایش کار می کند. سپس سخت افزار استریو سیگنال درهم تنیده را رمزگشایی می کند و یا آنها را به دو نمایشگر جداگانه تقسیم می کند و یا اسکن های یکنواخت یا عجیب را خالی می کند تا فقط تصویر چشم چپ یا راست را همزمان نمایش دهد که عدسی دیافراگم به روش مناسب قطبی شود. تنها مورد نیاز ویژه برای شتاب دهنده گرافیک این است که بافر استنسیل را ایجاد می کند که برای تولید اسکن های متناوب در تصویر نهایی استفاده می شود. این حالت معمولاً توسط GPU های بازی ارزان قیمت پشتیبانی می شود.

۷,۳,۷ Anaglyph Stereo

استریو آناگلیف به استفاده از رنگ ها برای جدا کردن چشم چپ و راست از یکدیگر اشاره دارد. کاربر باید عینک هایی با لنزهای رنگی مانند عینک های قرمز مایل به آبی که در بعضی از نمایشگاه های فیلم های علمی تخیلی و وحشت پیدا می کند را بپوشد. استریو آناگلیف در مقایسه با استریو quad-buffered یک نقطه ضعف اساسی دارد، این است که ارائه رنگ آن به شدت محدود می شود. این یک محدودیت غیرقابل اجتناب از استریو آناگلیف است، و این وظیفه کاربر را دارد که از مولکول های خود از طرح های رنگی استفاده کند که هنوز هم در این حالت از نظر بصری خوشایند به نظر می رسند. این حالت توسط همه GPU پشتیبانی می شود.

۷,۳,۸ Stereo Parameters

یک تصویر استریو با ترسیم دو تصویر از دو منظر متفاوت، یکی از چشم چپ و دیگری از چشم راست. تصاویر با پیدا کردن منظره ای که توسط شخصی که در صحنه واقع شده است دیده می شود. این روش از دو پارامتر برای یافتن نمای استفاده می کند. جداسازی چشم و فاصله کانونی. حالت اول فاصله بین چشم ها را مشخص می کند و جلوی اختلاف منظر را می دهد. تنظیم جداسازی در ° منجر به یک تصویر ۲D مسطح خواهد شد، در حالی که تنظیم آن به بسیار بزرگ باعث سردرد بیشتر افراد خواهد شد. مدل گرافیکی استفاده شده توسط VMD چشم هایی را در جلوی بیننده فرض می کند و در همان نقطه فاصله کانونی را به دور خود متمرکز می کند. اگر فاصله کانونی ° باشد، چشم بیننده متقاطع شده و به یکدیگر نگاه می کنند. فاصله کانونی بزرگتر اغلب در ایجاد یک تصویر قابل مشاهده کمک می کند. دو پارامتر را می توان با دستورات متنی display focallength و display eyesep، یا با استفاده از پنجره Display Settings [۵/۴/۶] تغییر داد.

به طور کلی، سعی کنید جداسازی چشم تا حد ممکن بدون ایجاد میگردن به بیننده انجام شود و سعی کنید فاصله کانونی را برای کاهش تصاویر دوگانه تغییر دهید. ممکن است اغلب به تفسیر مولکول به جلو یا عقب و همچنین تنظیم مقیاس کمک کند، زیرا به طور معمول برای یک مجموعه معین از پارامترهای استریو موقعیت بهینه برای یک مولکول وجود دارد.

یکی از متداول ترین کارهایی که توسط کاربران VMD انجام می شود، تولید تصاویری است که می تواند در برنامه های دیگر بارگذاری شود یا در اسناد چاپ شده، پوسترها، اسلایدها و شفافیت ها استفاده شود. پنجره Render یک مکانیزم ساده برای تولید فایل های تصویری از عکس های فوری از پنجره گرافیکی VMD و از طریق استفاده از برنامه های رندر خارجی و ردیابی اشعه فراهم می کند.

۸٫۱ Screen Capture Using Snapshot

ساده ترین روش برای تولید فایل های تصویری raster در VMD استفاده از ویژگی "Snapshot" است. ویژگی عکس فوری، محتویات پنجره گرافیکی VMD را ضبط می کند، و آنها را در یک فایل تصویری raster ذخیره می کند. در سیستم های یونیکس، تصویر گرفته شده به پرونده Truevision با رنگ ۲۴ بیتی "Targa" نوشته شده است. در سیستم های ویندوز، تصویر گرفته شده به صورت Bitmap ویندوز با رنگ ۲۴ بیتی یا پرونده "BMP" نوشته شده است. برای استفاده از ویژگی عکس فوری، فقط پنجره Render [۵٫۴٫۱۱ §] را باز کنید و گزینه عکس فوری را انتخاب کنید. VMD محتویات پنجره گرافیکی را ضبط می کند، و سعی می کند تصویر حاصل را با نام فایل در پنجره Render ذخیره کند. ممکن است بدانید که هنگام استفاده از عکس فوری، مهم نیست که دیگر Windows یا مکان نما را در جلوی صفحه نمایش گرافیکی VMD قرار ندهید، زیرا تصاویر حاصل ممکن است شامل پنجره های مبهم یا مکان نما باشند. این یک رفتار وابسته به پلتفرم است، بنابراین شما نیاز دارید که سیستم خود این کار را انجام دهد یا خیر.

۸٫۲ Higher Quality Rendering

بعضی اوقات تصاویر حاصل از ضبط صفحه به اندازه کافی خوب نیستند؛ ممکن است شما یک تصویر بسیار بزرگ، با کیفیت بالا یا تصویر با سایه ها، بازتاب ها یا ارائه کیفیت بالای سطوح شفاف بخواهید. در حالی که VMD به طور کلی آن تصاویر زیبا را در پنجره گرافیکی خود به نمایش می گذارد، اما برای به حداکثر رساندن تعامل، تصاویر خود را بسیار سریع تولید می کند، که این امر مانع از استفاده از تکنیک های رندرینگ نوری است که باعث کند شدن عملکرد کل برنامه می شود. به جای تولید تصاویر با کیفیت بالا به طور مستقیم، VMD پرونده های توصیف صحنه را می نویسد که می تواند به عنوان ورودی چندین برنامه ردیابی پویش معروف و ردیابی پرتو مورد استفاده قرار گیرد. جداول ۸٫۱ فرمت های خروجی پشتیبانی شده در حال حاضر را لیست می کند، و در صورت امکان نرم افزار رندر مناسب بدست می آید.

تهیه تصویر راستری معمولاً یک فرآیند دو مرحله است، به عنوان مثال به استثنای رندهای داخلی مانند TachyonInternal، TachyonLOSPRayInternal و TachyonLOptiXInternal یا انواع تعاملی مربوطه. ابتدا باید یک فایل توصیف صحنه را برای برنامه رندر انتخاب شده مناسب تهیه کنید و سپس برنامه را با استفاده از فایل جدید به عنوان ورودی برای تولید خروجی تصویر راستری اجرا کنید. برنامه های رندر خارجی معمولاً از فرمت های فایل خروجی مختلف پشتیبانی می کنند، که ممکن است نیاز باشد به چیزی مناسب تر برای شما تبدیل شود. پیش بینی اینکه چه چیزی ممکن باشد غیرممکن است، بنابراین ما نحوه تبدیل انواع فایل های مختلف به Targa را توضیح خواهیم داد و به شما این امکان را می دهیم تا از ابزارهای ذکر شده در جدول ۸٫۱ برای به دست آوردن آنچه نیاز دارید استفاده کنید. Raster3D، Tachyon و POV-ray

Chapter 8

فصل هشتم

خروجی گرفتن از پروژه

Export the project

می توانند فایل های Targa را تولید کنند، بنابراین شما نیازی به انجام هیچ کاری ندارید اما این فرمت خروجی را مشخص کنید. Rayshade فایل های تصویری RLE ایجاد می کند، که با استفاده از ImageMagick قابل تبدیل هستند. Radiance یک فایل oct. تولید می کند، که می تواند با دستورات rview و rpict موجود در توزیع Radiance تبدیل شود. برنامه رایگان display از ImageMagick - به <http://www.imagemagick.org> مراجعه کنید - باید بتواند بین همه این قالب ها را بخواند و تبدیل کند.

پیشنهاد می کنیم از Tachyon یا Raster3D استفاده کنید زیرا آنها به طور کلی سریعترین برنامه ها هستند. این برنامه ها به راحتی قابل فهم هستند، و حتی هنگام ارائه مولکول های بسیار پیچیده سریع هستند. فایل های صحنه تولید شده متنی ساده هستند، بنابراین اصلاح آنها بسیار آسان است. این کار اغلب برای ایجاد یک فایل رستری بزرگتر انجام می شود، اگرچه برخی از آنها گزینه های جهانی دیگری دارند که ممکن است بخواهید آنها را تغییر دهید. به عنوان مثال، به طور مثال پرونده Raster3D سایه ها را روشن می کند. پیشنهاد می کنیم برای تعیین آنچه در فایل اصلاح می شود، به مستندات ارائه دهنده مربوطه مراجعه کنید.

برای ارائه تصویر واقعی در یک فایل خروجی، ابتدا گرافیک را در VMD درست کنید همانطور که می خواهید خروجی ظاهر شود. سپس از پنجره Render [5/4/11\$] یا دستور متن زیر استفاده کنید تا فایل ورودی را ایجاد کرده و برنامه اجرا را شروع کنید:

```
render method filename [render command]
```

method یکی از نامهای ذکر شده در ستون اول جدول ۸/۱ است و filename نام فایلی است که حاوی نتایج اسکریپت برنامه پردازش تصویر حاصل خواهد بود. از متن پیرو این، به عنوان دستوری که برای اجرای پردازش فایل استفاده خواهد شد. اگر s٪ در رشته فرمان ظاهر شود، آنها را با نام فایل اسکریپت جایگزین خواهد شد.

۸,۳ Caveats

هنگامی که VMD فایل خروجی را ایجاد می کند، سعی خواهد کرد که نمای فعلی و اندازه صفحه مطابقت انجام دهد. در بیشتر قسمت ها این کار خوب را انجام می دهد اما ممکن است مشکلاتی به وجود بیاید. رنگهای موجود در تصویر راستر نهایی ممکن است متفاوت از آنچه در پنجره گرافیکی VMD است دیده شود. این امر به این دلیل است که برنامه های رندر خارجی از معادلات سایه زنی و الگوریتم های مختلف از آنچه VMD استفاده می کند استفاده می کنند. اختلافات بالقوه رندر شامل:

- ✓ هندسه ممکن است کمی متفاوت به نظر برسد. در سطح خمیده VMD چند ضلعی شده و با استفاده از تعدادی اشکال چند ضلعی ترسیم شده، ممکن است سطوح خمیده در خروجی نهایی کاملاً یکتواخت ارائه شود (که عموماً به عنوان یک پیشرفت مورد توجه است).
- ✓ رنگ یا شدت شی ارائه شده ممکن است با توجه به رنگهای مختلف، مقادیر گاما یا مدل های روشنایی کمی متفاوت باشد. این خصوصاً در مورد خصوصیات ماده ای که برای انجام سایه های پیچیده استفاده می شود صادق است. ارائه VMD real-time از این خصوصیات مواد معمولاً در مقایسه با رندهای تمام عیار فوتورئالیستی بسیار ساده است یا محدود است، بنابراین به طور بالقوه می توانید تفاوت های بزرگی بین اجرای شفافیت، هایلایت های

برجسته و غیره وجود داشته باشد.

✓ بسیاری از رندهای خارجی از ارائه واقعی ارتوگرافی پشتیبانی نمی کنند. با برگرداندن دوربین بسیار دور از مولکول، می توان آن را "faked" کرد و به دنبال آن زوم کردن دوربین به طوری که اندازه تصویر دوباره قابل قبول باشد. این به طور چشمگیری اثر چشم انداز را کاهش می دهد، اما یک طرح نویسی واقعی نیست.

✓ دستورات رندر در حال حاضر از خروجی استریو پشتیبانی نمی کنند، بنابراین حتی اگر صفحه نمایش در حال حاضر در حالت استریو باشد، از یک چشم انداز غیر استریو برای اسکریپت ورودی برنامه رندر استفاده می شود. ارائه در استریو با تنظیم حالت نمایش در "سمت چپ"، سپس دادن تصویر، به دنبال "سمت راست"، و دوباره ارائه مجدد انجام می شود. این کار با یک برنامه رندر خارجی یک جفت استریو را به بهترین وجه از VMD ارائه می دهد.

✓ صفحات قطع نزدیک و دور توسط کلیه رندهای خارجی نادیده گرفته می شوند.

✓ متن به طور کلی به عنوان گرافیکی در زبانهای صحنه رندر موجود نیست، بنابراین متن برچسب دار ظاهر نمی شود، اگرچه خطوط برچسب، باند، زاویه و غیره ترسیم می شوند. تنها استثناء در خروجی Postscript است که از خروجی متن پشتیبانی می کند.

✓ حوزه های نقطه دار با نقاط ترسیم نمی شوند.

✓ رنگ پس زمینه ممکن است سیاه باشد، زیرا همه قالب های خروجی از رنگ پس زمینه ای به غیر از رنگ سیاه پشتیبانی نمی کنند.

یک سوال متداول این است که "چگونه می توانم به سرعت چاپ صفحه نمایش VMD را بدست آورم؟" چندین راه حل یک مرحله برای این مشکل وجود دارد، چند مورد در زیر ذکر شده است:

✓ گزینه snapshot را انتخاب کرده و با استفاده از ImageMagick یا ابزارهای مشابه، تصویر

حاصل را به فرمت تصویر دلخواه خود تبدیل کنید.

✓ گزینه TachyonInternal را انتخاب کنید و با استفاده از ImageMagick یا ابزارهای

مشابه، تصویر حاصل را به فرمت تصویر دلخواه خود تبدیل کنید.

تصاویر استریوسکوپي را می توان با یک توالی ساده از دستورات متن، چرخه ی بین حالت های استریو مونوسکوپي چاپ و راست و اجرای یک صحنه برای هر چشم ارائه کرد:

```
display stereo left
render TachyonInternal left.tga
display stereo right
render TachyonInternal right.tga
```

ارائه دهنده های خارجی همیشه از توانایی ترسیم تصاویر استریو پشتیبانی نمی کنند. در اصل، می توان صحنه را بر روی پرونده دو بار با تحولات مناسب اعمال کرد تا منظره برای هر چشم درست شود، اما پس از آن سایه ها نادرست خواهند بود. در عوض، ما پیشنهاد می کنیم یک تصویر از صحنه فعلی بسازید، سپس مولکول ها را به سمت چپ (یا راست) بکشید تا تصویر دیگر ایجاد شود. دستورات متنی برای این چیزهایی مانند:

```
display stereo off
render Raster3D left.r3d
trans by -.100
render Raster3D right.r3d
```

برای تولید فایل rgb باید دو پرونده ارائه شود. همانطور که مشخص است، این روش تولید تصاویر استریو از پرونده های معمولی Raster3D را آسان می کند. از آنجا که VMD می تواند فرمت Raster3D را بخواند، تنها کاری که باید انجام دهید خواندن پرونده و سپس اجرای دستورات ذکر شده در بالا است. دستورات متنی برای تولید نماهای چاپ یا راست نیز در GUI تحت گزینه Stereo از پنجره Display معادل هایی دارند.

تهیه فیلم با VMD، از طریق استفاده از اسکریپت های Tcl یا Python یا پسوند "vmdmovie" همراه با VMD امکان پذیر است. چندین اسکریپت ساخت فیلم در کتابخانه اسکریپت VMD در صفحه اصلی VMD ارائه شده است. از این اسکریپت ها می توان به صورت اصلی استفاده کرد، یا می توان آنها را برای انجام کارهای پیچیده انیمیشن فراتر از محدوده این راهنمای کاربر تنظیم کرد. به طور کلی، فیلم ها با وارد کردن دستورات رندر با یک اسکریپت ساخته می شوند، دنباله ای از پرونده های تصویری مجزا را تولید می کنند. وقتی اسکریپت ارائه تمام فریم های انفرادی را به پایان رساند، تصاویر برای وارد کردن به یک بسته انیمیشن آماده هستند یا می توانند با پردازش بیشتر به یکی از چندین قالب محبوب فیلم فشرده شده تبدیل شوند. برنامه افزودنی "vmdmovie" با VMD کاملاً خودکار مراحل ساخت فیلم را فراهم می کند، اگرچه برای انجام کار نیاز به نصب تعدادی بسته نرم افزاری دارد. لطفاً مستندات جداگانه در مورد فیلمنامه ها و "vmdmovie" را در کتابخانه اسکریپت VMD ببینید.

Name	Description
ART1	Simple VORT ray tracer
Gelato	NVIDIA Gelato PYG Format
PostScript	Simple Vector PostScript Output
POV32	POV-Ray 3.x ray tracer
Radiance3	Radiosity ray tracer
Raster3D4	Fast raster file generator
Rayshade5	Rayshade ray tracer
RenderMan	PIXAR RenderMan RIB Format, render with Aqsis, Pixie, PRMan, RenderDotC
STL	Stereolithography format, triangles only
Tachyon6	High quality parallel ray tracer
TachyonInternal6	Fast, built-in Tachyon engine that generates images directly from VMD internal data structures with no intermediate step
TachyonOptiXInternal	Fast, built-in GPU-accelerated Tachyon for NVIDIA GPUs (available on supported platforms)
TachyonOptiXInteractive	Interactive, built-in, GPU-accelerated version of Tachyon for NVIDIA GPUs (available on supported platforms)
TachyonLOSPRayInternal	Fast, built-in OSPRay ray tracer for Intel CPUs (available on supported platforms)
TachyonLOSPRayInteractive	Interactive, built-in, OSPRay ray tracer for Intel CPUs (available on supported platforms)
VRML-1	Virtual Reality Markup Language V1.0
VRML-2	Virtual Reality Markup Language V2.0
Wavefront	Wavefront .OBJ/.MTL scene format, loads into 3DS Max-, Blender, Maya, and others
X3D7	X3D declarative scene format
X3DOM8	Open source HTML5-based X3D viewing system

جدول ۸.۱: گزینه های گوناگون رندرینگ

رابط متن Tcl دسترسی کاملی به کلیه دستورات VMD فراهم می کند. هر کاری که از منوها انجام شود می تواند با دستورات متن VMD انجام شود.

۹٫۱ Using text commands

دستورات متنی را می توان به چندین روش وارد VMD کرد:

✓ دستورات را می توان با تایپ کردن آنها در VMD prompt در پنجره کنسول متن وارد کرد. این پنجره معمولاً حاوی کاراکتر > vmd است. هنگامی که متن دیگر (به عنوان مثال، از انتخاب ماوس) روی صفحه نمایش داده می شود، صفحه را به سمت بالا می چرخانید تا کاراکتر در آخرین خط صفحه نباشد. برای ظاهر شدن مجدد آن، Enter را فشار دهید. هنگام وارد کردن دستورات چند خطی، یک اعلان متناوب ظاهر می شود، ؟، و تا زمان تمام شدن فرمان ناپدید نمی شوند. بعضی مواقع منتظر بسته شدن با نشانه دوتایی، آکولاد باز یا کروشه باز است، در حالی که در زمان های دیگر در انتظار یک خط است که به حالت برگشتی ختم نمی شود.

✓ از آنجا که ممکن است شما بخواهید در هر زمان همه داده ها را مجدداً بارگیری کنید، در روش برای خواندن داده ها از یک فایل متنی وجود دارد. روش اول وارد کردن دستور است. این یک خط از فایل را می خواند، آن را اجرا می کند، سپس صفحه را به روز می کند و هرگونه تغییر در ورودی ماوس یا پنجره را بررسی می کند، تا VMD در حین اجرای متن تعاملی بماند. راه دوم منبع فرمان Tcl است. این قبل از اینکه به ماوس و ویندوز اجازه ورود به ورودی جدید را بدهد، کل فایل را می خواند. این کار اغلب وقتی کارآمدتر است که متن شما خطوط زیادی داشته باشد.

✓ در سیستم عامل های یونیکس / لینوکس، اگر فایل vmdrc (بخش ۳/۳/۱۴ را ببینید) در دایرکتوری شما وجود دارد، در هنگام راه اندازی VMD اجرا می شود. اگر فایل vmdrc ندارید، VMD از یک اسکریپت پیش فرض در فهرست نصب VMD استفاده می کند. به طور مشابه، در هنگام راه اندازی می توان از نشانه خط فرمان -e برای مشخص کردن یک فایل ورودی پس از خواندن فایل vmdrc استفاده کرد. نسخه ویندوز VMD به طور مشابه کار می کند، اگرچه فایل راه انداز vmd.rc نامیده می شود.

یک استفاده خوب از پرونده vmdrc مشخص کردن منوهای VMD است که می خواهید هنگام شروع VMD باز شوند و آنها در جایی که می خواهید قرار گیرند. برای اطلاعات در مورد استفاده به بخش ۹/۳/۱۹ مراجعه نمایید.

۹٫۲ Tcl/Tk

توزیع استاندارد با Tcl تهیه شده است، که یک زبان برنامه نویسی کامل شامل متغیرها، حلقه ها و شروط را به همراه یک روش استاندارد برای برقراری ارتباط با سایر برنامه ها از طریق سوکت های استاندارد TCP/IP اضافه می کند. نسخه های ۱/۲ و بعد از آن همچنین شامل جعبه ابزار Tk، برای ایجاد منوهایی با دکمه هایی که مرتبط با اقدامات مورد علاقه شخص است. Tcl (مختصر Tool Command Language، ساخته جان اوستروت) یک زبان برنامه نویسی جاسازی شده و قابل توسعه

Chapter 9

فصل نهم

رابط متن Tcl

Tcl text interface

است. به عبارت دیگر، Tcl در داخل VMD به عنوان یک مترجم زبان قرار دارد که می تواند دستورات زبان استاندارد خود یا برنامه های افزودنی مختلف VMD را اجرا کند. VMD از Tcl و Tk نسخه ۸٫۶٫۱ استفاده می کند. ما شما را برای کسب اطلاعات بیشتر در مورد Tcl به آدرس <http://www.tcl.tk> ارجاع می دهیم.

Tcl Text Commands ۹٫۳

تمام دستورات Tcl در VMD از یک یا چند کلمه یا عبارت جدا شده توسط فضای سفید تشکیل شده و توسط یک خط جدید خاتمه می یابد. در Tcl، «عبارت» متنی است که با اقتباس های مضاعف یا مجموعه ای از آکولاد های باز و بسته احاطه شده است. کلمه اول هر دستور، هدف کلی دستور را مشخص می کند و کلمات زیر نوع دقیق دستور را برای اجرای آن مشخص می کنند. جدول ۹٫۱ دستورات عمل های متن را در VMD با ذکر اولین کلمات و توصیف هدف کلی برای دستورات شروع با آن کلمات خلاصه می کند.

دستورات در بخش های زیر با نام ذکر شده و در ادامه توسط لیستی از شناسه های موجود شرح داده می شوند. اگر یک نشانه اختیاری باشد، در [] ها ضمیمه می شود. اگر فقط به یک لیست از نشانه ها نیاز باشد، لیست در <> ها ضمیمه می شود و موارد با | از هم جدا می شوند. کلمات در حالت ایتالیک یک رشته یا مقدار را مشخص می کنند که باید توسط کاربر مشخص شوند.

animate ۹٫۳٫۱

این دستورات پویا نمایی یک مسیر مولکولی را کنترل می کنند و برای خواندن و نوشتن فریم های انیمیشن به یا از یک فایل یا Play/Pause/Rewind یک مسیر مولکولی استفاده می شوند.

✓ **molld [frame frame number] dup**: قالب داده شده (پیش فرض «now») از مولکول

molld را دوباربر کنید و قالب جدید را به این مولکول اضافه کنید.

✓ **forward**: انیمیشن را به جلو اجرا می کند.

✓ **for**: همانند دستور forward عمل می کند.

✓ **reverse**: انیمیشن را به عقب اجرا می کند.

✓ **rev**: همانند دستور reverse عمل می کند.

✓ **pause**: انیمیشن را متوقف می کند.

✓ **prev**: به فریم قبلی می روید.

✓ **next**: به فریم بعدی می روید.

✓ **skip n**: فریم های ۱+n را قید کنید.

✓ **delete all**: همه فریم ها را از حافظه پاک می کند.

First Word	Description
animate	Play/Pause/Rewind a molecular trajectory.
atomselect	Create atom selection objects for analysis.
axes	Position a set of XYZ axes on the screen.
color	Change the color assigned to molecules, or edit the colormap.
colorinfo	(Tcl) Obtain color properties for various objects
display	Change various aspects of the graphical display window.
exit, quit	Ouit VMD.
gettimestep	Retrieve a timestep as a binary Tcl array (use for plugins)
help	Display an on-line help file with an HTML viewer.
imd	Control the connection to a remote simulation.
label	Turn on/off labels for atoms, bonds, angles, dihedral angles, or springs.
light	Control the light sources used to illuminate graphical objects.
logfile	Turn on/off logging a VMD session to a file or the console.
material	Create new material definitions and modify their settings.
mdffi	MDFF density map synthesis and cross correlation commands
measure	Measure properties of molecular structures.
menu	Control or query the on-screen GUI windows.
molecule or mol	Load, modify, or delete a molecule.
molinfo	Get information about a molecule or loaded file.
mouse	Change the current state (mode) of the mouse.
parallel	Execute commands in parallel on clusters or supercomputers.
play	Start executing text commands from a specified file.
render	Output the currently displayed image (scene) to a file.
rock	Rotate the current scene continually at a specified rate.
rotate	Rotate the current scene around a given axis by a certain angle.
scale	Scale the current scene up or down.
stage	Position a checkerboard stage on the screen.
tool	Initialize and control external spatial tracking devices.
translate	Translate the objects in the current scene.
user	Add new keyboard commands.
vmddinfo	(Tcl) Get information about this version of VMD
volmap	Create volumetric data based on molecular information
wait	Wait a number of seconds before reading another command. Animation continues.
sleep	Sleep a number of seconds before reading another command. Animation is frozen.

جدول ۹٫۱: خلاصه هسته دستورات متنی در VMD

✓ **Speed n**: سرعت انیمیشن را روی n تنظیم کنید.

✓ **style once**: تنظیم به منظور اینکه یک بار انیمیشن را پخش کنید.

✓ **style loop**: تنظیم به منظور اینکه به طور مداوم از طریق انیمیشن حلقه ایجاد کنید.

✓ **style rock**: تنظیم کنید تا انیمیشن را به صورت مداوم و به جلو و عقب برگردانید.

✓ **goto start**: به اولین فریم می‌روید.

✓ **goto end**: به آخرین فریم می‌روید.

✓ **goto n**: به فریم n می‌روید.

➤ **read file_type filename [beg nb] [end ne] [skip ns] [waitfor nw] [molecule_number]**:

اطلاعات مربوط به molecule_number را از filename نوع file_type، شروع شونده با قاب nb، پایان با فریم ne، با یک گام از ns بخوانید. تعداد فریم‌های خوانده شده از این فایل را برگردانید. اگر فایل حاوی بیشتر از این تعداد باشد، فریم‌های باقی‌مانده در به روزرسانی‌های بعدی نمایشگر VMD بارگیری می‌شوند. به طور پیش فرض، قبل از بازگشت فرمان، یک فریم بارگذاری می‌شود. گزینه waitfor به شما امکان می‌دهد قبل از بازگشت چند فریم را بارگذاری کنید. پارامتر nw، waitfor می‌تواند عدد صحیحی یا همه باشد. انتخاب nw کمتر از صفر همان انتخاب all است. اگر فریم‌ها از دیگر فایل‌ها هنوز هنگام صدور دستور animate بارگیری می‌شوند، ابتدا این فریم‌ها بارگذاری خواهند شوند.

➤ **write file_type filename [beg nb] [end ne] [skip ns] [waitfor nw] [sel selection]**

[molecule_number]:

داده‌ها را از شماره مولکول بنویسید تا نام پرونده نوع پرونده، شروع با قاب nb، پایان دادن به فریم با ne، با یک گام از ns. تعداد فریم‌های نوشته شده به این پرونده را برگردانید. اگر فریم بیشتری از این عدد مشخص شده باشد، فریم‌های باقی‌مانده در طی به روزرسانی‌های بعدی نمایشگر VMD نوشته می‌شوند. به طور پیش فرض، قبل از بازگشت فرمان، یک فریم نوشته می‌شود. گزینه waitfor به شما امکان می‌دهد قبل از بازگشت چند فریم را برای نوشتن تعیین کنید. پارامتر nw، waitfor می‌تواند عدد صحیحی یا همه باشد. انتخاب nw کمتر از صفر همان انتخاب همه است. نام یک اتم را به عنوان انتخاب گذر کنید تا فقط اتم‌های انتخاب شده در پرونده بنویسید.

➤ **delete [beg nb] [end ne] [skip ns] [molecule_number]**:

حذف داده‌های مربوط به molecule_number را که ابتدا با فریم nb شروع می‌شود، و با فریم ne تمام می‌شود، و فریم‌ها را با استفاده از ns نگه دارید (یک گام ۱- به معنی نگه داشتن تمام فریم‌ها) است.

۹,۳,۲ atomselect

انتخاب اتم روش اصلی دسترسی به اطلاعات مربوط به اتم‌های موجود در یک مولکول است. در دو مرحله کار می‌کند. مرحله اول ایجاد یک انتخاب با توجه به متن انتخاب، شناسه مولکول و تعداد فریم اختیاری است. این کار با عملکردی به نام atomselect انجام می‌شود که نام انتخاب اتم جدید را برمی‌گرداند. مرحله دوم استفاده از گزینه ایجاد شده برای دسترسی به اطلاعات مربوط به اتم‌های موجود در انتخاب‌ها است.

✓ **list**: لیستی از همه انتخاب‌های اتمی حذف نشده را برگردانید.

✓ **keywords**: لیستی از کلمات کلیدی شناخته شده را در متن انتخاب اتم برگردانید.

✓ **macro name selection**: یک انتخاب اتمی تک کلمه جدید را از انتخاب‌های موجود اتم ایجاد کنید. name باید یک کلمه واحد باشد که از یک کاراکتر غیر عددی شروع شده و فاقد فاصله یا کاراکترهای خاصی باشد. انتخاب می‌تواند هر انتخاب اتمی معتبر باشد و حتی می‌تواند ماکروهای دیگری نیز داشته باشد. باید اطمینان حاصل کنید که ماکروهای شما، چه مستقیم و چه از طریق زنجیره‌ای از سایر ماکروها، خود را شامل نمی‌شوند. اگر VMD این وضعیت را تشخیص دهد، ارزیابی انتخاب اتم را متوقف می‌کند.

✓ در صورت عدم انتخاب، ماکرو برای نام داده شده بازگردانده می‌شود.

✓ اگر هیچ نامی داده نشود، لیستی از تمام نام‌های macro برمی‌گردد.

✓ اگر در حال حاضر یک macro برای نام داده شده وجود داشته باشد، انتخاب قدیمی با انتخاب جدید جایگزین می‌شود. تک کلمات که به عنوان ماکرو تعریف نمی‌شوند، مانند پروتئین و آب، با دستور ماکرو قابل تعریف نیستند.

✓ **delmacro name**: ماکرو مربوط به نام را حذف کنید. تک کلمات که به عنوان ماکرو تعریف نشده اند نمی‌توانند حذف شوند.

✓ **Molecule_id selection_text [frame frame_number]**: انتخاب اتمی جدیدی ایجاد می‌کند و نام خود را برمی‌گرداند. برای دستیابی به انتخاب اتم می‌توان از نام برگردانده شده به عنوان Tcl استفاده کرد. متن انتخاب همان زبانی است که در پنجره Graphics [5/4/7] استفاده می‌شود و در فصل ۶,۳ شرح داده شده است. برای انتخاب زیر مجموعه معین اتم استفاده می‌شود. پس از انجام انتخاب، متن قابل تغییر نیست. برخی از شرایط انتخاب بستگی به داده‌هایی دارد که در طی یک مسیر تغییر می‌کنند (تاکنون فقط کلمات کلیدی «y»، «x» و «z» می‌توانند با گذشت زمان تغییر کنند). برای اینها، 'framevalue' اختیاری برای تعیین اینکه از چه قاب خاصی استفاده می‌شود استفاده می‌شود. عدد فریم می‌تواند یک عدد صحیح غیر منفی باشد، کلمه اکنون (قاب فعلی)، کلمه اول (برای فریم ۰) و آخرین (برای آخرین فریم) است. چند نمونه از این موارد است:

```
vmd> atomselect top "name CA"
atomselect0
vmd> atomselect 3 "resid 25" frame last
atomselect1
vmd> atomselect top "within 5 of resname LYR" frame 23
atomselect2
```

انتخاب اتمی که به تازگی ایجاد شده است یک روش Tcl است که گزینه های زیر را انتخاب می کند:

- ✓ **num**: تعدادی از اتم ها را در انتخاب برگردانید.
- ✓ **list**: لیستی از شاخصهای اتم را در انتخاب برگردانید (BTW، این همان شاخص دریافت است).
- ✓ **text**: متن مورد استفاده برای ایجاد این انتخاب را برگردانید.
- ✓ **molid**: بازگرداندن مولکول برای ایجاد این انتخاب استفاده می شود.
- ✓ **frame**: فریم انیمیشن مرتبط با این انتخاب را برمی گرداند. نتیجه اکنون یا آخر، عدد صحیح مربوط به فریم خواهد بود. وقتی قاب اکنون باشد، انتخاب اتم از مختصات اتمی از قاب فعلی برای مولکول همراه خود استفاده می کند. اگر قاب آخرین باشد، انتخاب اتم همیشه از مختصات آخرین فریم استفاده می کند. اگر قاب عدد صحیح خاصی باشد، انتخاب همیشه از مختصات آن قاب استفاده می کند، حتی اگر فریم انیمیشن فعلی تغییر کند. توجه داشته باشید که اگر یک فریم وجودی مشخص نشده باشد، مختصات اتمی آخرین فریم را ارجاع می دهند.
- ✓ **frameframe**: فریم را برای انتخاب تنظیم کنید. فریم باید یا در حال حاضر، حالا یا آخرین عدد صحیح باشد
- ✓ **delete**: این شی را حذف کنید (عملکرد را حذف می کند).
- ✓ **global**: جسم را به فضای نام کروی منتقل می کند. انتخاب های اتمی ایجاد شده در یک Tcl Proc که کروی نشده اند، هنگام خروج محصول حذف می شوند.
- ✓ **uplevel level**: جسم را به سطح جدیدی در فضای نام انباشته منتقل می کند. مشابه با عملکرد uplevel در Tcl کار می کند.
- ✓ **getattribute_list**: ب توجه به یک ویژگی یا لیستی از صفات، مقادیر ویژگی را برمی گرداند. اگر فقط یک ویژگی واحد داده شود، لیستی از مقادیر مشخصه های مربوطه بازگردانده می شود. اگر لیستی از ویژگی ها داده شود، لیستی از زیر فهرست ها بازگردانده می شوند. هر زیر فهرست مقادیری را برای ویژگی های مربوطه درج می کند. برای کلمات کلیدی ویژگی های شناخته شده، به جداول ۶/۵، ۶/۶ و ۶/۸ مراجعه کنید.
- ✓ **setattribute_list values_lists**: صفات را در لیست ویژگی ها با given مقادیر در لیست ارزش ها تنظیم کنید. اگر فقط یک ویژگی وجود داشته باشد، آنگاه لیست های مقادیر می توانند یک مقدار واحد یا یک لیست از مقادیر باشند، یکی برای هر اتم انتخاب شده. اگر بیش از یک ویژگی وجود داشته باشد، لیست مقادیر باید لیستی از زیر لیست ها باشند. تعداد زیر فهرست ها باید با تعداد اتم های انتخاب شده برابر باشد، و تعداد موارد موجود در هر زیر نویس باید با تعداد صفات برابر باشد.

مثال:

```
set sel [atomselect top all]
set mass [$sel get mass]
set xyz [$sel get {x y z}]
$sel set beta 0 # all values are set to zero
$sel set beta $mass # copy mass to beta
# set occupancy to x, mass to y, beta to z
$sel set {occupancy mass beta} $xyz
```

- ✓ واژه های کلیدی عدد صحیح یا ممیز شناور با استفاده از مقادیر غیر عددی خطا است. اگر مقادیر ممیز شناور به کلمات کلیدی صحیح منتقل شوند، آنها به عدد صحیح تبدیل می شوند و بالعکس.
 - ✓ دستور مجموعه بلافاصله تمام بازنمودهای مولکول انتخاب شده را به روز می کند. اگر سرعت مهم است، قبل از تنظیم مقادیر، تمام نمایش های مولکولی را حذف کنید.
 - ✓ **getbonds**: لیستی از لیست های مربوط را برمی گرداند. هر لیست پیوند شامل شناسه اتمهای پیوند یافته به اتم مربوطه در انتخاب است.
 - ✓ **setbonds**: پیوندهای مربوط به اتمها را در انتخاب تنظیم کنید. استدلال دوم باید لیستی از لیستهای مربوط، یک لیست پیوندی برای هر اتم انتخاب شده باشد.
 - ✓ **move 4x4 matrix**: ماتریس تحول داده شده را در مختصات هر اتم در یک انتخاب اعمال می کند.
 - ✓ **movebyoffset**: تمام اتمها را با یک جابجاسازی معین حرکت دهید.
 - ✓ **lmovebyoffset_list**: حرکت هر اتم توسط یک جابجایی داده شده در لیست.
 - ✓ **moveto position**: همه اتمها را به یک مکان معین منتقل کنید.
 - ✓ **lmoveto position_list**: حرکت هر اتم به نقطه ای که توسط عنصر لیست مناسب داده شده است.
 - ✓ **writeXXX filename**: اتم های انتخاب شده را در پرونده ای از نوع XXX بنویسید؛ به عنوان مثال، pdb، dcd.
 - ✓ **جدید در VMD 1.8**: نوشتن pdb یک نام فایل نیاز دارد. حذف نام فایل دیگر داده های PDB را به صورت رشته بر نمی گرداند. برای به دست آوردن داده های PDB به عنوان یک رشته، ابتدا به یک پرونده بنویسید، سپس دستورات زیر را وارد کنید: `set s [read $fd]; set fd [open filename r];` `close $fd`. متن در متغیر s موجود خواهد بود.
 - ✓ **update**: انتخاب اتم را بر اساس فریم برای انتخاب به روز کنید (فریم را می توان با استفاده از گزینه فریم همانطور که در بالا توضیح داده شد مشخص کرد).
- برای کسب اطلاعات بیشتر در مورد استفاده از انتخاب های اتمی برای بازی و منفعت و همچنین موضوعات مربوط به سرعت اسکریپت های تجزیه و تحلیل، به بخش ۱۲/۲ مراجعه کنید.

محورها (بردارهای متعامد حاوی جهت x، y و z) می توانند در هر ۵ مکان روی صفحه قرار بگیرند یا خاموش شوند.

✓ **Locations**: لیستی از مکانهای ممکن را برگردانید.

✓ **Location**: موقعیت مکانی فعلی را دریافت کنید.

✓ **location < off | origin | lowerleft | lowerright | upperleft | upperright**: محورهای

موقعیت.

همچنین، اگرچه ممکن است این یک دستور احتمالی برای تغییر رنگ محورها باشد، اما این عملکرد فقط از پنجره Colors یا با دستور رنگ قابل انجام است (شکل زیر را ببینید). پیاده سازی های آینده VMD ممکن است این موضوع را تغییر دهد.

رنگ اختصاص داده شده به مولکول ها را تغییر داده و یا مقیاس رنگ را ویرایش کنید. تمام مقادیر رنگ در محدوده ۰...۱ قرار دارند. برای توضیحات کامل در مورد گزینه های مختلف، لطفاً به بخش رنگ آمیزی [۶/۲] مراجعه کنید.

✓ **category name color**: رنگ جسم مشخص شده بر اساس طبقه بندی و نام را بر روی رنگ

تنظیم کنید.

✓ **category name**: رنگ جسم مشخص شده بر اساس طبقه بندی و نام را بدست آورید.

✓ **scale method < scale_name**: نوع مقیاس را برای استفاده برای رنگ آمیزی اشیاء بر

اساس مقادیر تنظیم کنید. آنها هستند:

- RGB - قرمز تا سبز تا آبی

- BGR - آبی تا سبز تا قرمز

- RWB - قرمز تا سفید تا آبی

- BWR - آبی تا سفید تا قرمز

- RWG - قرمز تا سفید تا سبز

- GWR - سبز تا سفید تا قرمز

- GWB - سبز تا سفید تا آبی

- BWG - قرمز تا سفید تا سبز

- BlkW - سیاه تا سفید

- WBlk - سفید تا سیاه

✓ **scale midpoint x**: حد وسط مقیاس رنگ را در محدوده ۰...۱ قرار دهید.

✓ **scale min x**: حداقل مقیاس رنگ را در x، در دامنه ۰...۱ تنظیم کنید.

✓ **scale max x**: حداکثر مقیاس رنگ را در x، در دامنه ۰...۱ تنظیم کنید.

✓ **changergb color: rgb**: رنگ را به مقدار پیش فرض بازنشانی کنید.

✓ **changergb color rgb: RGB**: رنگ را روی rgb تنظیم کنید.

✓ **restype resname [restype**: نوع رزیدورا برای تغییر نام مجدد تنظیم کنید. اگر پارامتر

restype حذف شود، نوع رزیدو فعلی بازگردانده می شود.

✓ **add item category name color name**: با استفاده از رنگ color name، رنگ های دسته

بندی شده، نام مورد را اضافه می کند.

برای اطلاعات بیشتر در مورد جستجوی تنظیمات رنگی VMD، به فرمان اطلاعات رنگ info ۹,۳,۵

مراجعه کنید. برای تغییر رنگ یک شی گرافیکی تعریف شده توسط کاربر، به دستور گرافیکی ۹,۳,۹ مراجعه کنید.

(Tcl) این دستور دسترسی به تعاریف رنگ را فراهم می کند. برای اطلاعات در مورد خصوصیات رنگ، به فصل رنگ آمیزی مراجعه کنید [۶/۲].

✓ **colorinfo categories**: لیستی از دسته های موجود را برمی گرداند.

✓ **colorinfo category category**: لیستی از نامها را برای گروه داده شده برمی گرداند.

✓ **colorinfo num**: تعداد رنگهای جامد پایه را برمی گرداند (۳۳)

✓ **colorinfo max**: تعداد کل رنگ های موجود (۱۰۵۷) را برمی گرداند.

✓ **colorinfo colors**: لیستی از رنگهای جامد نامیده شده را برمی گرداند.

✓ **colorinfo [index | rgb] < name | value**: شاخص یا rgb از نام داده شده یا شناسه رنگی

را برگردانید.

✓ **colorinfo scale < method | methods | midpoint | min | max**: اطلاعات مربوط به

مقیاس های رنگ را برگردانید.

مثالها:

```
# find out what color corresponds to which id:
set i 0
foreach color [colorinfo colors] {
    puts "$i $color"
    incr i
}
# also get a list of RGB values
set i 0
foreach color [colorinfo colors] {
    lassign [colorinfo rgb $color] r g b
    puts "$i $color \{$r $g $b\}"
    incr i
}
```

۹٫۳٫۶ display

جنبه های مختلف پنجره نمایش گرافیکی را تغییر دهید. برای اطلاعات در مورد گزینه ها، به بخش توصیف پنجره نمایش [۶٫۵/۴/۶] مراجعه کنید.

✓ `| get < backgroundgradient | eyesep | focallength | height | distance | antialias`

`| depthcue | culling | rendermode | size | stereo | projection | nearclip | farclip`

`-cuestart | cueend | cuedensity | cuemode shadows | ambientocclusion | aoambi`

`backgroundgradient: <ent | aodirect | dof | dofnumber | dof focaldist |`

`گزینه درخواست شده را برگردانید.`

✓ `| get < rendermodes | stereomodes | projections`

های داده شده برگردانید. (برای اطلاعات بیشتر به بخش ۵/۴/۶ و فصل ۷ مراجعه کنید.)

✓ `antialiasing < on | off > :` antialias را خاموش یا روشن کنید.

✓ `ambientocclusion < on | off > :` روشنایی انسداد محیط را روشن یا خاموش کنید. این

تنها در ارائه دهنده هایی که از روشنایی انسداد محیط پشتیبانی می کنند تأثیر می گذارد. این اثر قابل مشاهده در صفحه نمایش تعاملی VMD یا ارائه دهنده هایی که از آن پشتیبانی نمی کنند، خواهد شد. در حال حاضر، فقط رندهای Tachyon و TachyonInternal قادر به روشنایی انسداد محیط هستند.

✓ `aoambientvalue :` ضریب روشنایی انسداد محیط را به مقدار تنظیم کنید. مقادیر مفید از ۰٫۷

تا ۱٫۰ متغیر است. در حال حاضر، فقط رندهای Tachyon و TachyonInternal قادر به روشنایی انسداد محیط هستند.

✓ `aodirect value :` ضریب صرفه جویی در روشنایی مستقیم انسداد محیط را به مقدار تنظیم کنید. مقادیر مفید از ۰٫۴ تا ۰٫۴ متغیر است. در حال حاضر، فقط رندهای Tachyon و TachyonInternal قادر به روشنایی انسداد محیط هستند.

✓ `dof < on | off > :` عمق تاری کانونی میدان را روشن یا خاموش کنید. این فقط در ارائه دهنده

ها تأثیر می گذارد.

✓ `دofnumbervalue :` عمق دیافراگم زمینه f / stop عدد را روی مقدار تنظیم کنید. مقادیر مفید با توجه به روابط متقابل بین عدد f / stop و در نتیجه اندازه دیافراگم تاری، بیش از یک طیف گسترده از f / ۳۰ تا f / ۱۰۰۰ به دست می آید، قرار می گیرند. دیافراگم تاری به طور مستقیم به اندازه جلوه های فوکوس bokeh در تصویر ارائه شده نهایی مربوط می شود. در حال حاضر، تنها رندهای مختلف Tachyon و POV-Ray قادر به عمق میدان هستند.

✓ `دof focaldistvalue :` عمق فاصله صفحه فاصله کانونی را با مقدار تنظیم کنید. مقادیر مفید در بین دامنه وسیعی از f / ۳۰ تا f / ۱۰۰۰ قرار می گیرند. در حال حاضر، تنها رندهای مختلف Tachyon و POV-Ray قادر به عمق میدان هستند.

✓ `backgroundgradient < on | off > :` پیش زمینه گردان را فعال یا غیرفعال کنید.

✓ `backfaceculling < on | off > :` culling را خاموش یا روشن کنید.

✓ `depthcueing < on | off > :` depthcue روشن یا خاموش کنید.

✓ `eyesepvalue :` جداسازی چشم را به مقدار تنظیم کنید.

✓ `fps < on | off > :` نشانگر فریم در ثانیه را روشن یا خاموش کنید.

✓ `focallengthvalue :` طول کانونی را به مقدار تنظیم کنید.

✓ `heightvalue :` ارتفاع صفحه نمایش را به مقدار تنظیم کنید.

✓ `distancevalue :` فاصله صفحه را به مقدار تنظیم کنید.

✓ `nearclip < set | add > value :` مقدار صفحه را نزدیک به موقعیت برش اضافه یا تنظیم کنید.

✓ `farclip < set | add > value :` مقدار صفحه را نزدیک به موقعیت برش اضافه یا تنظیم کنید.

✓ `projection < perspective | orthographic > :` حالت طرح ریزی را روی mode تنظیم کنید.

✓ `rendermode < Normal | GLSL | Acrobat3D > :` حالت ارائه را روی حالت تنظیم کنید. این پارامتر امکان استفاده از پسوندهای مختلف OpenGL را برای پیاده سازی شفافیت آلفا مخلوط یا سایه قابل برنامه ریزی برای گرافیک های مولکولی با کیفیت بالاتر فراهم می آورد. حالت رندر پیش فرض این ویژگی ها را فعال نمی کند زیرا در هنگام فعال شدن، ویژگی های رندر و عملکرد VMD را به طور قابل توجهی تغییر می دهند. از حالت Acrobat3D استفاده می شود تا امکان ضبط موفقیت آمیز هندسه مولکولی به Acrobat3D فراهم شود.

✓ `resetview :` تنظیم مجدد نمایه.

✓ `resizevalueXvalueY :` اندازه پنجره صفحه را روی مقدار مقدار Set تنظیم کنید.

✓ `repositionvalueXvalueY :` موقعیت گوشه سمت چپ بالای پنجره نمایش را روی آن پیکسل های مقدار from از گوشه سمت چپ پایین صفحه نمایش تنظیم کنید.

✓ `shadows < on | off > :` رندر سایه را روشن یا خاموش کنید. این فقط در ارائه دهنده ها

کنترل پشتیبانی از ارائه سایه تأثیر می گذارد. این اثر قابل مشاهده در صفحه نمایش تعاملی VMD یا ارائه دهنده هایی که از آن پشتیبانی نمی کنند، خواهد شد. در حال حاضر، فقط رندهای Tachyon و TachyonInternal قادر به کنترل حالت رندر سایه هستند.

✓ **stereo mode**: حالت استریو را روی mode تنظیم کنید.

✓ **Update**: به روزرسانی صفحه نمایش را اعمال کنید. در صورت خاموش بودن بروزرسانی صفحه نمایش یا اعمال کردن مجدد دوباره استفاده می شود. این کار لزوماً از تغییر اندازه پنجره صفحه یا استفاده از GUI در هنگام خاموش بودن بروزرسانی صفحه محافظت نمی کند.

✓ **update on**: بروزرسانی صفحه نمایش را روشن کنید.

✓ **update off**: بروزرسانی صفحه نمایش را خاموش کنید. به صورت پیش فرض VMD، نمایشگر را مرتباً به روز می کند. بعضی اوقات خاموش کردن به روزرسانی صفحه نمایش مفید است. این مانع از طراحی مجدد VMD در صحنه به عنوان پاسخی برای هر تغییر می شود، در نتیجه باعث صرفه جویی در وقت هنگام انجام تغییرات نمایه می شود. برای مطالعه بیشتر از کتابخانه اسکریپت VMD دیدن کنید.

✓ **update status**: وضعیت بروزرسانی صفحه نمایش (روشن یا خاموش) را برگردانید.

✓ **update ui**: مشابه بروزرسانی نمایش، بلکه به روزرسانی های ویندوز GUI را نیز اعمال می کند. رابط ویندوز در معرض اقدام زیر است: اگر به روزرسانی صفحه نمایش خاموش باشد و اقدامات (برای مثال iconify / deiconify) به ویندوز انجام شود، ویندوز فقط با استفاده از دستور به روز رسانی نمایش نمی یابد، در حالی که به روزرسانی UI، هر دو بروزرسانی را مجبور می کند تا اتفاق بیفتد. به نظر نمی رسد Tk این مشکل را داشته باشد، بنابراین این گزینه پس از جابجایی به رابط کاربری گرافیکی Tk منسوخ خواهد شد.

۹,۳,۷ draw

VMD روشی برای نمایش اشیاء تعریف شده توسط کاربر ایجاد شده از گرافیک اولیه مانند نقاط، خطوط، سیلندرها، مخروط ها، کره ها، مثلث ها و متن ارائه می دهد. از آنجا که این موارد دقیقاً مانند سایر گرافیک ها در صحنه نمایش داده می شوند، می توان آنها را به قالب های مختلف ردیابی اشعه، چاپگرهای ۳ بعدی و غیره نیز صادر کرد. بین دو اتم، برچسب متنی را در جایی از فضا قرار دهید، یا یک روش جدید را برای تجسم یک مولکول آزمایش کنید.

دستور Draw یک تابع مستقیم Tcl است که به معنای ساده کردن رابط کاربری با گرافیک و همچنین فراهم کردن پایه ای برای پسوند های اولیه به گرافیک های استاندارد است. فرمت فرمان ترسیم:

✓ **draw command [arguments]**

دستور رسم معادل (در اکثر موارد) با دستور گرافیکی بالا [command [arguments]] است، به این معنی که ابتدای گرافیک را به مولکول بالا اضافه می کند، و مشکل تایپ یک آرگومان اضافی را برای شما به همراه می آورد. با این حال، رسم گرافیک را از دو طریق گسترش می دهد. در مرحله اول، اگر هیچ مولکولی وجود ندارد، ترسیم بطور خودکار یکی را برای شما ایجاد می کند. دوم، draw را می توان با دستورات طراحی شده توسط کاربر تعریف کرد. این کار با تعریف عملکردی از فرم دستوری \$vmd_draw انجام می شود. اگر این تابع وجود داشته باشد، با اولین پارامتر به عنوان شاخص مولکول و بقیه به عنوان آرگومان های اصلی ترسیم فراخوانی می شوند. در اینجا مثالی وجود دارد که فرمان کشیدن را شامل می شود که یک «پیکان» بدوی را شامل شود.

```
proc vmd_draw_arrow {mol start end} {
# an arrow is made of a cylinder and a cone
set middle [vecadd $start [vecsub $end $start]]
graphics $mol cylinder $start $middle radius 0.15
graphics $mol cone $middle $end radius 0.25
}
```

پس از وارد کردن این دستور به VMD، می توانید از یک دستورالعمل مانند پیکان رسم {۰۰}{۱۱} برای ترسیم پیکان استفاده کنید. علاوه بر تعریف دستورات جدید، از دستورات ترسیم تعریف شده توسط کاربر نیز می توان برای رد کردن دستورات موجود استفاده کرد. به عنوان مثال، اگر حوزه vmd_draw_sphere را تعریف کنید، سپس کره draw sphere {۰۰} را به صورت معمول کره خود نامیده خواهد شد، نه یکی از گرافیک ها.

در اینجا راهی سریع برای اضافه کردن برچسب خود در انتخاب اتم وجود دارد [۶,۳]. این تابع متن را انتخاب و آن اتم را برچسب (در مولکول بالا) با رشته داده شده برچسب می زند. اگر بیش از یک اتم انتخاب شود، با خطا برمی گردد.

```
proc label_atom {selection_string label_string} {
set sel [atomselect top $selection_string]
if {[[$sel num] != 1]} {
error "label_atom: '$selection_string' must select 1 atom"
}
# get the coordinates of the atom
lassign [$sel get {x y z}] coord
# and draw the text
draw text $coord $label_string
}
```

graphics ۹,۳,۹

فرمان گرافیکی، گرافیک ابتدایی سطح پایین را ترسیم می کند. از این ابتدایی ها می توان برای کشیدن یک جعبه به دور یک مولکول یا یک فلش بین دو اتم استفاده کرد یا یک برجسب متنی را در جایی از فضا قرار داد. نحو فرمان گرافیکی <cmd> <molid> است، جایی که <molid> یک شناسه مولکول معتبر است و <cmd> یکی از دستوراتی است که در زیر ذکر شده است. برای ایجاد یک مولکول «خالی»، از دستور Tcl mol جدید استفاده کنید. برای یک رابط احتمالاً راحت تر، دستور draw [۹,۳,۷] را ببینید. همچنین برای بعضی از نمونه های اسکریپت های گرافیکی تعریف شده توسط کاربر، به کتابخانه VMD مراجعه کنید.

همانطور که (دستورات) اولیه گرافیکی به لیست اضافه می شوند، یک شناسه در حال افزایش و منحصر به فرد به آنها اختصاص می یابد. دستور اول که اضافه می شود °، دوم به اختصاص می یابد و غیره. دستوراتی که یک مورد را اضافه می کنند مقدار آن را برمی گردانند.

✓ **point {xyz}**: نقطه ای را در موقعیت معین ترسیم می کند.

✓ **line {x1 y1 z1} {x2 y2 z2} [width w] [style <solid|dashed>]**: یک خط توپر یا متراکم از عرض داده شده را از نقطه اول به نقطه دوم رسم می کند. به طور پیش فرض، این یک خط توپر از عرض ۱ است.

✓ **cylinder {x1 y1 z1} {x2 y2 z2} [radius r] [resolution n] [filled <yes|no>]**: یک سیلندر شعاع داده شده (پیش فرض ۱=r) را از نقطه اول به دوم می کشد. استوانه در واقع به عنوان یک چند ضلعی n یک طرف ترسیم می شود. اگر گزینه پر شده صحیح باشد، انتهای آن با دیسک های مسطح پوشانده می شود، در غیر این صورت استوانه توخالی (پیش فرض) است. عرض پایه. پارامتر وضوح (پیش فرض ۶=n) تعداد چند ضلعی مورد استفاده در تقریب را تعیین می کند.

✓ **cone {base x base y base z} {tip x tip y tip z} [radius r] [resolution n]**: یک استوانه با شعاع داده شده (پیش فرض ۱=r) را از نقطه اول به دوم می کشد. استوانه در واقع به عنوان یک چند ضلعی n یک طرف ترسیم می شود. اگر گزینه پر شده صحیح باشد، انتهای آن با دیسک های مسطح پوشانده می شود، در غیر این صورت استوانه توخالی (پیش فرض) است. عرض پایه. پارامتر وضوح (پیش فرض ۶=n) تعداد چند ضلعی مورد استفاده در تقریب را تعیین می کند.

✓ **triangle {x1 y1 z1} {x2 y2 z2} {x3 y3 z3}**: مثلثی با نقاط انتهایی در هر سه راس ترسیم می کند

✓ **trinorm {x1 y1 z1} {x2 y2 z2} {x3 y3 z3} {nx1 y1 z1} {nx2 y2 z2} {nx3 y3 z3}**: یک مثلث را با نقاط انتهایی در هر یک از سه نقطه اول ترسیم می کند. گروه دوم از سه مقدار عادی را برای سه امتیاز مشخص می کند. این مورد برای ایجاد سایه صاف در مثلث استفاده می شود.

برای نمایش مناسب باید عادی ها به طول واحد نرمال شوند.

✓ **tricolor {x1 y1 z1} {x2 y2 z2} {x3 y3 z3} {nx1 y1 z1} {nx2 y2 z2} {nx3 y3 z3} c1 c2 c3**:

یک مثلث را با نقاط انتهایی در هر یک از سه نقطه اول ترسیم می کند. گروه دوم از سه مقدار عادی را برای سه امتیاز مشخص می کند. سه عدد صحیح آخر رنگهایی را نشان می دهد که برای هر راس اعمال می شود. این مورد برای ایجاد سایه صاف در مثلث استفاده می شود. برای نمایش مناسب باید عادی ها به طول واحد نرمال شوند.

✓ **sphere {xyz} [radius r] [resolution n]**: حوزه ای از شعاع داده شده را (پیش فرض ۱=r) با محور راس ترسیم می کند. وضوح تصویر (پیش فرض ۶=n) تعیین می کند که چند ضلعی در تقریب یک کره استفاده می شود.

✓ **text {xyz} "text string" [sizes] [thickness t]**: رشته متن را با پایین سمت چپ رشته با شروع در مختصات داده شده نشان می دهد، با اندازه قلم توسط پارامتر اندازه اختیاری، و با ضخامت خط تعیین شده توسط پارامتر ضخامت اختیاری، ترسیم می کند.

✓ **color colorId**

✓ **color name**

✓ **color trans name**: هر یک از اشیاء هندسی فوق با استفاده از رنگ فعلی ترسیم می شوند. در ابتدا، آن رنگ آبی است، که رنگ آن ° است. فرمان رنگ، رنگ فعلی را تغییر می دهد و تا دستور رنگ بعدی اثر اطلاعات را نگه می دارد. بنابراین، برای ترسیم یک استوانه قرمز و سپس یک کره قرمز، ابتدا از دستور قرمز رنگ دستور استفاده کنید تا رنگ تغییر یابد، سپس از دستورات استوانه و کره استفاده کنید.

✓ **materials <on|off>**: از خواص مواد برای ساختن اشیاء گرافیکی (خطوط، استوانه ها و غیره) تحت تأثیر منابع نوری قرار می گیرند. اینها باعث می شوند که اشیاء واقع بینانه تر به نظر برسند، اما در دستگانهایی که مواد را در سخت افزار اجرا نمی کنند کندتر هستند (به فصل ۶/۲ و بخش های مربوط به رنگ [۹,۳,۴] مراجعه کنید) و دستورات colorinfo [۹,۳,۵] برای اطلاعات در مورد نحوه ویژگی های مواد را برای همه اشیاء در VMD خاموش کنید). یک اثر شگفت آور از ویژگی های مواد این است که خطوط تحت تأثیر قرار می گیرند. در برخی شرایط روشنایی، خطوط حتی می توانند ناپدید شوند. بنابراین، ممکن است بخواهید مواد را قبل از ترسیم خطوط خاموش کنید.

✓ **material <name>**: مواد را برای استفاده برای مولکول گرافیکی مربوطه تنظیم می کند. نام باید یک نام مواد معتبر باشد، همانطور که در فهرست مواد نشان داده شده است.

✓ **deleteId**: گرافیک اولیه را با شناسه داده شده حذف می کند.

✓ **deleteall**: همه ابتدای گرافیک را حذف می کند.

✓ **replaceId**: بعثت اینکه جایگزینی تصویر با شناسه داده شده، باعث ایجاد گرافیک بعدی می شود. (دستورات) بدوی بعدی گرافیکی طبق معمول به انتهای لیست اضافه می شوند.

✓ **existsId**: اینکه آیا بدوی با شناسه داده شده وجود داشته باشد یا خیر برمی گردد.

✓ **list**: لیستی از شناسه های معتبر گرافیکی را برمی گرداند.

✓ **infoid**: متن یک دستور Tcl را که با شناسه داده شده گرافیکی از نومی سازد را، برمی گرداند.

Source	Associated URL
Raster3D	http://www.bmsc.washington.edu/Raster3D/
msms	http://www.scripps.edu/pub/olson-web/people/sanner/html/msms home.html
faq	http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/allversions/vmd faq.html
biocore	http://www.ks.uiuc.edu/Research/biocore/
tachyon	http://www.photonlimited.com/~johns/tachyon/
babel	http://www.eyesopen.com/babel/
homepage	http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/
quickhelp	http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/vmd help.html
radiance	http://radsite.lbl.gov/radiance/HOME.html
maillist	http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/mailling list/
scripts	http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/script library/
namd	http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/
vrml	http://www.web3d.org/
rayshade	http://www-graphics.stanford.edu/~cek/rayshade/rayshade.html http://www.
povray	povray.org
plugins	http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/plugins/
python	http://www.python.org/
software	http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/allversions/related programs.html
tcl	http://www.tcl.tk/
userguide	http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/vmd-1.8.1/ug/ug.html

جدول ۹.۲: منابع کمک کننده ی آنلاین

۹,۳,۱۰ **gettimestep**

زمان بندی مولکول مشخص شده را به عنوان یک آرایه بایت Tcl بازیابی کنید که می تواند برای محاسبات آنالیز راندمان بالا توسط پلاگین های Tcl گرد آوری شده استفاده شود.

✓ **<timestep> <molid>**: بازیابی زمان بندی به عنوان یک آرایه بایت Tcl برای استفاده در تجزیه و تحلیل گردآوری پلاگین ها.

۹,۳,۱۱ **help**

فایل راهنمای آنلاین را با یک نمایشگر HTML نمایش دهید. برای اطلاع از نحوه تغییر بیننده پیش فرض (که Netscape است) به فصل ۱۴ مراجعه کنید.

✓ **[subject]**: پرش برای کمک به متناسب با موضوع.

در حال حاضر، "موضوع" می تواند هر یک از کلمات زیر باشد، که URL مرتبط را راه اندازی می کند. برای اطمینان از عملکرد صحیح سیستم کمک، احتمالاً می خواهید قبل از انتخاب یکی از این گزینه ها، مرورگر وب خود را راه اندازی کنید. بعد از انجام این کار، VMD به درستی مرورگر را به صفحات ذکر شده در زیر هدایت می کند.

۹,۳,۱۲ **imd**

اتصال به یک شبیه سازی از راه دور را کنترل می کند.

- ✓ **connect host port**: به یک شبیه سازی MD در حال اجرا بر روی دستگاه به نام میزبان متصل و به port گوش دهید. اگر ارتباط قبلی که هنوز برقرار نشده است قطع نشده باشد، این فرمان شکست خواهد خورد.
- ✓ **detach**: قطع از شبیه سازی. شبیه سازی ادامه خواهد داشت.
- ✓ **Kill**: از شبیه سازی جدا شوید و همچنین باعث متوقف شدن آن شوید.
- ✓ **<on | off | toggle> pause**: مکث، حالت مکث یا تغییر وضعیت متوقف شده از راه دور شبیه سازی.
- ✓ **transferrate**: میزانی را که در آن مختصات جدید توسط شبیه سازی از راه دور به VMD ارسال می شوند برای مقدار مشخص شده تنظیم کنید.

- ✓ **keep rate**: میزان نگه داشتن، یعنی فرکانس که در آن VMD فریم های شبیه سازی را در حافظه ذخیره می کند، به مقدار مشخص شده تنظیم کند.
- ✓ **<on | off> copy unit cell**: فعال کردن یا غیرفعال کردن اطلاعات سلول واحد کپی کردن از قبلی فریم هنگام به روزرسانی یا ذخیره فریم از طریق IMD. این می تواند در استفاده از نمایشگر دوره ای با IMD مفید باشد زیرا پروتکل IMD در حال حاضر از برقراری ارتباط با اطلاعات غیرقابل پشتیبانی یا در هنگام استفاده از مشتری IMD که پس از تمدید پروتکل این اطلاعات را ارائه نمی دهد پشتیبانی نمی کند.

✓ **WARNING**: هنگام استفاده از imd copyunitcell با شبیه سازی در گروه NPT، اطلاعات

مربوط به واحد نادرست خواهد بود.

تنظیم پیش فرض خاموش است.

۹,۳,۱۳ label

برچسب ها را برای چهار دسته روشن یا خاموش کنید: اتم، پیوند، زاویه یا dihedral angles. چشمه های شبیه سازی شده را ایجاد و از بین ببرید. پس از ایجاد یک برچسب (با توجه به لیست اتم های مرتبط) می توان آن را روشن یا خاموش کرد تا حذف شود. همچنین مقدار برچسب در طول مسیر را می توان در یک پرونده ذخیره کرد و با یک برنامه خارجی مانند xmgrace مشاهده کرد. در زیر، طبقه بندی یکی از [اتم ها — پیوندها — زاویه ها — دی هدرال ها] را نشان می دهد.

✓ **list**: لیستی از دسته های موجود را برگردانید.

✓ **listcategory**: تمام برچسب ها را در گروه داده شده ذکر کنید.

✓ **addcategory molID1/atomID1 [molID2/atomID2] ...**: برچسب مربوط به اتم (ها)

atomID مولکول مولکول را به دسته معین اضافه کنید.

✓ **showcategory <all|label number>**: برچسب ها را در گروه مشخص شده روشن کنید.

✓ **hidecategory <all|label number>**: برچسب ها را در گروه مشخص شده خاموش کنید.

✓ **deletecategory <all|label number>**: برچسب ها را در گروه مشخص شده حذف کنید.

✓ **graph category label number [filename]**: مقادیر برچسب ها را برای همه زمان ها

بازیابی کنید. اگر نام اختیاری داده شده باشد، داده ها برای آن پرونده نوشته می شوند. در

غیر این صورت به عنوان لیست برگردانده می شود. برای ترسیم داده ها در صورت تمایل می

توانید از دستور Tcl exec برای راه اندازی یک برنامه گرافیکی خارجی استفاده کنید.

✓ **addspring molID1 atomID1 atomID2 k**: فنری را اضافه کنید که اتم (ها) atomID و

atomID۲ مولکول molID را به هم وصل می کند. به فنر k فنر ثابت دارد.

✓ **textsize [newszie]**: اندازه متن را برای همه برچسب ها دریافت یا تنظیم کنید، که به

طور پیش فرض ۱۰ است. اندازه جدید باید مقدار اعشاری بیشتر از صفر باشد.

✓ **textthickness [newthickness]**: ضخامت خط متن را برای همه برچسب ها دریافت

کنید، تنظیم کنید که ۱۰ در آن است. پیش فرض newthickness باید یک مقدار اعشاری

بیشتر از صفر باشد.

۹,۳,۱۴ light

چهار منبع نور با شماره ۰ تا ۳ وجود دارد که برای روشنایی اشیاء گرافیکی استفاده می شوند. آنها

منابع نقاط واقع در بینهایت هستند، بنابراین با قرار دادن موقعیت های خود، آنها را در امتداد پرتوی

از مبدا از طریق نقطه مشخص قرار می دهند.

✓ **num**: تعداد نورهای موجود را برگردانید.

✓ **light number on**: نورها را روشن کنید.

✓ **light number off**: نورها را خاموش کنید.

✓ **light number status**: جفت خاموش / روشن highlight/unhighlight را غیرفعال کنید.

✓ **light number rot <x|y|z> angle**: یک درجه زاویه نوری (در بینهایت) را در حدود یک

محور مشخص بچرخانید.

✓ **light numer pos**: موقعیت فعلی را برگردانید.

✓ **light numer pos default**: وضعیت پیش فرض را برگردانید.

✓ **light numer pos {xyz}**: موقعیت نور را تنظیم کنید.

۹,۳,۱۵ logfile

روشن کردن یا خاموش کردن ورود به جلسه VMD به یک پرونده log. با این کار برای همه اقدامات

انجام شده در طول جلسه، یک فایل log با دستورات ایجاد می شود. پرونده log ممکن است بعداً

با استفاده از دستور «play» یا دستور «منبع Tcl» پخش شود. تنها اقدامات ضبط شده مواردی

است که وضعیت صفحه نمایش VMD را تغییر می دهد، بنابراین دستورات مستقیم Tcl ذخیره نمی

شوند. همه دستورات اصلی VMD روی سیاهه نامه می نویسند.

✓ **Filename**: ورود به سیستم را برای نام پرونده روشن کنید.

✓ **Console**: ورود به سیستم را روشن کنید و آن را به پنجره کنسول متن VMD هدایت کنید.

✓ **Off**: ورود به سیستم را خاموش کنید.

برای نوشتن اطلاعات ورود به پرونده «خاموش»، از نام پرونده «./off» استفاده کنید.

۹,۳,۱۶ material

این مجموعه دستورات برای ایجاد تعاریف جدید مواد و اصلاح دستورات موجود استفاده می شود.

✓ **List**: لیستی از مطالب موجود را برگردانید.

✓ **settings name**: لیستی از پنج تنظیمات متریکال برای متریکال و نام داده شده را بازگردانید.

این تنظیمات مقادیر نقطه ating شناور را بین ۰ و ۱ به دست می آورند. مقادیر به ترتیب زیر

برمی گردند: محیط، دایره ای، پراکندگی، درخشندگی، آینه، کدورت. اگر ماده مشخص شده تعریف نشده باشد، هیچ چیزی بازگردانده نمی شود.

✓ **add name**: با نام معین یک ماده جدید ایجاد کنید. مواد جدید با تنظیمات Opaque شروع می شود. اگر این نام از قبل وجود داشته باشد، هیچ ماده جدیدی ایجاد نمی شود.

✓ **add copy name**: ماده جدیدی را که از نام مواد انتخاب شده کپی شده است، ایجاد کنید.

✓ **rename oldname newname**: ماده داده شده را تغییر نام دهید. دستور ناموفق خواهد بود اگر قبلاً استفاده شده باشد.

✓ **change property name value**: یک خاصیت مادی از نام ماده را به آن تغییر دهید مقدار ارزش خاصیت باید یکی از موارد زیر باشد:

ambient-specular-shininess-mirror-opacity

✓ **delete name**: متریال داده شده را حذف کنید.

۹,۳,۱۷ mdffi

دستور mdffi پیاده سازی سریع داخلی از الگوریتم های سنتز نقشه همبستگی متقابل و تراکم نقشه استفاده شده برای شبیه سازی، تجزیه و تحلیل و تجسم انعطاف پذیر دینامیک مولکولی (MDFF) را ارائه می دهد [۲۶].

✓ **c selection [-allframes] [-i input density map] [-mol molid | -vol volume ID]**

[-thresholddensity

threshold value]:

همبستگی MDFF را بین یک انتخاب از یک ساختار مولکولی آلاتوم و یک نقشه تراکم محاسبه می کند.

✓ **sim selection [-o output density map] [-res target resolution in °A] [-spacing grid spacing]:**

نقشه تراکم شبیه سازی شده را از یک انتخاب اتم بر روی یک ساختار مولکولی همه اتم محاسبه کنید.

۹,۳,۱۸ measure

دستور اندازه گیری چندین الگوریتم برای تجزیه و تحلیل ساختارهای مولکولی ارائه می دهد. در گزینه های زیر، انتخاب به انتخاب اتم گفته می شود، همانطور که توسط دستور atomselect که

در بخش ۹,۳,۲ شرح داده شده است برگردانده شده است. وزن اختیاری باید یکی باشد، یک کلمه کلیدی انتخاب اتم مانند جرم، یا لیستی از مقادیر، یک برای هر اتم در انتخاب، به عنوان وزن استفاده شود. اگر وزن از دست رفته باشد و یا هیچ باشد، تمام وزنها برابر با ۱ گرفته می شوند. وقتی از کلمه کلیدی انتخاب اتم استفاده می شود، وزن ها از انتخاب گرفته می شوند.

✓ **step step [last last] [first first] [avposselection]**: میانگین موقعیت هر یک از اتمهای

انتخاب شده را برای قابهای انتخاب شده برمی گرداند. اگر مقادیر اول، آخر یا مرحله ارائه نشود، محاسبه برای همه فریم ها انجام می شود.

✓ **center selection [weight weight]**: با استفاده از وزن معین، مرکز هندسی اتمها را در انتخاب برمی گرداند.

✓ **cluster selection [num numclusters] [distfunc flag] [cutoff cutoff] [first first] [last last]**

✓ **[weight weight] [selupdate bool] [step step]**: تجزیه و تحلیل خوشه ای را انجام می

دهد (خوشه های زمان سنج را که با توجه به یک عملکرد از راه دور مشابه هستند) برای اتم های انتخاب با استفاده از وزن معین پیدا کنید. اجرای براساس الگوریتم آستانه کیفیت (OT) است. برای اطلاعات بیشتر در مورد این الگوریتم به <http://dx.doi.org/10.1063/1.1191106> است. برای اطلاعات بیشتر در مورد این الگوریتم به <http://dx.doi.org/10.1063/1.1191106> است. تجزیه و تحلیل خوشه ای در ویکی پدیا مراجعه کنید. به طور معمول، فقط تعداد کمی از بزرگترین خوشه ها مورد توجه هستند. این پیاده سازی این امر را در نظر می گیرد و مصرف کم حافظه در مجموعه داده ها با فریم های زیادی را برای تعیین سریع خوشه های متعدد معامله می کند. با استفاده از کلید واژه num برای تنظیم چند خوشه برای تعیین (پیش فرض ۵ است). پرچم distfunc «عملکرد فاصله» را انتخاب می کند. گزینه های موجود «rmsd» (میانگین ریشه مربع فاصله اتم به اتم)، «fitrmsd» (میانگین ریشه مربع فاصله اتم به اتم بعد از تراز) و «rgyrd» (تفاوت شعاع gyration) است. پرچم cutoff، حداکثر فاصله بین دو فریم را که مشابه در نظر گرفته می شوند (مقدار پیش فرض ۰٫۱ است) تعیین می کند. پرچم weight اجازه می دهد تا از یک ویژگی اتم استفاده شود، به عنوان مثال جرم یا شعاع، به عنوان فاکتور وزنی استفاده می شود (پیش فرض هیچ گونه وزنی نیست). در این لیست لیستی از لیستهای numcluster + ۱ که هر یک حاوی لیست شاخص های قاب مسیر متعلق به یک خوشه در کاهش اندازه است، برمی گرداند. لیست آخر شامل شاخصهای فریم باقیمانده و در عین حال نامشخص است.

✓ **[selection2] [contacts cutoff selection1]**: تمام اتم ها را در انتخاب ۱ پیدا کنید که در قطع هر اتم در انتخاب ۲ قرار دارند و به آن پیوند ندارند. اگر انتخاب ۲ حذف شود، همان انتخاب ۱ گرفته می شود. انتخاب ۲ و انتخاب ۱ یا می تواند از همان مولکولهای مختلف باشد. دولیست از شاخصهای اتمی را نشان می دهد، اولین حاوی اولین شاخص از هر جفت (گرفته شده از انتخاب ۱) و دوم حاوی شاخص دوم (گرفته شده از انتخاب ۲). توجه داشته باشید که این شاخص، شاخص جهانی اتم با توجه به مولکول اصلی آن است، بر خلاف شاخص موجود

در انتخاب اتمی که حاوی آن است.

✓ **dipole selection [-elementary—debye] [-geocenter—masscenter—origin- center]**: بردار لحظه ای دو قطبی اتم ها را در انتخاب موقعیت های مربوطه و مقادیر بار آنها محاسبه کنید. نتیجه به طور پیش فرض فرضی را در واحدهای دارای یک بار ابتدایی و مسافت در آنگستروم تحمل می کند. به طور پیش فرض نتیجه در همان واحدها (همان استفاده از پرچم -elementary) داده می شود، با تنظیم پرچم -debye، خروجی را به واحدهای Debye تبدیل می کند. برای انتخاب هایی که پس از جمع کردن تمام هزینه های فردی بار پسماند دارند، بردار دو قطبی حاصل به انتخاب مرکز توزیع بار بستگی دارد. به طور پیش فرض، مرکز هندسی انتخاب خواهد بود (نام هایی که از پرچم مرکز استفاده می کنند)، اما با استفاده از مرکز جرم انتخاب از طریق پرچم -masscenter در دسترس است، و همچنین استفاده از مبدا از طریق پرچم -origincenter. استفاده از -masscenter توصیه می شود، اما به طور پیش فرض ساخته نمی شود زیرا بستگی به مقدار جرم به درستی برای همه اتم ها دارد.

✓ **[fit selection1 selection2] [weight weight] [order index list]**: یک ماتریس تحول ۴x۴ را نشان می دهد که وقتی در انتخاب ۱ به اتم ها اعمال می شود، RMSD وزنی بین انتخاب ۱ و انتخاب ۲ را به حداقل می رساند. برای اطلاعات بیشتر در مورد تراز RMSD به بخش ۱۲/۴٫۲ مراجعه کنید. ترتیب پرچم اختیاری لیستی از شاخص های مبتنی بر ۰ را نشان می دهد که چگونگی ترتیب مجدد اتم ها در انتخاب ۲ را مشخص می کند (مثال: برای معکوس کردن ترتیب اتم ها در یک انتخاب شامل ۱۰ اتم یکی از دستورات {۰۱۲۳۴۵۶۷}۹).

✓ **gofr selection1 selection2 [delta value] [rmax value] [usepbcb boolean] [selup- [date boolean]**

✓ **[first first] [last last] [step step]**: تابع توزیع جفت شعاعی اتمی (g(r) و عدد integral $\int r^2 dr \cdot pg(r)$ را برای همه جفت اتمها در دو انتخاب محاسبه می کند. هر دو انتخاب باید به همان مولکول مراجعه کنند و ممکن است یکسان باشند. در صورتی که یکی از گزینه ها برای یک مرحله زمانی مشخص به یک فهرست خالی برگردد، و آرایه خالی به هیستوگرام ها اضافه شود. دستور یک لیست از پنج لیست حاوی $pg(r)$ ، $r^2 dr$ ، $g(r)$ ، R ، r و یک لیست از شمارنده های فریم را شامل می کند که در حال حاضر ۳ عنصر دارد: تعداد کل فریم های پردازش شده، تعداد رد شده فریم ها و تعداد فریم های مورد استفاده با الگوریتم سلول متعامد (الگوریتم بیشتر و لیست مربوطه در آینده اضافه می شود). با دلتا آرگومان های اختیاری (پیش فرض ۱/۰) و $rmax$ (پیش فرض ۱۰/۰) می توان رزولوشن و حداکثر مقدار r را تنظیم کرد. با استفاده از پرچم usepbcb می توان شرایط مرزی دوره ای را روشن کرد. با فعال کردن پرچم selupdate، هر دو انتخاب اتم با پردازش هر فریم به روز می شوند و امکان استفاده مولد از "درون" را فراهم می کنند. اندازه unitcell باید در پرونده مسیر ذخیره شود یا برای همه فریم ها با دستور molinfo باید بصورت دستی تنظیم شود. این فرمان به طور پیش فرض فقط از قاب فعال فعلی برای هر دو گزینه استفاده می کند. استفاده از محدوده

فریم اکتشافی از طریق مرحله اول، آخر و مرحله برای بیشتر موارد توصیه می شود.

✓ **[hbonds cutoff angle selection1 [selection2]**: با استفاده از معیارهای هندسی ساده، تمام پیوندهای هیدروژن را در انتخاب (های) معین پیدا کنید. اهدا کننده و پذیرنده باید در فاصله قطع باشند و زاویه تشکیل دهنده، هیدروژن و پذیرنده باید از زاویه ۱۸۰ درجه کمتر باشد. فقط اتمهای غیر هیدروژن در هر دو انتخاب در نظر گرفته می شوند. اگر هر دو انتخاب ۱ و انتخاب ۲ داده شود، انتخاب ۱ اهدا کننده در نظر گرفته می شود و انتخاب ۲ پذیرنده در نظر گرفته می شود. اگر تنها یک انتخاب داده شود، تمام اتمهای غیر هیدروژن موجود در این انتخاب، اهدا کننده و پذیرنده در نظر گرفته می شوند. این دو انتخاب باید از یک مولکول یکسان باشند. این تابع سه لیست را برمی گرداند. هر عنصر در هر لیست با یک پیوند هیدروژن مطابقت دارد. لیست اول حاوی شاخصهای اهدا کنندگان، دسته دوم شامل شاخصهای پذیرندگان است و دسته سوم شامل شاخص اتم هیدروژن در پیوند هیدروژن است.

✓ **inverse matrix**: معکوس ماتریس داده شده ۴x۴ را برمی گرداند.

✓ **minmax selection**: دو بردار را نشان می دهد، اولین حاوی حداقل مختصات x، y و z از همه اتم ها در انتخاب، و دوم حاوی حداکثر مربوطه.

✓ **[rgyr selection] [weight weights]**: با استفاده از وزن معین، شعاع چرخش اتمها را در انتخاب برمی گرداند. شعاع چرخش محاسبه می شود به عنوان

$$r_{gyr}^2 = \left(\sum_{i=1}^n w(i) (r(i) - \bar{r})^2 \right) / \left(\sum_{i=1}^n w(i) \right) \quad (9.1)$$

✓ **جایی که $r(i)$ موقعیت اتم ith است و $\bar{r}$ مرکز وزنی به عنوان محاسبه کننده توسط مرکز اندازه گیری است.**

✓ **[rmsd selection1 selection2] [weight weights]**: میانگین فاصله مربع ریشه بین اتم های مربوطه را در دو انتخاب برمی گرداند و وزن معین آن وزن می گیرد. انتخاب ۱ و انتخاب ۲ باید دارای تعداد اتم های یکسانی باشد (انتخاب ها ممکن است از مولکول های مختلفی باشد که تعداد اتم های متفاوتی دارند).

✓ **[rmsf selection [first first] [last last] [step step]**: میانگین نوسانات موقعیت مربع ریشه را برای هر اتم انتخاب شده در قاب های انتخاب شده برمی گرداند. اگر مقادیر اول، آخر یا مرحله ارائه نشود، محاسبه برای همه فریم ها انجام می شود.

✓ **sasa srad selection [-points varname] [-restrict restrictedsel] [-samples num- [samples]**: با استفاده از شعاع اختصاص یافته برای هر اتم، سطح دسترسی اتم های حلال را برمی گرداند و هر شعاع را توسط srad امتداد می دهد تا نقاطی را در کره که در معرض حلال

است پیدا کند. در صورت استفاده از انتخاب محدود، فقط نقاط قابل دسترسی با حلال در نزدیکی آن انتخاب در نظر گرفته می شود. از گزینه محدود می توان برای جلوگیری از تأثیری پروتئین های داخلی یا جیب در نتایج سطح استفاده کرد. از گزینه نقاط می توان برای دیدن مکان های منطقه از کجا استفاده می کند و سپس می توان از پرچم محدود برای حذف هرگونه کمک ناخواسته پس از تجسم در آنها استفاده کرد. پارامتر varname را می توان برای جمع آوری امتیازهایی که مشخص می شود در دسترس با حلال است، استفاده کرد.

✓ **sumweights selection weight weights** : مجموع لیست وزنها (یا فیلد داده برای استفاده از وزنها) را برای همه اتمهای موجود در انتخاب برمی گرداند.

✓ **bondatomlist[options]** : فاصله دو اتم مشخص شده را برمی گرداند. اتم ها به صورت لیستی از شاخص های اتم مشخص می شوند. مگر در مواردی که یک مولکول مشخص را از طریق «molid molecule number» مشخص کنید، این شاخص ها به مولکول بالای فعلی اشاره دارند. اگر اتم ها در مولکول های مختلف هستند می توانید از فرم {atomid\} [molid\] use ... {[molid\] atomid\} می توانید شناسه مولکول را برای اتمهای فرد تنظیم کنید. توجه داشته باشید که پیوند اندازه گیری به پیوندهایی که در یک پرونده psf مشخص شده اند یا در VMD کشیده شده اهمیتی نمی دهد، فقط فاصله را برمی گرداند! چیزهای مشابه برای زاویه اندازه گیری، رقیق شدن و ضخامت نیز صادق هستند.

گزینه های زیر قابل تعیین است:

<default molid> molid : مولکول پیش فرض که یک اتم به آن تعلق دارد مگر اینکه یک تعداد مولکول به طور صریح برای این اتم در لیست اتم ها مشخص شده باشد. علاوه بر این، تمام مشخصات قاب به این مولکول اشاره دارد. (پیش فرض مولکول برتر فعلی است).

<frame> frame : به طور پیش فرض مقدار برای فریم فعلی بازگردانده می شود اما یک فریم خاص را می توان از طریق این گزینه انتخاب کرد. به منظور بدست آوردن لیستی از مقادیر برای همه فریم ها یا فقط آخرین قاب، می توانید به جای عدد فریم، همه یا آخرین را مشخص کنید.

<first> first : برای مشخص کردن اولین فریم از یک قاب از این گزینه استفاده کنید. (پیش فرض فریم فعلی است).

<last> last : برای مشخص کردن آخرین فریم یک محدوده قاب از این گزینه استفاده کنید. (پیش فرض آخرین قاب مولکول است).

در صورتی که شناسه های مولکول را در لیست اتم مشخص کرده باشید، مشخصات کلیه فریم ها به مولکول برتر فعلی اشاره خواهد کرد مگر اینکه یک مولکول پیش فرض با استفاده از گزینه «molid» تنظیم نشده باشد. از آنجا که مولکول بالا می تواند متفاوت از مولکولهای موجود در اتمهای منتخب باشد، به

طور کلی ایده خوبی است برای تعیین یک مولکول پیش فرض.

در اینجا چند مثال از استفاده ذکر شده است:

پیوند اندازه گیری {۵۳} - فاصله بین اتم های ۳ و ۵ از فریم فعلی مولکول بالا را نشان می دهد - پیوند اندازه گیری {۵۳} frame all\ molid - فاصله بین اتم های ۳ و ۵ مولکول ۱ را برای همه فریم ها بازمی گرداند.

پیوند اندازه گیری {۳\۱۵} first\ molid - فاصله بین اتم ۳ مولکول ۰ و اتم ۵ مولکول را برمی گرداند. مقادیر برای همه فریم ها بین هفتمین و آخرین فریم از مولکول ۰ محاسبه می شود.

✓ **angleatom_list[options]** : زاویه ای را می پوشاند که توسط سه اتم پوشیده شده است.

همانند قالب ورودی دستور پیوند اندازه گیری.

✓ **dihedatomlist[options]** : زاویه دیافراگم تعریف شده توسط چهار اتم را برمی گرداند.

همانند قالب ورودی دستور اندازه گیری پیوند.

✓ **imprpatomlist[options]** : زاویه دو سطحی نادرست تعریف شده توسط چهار اتم را

برمی گرداند. همانند قالب ورودی دستور اندازه گیری پیوند.

✓ **energy energy_term atom_list [parameters] [options]** :

اصطلاح انرژی مشخص شده را برای مجموعه مشخصی از اتم ها برمی گرداند. اصطلاح انرژی باید یکی bond, angle, dihed, imprp, vdw یا elect باشد، جاییکه که vdw مخفف «van der Waals» و elect برای انرژی الکترواستاتیک است. انرژی بر اساس توابع میدان نیروی CHARMM، پارامترهای داده شده و مختصات فعلی محاسبه می شود. همه گزینه های مربوط به دستور اندازه گیری bond برای اندازه گیری انرژی نیز هستند. بنابراین، به عنوان مثال می توانید انرژی برای طیف وسیعی از قاب های یک تراژکتوری درخواست کنید. همچنین قالب لیست اتمها یکسان است. پارامترهای زیر را می توان مشخص کرد:

<value> k : نیروی ثابت برای انرژی های پیوند، زاویه، dihed و imprp به ترتیب در $\text{kcal / mol / rad}^2$ یا kcal / mol / A^2 است.

<value> x : مقدار تعادل برای طول باند، زاویه، زاویه دوسطحی و زاویه دوسطحی نامناسب ۱۷ در آنگستروم یا درجه است.

<value> kub : نیروی اوری برادلی برای زاویه هایی در kcal / mol / A^2 ثابت است.

<value> s : فاصله تعادل اوری - بردلی برای زاویا در آنگستروم.

<value> n : تناوب دی هدرال.

<value> delta : تغییر فاز دی هدرال در درجه (معمولاً ۰٫۰ یا ۱۸۰٫۰).

<value> rmin1 : فاصله تعادل VDW برای اتم ۱ در آنگستروم.

<value> rmin2 : فاصله تعادل VDW برای اتم ۲ در آنگستروم.

✓ **eps** <value>: عمق چاه انرژی VDW (اِپسیلون) برای اتم ۱ در کیلو کالری / مول.

✓ **eps2** <value>: عمق چاه انرژی VDW (اِپسیلون) برای اتم ۲ در کیلو کالری / مول.

✓ **q1** <value>: بار اتم ۱.

✓ **q2** <value>: بار اتم ۲.

✓ **cutoff** <value>: فاصله کات آف غیرمتصل.

✓ **switchdist** <value>: فاصله سوئیچینگ غیرمتصل.

برای همه پارامترهای حذف شده مقدار پیش فرض ۰٫۰ فرض می شود. برای انرژی

الکترواستاتیک، بارهای پیش فرض از میدان مبتنی بر اتم مولکول گرفته می شوند.

اگر برش تنظیم نشده یا صفر باشد، از هیچ عملکرد قطع استفاده نمی شود.

✓ **surface selection gridsize radius depth**: لیستی از شاخصهای اتمی را که شامل سطح

اتمهای انتخاب شده است، برمی گرداند. روش تعیین سطح، ساختن یک شبکه با فاصله

تقریباً برابر با gridsize است، جایی که هر نقطه از شبکه کاملاً یا خالی مشخص شده است،

بسته به اینکه آیا اتمهای انتخابی در فاصله شعاعی از نقطه شبکه قرار دارند. اگر پارامترهای

سلولی دوره ای در VMD تعریف می شود، این مولکول دوره ای در نظر گرفته می شود و شبکه

منعکس کننده مختصات تصاویر دوره ای از انتخاب است. اندازه شبکه ممکن است از آنچه

به روال منتقل می شود تغییر کند تا یک بعد شبکه عدد صحیح ابعاد جعبه حاوی مولکول

متناسب باشد. سرانجام، هر اتمی که در فاصله عمق یک نقطه شبکه خالی قرار داشته باشد،

یک اتم سطح در نظر گرفته می شود و دستور لیستی از شاخص های اتم را برای همه این اتم

ها برمی گرداند.

✓ **[frame frame] last [pb2onc center]**: ماتریس تحول را محاسبه می کند که مختصات

را از یک سلول PBC دلخواه تبدیل می کند. از آنجا که مرکز سلول توسط VMD ذخیره نمی

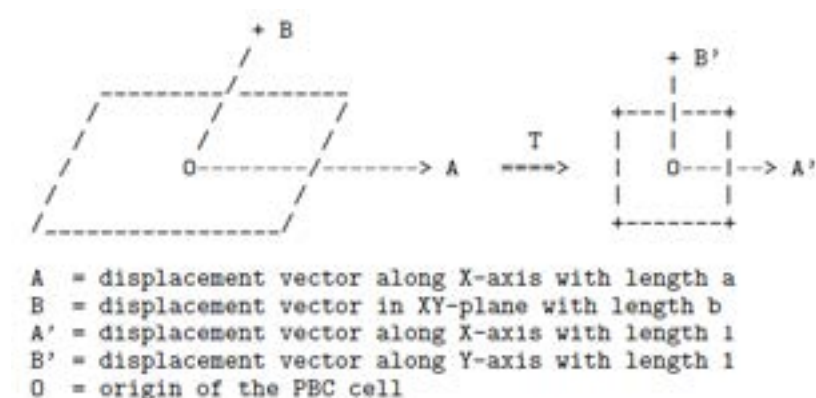
شود، باید آن را مشخص کنید.

✓ **در اینجا یک نمونه 2D از یک سلول PBC غیر متعامد وجود دارد:** A و B ناقلهای جابجایی هستند

که برای ایجاد تصاویر همسایه مورد نیاز هستند. موازی مشخصه سلول PBC با منشأ O در

مرکز آن است. مربع در سمت راست سلول واحد ارتونومی یعنی منطقه ای را که در آن اتم ها

با تغییر T پیچیده می شوند نشان می دهد.



✓ **[options] [pb2onc center cutoff]**: تمام اتمهای تصویری را که در کات آف A از

unBCell PBC قرار دارند به شکل دو لیست برمی گرداند. لیست اول مختصات اتم را در خود

جای می دهد، و دومی نقشه ی Indexlist اتم های تصویر را به اتم های موجود در unitcell

ترسیم می کند. از آنجا که مرکز سلول های PBC در DCD ها ذخیره نمی شود و نمی تواند در

VMD تنظیم شود، باید به عنوان اولین آرگومان توسط کاربر فراهم شود.

استدلال دوم (cutoff) حداکثر فاصله (در درجه ی آنگستروم) از سلول واحد PBC برای اتمها

در نظر گرفته شده است. به عبارت دیگر، بردار قطع منطقه اطراف سلول pbc را مشخص می

کند که برای آن باید اتم های تصویر ساخته شوند (یعنی {۰ ۸ ۶} به معنی ۶ آنگستروم برای

جهت A، ۸ آنگستروم برای B و هیچ تصویری در جهت C نیست.)

گزینه های زیر قابل تعیین است:

✓ **molid** <molecule number>: مولکول پیش فرض که یک اتم به آن تعلق

دارد مگر اینکه یک تعداد مولکول به طور صریح برای این اتم در لیست اتم

ها مشخص شده باشد. علاوه بر این، تمام مشخصات فریم به این مولکول

اشاره دارد. (پیش فرض مولکول برتر فعلی است.)

✓ **frame** <frame>: به طور پیش فرض مقدار برای فریم فعلی بازگردانده می

شود اما یک فریم خاص را می توان از طریق این گزینه انتخاب کرد. به منظور

بدست آوردن لیستی از مقادیر برای همه فریم ها یا فقط آخرین فریم به ترتیب

می توانید به جای شماره فریم، همه یا آخرین را مشخص کنید.

✓ **sel** <selection>: اگر انتخاب اتمی ارائه شود، پس فقط آن اتمهای تصویر

برگردانده شده در کات آف اتمهای منتخب سلول اصلی هستند. در مورد کات اف

بردار بیشترین مقدار استفاده خواهد شد.

✓ **align** <matrix>: در صورت تراز شدن مولکول می توانید ماتریس تراز را تهیه

کنید که سپس برای اصلاح چرخش و تغییر سلول pbc استفاده می شود.

✓ **[mincoord] <maxcoord> [boundingbox PBC]**: با این گزینه، اتمها

در یک جعبه اتصال مستطیل پیچیده می شوند. اگر «PBC» را به عنوان

استدلال ارائه دهید، جعبه محدوده جعبه PBC را محصور می کند، اما سپس

کات آف به جعبه محدود کننده اضافه می شود. مقادیر منفی برای ابعاد کات

آف مجاز است و به یک جعبه کوچکتر منتهی می شود. در عوض شما می

توانید یک جعبه محدودیت سفارشی را نیز در قالب مختصات minmax تهیه

کنید (لیستی شامل دو بردار مختصات مانند بازگشت با دستور اندازه گیری

minmax). در اینجا، دوباره، کات آف به جعبه محدود کننده اضافه می شود.

✓ **[eigenvals] [inertia selection [moments]]**: مرکز توده و محورهای اصلی اینرسی را

برای اتمهای انتخاب شده برمی گرداند. اگر moments تنظیم شده باشد، ممان‌های کشش اینرسی نیز برمی گردد. با گزینه eigenvals، مقادیر ویژه مربوطه نیز بازگردانده می شوند. اگر هر دو پرچم تنظیم شود، مقادیر ویژه پس از ممان‌ها ذکر می شوند.

✓ **symmetryselection[plane][Cn|Sn[vector]][tolvalue][nobonds][verboselevel]**: این عملکرد تقارن مولکولی یک اتم انتخابی را ارزیابی می کند. الگوریتم زیربنایی عناصر تقارن مانند مرکز وارونگی، صفحات آینه، محور چرخشی و بازتاب های چرخشی را پیدا می کند. بر اساس عناصر تقارن یافت شده، آن گروه اصلی را حدس می زند. حدس نسبتاً قوی است و می تواند مولکولهایی را کنترل کند که مختصات آنها تا حدی از تقارن ایده آل منحرف می شوند. نزدیکترین تطابق با بالاترین تقارن برمی گردد.

گزینه ها:

tol <value>: به شخص اجازه می دهد هنگام بررسی اینکه آیا چیزی متقارن است یا خیر، تحمل الگوریتم را کنترل کند. مقدار کمتری تحمل کمتری را نشان می دهد، پیش فرض آن ۸e است.

nobonds: اگر این پرچم تنظیم شده باشد، هنگام مقایسه ساختارها، ترتیب و جهت گیری باند در نظر گرفته نمی شود.

verbose <level>: میزان خروجی کنسول را کنترل می کند. سطح ۰ به معنی خروجی نیست، برخی از آماری را در انتهای جستجو (پیش فرض) ارائه می دهد. سطح ۲ اطلاعات تکمیلی در مورد هر مرحله ارائه می دهد، و ۲، ۳، ۴ اطلاعات بیشتری را برای هر تکرار ارائه می دهد.

idealselection <selection>: جستجوی تقارن روی انتخاب منظم انجام می شود اما سپس عناصر تقارن یافت شده با انتخاب گزینه انتخاب شده با این گزینه تحمیل می شوند و جستجو با این انتخاب دوم تکرار می شود. به عنوان مثال، این روش می تواند حدس تقارن را بر روی يك انتخاب بدون هیدروژن انجام دهد (که ممکن است برای گروه های قابل چرخش در جهات تصادفی باشد) اما هنوز هم مختصات ایده آل و اتم های منحصر به فرد را برای کل ساختار بدست می آورد. انتخاب مشخص شده در اینجا باید یک مجموعه انتخابی باشد که برای جستجوی تقارن استفاده می شود.

۱: به جای حدس زدن گروه نقطه تقارن انتخاب، تعیین کنید آیا مرکز خاموش انتخاب مرکز نمایانگر یک مرکز وارونگی است. مقدار بازده نمره ای بین ۰ و ۱ است که در آن ۱ مطابقت کامل را نشان می دهد.

plane <vector>: به جای حدس زدن گروه نقطه تقارن انتخاب، مشخص کنید که آیا صفحات مشخص شده توسط بردار عادی آن، صفحه آینه ای از انتخاب است. مقدار بازده نمره ای بین ۰ و ۱ است که در آن ۱ مطابقت کامل را نشان می دهد.

Cn|Sn <vector>: به جای حدس زدن گروه نقطه تقارن انتخاب، مشخص کنید که آیا محور چرخش یا بازتاب چرخشی Cn / Sn با ترتیب n تعریف شده توسط بردار برای انتخاب وجود دارد یا خیر. به عنوان مثال، اگر می خواهید سوال کنید که آیا محور ۲ دارای تقارن چرخشی C۳ است، شما مشخصاً C۳ {۰۱۰} را مشخص می کنید. مقدار بازگشتی امتیازی بین ۰ و ۱ است که در آن ۱ مطابقت کامل را نشان می دهد.

Imposeinversion: یک مرکز وارونگی را روی سازه وارد کنید.

imposeplanes {<vector> [<vector...> order [<vector> order...]}: صفحات داده شده توسط یک لیست از بردارهای عادی را بر روی ساختار وارد کنید.

imposeaxes|imposerotref {<vector> order [<vector> order...]}: محورهای دوار یا بازتابهای چرخشی را بر روی ساختار مشخص شده توسط لیستی از جفت های بردار و یک عدد صحیح تحمیل کنید. هر جفت یک محور و ترتیب آن را مشخص می کند.

امتیازات عناصر تقارن تکی بستگی به تحمل مشخص دارد. تحمیل عناصر تقارن بر روی یک ساختار، اتمها را در اطراف این عناصر پیچیده و به طور متوسط مختصات اتمها و تصاویر آن را می سازد. اتمهایی که هیچ تصویری برای آنها یافت نمی شود (با توجه به آن تحول) پیچیده نمی شوند. یعنی، اگر محوری را به مولکولی تحمیل کنید که چنین تقارن دوار در تحمل معین نداشته باشد، هیچ اتفاقی نخواهد افتاد.

نتایج:

مقدار بازده، یک لیست جفت TCL است که از یک رشته برچسب و یک مقدار یا لیست تشکیل شده است. برای هر برچسب داده های زیر آن در زیر شرح داده شده است:

Pointgroup گروه نقطه حدس زده. برای گروه های نقطه ای که نظم مربوط به آن را دارند، مانند C۳v یا D۲، سفارش با «n» جایگزین می شود و ما Cnv یا Dn داریم. ترتیب به صورت جداگانه اعمال می شود (در زیر مراجعه کنید) **Order** ترتیب گروه نقطه، یعنی مرتبه بالاترین محور (در صورت عدم استفاده ۰). **Elements** خلاصه عناصر تقارن یافت شده، یعنی مرکز وارونگی، محورهای دوار، بازتابهای چرخشی، هواپیماهای آینه. مثال: «(C۳) (i) ۳ * (C۲) (S۶) ۳ * (sigma)» برای گروه D۳d.

Missing عناصر مربوط به مجموعه ایده آل ها از عناصر موجود نیست (همان قالب بالا). اگر این یک لیست خالی نباشد، با الگوریتم یافتن تقارن، چیزی به طرز وحشتناکی پیش آمده است.

Additional عناصر اضافی که برای این گروه نقطه انتظار نمی رود (همان

قالب بالا). اگر این یک لیست خالی نباشد، با الگوریتم یافتن تقارن، چیزی به طرز وحشتناکی پیش آمده است.

Com مرکز توده انتخاب بر اساس مختصات ایده آل (در زیر به «ایده آل» مراجعه کنید).

Inertia لیست سه محور اینرسی، مقادیر ویژه لحظات تانسور اینرسی و لیستی از سه پرچم $1/^\circ$ که مشخص می کند برای هر محور بی نظیر است یا خیر.

Inversion پرچم $1/^\circ$ را نشان می دهد که یک مرکز وارونگی وجود دارد.

Axes بردارهای عادی تعیین محورهای دوار

Rotreflect بردارهای عادی تعیین بازتابهای دوار

Planes بردارهای عادی تعیین صفحات آینه

Ideal مختصات متقارن ایده آل برای همه اتم های انتخاب. مختصات به ترتیب افزایش شاخص های اتمی ذکر شده اند (همان مرتبه ای که توسط دستور "get x y z atomselect" برگردانده شده است). بنابراین می توانید از لیست استفاده کنید تا اتم های انتخاب خود را بر روی مختصات ایده آل قرار دهید (به مثال زیر مراجعه کنید).

Unique فهرست مجموعه ای از اتم ها با مختصات منحصر به فرد.

Orient ماتریسی که مولکول را با جهت گیری استاندارد GAMESS تراز می کند. اگر مورد خاصی موجود نباشد (به عنوان مثال بدون صفحات یا بدون محور)، مقدار مربوطه یک لیست خالی است. قالب جفت اجازه می دهد تا از نتیجه به عنوان یک آرایه TCL برای دسترسی راحت به موارد مختلف بازگشت استفاده کنید.

مثال:

```
set sel [atomselect top all]
# Determine the symmetry
set result [measure symmetry $sel]
# Create array 'symm' containing the results
array set symm $result
# Print selected elements of the array
puts $symm(pointgroup)
puts $symm(order)
puts $symm(elements)
puts $symm(axes)
# Set atoms of selection to ideally symmetric coordinates
$sel set {x y z} $symm(ideal)
```

۹,۳,۱۹ menu

فرمان منو، ویندوزهای GUI روی صفحه را کنترل یا پرس و جو می کند.

✓ **list** : لیستی از منوهای موجود را برگردانید.

✓ **menu name on** : منورا روشن کنید.

✓ **menu name off** : منورا خاموش کنید.

✓ **menu name status** : اگر روشن است روشن، اگر خاموش است خاموش کنید.

✓ **menu name loc** : محل x y را برگردانید.

✓ **menu name move x y** : یک منورا به مکان داده شده (x, y) منتقل کنید.

نام فهرست پارامترها یکی از نامهای زیر است: رنگ، صفحه نمایش، پرونده ها، گرافیک، برچسب ها، اصلی، مواد، ramaplot. ارائه، ذخیره، دنباله، شبیه سازی یا ابزار.

۹,۳,۲۰ mol

بارگیری، اصلاح یا حذف یک مولکول در VMD. در ادامه، molecule_number رشته ای است که توصیف می کند مولکول ها توسط دستورات تحت تأثیر قرار بگیرند. این یکی از موارد زیر است: همه، بالا، فعال، غیرفعال، نمایش داده شده، روشن، خاموش، ثابت، رایگان یا یکی از کدهای شناسایی منحصر به فرد عدد صحیح که به هنگام بارگیری به مولکول ها اختصاص داده شده است (با شروع $^\circ$). پس از حذف یک مولکول، کدها (molID) مورد استفاده مجدد قرار نمی گیرند، بنابراین اگر به عنوان مثال شما سه مولکول را بارگذاری کرده اید (شماره $^\circ$ ، ۱، ۲)، مولکول را با molID برابر با $^\circ$ حذف کرده و سپس بارگذاری یک مولکول دیگر، مولکول جدید molID ۳ خواهند داشت. بنابراین، لیست شناسه های موجود در مولکول (۳۲۱) می شود. شاخص مولکول موجود در این لیست، از جمله موارد دیگر، از طریق دستور molinfo قابل دسترسی است [۹,۳,۲۲]. در مورد بالا، به عنوان مثال، مولکولی که آخرین بار بارگذاری شده است، molID برابر با ۳ است، با این حال، در لیست مولکول ها سوم است، بنابراین دارای این شاخص برابر با ۲ است (از آنجا که ما از $^\circ$ شروع به کار می کنیم). بازنمایی مولکول (نماها) به شماره عدد صحیح اختصاص داده می شوند (با شروع از $^\circ$ برای هر مولکول)، که در این فهرست در پنجره Graphics [۵,۴,۷] appear ظاهر می شود. بازنمایی ها را می توان با فرمان mol اضافه یا حذف کرد یا تغییر داد. همچنین به روشهای بیشتر در مورد بازیابی اطلاعات در مورد بازنمایی ها به بخش های مربوط به دستور molinfo [۹,۳,۲۲] مراجعه کنید.

✓ **new [filename] [options]**

✓ **addfile < filename > [options]**

mol new برای ایجاد یک مولکول جدید از یک پرونده استفاده می شود. اگر پارامتر نام خانوادگی اختیاری حذف شود، یک مولکول ساده و «خالی» بدون اتم ایجاد می شود (این می تواند برای ایجاد بوم برای ترسیم هندسه تعریف شده توسط کاربر استفاده شود). addfile mol مانند mol جدید

است به جز اینکه ساختار و داده های مختصات به جای ایجاد یک مولکول جدید در مولکول بالا (هر کدام از مولکول ها آخرین بار بارگذاری شده باشد) بارگذاری می شوند. افزودنیهای mol و new mol هر دو مجموعه زیر را قبول دارند گزینه ها:

<type> type : نوع پرونده (psf، pdb، و غیره) را مشخص می کند اگر این گزینه حذف شود، از پسوند نام پرونده برای حدس زدن پرونده استفاده می شود. در غیر این صورت، آنچه را که از نام پرونده می توان حدس زد، لغو می کند.

<frame> first :

<frame> last :

<frame> step : برای پرونده های حاوی فریم مختصات، مشخص می کند که فریم ها را بارگیری کنید. فریم ها با شروع از ° فهرست می شوند. یک مرحله ۱ بدین معنی است که تمام فریم های موجود در آن بارگیری می شوند. مرحله ۲ به معنی بارگذاری هر فریم دیگر است.

<frames> waitfor : برای فایل های حاوی فریم مختصات، تعداد بارها را برای بارگیری قبل از بازگشت مشخص می کند، پیش فرض ۱ است. اگر فریم ها کمتر از تعداد فریم های موجود در فایل باشند، بقیه فریم ها در پس زمینه به روزرسانی های بعدی نمایشگر VMD بارگذاری می شوند. اگر فریم ها برابر با ۱- و یا all باشند، قبل از بازگشت فرمان تمام فریم ها در کلیه پرونده هایی که هنوز در دست هستند به طور همزمان بارگیری می شوند. قاب هایی که به این روش بارگذاری می شوند سریعتر از زمانی که در پس زمینه بارگذاری شوند بارگیری می شوند. اگر هنگام ارسال دستور افزودنی، پرونده ها هنوز در پس زمینه بارگیری می شوند، ابتدا فریم های موجود در پرونده ها بارگیری می شوند.

<set ids> volsets : برای پرونده های حاوی داده های حجمی، مجموعه داده ها را برای بارگذاری مشخص می کند. <set ids> باید لیستی از شاخصهای مبتنی بر صفر باشد.

<on|off> autobonds : اتوماتیک روشن و خاموش شدن محاسبه پیوند را فعال کنید. این می تواند برای بارگذاری مختصات غیر مولکولی غیرمعمول مفید باشد که الگوریتم پیدا کردن پیوند VMD خیلی کند باشد (مثلاً اگر چگالی نقطه بسیار زیاد باشد). پیش فرض روشن است.

Molid : فقط برای افزودن فایل شناسه مولکول مولکولی که پرونده باید در آن بارگذاری شود ممکن است مشخص شود. این باید آخرین گزینه مشخص شده باشد. در صورت حذف، پیش فرض مولکول بالاتر است.

✔ **coordinate file type coordinate file [coordinate file type structure file load structure file type structure file] :** با استفاده از قالب داده شده، یک مولکول جدید را از نام (های) پرونده بارگیری کنید. اگر یک فایل مختصات اضافی مشخص شده است، این پرونده را بارگیری کنید. جدید در VMD ۱٫۸: کلیه فریم های موجود در پرونده مختصات قبل از بازگشت فرمان بارگیری می شود. اگر این مطلوب نیست، برای کنترل دقیق تر نحوه بارگیری پرونده های مختصات از دستور animate read استفاده کنید. نسخه قبلی VMD فقط یک قاب را قبل از بازگشت بارگذاری می کرد. این عملکرد شناسه مولکول تازه ایجاد شده را برمی گرداند یا در صورت عدم موفقیت خطایی را برمی گرداند.

✔ **<URL> <urlload> <filetype> :** یک مولکول از نوع پرونده را از آدرس URL داده شده بارگیری کنید. شناسه مولکول تازه ایجاد شده یا خطا در صورت عدم موفقیت را برگردانید.

✔ **<four letter accession id> pdbload < :** فایل PDB را با کد الحاق مشخص شده از وب سایت RCSB بازبایی کنید. شناسه مولکول تازه ایجاد شده یا خطا در صورت عدم موفقیت را برمی گرداند.

✔ **List :** خلاصه وضعیت یک خط را برای هر مولکول چاپ کنید.

✔ **listmolecule_number :** خلاصه وضعیت یک خط را برای هر مولکول مطابق با تعداد مولکول چاپ کنید. اگر فقط یک مولکول با تعداد مولکول مطابقت داشته باشد، وضعیت بازنمایی این مولکول را نیز چاپ کنید، یعنی تعداد نمایش ها و همچنین تعداد بازنمایی، روش رنگ آمیزی، سبک بازنمایی و رشته انتخاب برای هر یک از نمایش ها.

✔ **colorcoloring_method :** تنظیم روش پیش فرض رنگ آمیزی اتم را تغییر دهید.

✔ **materialmaterial name :** تنظیم پیش فرض مواد را تغییر دهید.

✔ **representation rep style :** تنظیم روش پیش فرض رندر را تغییر دهید.

✔ **selection select method :** تنظیم پیش فرض انتخاب اتم را تغییر دهید.

✔ **[vector clipplane center clipplane_id rep_number molecule_number] :**

✔ **[vector clipplane color clipplane_id rep_number molecule_number] :**

✔ **[vector clipplane normal clipplane_id rep_number molecule_number] :**

✔ **[boolean clipplane status clipplane_id rep_number molecule_number] :**

✔ **modcolor rep_number molecule_number coloring_method :** روش رنگ آمیزی فعلی را برای نمایش داده شده در مولکول مشخص شده تغییر دهید.

✔ **modmaterial rep_number molecule_number material_name :** ماده فعلی را برای نمایش داده شده در مولکول مشخص شده تغییر دهید.

✔ **modstyle rep_number molecule_number rep_style :** روش ارائه دهی فعلی (سبک) را برای نمایش داده شده در مولکول مشخص شده تغییر دهید.

✔ **modselect rep_number molecule_number select_method :** انتخاب فعلی را برای نمایش داده شده در مولکول مشخص شده تغییر دهید.

✓ **addrep molecule_number**: با استفاده از تنظیمات پیش فرض فعلی برای انتخاب اتم، رنگ آمیزی، و روشهای ارائه، نمایه جدیدی به مولکول مشخص شده اضافه کنید.

✓ **defaultcategoryvalue**: تنظیمات پیش فرض مربوط به رنگ، سبک، انتخاب یا مواد را بر روی مقدار عرضه شده تنظیم کنید.

✓ **delrep rep_number molecule_number**: نمایش داده شده را از مولکول مشخص شده حذف می کند.

✓ **modrep rep_number molecule_number**: با استفاده از تنظیمات پیش فرض فعلی برای انتخاب اتم، رنگ آمیزی و روش های ارائه، نمایه داده شده را به حالت پیش فرض فعلی تغییر می دهد.

✓ **delete molecule_number**: مولکول ها را حذف کنید.

✓ **active molecule_number**: مولکول ها را فعال کنید.

✓ **inactive molecule_number**: مولکول (ها) را غیرفعال کنید.

✓ **on molecule_number**: مولکول (ها) را روشن کنید (ترسیم کنید).

✓ **off molecule_number**: مولکول ها را خاموش کنید (مخفی کنید).

✓ **fix molecule_number**: ثابت کردن مولکول (ها).

✓ **free molecule_number**: رفع ثابت کردن مولکول (ها).

✓ **top molecule_number**: مولکول بالا را تنظیم کنید.

✓ **cancel molecule_number**: مسیر بارگیری را لغو کنید.

✓ **reanalyze molecule_number**: ساختار را بعد از پیوند زدن و تغییر نام اتم مجدداً تجزیه و تحلیل کنید.

✓ **bondsrecalc molecule_number**: بازمحاسبه پیوندها از مسافت برای timestep کنونی.

✓ **ssrecalc molecule_number**: ساختار ثانویه را دوباره محاسبه کنید.

✓ **rename molecule_number newname**: مولکول مشخص شده را تغییر نام دهید.

✓ **rename molecule_number rep_number**: نام rep داده شده را برمی گرداند. این نام تضمین شده است که برای تمام تکرارهای موجود در این مولکول بی نظیر است و حتی اگر rep_number تغییر کنند، در محل تکرار باقی می مانند.

✓ **rep_number**: repindex molecule_number name را برای نمایش با نام داده شده برگردانید، یا ۱- اگر هیچ نمایشی با آن نام در آن مولکول وجود ندارد.

✓ **[selupdate rep_number molecule_number] [on|off]**: هر زمان که زمانبندی مولکول تغییر کند، گزینه انتخاب برای نمایه مشخص شده را به روز کنید. اگر خاموش / روشن ۱۸ بودن مشخص نشده باشد، وضعیت بروزرسانی فعلی را برمی گرداند.

✓ **[colupdate rep_number molecule_number] [on|off]**: هر بار زمانبندی مولکول تغییر می کند، رنگ محاسبه شده را برای نمایه مشخص شده به روز کنید. اگر خاموش / روشن

بودن مشخص نشده باشد، وضعیت بروزرسانی فعلی را برمی گرداند.

✓ **[drawframes molecule_number rep_number] [frame_specification]**: چندین فریم مسیر ۱۹ یا مجموعه مختصات را همزمان بکشید. این تنظیم به کاربر اجازه می دهد تا یک یا چند محدوده فریم را برای نمایش همزمان انتخاب کند. مشخصات قاب در حال حاضر یکی از شکل های زیر را می گیرد: start:end, frame_number, یا start:step:end. اگر frame_specification مشخص نشده باشد، دستور متن انتخاب فریم فعال فعلی را باز می گرداند.

✓ **[smoothrep molecule_number rep_number] [n]**: اندازه ی پنجره را برای مسیرهای روان انتخاب یا تنظیم کنید. به جای ترسیم نمایه مشخص شده از مختصات فعلی، VMD میانگین مختصات را از زمان های قبلی و بعدی محاسبه می کند. اگر n صفر باشد، هیچ هموارسازی انجام نمی شود. توجه داشته باشید که این هموارسازی هیچگونه اندازه گیری برچسب را تحت تأثیر قرار نمی دهد و مقادیر مختصات بازگشتی توسط انتخاب اتم یا ارسال شده به پرونده ها را تغییر نمی دهد. این تنها در نحوه رسم نمایان تأثیر می گذارد. هموارسازی می تواند به ویژه در تجسم سریع مولکول ها نوسان کننده یا ساخت فیلم مفید باشد.

✓ **[scaleminmax molecule_number rep_number] [min|max|auto]**: دامنه مقیاس رنگ را برای این نمایه دریافت / تنظیم کنید. به طور معمول مقیاس رنگ به طور خودکار به حداقل و حداکثر دامنه داده مربوطه می رسد. این دستور مقادیر به طور اتوماتیک متناسب شده را با مقادیری که تعیین کرده اید باطل می کند. برای به دست آوردن مقادیر فعلی، آرگومان های min و max را کنار بگذارید. به جای حداقل و حداکثر از حالت «خودکار» استفاده کنید تا دوباره مقیاس رنگ را به حداکثر دامنه تغییر دهید.

✓ **[showrep molecule_number rep_number] [on|off]**: اینکه آیا نمایش نشان داده شده یا مخفی شود را دریافت یا تنظیم کنید. نمایش های پنهان را نمی توان انتخاب کرد و هیچ گرافیکی را نشان نمی دهد.

✓ **volume molecule_number <volumeset name> <Origin> <a> <c> #a #b #c**: یک مجموعه داده حجمی را به مولکول فعلی اضافه کنید. مبدأ، a، b و c بردارهایی هستند که منشأ و سه بردار سلولی را تعیین می کنند. #a، #b و #c تعداد نقاط شبکه در جهت بردار سلول مربوطه هستند و در آخر داده ها باید به عنوان یک لیست با داده های زیر نقاط شبکه در امتداد محور c سریعترین، سپس b- محور و سرانجام محور a.

۹,۳,۲۱ molecule

مشابه با مول.

Keyword	Aliases	Arg	Set	Description
id	dis- played	int	N	molecular id
index		int	N	index on the molecule list
numatoms		int	N	number of atoms
name		str	N	the name of the molecule (usually the name of the file)
filename		str	N	list of filenames for all files loaded for this molecule
filetype		str	N	list of file types for this molecule
database		str	N	list of databases for this molecule
accession		str	N	list of database accession codes for this molecule
remarks		str	N	list of freeform remarks for this molecule
active		bool	Y	is/make the molecule active
drawn		bool	Y	is/make the molecule drawn
fixed		bool	YY	is/make the molecule fixed
top		bool	Y	is/make the molecule top
center		vector	Y	get/set the coordinate used as the center
center_matrix		matrix	Y	get/set the centering matrix
rotate_matrix		matrix	Y	get/set the rotation matrix
scale_matrix		matrix	Y	get/set the scaling matrix
global_matrix		matrix	N	get/set the global (rotation/scaling) matrix
view_matrix		matrix	N	get/set the overall viewing matrix
numreps	colour	matrix	N	the number of representations
selection i		int	N	the string for the i'th selection
rep i		string	N	the string for the i'th representation
color i		string	N	the string for the i'th coloring method
numframes		string	N	the string for the i'th coloring method
numvolumedata		int	N	number of animation frames
frame		int	Y	number of volumetric data sets
timesteps		int	Y	current frame number
angles		int	Y	number of elapsed timesteps in an interactive simulation
dihedrals		list	Y	topology angle types and definitions {type a1 a2 a3 }
impropers	elec	list	Y	topology dihedral types and definitions {type a1 a2 a3 a4 }
bond		list	Y	topology improper types and definitions {type a1 a2 a3 a4 }
angle		float	N	the bond energy (for the current frame)
dihedral		float	N	the angle energy
improper		float	N	the dihedral energy
vdw		float	N	the improper energy
electrostatic		float	N	the van der Waal energy
hbond		float	N	the electrostatic energy
kinetic		float	N	the hydrogen bond energy
potential		float	N	the total kinetic energy
energy	temp	float	N	the total potential energy
temperature		float	N	the total energy
pressure		float	N	the overall temperature
volume		float	Y	the simulation pressure
efield		float	Y	the simulation volume
alpha		float	Y	efield
beta		float	Y	unit cell angle alpha in degrees (for the current frame)
gamma		float	Y	unit cell angle beta in degrees (for the current frame)
a		float	Y	unit cell angle gamma in degrees (for the current frame)
b		float	Y	unit cell length a in Angstroms (for the current frame)
c		float	Y	unit cell length b in Angstroms (for the current frame)
		float	Y	unit cell length c in Angstroms (for the current frame)

جدول ۹.۳: کلمات کلیدی تنظیم یا دریافت شده molinfo

۹,۳,۲۲ molinfo

از دستور molinfo برای به دست آوردن اطلاعات در مورد یک مولکول (یا فایل بارگذاری شده) از جمله تعداد اتم های بارگذاری شده، نام پرونده، انتخاب های گرافیکی و ماتریس مشاهده استفاده می شود. همچنین می توان از آن برای بازگشت اطلاعات در مورد لیست مولکول های بارگذاری شده استفاده کرد. هر مولکول یک شناسه منحصر به فرد دارد که هنگام بارگذاری برای اولین بار به آن اختصاص می یابد. اینها از صفر شروع شده و برای هر مولکول جدید ۱ عدد افزایش می یابد. وقتی یک مولکول حذف شود، دوباره از این شماره استفاده نمی شود. یک مولکول منحصر به فرد وجود دارد، به نام مولکول بالا [۵/۶,۲]، که برای تعیین برخی پارامترها مانند مرکز دید، داده های موجود در کنترل های انیمیشن و غیره استفاده می شود.

✓ **List**: لیستی از تمام شناسه های مولکول فعلی را برمی گرداند.

✓ **Num**: تعداد مولکولهای بارگذاری شده را برمی گرداند.

✓ **Top**: شناسه مولکول بالاتر را برمی گرداند.

✓ **index n**: شناسه n مین مولکول را برمی گرداند.

✓ **{molecule_id get {list of keywords**

✓ **{molecule_id set {list of keywords}{list of values**: دسترسی و در بعضی موارد اصلاح

اطلاعات مربوط به یک مولکول داده شده . لیست کلمات کلیدی شناخته شده در جدول ۹,۳ آورده شده است.

مثال ها:

```
vmd > molinfo top get numatoms
568
molinfo 0 get {filetype filename}
pdb /home/dalke/pdb/bpti.pdb
vmd > molinfo 0 get { {rep 0}{color 0}{rep 1}{color 1}}
{VDW 1.000000 8.000000}{ColorID 5}Lines 1.0000 SegName
```

حالت فعلی (mode) ماوس را تغییر دهید، به طور اختیاری تماس های TCL را فعال کنید.

✓ **mode0**: حالت ماوس را روی چرخش تنظیم کنید.

✓ **mode1**: حالت ماوس را روی ترجمه تنظیم کنید.

✓ **mode2**: حالت ماوس را برای مقیاس گذاری تنظیم کنید.

✓ **mode3N**: حالت ماوس را تنظیم کنید تا نور N را بچرخاند.

✓ **mode4N**: حالت ماوس را روی حالت چیدن N تنظیم کنید، جایی که N یکی از موارد زیر است:

۱. مورد پرسش
۲. انتخاب مرکز
۳. انتخاب اتم
۴. انتخاب پیوند
۵. انتخاب زاویه
۶. انتخاب سطح
۷. حرکت اتم
۸. حرکت رزیدو
۹. حرکت قطعه
۱۰. حرکت مولکول
۱۱. نیروی روی اتم
۱۲. نیروی روی رزیدو
۱۳. نیروی روی قطعه

✓ **callback on/off**: تماس ها را روشن یا خاموش کنید. برای استفاده از تماس های برگشتی،

متغیر vmd_pick_atom_silent را ردیابی کنید. برای اطلاعات در مورد ردیابی به زیرمراجعه کنید.

✓ **rocking on/off**: چرخش مداوم صحنه را با ماوس فعال یا غیرفعال کنید.

✓ **Stoprotation**: هرگونه چرخش صحنه ای که از طریق ماوس شروع شده است و همچنین

هر گونه لرزشی که با دستور «rock» شروع شود، متوقف شود.

فرمان موازی، امکان تهیه اسکریپت موازی در مقیاس بزرگ را در هنگام تهیه VMD با پشتیبانی MPI فراهم می کند. در صورت عدم پشتیبانی MPI، فرمان موازی هنوز در دسترس است، اما همانطور که می توانست عملکرد کند اگر یک VMD با قابلیت MPI در هنگام اجرای تنها یک گره واحد کار کند. دستور موازی باعث می شود تا اسکریپت های آنالیز بزرگ به راحتی برای اجرای بر روی خوشه های بزرگ و ابر رایانه ها پشتیبانی شود تا از عملیات شبیه سازی، تجزیه و تحلیل و تجسم پشتیبانی کند

که در غیر این صورت برای ایستگاه های کاری معمولی بسیار محاسباتی می باشد [۱۴، ۳۵، ۲۶، ۴۰].

✓ **Nodename**: نام میزبان گره محاسباتی فعلی را برگردانید.

✓ **Noderank**: رتبه MPI گره محاسباتی فعلی را برگردانید.

✓ **Nodecount**: تعداد کل رتبه های MPI را در حال حاضر در حال انجام کار VMD برگردانید.

✓ **allgather object**: یک عمل Allgather موازی را در تمام رده های MPI انجام دهید، و

کاربر را به عنوان ورودی برای هر تماس گیرنده تعریف کنید. تمام رتبه های VMD MPI باید

در عملیات Allgather شرکت کنند.

✓ **allreduce user_reduction_procedure object**: با فراخوانی روند کاهش تأمین شده

توسط کاربر، عبور از یک شی تعریف شده توسط کاربر، کاهش موازی را در تمام رده های MPI

انجام دهید. تمام رتبه های VMD MPI باید در عملیات allreduce شرکت کنند.

✓ **Barrier**: همگام سازی سدی در همه رده های MPI در اجرای VMD انجام دهید.

✓ **for startcount endcount user_worker_procedure object**: برای اجرای یک

محاسبه در تمام رده های MPI، از زمانبندی کار موازی VMD فراخوانی کنید. برنامه ریز کار

VMD از تعادل بار پویا برای تعیین شاخص های کار به کارگران استفاده می کند و روش تماس

با کارگر تعریف شده توسط کاربر را برای هر مورد کار فرا می خواند.

به جای کنسول، اجرای دستورات متنی را از یک فایل مشخص شروع کنید. با پایان یافتن فایل، VMD دستورات خواندن را از منبع قبلی از سر می گیرد. این دستور ممکن است تودر تو باشد، بنابراین دستوراتی که از یک پرونده خوانده می شوند می توانند شامل دستوراتی برای خواندن فایل های دیگر باشند.

✓ **Filename**: دستورات را از نام فایل اجرا کنید.

همان خروج

با استفاده از تنظیمات صفحه نمایش جهانی VMD و هرگونه تنظیمات خاص رندر، تصویر (صحنه) نمایش داده شده را به پرونده ای منتقل کنید.

✓ **List**: روشهای رندر موجود را لیست کنید.

✓ **hasaa method**: پرس و جو کنید که آیا یک ارائه دهنده ویژگی خوش نماسازی قابل

کنترل دارد یا خیر.

✓ **aasamples method samples**: در صورت پشتیبانی تعداد نمونه های خوش نماسازی

مورد استفاده توسط این رندر را جستجو یا تنظیم کنید.

✓ **aosamples method samples**: در صورت پشتیبانی تعداد نمونه های روشنایی انسداد

محیط را که توسط این رندر استفاده می شود، بررسی یا تنظیم کنید.

✓ **formats method**: قالب ها و حالت های خروجی تصویر موجود را ارائه دهید.

✓ **format method format**: قالب / حالت خروجی تصویر فعال رندر را تنظیم کنید.

✓ **method filename**: با استفاده از روش، global scene را به نام فایل تبدیل کنید و دستور

پیش فرض را اجرا کنید، جایی که روش می تواند یکی از موارد زیر باشد:

- ۱. ART
- ۲. Gelato
- ۳. POV۳
- ۴. PostScript
- ۵. Radiance
- ۶. Raster3D
- ۷. Rayshade
- ۸. Renderman
- ۹. Snapshot
- ۱۰. STL
- ۱۱. Tachyon
- ۱۲. TachyonInternal
- ۱۳. ۱-VRML
- ۱۴. ۲-VRML
- ۱۵. Wavefront

✓ **global scene**: method filename command را به نام فایل تبدیل کنید، سپس

«دستور» را اجرا کنید. هر %s در «فرمان» با نام فایل (حداکثر ۵) جایگزین می شود.

✓ **options method**: رشته فرمان پیش فرض را بدست آورید.

✓ **options method command**: فرمان پیش فرض جدید را تنظیم کنید.

✓ **default method**: دستور اصلی پیش فرض را دریافت کنید.

rock۹,۳,۲۸

صحنه فعلی را به طور مرتب با یک میزان مشخص بچرخانید.

✓ **off**: توقف حرکت.

✓ **x|y|z>by step**: حرکت اطراف محور داده شده به میزان درجات گام ها در هر رسم

✓ **x|y|z>by step n**: حرکت حول محور داده شده به میزان درجات گام ها در هر رسم

برای گام n، معکوس و تکرار

rotate۹,۳,۲۹

صفحه کنونی را با یک زاویه مشخص در اطراف یک محور مشخص بچرخانید. این مختصات اتمی را تغییر نمی دهد.

✓ **Stop**: توقف همه چرخش ها، مانند خاموش سازی حرکت، اما چرخشهای ماوس را نیز

متوقف می کند.

✓ **x|y|z<by angle**: در حدود درجه های زاویه محور داده شده بچرخید.

✓ **x|y|z<to angle**: محور داده شده را به زاویه موقعیت مطلق بچرخانید.

✓ **x|y|z><by|to<angle step**: چرخش به میزان درجات گام در هر رسم

scale۹,۳,۳۰

صحنه فعلی را از بالا یا پایین تراز کنید. این مختصات اتمی را تغییر نمی دهد.

✓ **by f**: ضریب تغییر مقیاس صحنه را با f ضرب کنید.

✓ **to f**: ضریب مقیاس صحنه را بر روی f تنظیم کنید.

یک صفحه شطرنجی را روی صحنه قرار دهید.

✓ `< location < off | origin | bottom | top | left | right | behind` : مکان را تنظیم کنید.

✓ `Location` : موقعیت مکانی فعلی را دریافت کنید.

✓ `Locations` : لیستی از مکانهای ممکن را دریافت کنید.

✓ `panels n` : تعداد پنل ها را در مرحله تا ۳۰ تنظیم کنید.

✓ `Panels` : تعداد پنل های مورد استفاده را بدست آورید

ابزارهایی را که توسط دستگاههای ردیابی خارجی کنترل می شوند، تنظیم اولیه کرده و کنترل کنید.

✓ `Create` : ابزاری جدید ایجاد کنید

✓ `change type [ toolid ]` : نوع ابزار را تغییر دهید.

✓ `scale scale [ toolid ]` : مقیاس مختصات گزارش شده توسط یک ابزار را تغییر دهید.

✓ `scaleforce scale [ toolid ]` : نیرو را در دستگاه بازخورد نیرو افزایش یا کاهش دهید.

✓ `offset x y z [ toolid ]` : یک بردار را به موقعیت یک ابزار اضافه کنید.

✓ `delete [ toolid ]` : یک ابزار را حذف کنید.

✓ `rep molid repid` : فقط یک نمایه واحد را برای کشیدن یا SMD انتخاب کنید.

✓ `adddevice name [ toolid ]` : با استفاده از نام موجود در فایل پیکربندی حسگر، یک

دستگاه را به یک ابزار اضافه کنید.

✓ `removedevice name [ toolid ]` : با استفاده از نام موجود در فایل پیکربندی حسگر، یک

دستگاه را از یک ابزار خارج کنید.

✓ `callback on/off` : تماسهای برگشتی برای ابزارها را فعال کنید.

اشیاء را در صحنه فعلی برگردانید. این مختصات اتم را تغییر نمی دهد.

✓ `by x y z` : برگرداندن توسط وکتور (x، y، Z) در واحد صفحه (توجه داشته باشید که این

باعث تغییر مختصات اتمی نمی شود).

✓ `to x y z` : برگرداندن در موقعیت مطلق (x، y، Z) در واحد صفحه.

دستورات سفارشی کاربر را اضافه کنید.

✓ `add key key command` : دستور متن داده شده را به کلید اصلی key اختصاص دهید.

هنگامی که key فشار داده می شود در حالیکه ماوس در پنجره صفحه نمایش است، فرمان

مشخص شده اجرا می شود.

✓ `print keys` : تعریف فعلی کلیدهای اصلی را چاپ کنید.

برای مثال هایی از استفاده از دستور کاربر، به بخش ۵٫۱٫۳ مراجعه کنید.

(Tcl) اطلاعات مربوط به این نسخه از VMD را برمی گرداند.

✓ `Version` : شماره نسخه را برمی گرداند.

✓ `Versionmsg` : اطلاعات کامل در مورد این نسخه؛

✓ `Authors` : لیست نویسندگان؛

✓ `Arch` : نوع معماری (در صورتی که نتوانید بگویید)؛

✓ `Options` : گزینه های مورد استفاده برای کامپایل کردن VMD.

✓ `www` : صفحه اصلی VMD؛

✓ `Wwwhelp` : صفحه راهنما VMD.

این عملکرد بدون Tcl در دسترس است و اطلاعات روی صفحه نمایش داده می شود.

دستور volmap بر اساس داده های مولکولی نقشه های حجمی (شبکه های سه بعدی^{۲۰} حاوی

یک مقدار در هر نقطه از شبکه) ایجاد می کند که می توان در VMD با استفاده از نمایش های

Isosurface و VolumeSlice یا با استفاده از حالت رنگ آمیزی حجمی تجسم کرد. همچنین توجه

داشته باشید که افزونه VolMap، قابل دسترس از منوی VMD Extension، بسیاری از قابلیت های

دستور volmap را در قسمت جلویی گرافیکی فراهم می کند.

برای ایجاد یک نقشه حجمی، دستور volmap به صورت زیر اجرا می شود، جایی که انتخاب اتم، اتم

ها و مولکول را برای محاسبه مشخص می کند، و در جایی که maptype نوع داده های حجمی برای

ایجاد را مشخص می کند:

volmap <maptype> <atom selection> [optional arguments]

به عنوان مثال، برای ایجاد نقشه تراکم جرم با ضلع سلول ۵/۰٪ آنگستروم، به طور متوسط بیشتر از تمام فریم های مولکول بالا و اضافه کردن داده های حجمی به مولکول بالا، در موارد زیر استفاده می شود:

```
volmap density [atomselect top "all"] -res 0.5 -weight mass -allframes \
-combine avg -mol top
```

انواع مختلف نقشه داده های حجمی که در حال حاضر توسط volmap پشتیبانی می شوند به شرح زیر است. لطفاً توجه داشته باشید که وقتی توصیفی از نوع نقشه به شعاع اتم یا میدان بتا و غیره اشاره دارد، این مقادیر مستقیماً از قسمتهای مرتبط VMD برای آن اتم خوانده می شوند. در موارد خاص، ممکن است شما بخواهید قبل از انجام تحلیل volmap، زمینه انتخاب اتم (مانند شعاع، بتا و غیره) را تنظیم کنید.

✓ Density: نقشه ای از تراکم اتمی وزنی در هر نقطه شبکه ایجاد می کند. این کار با

جایگذاری هر اتم در انتخاب با توزیع گاوسی نرمال سازی شده از عرض (انحراف استاندارد) برابر با شعاع اتمی آن انجام می شود. توزیع گاوسی برای هر اتم با استفاده از یک وزن اختیاری وزن می گیرد (به آرگومان -weight مراجعه کنید) و وزن یکی از آنها پیش فرض می شود (یعنی تراکم عدد). گاوسی های مختلف سپس به صورت افزودنی روی یک شبکه توزیع می شوند. ✓ Interp: نقشه ای با وزن اتمی درون شبکه ایجاد می کند. برای هر اتم، وزن آن از طریق درون یابی سه جانبه به ۸ نزدیکترین وکسل (معادل پیکسل) توزیع می شود. وزن اختیاری (آرگومان -weight را ببینید) به صورت پیش فرض وزن یکی از آنهاست.

✓ Distance: نقشه ای را ایجاد می کنید که برای آن هر نقطه شبکه شامل فاصله بین آن نقطه و لبه نزدیکترین اتم باشد. به عبارت دیگر، هر یک از نقاط شبکه حداکثر شعاع کرانه ای را که در آن نقطه قرار دارد مشخص می کند که با کره های اتم های دیگر در تقاطع نیست. تمام اتمها با استفاده از شعاع VMD اتم ها به عنوان کره در نظر گرفته می شود.

✓ coulomb, coulombmsm: نقشه میدان الکترواستاتیکی اتم انتخابی را ایجاد می کند، که با محاسبه پتانسیل کولومبی غیر پیوندی از هر اتم در انتخاب (در واحدهای kBT / e) تهیه می شود. تولید نقشه کولومبی بهینه شده است تا در صورت موجود بودن از CPU های چند هسته ای و GPU های قابل برنامه ریزی استفاده کند [۱۶، ۱۷، ۱۸، ۱۹، ۲۰، ۲۱، ۲۲، ۲۳، ۲۴].

✓ IIs: با استفاده از تکنیک نمونه برداری (Ligand Implicit Ligand (ILS)، یک نقشه انرژی آزاد از توزیع یک لیگاند گاز تک اتمی یا دو اتمی با واکنش ضعیف ایجاد می کند. اطلاعات تکمیلی در مورد ILS را در زیر مشاهده کنید.

✓ Mask: نقشه ای را ایجاد می کند که بسته به اینکه در فاصله مشخصی از کات آف قرار گیرید (از آرگومان -cutoff استفاده می کند) از هر اتمی در انتخاب، روی ۰ یا ۱ تنظیم شده باشد. نقشه mask معمولاً در ترکیب با سایر نقشه ها به منظور مخفی کردن / پوشاندن داده

هایی که دور از منطقه مورد علاقه است استفاده می شود.

✓ Occupancy: بسته به اینکه حاوی اتم یا بیشتر اتم باشد یا خیر، هر نقطه شبکه ۲۱ به ۰ یا ۱ تنظیم می شود. هنگامی که به طور متوسط بیش از بسیاری از فریم ها، این اشغال کسری از آن نقطه شبکه را فراهم می کند. به طور پیش فرض، اتم ها با استفاده از شعاع اتمی به عنوان کره هایی در نظر گرفته می شوند و اگر در داخل این کره قرار گیرد، یک نقطه شبکه «اشغال شده ۲۲» در نظر گرفته می شود. از آرگومان -point استفاده کنید تا اتمها به عنوان نقاط در نظر گرفته شوند (اگر مکعب شبکه آن دارای مرکز اتمی باشد نقطه شبکه «اشغال شده» است).

آرگومان های اختیاری زیر به طور کلی توسط هر نوع نقشه volmap قابل درک است:

✓ allframes -: برای محاسبه نقشه حجمی از هر فریم موجود در مولکول به جای فقط جریان فعلی استفاده کنید. روش استفاده شده برای ترکیب نقشه های قاب تراجکتوری های مختلف را می توان با استفاده از آرگومان -combine مشخص کرد. به طور پیش فرض، volmap فقط از قاب فعلی استفاده می کند.

✓ > pmf | stdev | min | max | avg < combine -: قاعده استفاده برای ترکیب فریم هنگام استفاده از آرگومان -allframes را مشخص می کند. اینها با نگره داشتن میانگین، حداکثر یا حداقل مقادیر از محدوده قابهای محاسبه شده مطابقت دارد. stdev انحراف استاندارد برای هر نقطه را در محدوده فریم ها باز می گرداند، و pmf از میانگین حرارتی برای هر نقطه استفاده می کند. پیش فرض میانگین است به جز نقشه های لیگاند که در آن پیش فرض pmf است.

✓ res resolution -: وضوح نقشه را تنظیم می کند. این بدان معناست که حجم آن به تعداد زیادی مکعب کوچک تقسیم می شود که ضلع آن دارای طول وضوح است. ✓ minmax {{xmin ymin zmin} {xmax ymax zmax}} -: به کاربر اجازه می دهد مرزهای حداقل حداکثر شبکه را که در آن نقشه حجمی محاسبه می شود، مشخص کند. آرگومان به -minmax لیستی از دو ۳-بردار است که حداقل و حداکثر مختصات شبکه داده حجمی مورد نظر را مشخص می کند.

✓ checkpoint frequency -: برای تجزیه و تحلیل تراجکتوری های طولانی، می توان از خروجی میانی محاسبه حجم سنج استفاده کرد. گزینه checkpoint محاسبات volmap را مجبور می کند تا نقشه ای را که تاکنون محاسبه شده است، در هر فریم فرکانس به عنوان خروجی ایجاد کند. فرکانس پیش فرض ۵۰۰ است؛ تنظیم فرکانس به صفر، ویژگی چکاپ را غیرفعال می کند. ✓ > molid | top < mol -: داده های حجمی نهایی را در مولکول VMD مشخص شده توسط molid ایجاد می کند. به طور پیش فرض، تمام نقشه ها به صورت یک فایل یا نام Maptypes out.dx ایجاد می شوند. با استفاده از گزینه -mol این مسئله نادیده می گیرد.

✓ o filename -: داده های حجمی نهایی را به صورت یک فایل DX (اگر افزونه نبود،

افزونه ی dx. اضافه می‌شود) ایجاد می‌کند. به طور پیش فرض، تمام نقشه ها به یک فایل یا نام dx.out Maptype ایجاد می‌شوند.

✓ آرگومان های اختیاری زیر آرگومان های خاصی هستند که فقط توسط برخی از انواع نقشه های volmap فهمیده می‌شوند. برخی از آرگومان ها فقط ممکن است در مورد انواع خاصی از نقشه اعمال شود یا ممکن است برای انواع مختلف نقشه معنای متفاوتی داشته باشد:

✓ **cutoff** **cutoff**:- فاصله کات آف را مشخص می‌کند. برای نقشه های فاصله، بزرگترین مسیری را که در نظر گرفته می‌شود (تعداد زیاد بهتر اما کندتر است) مشخص می‌کند. برای نقشه های ماسک ۲۳ فاصله هر اتم را که بخشی از ماسک در نظر گرفته می‌شود، مشخص می‌کند.

✓ **points**:- برای اشغال نوع نقشه. اتم ها به جای کره ذرات نقطه ای در نظر گرفته می‌شوند.

✓ **radscale factor**:- برای نوع نقشه چگالی. یک عامل ضرب را تنظیم می‌کند که تمام شعاع اتمی VMD را به منظور محاسبه ضرب می‌کند.

✓ **<value list|field name> weight**:- برای نوع نقشه چگالی. وزن هر اتم را برای محاسبه چگالی تنظیم می‌کند. این می‌تواند نام هر زمینه اتمی عددی VMD (مانند جرم، شارژ، بتا، اشغال، کاربر، شعاع، و غیره) یا دیگری لیست Tci از اعداد با طول یکسان با تعداد اتم ها باشد.

نمونه برداری ضمنی لیگاند (فرمان volmapils)

این دستور یک نقشه از نیروی پتانسیل متوسط تخمینی (در واحدهای kBT در ۳۰۰ کیلوگرم) جایگاه یک لیگاند گاز واکنشی ضعیف مونواتمی یا مولتی اتمی در هر شبکه نقطه ای^{۲۴} را محاسبه می‌کند. این نتایج فقط در صورت میانگین گرفتن از تعداد زیادی از فریم ها معتبر خواهد بود. توجه داشته باشید که اگر دارای یک پردازنده گرافیکی CUDA فعال هستید، محاسبه ILS شما حدود ۲۰ برابر سریعتر از یک CPU انجام می‌شود. لطفاً به مقاله زیر مراجعه و استناد کنید:

Cohen, J., A. Arkhipov, R. Braun and K. Schulten, "Imaging the migration pathways for O₂, CO, NO, and Xe inside myoglobin", Biophysical Journal 91, 1844-1857, 2006.

نحو فرمان با سایر دستورات volmap متفاوت است و مجموعه گزینه های خاص خود را دارد:

[options] <minmax|pbcbox> volmapils molid

در اینجا minmax مرزهای شبکه را نشان می‌دهد که در آن نقشه حجمی محاسبه می‌شود. این به عنوان لیستی از دو سه بردار مشخص شده است که حداقل و حداکثر مختصات شبکه داده حجمی مورد نظر {desired {xmin ymin zmin}} {xmax ymax zmax} را نشان می‌دهد. اگر به جای

مختصات minmax کلمه کلیدی pbcbox را ارائه دهید، شبکه هدف روی جعبه مستطیل شکل قرار می‌گیرد که سلول PBC را محصور می‌کند. یک انتخاب معمولی برای پارامترهای minmax می‌تواند جعبه minmax زیر مجموعه سیستم شما باشد (به عنوان مثال فقط پروتئین) که توسط دستور اندازه گیری minmax برگردانده می‌شود.

بر اساس ابعاد شبکه، انتخابی که شامل تمام اتم ها در فاصله کات آف تعامل (مشخص شده با -cutoff) باشد، به طور خودکار برای محاسبه تعامل انتخاب می‌شود.

در صورتی که جعبه minmax شما از جعبه محدوده دوره ای^{۲۵} بیشتر باشد، قسمت های غیر همپوشانی نقشه شما تعریف نشده و یک هشدار چاپ می‌شود. در این حالت شما باید بسته بندی مختصات را در نظر بگیرید تا شبکه درخواستی در مرکز جعبه قرار گیرد. برای این کار می‌توانید از دستور بسته pbc از افزونه PBCtool استفاده کنید.

در صورتی که محدوده ای اینتراکشن غیرپیوندی بیش از مرزهای دوره ای نقشه های شما باشد باعث ایجاد تعامل ناقص خواهد بود و یک هشدار چاپ می‌شوند. اگر این اتفاق بیفتد باید از پیام pbc- استفاده کنید که به طور خودکار اتم سلولهای همسایه را در نظر می‌گیرد.

قبل از شروع محاسبه، شعاع اتمی هر اتم در مولکول باید بر روی پارامتر -CHARMM Lennard-Jones R_{min} / ۲ مربوطه (در آنگستروم) تنظیم شود و مقدار بتا هر اتم باید روی CHARMM Lennard-jones (عمق چاه انرژی در kcal/mol) تنظیم شود. این کار با استفاده از افزونه VolMap VMD انجام می‌شود. به سادگی دستورات زیر را در محیط کنسول VMD فراخوانی کنید تا از مقادیر پیش فرض CHARMM برای اتم های مختلف یک مولکول استفاده کنید:

```
package require ilstools
ILTools::readcharmmparams [list of CHARMM parameter files]
ILTools::assigncharmmparams <molid>
```

آرگومان های اختیاری زیر درک می‌شوند:

✓ **-first frame**: اولین قاب برای پردازش. (پیش فرض: قاب ۰)

✓ **-last frame**: آخرین فریم برای پردازش. (پیش فرض: آخرین قاب مولکول)

✓ **-o filename**: داده های حجمی نهایی را به یک پرونده DX (در صورت حذف شدن افزونه،

افزونه ی dx. اضافه می‌شود) منتقل می‌کند. به طور پیش فرض، تمام نقشه ها به یک فایل یا نام dx.out Maptype منتقل می‌شوند.

✓ **-res resolution**: وضوح نقشه نهایی را تنظیم می‌کند. این بدان معناست که حجم آن به تعداد زیادی مکعب کوچک تقسیم می‌شود که ضلع آن دارای طول وضوح است. محاسبات باید بر روی یک شبکه دقیق تر انجام شود (گزینه -subres را ببینید) اما در انتهای نقشه نمونه نهایی این رزولوشن می‌شود. انتخاب خوبی برای وضوح شبکه ۱ آنگستروم است (آرگومان -res). وضوح پایین، دیدن ویژگی ها را دشوار می‌کند، موارد بالاتر از نظر زمان محاسبه بسیار پرهزینه خواهند بود. همچنین، از آنجا که نوسان ستون فقرات ۲۶ پروتئین به ترتیب ۱-۲

25 . periodic boundary box
26 . protein backbone

23 . mask
24 . gridpoint

آنگستروم است، وضوح شبکه بالاتر معنی چندانی نخواهد داشت.

✓ **subres num**:- تعداد نقاط در هر بعد از شبکه نمونه برداری، به عنوان مثال ۲ برای یک زیر شبکه ۲x۲x۲ یا ۳ برای زیرشاخه ۳x۳x۳. مقدار ۱ به معنای عدم نمونه برداری است، پیش فرض (-subres ۳) است. بدون نمونه برداری، کاوشگر در هر مرکز سلول شبکه قرار می گیرد (برای پروب های دیاتومیک در جهت های مختلف تصادفی numconf، به عنوان آرگومان مراجعه کنید). فرض می شود که این موقعیت برای تعامل پروب در این وکسل با سیستم نماینده باشد. با این حال، برای اندازه وکسل معمولی ۱x۱x۱ آنگستروم، مقدار انرژی می تواند در داخل وکسل تفاوت قابل توجهی داشته باشد و مقدار در مرکز ممکن است نزدیک به متوسط نباشد. نمونه برداری متقابل بیش از تعامل بر روی یک زیر شبکه منظم در هر وکسل در نتیجه یک مقدار انرژی آزاد دقیق تر برای قرار دادن کاوشگر در هر وکسل تولید می کند. اگرچه این امر به شدت هزینه محاسباتی را افزایش می دهد، اما توصیه می شود از نمونه برداری استفاده کنید! زیر شبکه ۳x۳x۳ برای نقشه با وضوح ۱ آنگستروم انتخاب خوبی است.

✓ **temperature T**:- دما در کلوین که در آن شبیه سازی ۲YMD انجام شده است. (پیش فرض: ۳۰۰)

✓ **probesel selection**:- انتخاب اتم که مولکول پروب را تعیین می کند. قسمت های شعاع و اشغال باید با پارامترهای شعاع VDW و VDW epsilon از میدان نیرو جمع شود (به گزینه probevdw مراجعه کنید). همچنین می توانید مختصات پروب و پارامترهای VDW را مستقیماً با استفاده از گزینه های -probecoor و -probevdw مشخص کنید.

✓ **probecoor atomcoords**:- مختصات اتمهای کاوشگر را به صورت لیستی سه گانه تنظیم کنید {xN yN zN ... z۰ y۰ x۰}.

✓ **probevdw parameterlist**:- پارامترهای ون در والس را برای هر اتم کاوشگر در فرم $\{\{\epsilon_0 \ R_{min,0}/2\} \dots \{\epsilon_N \ R_{min,N}/2\}\}$ تنظیم کنید. آنها اینتراکشن های غیرپیوندی کاوشگر ارزیابی شده با پتانسیل لnard-جونز را تعیین می کنند.

$$U_{VDW} = \sum_{atoms \ i,j} \epsilon_{ij} \left(\left(\frac{R_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{R_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right) \quad (9.2)$$

$R_{ij} = (R_{min,i} + R_{min,j})/2$ and $\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \cdot \epsilon_j}$. جایی که ارزیابی می شود. (این همان شکل در فایل های های پارامتر CHARMM و AMBER است). واحدهای kcal / mol و Rmin / ۲ درجه آنگستروم هستند.

✓ **orient n**:- تعداد نمونه های جهت گیری پروب های مختلف را برای پروب های multiatom در هر نقطه شبکه کنترل کنید. عدد n فاصله زاویه ای بردارهای جهت یابی پروب و چرخش های اطراف هر یک از این بردارها را تعیین می کند.

- **n = ۱**: فقط از ۱ جهت استفاده کنید
- **n = ۲**: از ۲ جهت استفاده کنید (رئوس های یک هشت ضلعی)
- **n = ۳**: از ۸ جهت استفاده کنید (رئوس های شش گوش)
- **n = ۴**: از ۱۲ جهت استفاده کنید (وجه یک dodecahedron)
- **n = ۵**: از ۲۰ جهت استفاده کنید (رئوس های یک dodecahedron)
- **n = ۶**: از ۳۲ جهت استفاده کنید (وجه Dodecahedron)
- **n < ۶**: تقسیمات ژئودزیکی چهره ایکوتوپایی با فرکانس ۱، ۲، ... n - ۶

برای هر جهت، تعدادی روتامر تولید خواهد شد. فاصله زاویه ای چرخش ها در اطراف بردارهای جهت گیری تقریباً برابر با فاصله زاویه ای خود بردار جهت گیری انتخاب شده است. اگر کاوشگر حداقل یک محور تقارن داشته باشد، چرخش های اطراف بردارهای جهت گیری بر این اساس کاهش می یابد. اگر یک محور نامتناهی (مولکول خطی) وجود داشته باشد، چرخش حذف خواهد شد. در صورت وجود محور C۲ عمود بر عمق دیگر، نیمی از جهت گیریها نادیده گرفته می شوند، به طوری که هیچ جفت غیر موازی وجود ندارد.

پروب با تقارن چهار گوشه ای:

✓ در اینجا n تعداد روتامرها را برای هر یک از ۸ جهت تعیین شده توسط رئوس های چهار ضلعی و چهار ضلعی آن مشخص می کند.

✓ **-cutoff cutoff**: تنظیم کات آف واندروالسی CHARMM را که فراتر از تعامل بین پروب و اتمهای پروتئین در صفر تنظیم شود.

✓ **maxenergy energy**:- انرژی کات آف که بالاتر از آن اشغال یک سلول شبکه صفر در نظر گرفته می شود. برای انرژی های GPU بیش از ۸۷ همیشه مطابق با مقادیر نقطه شناور صفر برای اشغال است. از این رو هیچ نقطه ای بالاتر از آن نمی رود. در مورد CPU ها این تعداد بیشتر است، هرچند اشغال هرچه پایین تر باشد از این نقاط استفاده نمی شود و خطای مطابق آن بسیار زیاد خواهد بود. بنابراین، در نقشه نهایی احتمالاً منطقی نیست که به مقادیری بالاتر از ۱۰kT بنگریم که ضرر بزرگی محسوب نمی شود زیرا مناطق کم انرژی آنها هستند که ما به آنها علاقه مند هستیم. بنابراین احتمالاً شما می خواهید این مقدار را بین ۱۰ و ۸۷ (ما در حال آزمایش این تست هستیم اما فکر می کنم ۲۰ کیلوولت یک شماره ایمن باشد).

✓ **-alignsel selection**:- با استفاده از انتخاب ارائه شده، تمام فریم های تراکتوری را با قاب اول تراز کنید. اگر از این گزینه استفاده نمی کنید، باید مطمئن شوید که همه فریم ها را قبل

از اجرای Volmap ils تنظیم کرده اید.

✔ **transform matrix-**: فرض کنید می خواهید مسیر مورد نظر خود را از یک مولکول متفاوت به یک قاب مرجع تراز کنید. در این حالت شما باید اولین فریم تراجکتوری خود را با مرجع تراز کنید و ماتریس تراز مطابق آن را با استفاده از گزینه «measure fit» با استفاده از گزینه transform- برگردانید. volmap ils مراقبت از بقیه را انجام می دهند.

✔ **pbcenter-**: این نشانه نشانگر این است که شما می خواهید یک محدوده دوره ای از محاسبه ILS آگاه باشید. بسته به نوع مقصد مورد نظر اتمهای اندازه تصویر از سلولهای همبستگی PBC در نظر گرفته شده است. اتم های مورد استفاده برای محاسبه از جعبه ای انتخاب می شوند که با قطع تعامل در هر جهت از اندازه شبکه هدف تجاوز می کند.

توجه: اگر مولکول شما در مرکز شبیه سازی MD از مرکز PBC چرخانده یا از آن خارج شده باشد، تراز ساختار می چرخد یا سلول PBC را تغییر می دهد تا نقشه شما ممکن است دیگر داخل سلول PBC نباشد. این به حاشیه های نقشه تعریف نشده منجر می شود و ممکن است بخواهید بازنویسی مختصات را در نظر بگیرید. بازنویسی مجدد نمی تواند چرخش را خنثی کند اما مگر اینکه یک سلول PBC بسیار مسدود داشته باشید که تغییر شیفیت را با بازنویسی انجام می دهد، در بیشتر موارد نقشه را بدون یا با اثرات مرزی کمی به همراه خواهد داشت. دستور بسته بندی pbc را از افزونه PBCtool مشاهده کنید.

هشدار: اگر از pbcenter- استفاده می کنید، فریم های سازه را قبل از محاسبه خود تراز نکنید! این تعریف سلول های PBC شما را کاملاً خراب می کند. در عوض شما باید از گزینه alignsel- استفاده کنید و اجازه دهید volmap بتواند تراز را کنترل کند. با این حال، شما می توانید توده خاویاری را در سطح جهانی (یعنی همه فریم ها را با استفاده از ماتریس تبدیل SAME تراز کنید) را به یک قاب مرجع تراز کنید. در این حالت باید ماتریس تحول را که از طریق ترانسفورماتور استفاده کرده اید تهیه کنید.

✔ **maskonly-**: از آنجا که منشأ سلول PBC در فایل های DCD و VMD شما ذخیره نشود، شما باید آن را مشخص کنید این مورد متفاوت از پیش فرض {} است.

✔ **maskonly-**: این نشانه درخواست می کند تا فقط یک نقشه ماسک را محاسبه کند و بیان کند که برای کدام نقاط شبکه انتظار انرژی های معتبری داریم، یعنی نقاطی که نقشه ها برای همه فریم ها با هم همخوانی دارند شامل باشد، تمام نقاط دیگر °. خواهد بود. بهتر است از شرایط مرز دوره ای (PBC) استفاده نکنید، جایی که در آن ممکن است اتفاق بیفتد که به دلیل انتخاب شبکه و / یا چرخش پروتئین جعبه در شبکه شما به علاوه کات آف اینتراکشن تا حدی خارج از سیستم شما قرار بگیرد که این بدان معنی است که شما برخی از تعامل ها را از دست می دهید. نقشه تولید شده توسط حالت maskonly نشان می دهد که این مناطق تعیین شده ایll کجا هستند.

wait ۹,۳,۳۷

چند ثانیه برای انتظار قبل از خواندن یک فرمان دیگر مشخص کنید. انیمیشن در این مدت ادامه می یابد. اگر دستورالعمل پیچیده Tcl یا ساختارهای حلقه ای فراخوانی شود، دستور انتظار رفتار نخواهد کرد. فرمان انتظار به دلیل روشی که VMD دستورات خود را پردازش می کند، تا زمان بلوک کامل کامل کد Tcl اجرا نمی شود.

✔ **Time**: چند ثانیه صبر کنید.

sleep ۹,۳,۳۸

قبل از خواندن دستور دیگری، چند ثانیه برای خواب مشخص کنید. انیمیشن در این مدت متوقف می شود. ✔ **Time**: چند ثانیه زمان خواب.

۹,۴ Tcl callbacks

هنگامی که اتفاقات خاصی رخ می دهد، VMD با تنظیم متغیرهای خاص Tcl به مقادیر جدید، مفسر Tcl را آگاه می کند. برای مثال می توانید از این ویژگی برای سفارشی سازی VMD استفاده کنید، به عنوان مثال با ایجاد گرافیکی جدید در هنگام انتخاب کاربر اتمی یا محاسبه ساختار ثانویه در پرواز، از این ویژگی استفاده کنید.

برای اینکه این ویژگی جدید در زمان مناسب اتفاق بیفتد، باید یک اسکریپت بنویسید که مجموعه خاصی از استدلال ها را در بر می گیرد، و این اسکریپت را با متغیر مورد نظر خود ثبت کنید. ثبت اسکریپت ها با ردیابی دستور Tcl داخلی انجام می شود. برای اسناد نحوه استفاده از این دستور به <http://www.tcl.tk/man/tcl۸.۴/TclCmd/trace.htm> مراجعه کنید. ایده این است که پس از ثبت پاسخ به تماس خود، وقتی VMD مقدار متغیر را تغییر می دهد، فوراً اسکریپت شما با مقدار جدیدی از متغیر به عنوان آرگومان فراخوانی می شود. جدول ۹,۴ متغیرهای پاسخ به تماس موجود در VMD را خلاصه می کند.

در کتابخانه اسکریپت VMD در http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/script_library/، می توانید تعدادی از اسکریپت ها را پیدا کنید که از ردیابی متغیر Tcl استفاده می کنند. در زیر، یک مثال ساده آورده ایم. روش زیر اتم برداشت شده را می گیرد و وزن مولکولی مانده آن را پیدا می کند.

```
proc mol_weight {args} {
# use the picked atom's index and molecule id
global vmd_pick_atom vmd_pick_mol
set sel [atomselect $vmd_pick_mol "same residue as index $vmd_pick_atom"]
set mass 0
```

When called	Name	Description
Molecule molid was deleted	vmd_molecule(molid)	0
Molecule molid was created (data may not have been loaded yet)	vmd_molecule(molid)	1
Molecule molid was renamed	vmd_molecule(molid)	2
Structure file loaded	vmd_initialize_structure(molid)	1
Coordinate file loaded	vmd_trajectory_read(molid)	name of coordinate file
Molecule molid changed anima- tion frames	vmd_frame(molid)	new animation frame
Any VMD command executed	vmd_logfile	Tcl text equivalent of command
An atom has been picked using the "Pick" mouse mode	vmd_pick_event	When receiving this event, the following global variables are also set: vmd pick atom (id of picked atom), vmd pick mol (id of picked molecule)
Pointer moved.	vmd_pick_client	name of pointer
Pointer moved.	vmd_pick_mol_silent	id of nearby mol
Pointer moved.	vmd_pick_atom_silent	id of nearby atom
Atom picked	vmd_pick_shift_state	1 if shift key down during pick, 0 otherwise
IMD coordinate set received	vmd_timestep(molid)	frame containing new coordi- nates
Set of labels to be graphed	vmd_graph_label	{labeltype labelid}{labeltype labelid}...
Tcl interpreter is shutting dow	vmd_quit	1

جدول ۹.۴: تفسیر متغیرهای Tcl callback در VMD

```
foreach m [$sel get mass] {
  set mass [expr $mass + $m]
}
# get residue name and id
set atom [atomselect $vmd_pick_mol "index $vmd_pick_atom"]
lassign [$atom get {resname resid}] resname resid
# print the result
puts "Mass of $resname $resid = $mass"
}
```

هنگامی که یک اتم انتخاب شد، فرمان mol weight را اجرا کنید تا از آن خارج شوید:

```
Mass of ALA 7 : 67.047
```

از آنجا که VMD رویداد انتخاب vmd را تعیین می کند، می توان آنرا ردیابی کرد. تابع ردیابی به صورت زیر ثبت شده است:

```
trace add variable ::vmd_pick_event write mol_weight
```

و اکنون هنگام انتخاب یک اتم توده های بصورت خودکار چاپ می شوند. مطمئن شوید که هنگام کار با آن، اثری را خاموش نکنید (مثلاً پنجره افزونه شما بسته می شود):

```
trace remove variable ::vmd_pick_event write mol_weight
```

VMD ۱٫۶ و بعد آن حاوی مفسر پایتون کاملاً کاربردی است. مترجم درست مثل خط فرمان پایتون عمل می کند: می توانید ماژول های خود را وارد کنید و آنها را با کنسول متن VMD اجرا کنید. علاوه بر این، VMD تعدادی ماژول را برای بارگذاری مولکول ها و کنترل نمایشگر آنها فراهم می کند.

باینری های مقدماتی VMD که از قبل ساخته شده اند، در حال حاضر از نسخه پایتون ۲٫۵ استفاده می کنند. کد های منبع فعلی VMD برای کامپایل با نسخه های Python ۲٫۴ تا ۲٫۶ در چند سیستم عامل مورد آزمایش قرار گرفته است. بنابراین بسته های VMD rpm یا debb را می توان درمورد هر یک از این نسخه ها گردآوری کرد.

۱۰٫۱ Using the Python interpreter within VMD

وقتی VMD را شروع می کنید، کنسول متن VMD به طور معمول از مفسر دستور Tcl برای پردازش آنچه تایپ می کنید استفاده می کند. برای استفاده از مفسر پایتون، باید به VMD بگویید که به حالت «Python» تغییر یابد. برای این کار سه روش وجود دارد: (۱) gopython را در پنجره کنسول تایپ کنید. (۲) pass-python را به عنوان گزینه خط فرمان؛ یا (۳) gopython را در آخرین خط پرونده vmdrc خود قرار دهید. اگر VMD یک پیام خطا را چاپ کند که گزارش می دهد مفسر پایتون در دسترس نیست، نسخه VMD شما با پشتیبانی پایتون وارد نشده است. برای کمک با توسعه دهندگان VMD تماس بگیرید. اگر همه چیز خوب پیش برود، باید فرمان پایتون را فوراً «>>>» در پنجره کنسول ببینید. برای بازگشت به مفسر Tcl، کلید Ctrl-D را طوری فشار دهید که گویی از پایتون خارج شده اید. جابجایی به جلو و عقب بین پایتون و Tcl هیچ کار شما را از بین نمی برد. همه متغیرها و ماژول ها تا زمانی که از VMD خارج شوید، همچنان تعریف خواهد شد. تایپ کردن 'gopython <filename>'، که در آن نام <filename> نام پرونده ای است که حاوی کد پایتون باشد باعث می شود VMD به حالت پایتون تغییر کند، پرونده را پردازش کرده و سپس به Tcl برگردد. در این روش می توانید توابع پایتون را درون اسکریپت های Tcl خود جاسازی کنید!

همچنین می توانید برای اجرای خط دلخواه از کد پایتون، «gopython -command» کد خود را در اینجا وارد کنید.

۱۰٫۲ Python modules within VMD

هنگامی که وارد محیط VMD Python می شوید، ماژولی به نام «VMD» را که قبلاً بارگذاری شده است پیدا خواهید کرد. این ماژول شامل تمام ماژول های داخلی برای نوشتن اسکریپت های VMD Python است.

VMD با کل محیط Python توزیع نمی شود. برای استفاده از مجموعه کتابخانه هایی که به طور معمول با توزیع پایتون همراه هستند، باید به پایتون بگویید که کتابخانه ها را در کجا پیدا کند. دوروش اصلی برای انجام این کار وجود دارد. متغیر محیط PYTHONHOME به محلی که پایتون نصب شده است اشاره می کند. نسخه نصب شده در این مرحله باید با نسخه VMD (۲٫۵) مطابقت داشته باشد. بنابراین اگر کتابخانه های پایتون را در /usr/local/lib/python۲٫۵ دارید، اضافه کردن مجموعه خط env (PYTHONHOME) /usr / local به اسکریپت راه اندازی خود یا پرونده vmdrc این ترفند را

Chapter 10

فصل دهم

رابط متن پایتون

Python text interface

انجام می دهد.

اگر ماژول های دیگری دارید که می خواهید در VMD از آنها استفاده کنید، از متغیر محیط PYTHONPATH استفاده کنید تا به پایتون بگویید که چگونه آنها را پیدا کند. لطفاً توجه داشته باشید که هر یک از این ماژول ها باید در برابر نسخه های مطابق با بسته Python و زیر بسته های آن که با باینری های VMD از پیش ساخته توزیع شده اند، گردآوری شوند. اگر می خواهید از Python و بسته های بومی آن استفاده کنید، مجبورید VMD را از کد منبع کامپایل کنید و یا یک بسته با کاربر را نصب کنید که مطابق با سیستم عامل شما باشد. برای اطلاعات بیشتر به هر کتاب Python و دستورالعمل های تهیه VMD از کد منبع مراجعه کنید.

اگر ماژول Tkinter در نصب پایتون یافت شود، VMD آن را در هنگام شروع پایتون بارگیری می کند تا ویندوزهای Tkinter مطابق با ویندوزهای ایجاد شده از Tk باشد. علاوه بر این، اگر Numeric Python را در سیستم خود نصب کرده باشید، زیرمجموعه ای به نام vmdnumpy در ماژول VMD در دسترس خواهد بود. برای جزئیات بیشتر به زیر مراجعه کنید.

۱۰٫۳ انتخاب اتم در پایتون

۱۰٫۳٫۱ The built-in atomsel type

جدید در VMD ۱٫۸٫۶: کلاس AtomSel به نفع یک نوع داخلی جدید به نام atomsel کاهش یافته است. نوع atomsel تقریباً به همان روش کلاس AtomSel قدیمی عمل می کند، اما همچنین روش هایی مشابه رابط Tcl برای بازگشت ماتریس های مناسب RMS و استفاده از آن تحولات در مختصات فراهم می کند.

نوع atomsel جدید در یک ماژول داخلی جدید یافت می شود که به آن نیز atomsel گفته می شود. برای بدست آوردن مستندات کامل از کمک (atomsel) استفاده کنید.

۱۰٫۳٫۲ (The AtomSel class (DEPRECATED

VMD یک کلاس انتخاب اتم را برای استفاده در مفسر پایتون فراهم می کند. موارد این کلاس با مجموعه ای از شاخص های اتمی در یک مولکول خاص برای یک مجموعه مختصات خاص مطابقت دارد. پس از انتخاب اتم، می توانید از خصوصیات اتم های انتخاب شده مانند نام آنها، شناسه های رزیدو یا مختصات پرس و جو کنید. با روشی مشابه می توانید مقادیر این خصوصیات را تنظیم کنید. شما همچنین می توانید عملیات منطقی را در انتخاب اتم انجام دهید، از جمله پیدا کردن تقاطع یا اتحادیه دو انتخاب اتم یا یافتن وارونگی مجموعه. سرانجام، شما می توانید عملیات چندتایی را بر روی شیء انتخاب اتم انجام دهید تا شاخص های اتم در انتخاب را بررسی کنید.

ماکروهای انتخاب اتم را می توان با استفاده از روش macro ماژول AtomSel تعریف کرد. ترکیب دقیقاً همانند دستورات TCL مشابه atomselect macro و atomselect delmacro است. برای

جزئیات بیشتر به بخش ۹٫۳٫۲ مراجعه کنید.

در زیر روش های موجود از کلاس AtomSel را خلاصه می کنیم.

✓ `AtomSel(selection='all', molid=0, frame=0)`: یک شیء انتخاب اتم جدید ایجاد می کند.

✓ `sel = AtomSel('name CA', 1)` # >>> کرپنهای آلفا مولکول ۱ را انتخاب می کند.

✓ `select(selection)`: اتم های انتخاب شده را تغییر دهید.

✓ `sel.select('resid 5')`

✓ `list()`: یک کپی از شاخص های اتم انتخاب شده را برگردانید.

✓ `frame(value=-1)`: قاب مختصات را برای انتخاب تنظیم و دریافت کنید. مقادیر غیر

مثبت خواهد بود مقدار فعلی قاب را بدون تغییر آن برگردانید.

```
>>> sel.frame(5)
>>> sel.frame()
5
```

✓ `get(attr1, attr2), ...`: تعداد آرگومانهای رشته ای را که باید با خاصیت اتمی معتبر مانند

«نام»، «x» یا «آب» مطابقت داشته باشد، انجام می دهد. لیستی از ارزش خاصیت برای هر اتم در انتخاب را برمی گرداند. برای خواص بولین مانند «آب» مقدار برگشتی ۱ در صورت صحیح بودن و ۰ اگر غلط باشد.

✓ `sel.get('x', 'y', 'z')` >>>

✓ `set(attr, val)`: با استفاده از مقادیر در val، خاصیت اتم مربوط به attr را تنظیم کنید.

تعداد عناصر در val باید هم در انتخاب اتم ۱ هم عدد در انتخاب اتم باشد.

```
>>> len(sel)
12
>>> sel.set('beta', 3)
>>> sel.set('beta', (1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12))
```

✓ `write(filename, filetype=None)`: اتم ها را در قسمت انتخاب برای نام فایل بنویسید.

نوع فایل از نام فایل حدس زده می شود، یا می تواند با نوع فایل مشخص شود.

✓ `sel1 & sel2`: با استفاده از اتمهای موجود در sel۱ و sel۲، یک انتخاب اتمی جدید ایجاد کنید.

✓ `sel1 | sel2`: با استفاده از اتمهای موجود در sel۱ یا sel۲، یک انتخاب اتمی جدید ایجاد کنید.

✓ `sel -`: انتخاب اتم جدید را با استفاده از اتمهایی که در sel یافت نمی شوند ایجاد کنید.

✓ `len(sel)`: تعداد اتمهای موجود در انتخاب را برمی گرداند.

✓ `sel[0], sel[0:3]`: ایندکس و عملیات برش، اتمهای مربوطه را انتخاب می کنند.

✓ `center(weight=None)`: مرکز اتمهای منتخب، احتمالاً با وزن، که باید یک توالی باشد را برگردانید.

✓ `sasa(srad), samples=-1, points=None, restrict=None`: با استفاده از شعاع اختصاص داده شده برای هر اتم، سطح قابل دسترسی به حلال (SASA) اتم ها را برمی گرداند و هر شعاع را توسط srad امتداد می دهد تا نقاطی را در کره پیدا کند که در معرض حلال باشد. در صورت انتخاب محدودیت، فقط نقاط قابل دسترسی با حلال در نزدیکی آن لایحه انتخاب در نظر گرفته می شود. پارامتر امتیاز را می توان برای جمع آوری امتیازهایی که مشخص می

شوند در دسترس با حلال باشند، استفاده کرد. این باید یک متغیر لیست باشد.

✓ `getbonds()`: لیستی از اتمهای پیوند شده به هر اتم را در انتخاب برمی گرداند.

✓ `setbonds(bonds)`: پیوندهای مربوط به اتمها را در انتخاب تنظیم کنید. پیوندها باید لیستی از همان طول انتخاب باشد. هر عنصر در لیست باید دنباله ای باشد که حاوی شاخص های اتمهایی باشد که اتم به آن پیوند دارد.

✓ `minmax()`: حداقل و حداکثر مختصات اتم ها در انتخاب را به عنوان فرم چندگانه (xmin, xmax, ymax, zmax, ymin, zmin). باز می گرداند.

✓ `rmsd(sel, frame=None, weight=None)`: فاصله ریشه میانگین مربع ۲۸ اتمها را در sel از انتخاب بر می گرداند. اگر قاب ارائه شود، مختصات از قاب مربوطه استفاده می شود (مثال را ببینید). اگر وزن داده شود، RMSD محاسبه شده با استفاده از مقادیر وزن، وزن می شود. ✓ `align(ref=None, move=None, frame=None, weight=None)`: تحولی را پیدا می کند که اتم های موجود در انتخاب را با اتم های ref، با وزن اختیاری weight هماهنگ می کند و این تغییر و تحول را در مورد اتم ها در حال حرکت اعمال می کند. مقادیر پیش فرض زیر برای همه آرگومان ها ارائه شده است:

🔗 `ref`: همان مولکول و اتم به عنوان انتخاب، اما همیشه با استفاده از:

🔗 `align(ref=None, move=None, frame=None, weight=None)`: تحولی

را پیدا می کند که اتم های موجود در انتخاب را با اتم های ref، با وزن وزنی اختیاری هماهنگ می کند و این تغییر و تحول را در مورد اتم ها در حال حرکت اعمال می کند. مقادیر پیش فرض زیر برای همه آرگومان ها ارائه شده است:

✱ `ref`: همان مولکول و اتم به عنوان انتخاب، اما همیشه با استفاده از اولین قدم در این مولکول.

✱ `Move`: تمام اتم های موجود در مولکول انتخاب.

✱ `Frame`: قاب انتخاب و قاب حرکت را نادیده می گیرد، اما روی قاب Ref تأثیر نمی گذارد.

✱ `Weight`: پیش فرض وزن یکنواخت در تمام اتم ها در انتخاب.

✱ اولین زمان در مولکول.

✱ `Move`: تمام اتم های موجود در مولکول انتخاب.

✱ `Frame`: قاب انتخاب و قاب حرکت را نادیده می گیرد، اما روی قاب Ref تأثیر نمی گذارد.

✱ `Weight`: پیش فرض وزن یکنواخت در تمام اتم ها در انتخاب.

🔗 `contacts(cutoff, sel=None)`: جفت اتمهای موجود در کات آف یکدیگر را برمی

گرداند. اگر sel نباشد، اتمهای موجود در جفت باید در انتخاب باشند. در غیر این صورت، اتم اول در هر جفت از انتخاب و دومی از sel خواهد بود.

۱۰٫۳٫۳ An atom selection example

در مثال اول، ما مولکول alanin.pdb را بارگذاری می کنیم، و یک انتخاب اتمی متشکل از کربن های آلفا ایجاد می کنیم. توجه داشته باشید که AtomSel نام کلاس است که نمونه های انتخاب اتم را تولید می کند. نمایش رشته ای شی را با وارد کردن نام آن و فشار دادن بازگشت نشان می دهیم. این متن مورد استفاده در انتخاب را نشان می دهد.

در مرحله بعد نشان می دهیم که چگونه انتخاب های اتمی به صورت چندتایی عمل می کنند: می توانیم طول آنها را با استفاده از دستور داخلی (len()) ساخته شده) بدست آوریم و با استفاده از عملگر برش [:] یک نسخه از اتمهای انتخاب شده را در یک tuple بازگردانیم.

در آخر، عملیات دریافت و تنظیم را نشان می دهیم. عملیات (get()) تعداد آرگومانهای رشته ای را می گیرد. برای هر آرگومان، لیستی از مقادیر پایتون را که مربوط به آن رشته است، برگرداند. عملکرد (set) اجازه می دهد تا فقط یک ویژگی را به طور همزمان تغییر دهید. با این حال، شما می توانید یک مقدار واحد را تصویب کنید، که برای تمام اتم های انتخاب شده استفاده می شود، یا یک دسته یا لیست به اندازه اندازه انتخاب اتم، که در این حالت مقادیر موجود در لیست به اتم مربوطه اختصاص می یابد. در انتخاب مادر مثال زیر از این رفتار استفاده می کنیم و ابتدا مقدار فعلی بتا را برای انتخاب ذخیره می کنیم، سپس مقدار بتا را برای ۵ اتم انتخاب شده به ۵ می رسانیم و در آخر دوباره با استفاده از نتایج دریافت مجدد مقادیر اصلی را تنظیم می کنیم.

```
>>> from molecule import *
>>> from AtomSel import AtomSel
>>> load('alanin.pdb')
>>> CA = AtomSel('name CA')
>>> CA
name CA
>>> len(CA)
12
>>> CA[:]
(0, 5, 11, 17, 23, 29, 35, 41, 47, 53, 59, 65)
>>> resname, resid = CA.get('resname', 'resid')
>>> resname
['ACE', 'ALA', 'ALA', 'ALA', 'ALA', 'ALA', 'ALA', 'ALA', 'ALA', 'ALA', 'ALA', 'C
BX']
>>> resid
[1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12]
>>> x,y,z=CA.get('x','y','z')
>>> x
[-2.18400000152587891, 1.45000000476837158, 1.98099999465942383, 0.541000000858306885,
2.80900000152587891, 5.9079999923706055, 5.0440001487731934, 4.5659999847412109,
7.93400000152587891, 9.7329998016357422, 8.1689996719360352, 9.2229995727539062]
>>> y
[0.59100000205039978, 0.0, 3.6429998874664307, 4.8410000801086426,
2.5559999942779541,
3.78600000133514404, 7.4190001487731934, 6.7989997863769531, 5.0819997787475586,
7.9559998512268066, 10.515999794006348, 8.5710000991821289]
>>> z
[0.91000000262260437, 0.0, -0.9089999794960022, 2.3880000114440918,
4.39200001983642578,
2.5859999656677246, 3.244999885559082, 6.9559998512268066, 7.2639999389648438,
5.5669999122619629, 7.8870000839233398, 11.013999938964844]
```

```
>>> NOTsel = -CA
>>> ANDsel
(name CA) and (resid 5)
>>> ORsel
(name CA) or (resid 5)
>>> NOTsel
not (name CA)
>>>
```

وقتی انتخاب اتم ترکیبی از مولکولهای مختلف باشد یا تعداد فریم های مختلف داشته باشد، از مولکول و قاب از اولین انتخاب اتم استفاده می شود.

۱۰,۳,۶ RMS example

مثال: فاصله RMS با وزن مخصوص را از قاب اولیه پیدا کنید. این فرضیه یک مولکول را دارد و زمان حرکت آن از قبل بارگیری شده است (به توضیحات کلاس Molecule مراجعه کنید).

```
from AtomSel import AtomSel
from Molecule import *
# Get a reference to the first molecule.
m=moleculeList()[0]
# Select all atoms.
sel=AtomSel()
# We are comparing to the first frame.
sel.frame(0)
# Get the mass weights.
mass = sel.get('mass')
Here's another RMSD example that uses the {\tt align} method:
\begin{verbatim}
from AtomSel import AtomSel
from Molecule import Molecule
mol1=Molecule()
mol1.load('proteins/alanin.psf')
mol1.load('proteins/alanin.dcd')
n = mol1.numFrames()
sel=AtomSel('backbone')
# align all frames with the first frame, using the backbone atoms
for i in range(1,n):
    sel.align(frame=i)
# align all frames with frame 10.
for i in range(1,n):
    sel.align(ref=sel.frame(10), frame=i)
# Align residues 1-3 from frame 10 with frame 20, but use all backbone atoms
# to perform the fit.
resid123=AtomSel('resid 1 to 3')
sel.align(ref=sel.frame(20), frame=10, move=resid123)
# GOTCHA ALERT: sel.frame(10).align(ref=sel.frame(20)) does not work!!
# That's because sel.frame(10) overrides frame 20 in this case since they
# are applied to the same AtomSel instance. Either use the frame argument,
# as illustrated here, or create a new AtomSel instance for the reference.
# Perform a mass-weighted RMSD alignment and compute the mass-weighted
# RMS distance from the first frame.
```

```
>>> beta = CA.get('beta')
>>> CA.set('beta',5)
>>> CA.set('beta',beta)
>>>
```

۱۰,۳,۴ Changing the selection and the fram

هنگامی که مولکول در VMD شامل چندین مجموعه مختصات (فریم) است، انتخاب های اتمی باید بدانند که کدام فریم را به آنها ارجاع می دهند، به خصوص هنگامی که شما انتخاب اتم مبتنی بر فاصله را انجام می دهید یا درخواست مختصات مختلفی مانند مختصات X، Y یا Z را دارید. به طور پیش فرض، انتخاب های اتمی در پایتون از قاب °، یعنی اولین مجموعه مختصات استفاده می کنند. می توانید قاب را هنگام انتخاب اتم یا با استفاده از روش قاب () مشخص کنید. ارسال هیچ آرگومان برای قاب () مقدار فعلی قاب را برمی گرداند.

```
>>> load('psf','alanin.psf','dcd','alanin.dcd')
>>> resid5 = AtomSel('resid 5', frame=50)
>>> resid5.frame()
50
>>> resid5.frame(22)
>>> resid5.frame()
22
```

با یک روش مشابه، شما می توانید اتم های انتخاب شده یک شیء انتخاب اتم را با استفاده از عمل انتخاب () انتخاب کنید. در ادامه با مثال قبلی:...

```
>>> resid5
resid 5
>>> resid5.select('resid 7')
>>> resid5
resid 7
>>>
```

۱۰,۳,۵ Combining atom selections

پس از ایجاد یک یا چند انتخاب اتم، می توانید آنها را ترکیب کنید تا موارد جدیدی ایجاد کنید.

```
>>> CA = AtomSel('name CA')
>>> resid5 = AtomSel('resid 5')
>>> CA
name CA
>>> resid5
resid 5
>>> ANDsel = CA & resid5
>>> ORsel = CA | resid5
```

ممکن است برخی از اسکریپت های پایتون هنگام وقوع حوادث مختلف در VMD بخوانند که از آنها مطلع شوند. مکانیسم ابراز این علاقه ثبت یک عملکرد پاسخ به تماس با ماژول ویژه تهیه شده توسط VMD است. هنگامی که رویداد مورد نظر رخ می دهد، تمام توابع ثبت شده نامیده می شوند. VMD اطلاعات توابع خاص مربوط به رویداد را منتقل می کند. مجموعه رویدادهای برگشت تماس در جدول ۱۰٫۴ ذکر شده است.

Name	When called	Function arguments
Display_update	Screen redraw	none
frame	Molecule changes coordinate frame	(molid, frame)
help	User pushes help button on Main window	(name of topic)
initialize_structure	Molecule created or deleted	(molid, 1 or 0)
pick_atom	Atom picked in graphics window	(molid, atomid,
pick_value		key shift state (1 if shift pressed, 0 otherwise)
timestep	Bond, angle, or dihedral label created	(value)
trajectory	New IMD coordinate frame received	(molid, frame)
	Completion of coordinate file read/write	(molid, filename)

جدول ۱۰٫۱: تفسیر بازخوانی های ۲۹ موجود در اسکریپت های پایتون در حال اجرا در VMD

کلیه عملکردهای برگشت پذیر باید دو آرگومان داشته باشند. اولین آرگومان یک شیء خواهد بود که در زمان ثبت تابع داده می شود. VMD از این شیء استفاده نمی کند، آن را به سادگی ذخیره کرده و در هنگام فراخوانی عملکرد برگشتی، آن را به پاسخ به تماس ارسال می کند آرگومان دوم عملکرد تابع پاسخ به بسته، بسته به نوع پاسخ به کار، یک عنصر حاوی ۰ یا بیشتر عناصر خواهد بود. نوع اطلاعات برای هر تماس برگشتی در ستون سوم جدول ۱۰٫۴ ذکر شده است. تماس های برگشتی با استفاده از روش اضافه کردن پاسخ به تماس / تاخیر برگشتی ماژول VMD.vmdcallbacks ثبت و ثبت می شوند. نحو این روش ها:

```
def add_callback(name, func, userdata = None):
def del_callback(name, func, userdata = None):
```

نام باید یکی از نام های پاسخ دهنده در جدول ۱۰٫۴ باشد. تابع شیء عملکرد است. userdata هر شیئی است؛ اگر هیچ شیئی تهیه نشود، هیچ کدام به عنوان اولین آرگومان برای عملکرد پاسخ به تماس ارسال نمی شوند. برای لغو پاسخ به تماس، از همان نام، کارکرد و داده های کاربر استفاده شده در هنگام ثبت پاسخ به کار می گیرید. همین عملکرد ممکن است چندین بار با اهداف مختلف کاربر ثبت شود.

```
w=sel.get('mass')
rms=[]
ref=AtomSel('backbone',frame=0)
for i in range(n):
rms.append(sel.frame(i).align(ref=ref, weight=w).rmsd(ref, weight=w))
# Initialize result list.
rms=[]
# Go!
for i in range(m.numFrames()):
rms.append(sel.rmsd(sel, frame=i, weight=mass))
Here's another RMSD example that uses the align method:
from AtomSel import AtomSel
from Molecule import Molecule
mol1=Molecule()
mol1.load('proteins/alanin.psf')
mol1.load('proteins/alanin.dcd')
n = mol1.numFrames()
sel=AtomSel('backbone')
# align all frames with the first frame, using the backbone atoms
for i in range(1,n):
sel.align(frame=i)
# align all frames with frame 10.
for i in range(1,n):
sel.align(ref=sel.frame(10), frame=i)
# Align residues 1-3 from frame 10 with frame 20, but use all backbone atoms
# to perform the fit.
resid123=AtomSel('resid 1 to 3')
sel.align(ref=sel.frame(20), frame=10, move=resid123)
# GOTCHA ALERT: sel.frame(10).align(ref=sel.frame(20)) does not work!!
# That's because sel.frame(10) overrides frame 20 in this case since they
# are applied to the same AtomSel instance. Either use the frame argument,
# as illustrated here, or create a new AtomSel instance for the reference.
# Perform a mass-weighted RMSD alignment and compute the mass-weighted
# RMS distance from the first frame.
w=sel.get('mass')
rms=[]
ref=AtomSel('backbone',frame=0)
for i in range(n):
rms.append(sel.frame(i).align(ref=ref, weight=w).rmsd(ref, weight=w))
```

۱۰٫۴٫۱ Using Tkinter menus in VMD

رابط شی گرا به Tk معروف به Tkinter با مفسر تعبیه شده Python گنجانده شده است. شما می توانید Tkinter GUI را به روش معمول و با یک احتیاط ایجاد کنید: روش Tkinter.mainloop () هرگز نباید فراخوانی شود، زیرا این امر با حلقه رویداد خود VMD تداخل می کند. VMD از بروزرسانی Windows GUI برای شما مراقبت خواهد کرد.

۱۰٫۵ Controlling VMD from Python

دستورات کنترل VMD از Python به ماژول هایی تنظیم می شوند که تقریباً با دستورات Tcl مطابقت دارند. وارد کردن کلیه دستورات در یک نمونه به دلیل همپوشانی برخی از توابع (به عنوان مثال، (listall)) توصیه نمی شود. تمام دستورات در زیر ذکر شده است، با نام نمونه داده شده توسط عنوان بخش.

۱۰٫۵٫۱ animate

عملیات پایتون موجود از نمونه محرک، برای کنترل اینکه فریم های مختصات نمایش داده شوند، استفاده می شود.

✓ (forward) :

✓ (reverse) : رو به جلو () و معکوس () باعث می شود که VMD به منظور افزایش یا کاهش تعداد فریم، به طور خودکار فریم های متحرک را شروع کند.

✓ (once) :

✓ (rock) :

✓ (loop) : یک بار ()، راک ()، و حلقه () نحوه کنترل چرخه فریم ها را وقتی VMD در حال متحرک کردن یک سری فریم است، کنترل می کند. یک بار () باعث می شود که VMD هنگام رسیدن به اولین یا آخرین قاب، متوقف شود. rock () باعث می شود که VMD هر بار که به آغاز یا پایان می رسد، جهت خود را معکوس کند. loop () باعث می شود که VMD از ابتدا با رسیدن به آخرین قاب، یا از آخرین قاب در صورت رسیدن به آغاز، از ابتدا ادامه دهد.

✓ «Rock»، «style() : Once»، یا «Loop»، مطابق با حالت انیمیشن VMD در حال حاضر باز می گردد.

✓ goto(frame) : انیمیشن را روی قاب معین تنظیم کنید و انیمیشن را مکث کنید.

✓ (prev) : به پایین ترین بخش فریم بروید، و سپس مکث کنید.

✓ (next) : به بالا ترین بخش فریم بروید، و سپس مکث کنید.

✓ (pause) : فریم های انیمیشن را متوقف کنید.

✓ speed(value) : نرخ نسبی را که فریم های متحرک VMD را تحریک می کند دریافت / تنظیم کنید. مقدار باید بین ۰ و ۱ باشد. اگر مقداری کمتر از ۰ داده شود، سرعت تغییر نخواهد

کرد. مقدار جدید سرعت همیشه برگردانده می شود.

✓ value(skip) : نرخ نسبی را که فریم های متحرک VMD را تحریک می کند دریافت / تنظیم کنید. مقدار باید بین ۰ و ۱ باشد. اگر مقداری کمتر از ۰ داده شود، سرعت تغییر نخواهد کرد.

مقدار جدید سرعت همیشه برگردانده می شود.

✓ molid(is active) : بازگرداندن اینکه آیا مولکول با شناسه مشخص فعال است یا خیر. به این معنا که؛ آیا به انیمیشن پاسخ می دهد یا نه.

✓ activate(molid, trueorfalse) : مولکول را با شناسه داده شده فعال یا غیر فعال کنید. مولکول های فعال، فریم های مختصات خود را در طول انیمیشن به روز می کنند. مولکول های غیرفعال نمی کنند.

۱۰٫۵٫۲ axes

عملیات پایتون موجود از واحد محورها، برای تغییر مکان نمایش محورها در پنجره گرافیکی، استفاده می شود.

✓ OFF, ORIGIN, LOWERLEFT, LOWERRIGHT, UPPERLEFT, UPERRIGHT :

ثابت های رشته تعریف شده در واحد محورها برای تنظیم محل محورها.

✓ get location() : یک شیء رشته را مطابق با مکان فعلی محورها برمی گرداند.

✓ set location(location) : با استفاده از یکی از ثابت های تعریف شده در ماژول، محل محورها را تنظیم کنید.

۱۰٫۵٫۳ color

عملیات پایتون که از ماژول رنگ موجود است، برای تغییر تعاریف رنگ، نقشه های رنگی یا ویرایش مقیاس رنگ استفاده می شود. تمام مقادیر rgb و مقیاس رنگ باید در محدوده ۰ تا ۱ باشد.

✓ categories() : لیستی از دسته های رنگ موجود را برمی گرداند.

✓ get colormap(name) : یک فرهنگ لغت از جفت های نام / رنگ را برای دسته رنگ داده شده برمی گرداند.

✓ set colormap(name, dict) : تعاریف رنگ را برای رنگ ها در رنگ مشخص تغییر دهید دسته بندی. کلیدهای موجود در ضبط باید از کلیدهای لیست شده توسط colormap برای آن دسته رنگها باشند، اگرچه همه کلیدها نیازی به لیست ندارند. این مقادیر باید دارای نامهای قانونی باشند.

✓ get colors() : دیکشنری را که کلیدهای آن همه اسامی رنگ قانونی است برگردانده شده

و مقادیر مربوط به آن مقادیر RGB از رنگ است که به صورت یک مجموعه ۳ گانه نشان داده شده است.

✓ `set colors(dict)`: مقادیر RGB را برای رنگ ها در VMD تغییر می دهد. کلیدها را باید از کلیدهایی که با رنگ دریافت می شوند انتخاب کنید (). مقادیر باید از ۳ نوبت شناور باشد.

✓ `scale method()`: روش مقیاس رنگ فعلی را برمی گرداند.

✓ `scale methods()`: لیستی از تمام روشهای مقیاس رنگ موجود را برمی گرداند.

✓ `scale midpoint()`: حد وسط مقیاس رنگ فعلی را برمی گرداند.

✓ `scale min()`: حداقل مقیاس رنگ فعلی را برمی گرداند.

✓ `scale max()`: حداکثر مقیاس رنگ فعلی را برمی گرداند.

✓ `set scale(method, midpoint, min, max)`: روش مقیاس رنگ، نقطه میانی، حداقل یا حداکثر را تغییر دهید. همه ویژگی ها با استفاده از آرگومان های کلمه کلیدی قابل تنظیم هستند.

display ۱۰/۵/۴

عملیات پایتون که از ماژول نمایشگر موجود است، برای کنترل دوربین VMD و همچنین به روزرسانی صفحه استفاده می شود.

✓ `update()`: بدون بررسی منوهای VMD/FLTK، یک بروزرسانی صفحه نمایش را اعمال کنید .

✓ `update ui()`: صفحه نمایش و سایر رابط های کاربر را به روز کنید.

✓ `update on()`: به VMD فرمان دهید که به طور مرتب نمایشگرها و منوهای FLTK را به روز کند.

✓ `update off()`: به VMD بگویید که نمایشگر را مرتباً به روز نکند. نمایشگر فقط هنگامی فراخوانی می شود که `display.update()` فراخوانی شود.

✓ `stereomodes()`: لیستی از حالت های استریو موجود را برمی گرداند.

✓ `PROJ PERSP, PROJ ORTHO`: ثابت های رشته تعریف شده در ماژول صفحه نمایش برای تنظیم کلمه کلیدی پیش بینی در روش مجموعه.

✓ `set(**keywordlist)`:

✓ `get(key)`: تنظیم () و کنترل () خواص نمایشگر مختلف را کنترل کنید. کلمات کلیدی زیر مقادیر نقطه شناور را می پذیرند و باز می گردند: چشمی، فاصله کانونی، ارتفاع، مسافت، نزدیک، کلیپ، `farclip`. کلمات کلیدی زیر مقادیر boolean را برای خاموش یا خاموش قبول می کنند: آنتیالیا، عمق، کشیدن استریو باید یکی از مقادیر بازگشتی توسط استریومدها باشد (). طرح ریزی باید یکی از ثابت های PROJ باشد که در این ماژول تعریف شده است. اندازه

باید لیستی از دو عدد صحیح باشد که مربوط به عرض و ارتفاع نمایشگر در پیکسل ها است.

evaltcl ۱۰/۵/۵

روش `evaltcl` دسترسی به مترجم اصلی VMD/Tcl را از پایتون فراهم می کند. این یک رشته با دستورات Tcl به عنوان یک آرگومان طول می کشد و آن را ارزیابی می کند. هدف اصلی آن دسترسی به مفسر پایتون دسترسی به کارایی است که فقط از Tcl در دسترس است و هنوز هیچ اجرای معادل در پایتون وجود ندارد، به عنوان مثال پلاگین های مبتنی بر Tcl. مثال های استفاده:

```
from VMD import evaltcl
versionid=evaltcl('vmdinfo version')
evaltcl('play somescript.tcl')
```

graphics ۱۰/۵/۶

عملیات پایتون که از ماژول گرافیکی موجود است، برای ایجاد اشیاء ۳ بعدی D دلخواه از گرافیک اولیه استفاده می شود. اولین استدلال برای همه عملیاتها، شناسه یک مولکول Graphics است. مولکول های گرافیکی با استفاده از فرمان بار () در ماژول مولکول ایجاد می شوند: بار ("گرافیکی"، "تست") یک مولکول گرافیکی با نام "آزمون" ایجاد می کند. برای راس و عادی، یک سیستم چند گانه با سه مورد شناور لازم است.

✓ `triangle(id, v1, v2, v3)`: مثلثی با رئوس داده شده بکشید.

✓ `cylinder(id, v1, v2, radius=1.0, resolution=6, filled=0)`: یک استوانه را با نقاط انتهایی مشخص شده توسط نقاط داده شده بکشید. پرتونگاری، وضوح تصویر، و پر کردن (این که آیا انتهای آن باید پوشانده شود یا خیر) ممکن است با آرگومان های کلمه کلیدی مشخص شود.

✓ `point(id, v)`: یک نقطه را در مختصات داده شده بکشید.

✓ `line(id, v1, v2, style='solid', width=1)`: بین رئوس داده شده خط بکشید. به صورت اختیاری، ممکن است سبک خط به عنوان «جامد» یا «شکسته» مشخص شود، و عرض ممکن است عدد صحیحی مثبت باشد.

✓ `materials(id, onoff)`: برای گرافیک اولیه، مواد را روشن یا خاموش می کند. ابتدایی قرار دادن در پشته تحت تأثیر قرار نمی گیرد. `onoff` باید یا ۰ (خاموش) یا ۱ (روشن) باشد.

✓ `material(id, name)`: مواد را برای همه گرافیک های اولیه در این مولکول تنظیم می کند. نام باید یکی از نام های مادی باشد که توسط `material.listall()` برگشت داده شده است.

✓ `color(id, color)`: رنگ را برای بدویات اولیه گرافیک تنظیم کنید. رنگ ممکن است (۱) یک

سیستم چند گانه شامل سه شناور باشد که مقدار RGB را مشخص می کند، (۲) یک عدد صحیح مربوط به یک شاخص رنگ یا (۳) رشته ای مربوط به یک نام رنگ باشد.

✓ `cone(id, v1, v2, radius=1.0, resolution=6)`: یک مخروط را با پایه در ۷۱ و نقطه در ۷۲ بکشید. شعاع و وضوح ممکن است اختیاری با آرگومان های کلمه کلیدی مشخص شود.

✓ `sphere(id, center=(0.0, 0.0, 0.0), radius=1.0, resolution=6)`: کره را ترسیم کنید. مرکز کره، شعاع و وضوح ممکن است به صورت اختیاری با آرگومان های کلمه کلیدی مشخص شود.

✓ `text(id, pos, text, size=1.0)`: متن را در موقعیت معین رسم کنید (مشخص شده توسط یک دسته از سه شناور با استفاده از متن رشته. اندازه ممکن است به صورت اختیاری با استفاده از آرگومان های کلمه کلیدی مشخص شود).

✓ `delete(id, index)`: گرافیک ابتدایی را با نمایه داده شده حذف می کند. از طرف دیگر، اگر رشته «همه» به عنوان فهرست منتقل شود، تمام primitives گرافیک ها حذف می شوند.

✓ `replace(id, index)`: گرافیک ابتدایی را با نمایه داده شده حذف می کند. گرافیک primitive بعدی اضافه شده در موقعیت تازه تخلیه شده قرار خواهد گرفت. ابتدای گرافیک بعدی در انتهای لیست از سر گرفته می شود.

✓ `info(ind, index)`: رشته ای را توصیف می کند که گرافیک را با شاخص داده شده توصیف می کند. اگر این شاخص نامعتبر باشد، یک استثناء IndexError مطرح می شود.

✓ `listall(ind)`: شاخص های گرافیک معتبر اولیه را در یک لیست برمی گرداند.

۱۰.۵.۷ imd

عملیات پایتون موجود از ماژول imd، برای نمایش و تعامل با یک مولکول در یک شبیه سازی دینامیک مولکولی.

✓ `connect(host, port)`: به یک شبیه سازی که در host میزبان اجرا می شود وصل شوید و به اتصالات ورودی در port گوش دهید.

✓ `pause()`: در صورت وصل شدن، مکث کنید.

✓ `detach()`: در صورت اتصال، از شبیه سازی جدا شوید. این شبیه سازی به اجرا ادامه خواهد داد، اما تا برقراری مجدد اتصال هیچ فریم بیشتری دریافت نمی شود.

✓ `kill()`: در صورت اتصال، شبیه سازی را خاتمه دهید. ارتباط نیز از بین می رود.

✓ `transfer(rate)`: تنظیم / دریافت کنید که چند بار شبیه سازی از راه دور فریم های مختصات را به VMD می فرستد. اگر نرخ حذف شود یا منفی باشد، هیچ اقدامی صورت نمی گیرد و مقدار فعلی بازگردانده می شود. مقدار ۱ با هر فریم ارسال شده مطابقت دارد. مقدار ۲ با هر فریم دیگر مطابقت دارد، و غیره

✓ `keep(rate)`: تنظیم / دریافت کنید که اغلب چارچوب های مختصات دریافت شده توسط VMD به عنوان بخشی از انیمیشن نگهداری می شوند. اگر نرخ حذف شود یا منفی باشد، هیچ اقدامی صورت نمی گیرد و مقدار فعلی بازگردانده می شود. مقدار ۰ بدین معنی است که هیچ فریم ذخیره نمی شود. مقدار ۱ با هر فریم ذخیره شده مطابقت دارد. مقدار ۲ با هر فریم دیگر مطابقت دارد، و غیره.

✓ `copyunitcell(True/False)`: نحوه انتقال اطلاعات unitcell به قاب جدیدی که از طریق IMD دریافت می شود را کنترل کنید. اگر تنظیم شود روی اطلاعات سلول واحد False (پیش فرض) از اتصال IMD گرفته می شود. از آنجا که پروتکل IMD در حال حاضر هیچگونه مفادی برای برقراری ارتباط اطلاعات سلول واحد ندارد، ابعاد سلول واحد بر صفر تنظیم می شود. اگر روی True سلول تنظیم شود، اطلاعات سلول از قاب قبلی کپی می شود.

WARNING: هنگام استفاده از imd.copyunitcell (درست) با شبیه سازی هادر گروه NPT، اطلاعات unitcell حاصل نادرست خواهد بود.

۱۰.۵.۸ label

عملیات پایتون که از ماژول برچسب موجود است، برای ایجاد، نمایش / پنهان کردن و حذف برچسب ها برای اتم ها، پیوندها، زاویه ها یا چند سطحی ها استفاده می شود.

✓ `ATOM, BOND, ANGLE, DIHEDRAL`: انواع برچسب توسط ماژول برچسب، برای استفاده به عنوان اولین آرگومان روشهای افزودنی، لیست، نمایش، پنهان کردن و حذف کردن تعریف می شود.

✓ `add(type, molids, atomids)`: یک برچسب از نوع داده شده ایجاد کنید. molid ها و اتمها باید به ترتیب دارای برچسب های حاوی ۱، ۲، ۳ یا ۴ عدد برای برچسب های، ATOM، ANGLE، BOND یا DIHEDRAL باشند. اگر برچسب قبلاً وجود داشته باشد، هیچ عملی انجام نمی شود. برگه ای متناسب با برچسب ارجاع شده را می توان برگرداند که می تواند در روش های نمایش ()، مخفی کردن ()، حذف () و موارد دریافت () استفاده شود

✓ `listall(type)`: لیستی از برچسب های نوع داده شده را برمی گرداند. عناصر لیست اشیاء فرهنگ لغت پایتون هستند که دارای کلیدهای زیر هستند: molid، atomid، مقدار، روشن. مقادیر molid و atomid سیستم های چند گانه ای هستند که حاوی شناسه مولکول و شناسه اتم برای برچسب هستند. مقدار مقدار عددی برچسب هندسه یا صفر برای برچسب های ATOM است. در صورت نشان دادن برچسب ۱، و اگر برچسب مخفی است ۰ است.

✓ `show(type, label)`: برچسب داده شده را روشن کنید. برچسب باید یک فرهنگ لغت باشد که دارای کلیدهای molid و atomid باشد و مقادیر آن سیستم های چند گانه هستند. اگر این سیستم ها با شناسه های مولکول و شناسه های اتم در یک برچسب موجود مطابقت داشته

باشند، برچسب روشن می شود. اگر برچسب وجود نداشته باشد ValueError را بالا می برد.
 ✓ `(hide(type, label` : برچسب داده شده را خاموش کنید. برچسب باید یک فرهنگ لغت باشد که دارای کلیدهای molid و atomid باشد و مقادیر آن سیستم های چند گانه هستند.
 اگر این سیستم ها با شناسه های مولکول و شناسه های اتم در یک برچسب موجود مطابقت داشته باشند، برچسب خاموش می شود. اگر برچسب وجود نداشته باشد ValueError را بالا می برد.

✓ `(delete(type, label` : برچسب داده شده را حذف کنید. برچسب باید یک فرهنگ لغت باشد که دارای کلیدهای molid و atomid باشد و مقادیر آن سیستم های چند گانه هستند.
 اگر این سیستم ها با شناسه های مولکول و شناسه های اتم در یک برچسب موجود مطابقت داشته باشند، برچسب حذف می شود. اگر برچسب وجود نداشته باشد ValueError را بالا می برد.

✓ `(getvalues(type, label` : لیستی از مقادیر برچسب داده شده برای هر فریم مختصات موجود در برچسب را برمی گرداند. اگر اتم های موجود در برچسب به مولکول های مختلفی تعلق داشته باشند، فقط مختصات مولکول اول چرخه ای می شوند. اگر برچسب ها مقادیری ندارند (مانند برچسب های اتمی)، هیچ کدام بازگردانده نمی شوند.

✓ `(show(type, label` : برچسب داده شده را روشن کنید. برچسب باید یک فرهنگ لغت باشد که دارای کلیدهای molid و atomid باشد و مقادیر آن نوارها هستند. اگر سیستم چند گانه با شناسه های مولکول و شناسه های اتم در یک برچسب موجود مطابقت داشته باشند، برچسب روشن می شود. اگر برچسب وجود نداشته باشد ValueError را بالا می برد.

✓ `(hide(type, label` : برچسب داده شده را خاموش کنید. برچسب باید یک فرهنگ لغت باشد که دارای کلیدهای molid و atomid باشد و مقادیر آن نوارها هستند. اگر سیستم چند گانه با شناسه های مولکول و شناسه های اتم در یک برچسب موجود مطابقت داشته باشند، برچسب خاموش می شود. اگر برچسب وجود نداشته باشد ValueError را بالا می برد.

✓ `(delete(type, label` : برچسب داده شده را حذف کنید. برچسب باید یک فرهنگ لغت باشد که دارای کلیدهای molid و atomid باشد و مقادیر آن نوارها هستند. اگر سیستم چند گانه با شناسه های مولکول و id های اتم در یک برچسب موجود مطابقت داشته باشند، برچسب حذف می شود. اگر برچسب وجود نداشته باشد ValueError را بالا می برد.

✓ `(getvalues(type, label` : لیستی از مقادیر برچسب داده شده برای هر فریم مختصات موجود در برچسب را برمی گرداند. اگر اتم های موجود در برچسب به مولکول های مختلفی تعلق داشته باشند، فقط مختصات مولکول اول چرخه ای می شوند. اگر برچسب ها مقادیری ندارند (مانند برچسب های اتمی)، هیچ کدام بازگردانده نمی شوند.

۱۰/۵/۹ material

عملیات پایتون که از نمونه ماده موجود است، برای ایجاد و اصلاح ویژگیهای ماده بازنمودهای مولکولی استفاده می شود.

✓ `(listall()` : لیستی از پایتون را با نام تمام مواد موجود برمی گرداند.

✓ `(settings(name` : یک فرهنگ لغت پایتون از تنظیمات مواد برای مواد با نام مشخص شده برمی گرداند.

✓ `(add(name=None, copy=None` : با نام مشخص، یک ماده جدید ایجاد کنید. در صورت تمایل، خصوصیات مربوط به کپی مواد را در مواد جدید کپی کنید. اگر نامی نیامده باشد، نام جدیدی ارائه می شود.

✓ `(delete(name` : مواد را با نام مشخص شده حذف کنید.

✓ `(rename(oldname, newname` : تغییر نام مواد با نام داده شده. نام جدید هنوز استفاده نشده است.

✓ `(change(name, ambient, specular, diffuse, shininess, mirror, opacity` : یک یا چند تنظیمات مواد را با نام مشخص شده تغییر دهید. استدلال های کلمه کلیدی ممکن است برای مشخص کردن هر ویژگی استفاده شود.

۱۰/۵/۱۰ molecule

عملیات پایتون که از ماژول مولکول موجود است، برای بارگیری مولکول ها و تغییر بازنمایی آنها استفاده می شود.

✓ `(num()` : تعداد مولکولهای بارگذاری شده را برمی گرداند.

✓ `(molid : listall()` های مولکولهای بارگذاری شده را برمی گرداند.

✓ `(exists(molid` : اگر molid با یک مولکول موجود مطابقت داشته باشد، برمی گردد.

✓ `(new(name` : با نام معین یک مولکول خالی جدید ایجاد کرده و شناسه خود را برمی گرداند.

✓ `(load(structure, sfname, coor, cfname)` : یک مولکول را با ساختار نوع ساختار و نام پرونده sfname بارگذاری کنید. علاوه بر این، ممکن است یک فایل مختصات جداگانه، از نوع coor و name cfname ارائه شود. New in VMD ۸.۰.۰: کليه فریم های cfname قبل از بازگشت عملکرد پردازش می شوند. در صورت موفقیت، تابع شناسه مولکول جدید را برمی گرداند.

```
>>> load('pdb', 'alanin.pdb')
>>> load('psf', 'alanin.psf', 'dcd', 'alanin.dcd')
```

✓ `(cancel(molid)` : بارگیری پرونده مختصات مربوط به مولکول داده شده را لغو کنید.

✓ `(delete(molid)` : مولکول مشخص شده را حذف کنید.

✓ `(get repname(molid, rep)` :

✓ `(repindex(molid, name)` : این دو دستور به شما امکان می دهد که نام ها را به reps اختصاص دهید و به آن نام به آنها دسترسی پیدا کنید. نام برگشت داده شده با دریافت repname تضمین می شود که برای تمام تکرارهای موجود در مولکول بی نظیر است و حتی در صورت تغییر سفارشات در تکرارها، با تکراری که به آن اختصاص داده شده خواهد بود. از repindex برای یافتن بازپرداخت گزارش با نام داده شده استفاده کنید. -۱ در صورت عدم پاسخ با آن نام، بازگردانده می شود.

✓ `(get autoupdate(molid, rep)`:

✓ `(set autoupdate(molid, rep, onoff)` : این دو دستور به شما امکان می دهد که نام ها را به reps اختصاص دهید و به آن نام به آنها دسترسی پیدا کنید. نام برگشت داده شده با دریافت repname تضمین می شود که برای تمام تکرارهای موجود در مولکول بی نظیر است و حتی در صورت تغییر سفارشات در تکرارها، با تکراری که به آن اختصاص داده شده خواهد بود. از repindex برای یافتن بازپرداخت گزارش با نام داده شده استفاده کنید. -۱ در صورت عدم پاسخ با آن نام، بازگردانده می شود.

✓ `(get colorupdate(molid, rep)` :

✓ `(set colorupdate(molid, rep, onoff)` : این دو دستور به شما امکان می دهد که به روزرسانی خودکار رنگ را برای یک نمایه خاص روشن یا خاموش کنید. به روزرسانی خودکار به این معنی است که هر زمان تغییر می کند قاب مختصات مولکول، رنگ مورد نظر مجدد محاسبه می شود. این برای رنگ آمیزی توسط Position یا کاربر مفید است.

✓ `(get smoothing(molid, rep)` :

✓ `(set smoothing(molid, rep, n)` : این دو دستور به شما امکان می دهد تا سطح پرواز از بازنمایی های مولکولی را تنظیم و تنظیم کنید. مختصات اتمی که برای ترسیم نمایش داده شده استفاده می شود با اندازه متوسط پنجره متحرک از $2n - 1$ صاف می شود.

✓ `(get scaleminmax(molid, rep)` :

✓ `(set scaleminmax(molid, rep, min, max)` :

✓ `(reset scaleminmax(molid, rep)`: دامنه مقیاس رنگ را برای این تکرار دریافت / تنظیم کنید. به طور معمول مقیاس رنگ به طور خودکار به حداقل و حداکثر دامنه داده مربوطه می رسد. این دستور مقادیر اتوکال شده را با مقادیری که تعیین کرده اید غلبه می کند. برای به دست آوردن مقادیر فعلی، آرگومان های min و max را کنار بگذارید. از تنظیم مجدد scaleminax استفاده کنید تا دوباره مقیاس رنگ را به حداکثر دامنه تغییر دهید.

✓ `(get visible(molid, rep)` :

✓ `(set visible(molid, rep, onoff)` : این دو دستور به شما امکان می دهد نمایه مولکولی منتخب را نشان داده یا مخفی کنید، و وضعیت دید یک نمایه مشخص را بازبایی کنید.

render ۱۰/۵/۱۲

عملیات پایتون که از ماژول رندر موجود است، برای صادر کردن صحنه به پرونده ای که توسط برنامه های رندر خارجی قابل خواندن است، استفاده می شود.

✓ `(listall())` : لیست پایتون را با اسامی تمام روشهای ارائه شده پشتیبانی کنید. یکی از این

موارد باید اولین استدلال در مورد عملکرد رندر () زیر باشد.

✓ `(render(method, filename)` : با استفاده از روش ارائه داده شده، صحنه فعلی را به پرونده

filename صادر کنید. method باید یکی از مقادیر بازگشت یافته توسط listall () باشد.

trans ۱۰/۵/۱۳

عملیات پایتون که از ماژول trans موجود است، برای تغییر نمای صحنه ارائه شده استفاده می شود.

✓ `(rotate(axis, angle)` : صحنه را در مورد محور مشخص شده با زاویه مشخص بچرخانید.

محور باید «y»، «x» یا «z» باشد. زاویه در درجه اندازه گیری می شود.

✓ `(translate(x, y, z)` : صحنه را با مقادیر x، y و z داده شده ترجمه کنید.

✓ `(scale(factor)` : مقیاس (بزرگنمایی) صحنه توسط فاکتور داده شده.

✓ `(resetview(molid)` : مرکز، مقیاس، چرخش برای همه مولکول ها را طوری تنظیم می

کند که منظره را نشان دهد

✓ در مولکول با شناسه مشخص متمرکز شده است.

✓ `(get center(molid)` :

✓ `(set center(molid, vector)` : مختصات مرکز مولکول داده شده را به عنوان لیست پایتون

بدست آورید / تنظیم کنید.

✓ `(get scale(molid)` : ضریب مقیاس مورد استفاده برای نمایش مولکول داده شده را دریافت

/ تنظیم کنید.

✓ `(get rotation(molid)` :

✓ `(set rotation(molid, matrix)` : ماتریس چرخش برای مولکول داده شده را به عنوان

لیست ۱۶ عنصر پایتون به ترتیب ردیف اصلی دریافت یا تنظیم کنید.

✓ `(get trans(molid)` :

✓ `(set trans(molid, vector)` : ترجمه جهانی را که در مورد مولکول داده شده به عنوان

لیست پایتون اعمال شده است، گرفته و تنظیم کنید.

✓ `(is fixed(molid)` : برمی گردد که آیا مولکول با شناسه مشخص ثابت است یا خیر. یعنی

اینکه تحت تأثیر ترجمه، چرخش یا مقیاس گذاری باشد. مولکولهای ثابت هنوز ممکن است

متحرک شوند (به بخش فعال در بخش حرکات فعال است).

✓ `(fix(molid, trueorfalse)` : مولکول را با شناسه داده شده ثابت یا متفاوت.

✓ `is shown(molid)`: بازگرداندن اینکه آیا مولکول با شناسه مشخص شده نشان داده شده است یا نه.

✓ `show(molid, trueorfalse)`: مولکول را با شناسه مشخص شده درست کنید یا خیر.

۱۰/۵/۱۴ vmdnumpy

اگر VMD نصب عددی Python را در مسیر جستجوی پایتون تشخیص دهد، این مازول اختیاری از درون مازول toplevel VMD در دسترس قرار می گیرد. در صورت وجود، روش های زیر ارائه می شود:

✓ `timestep(molid, frame)`: یک آرایه عددی تک دقیق را شامل یک مرجع مستقیم به مجموعه مختصات مختصات اتمی برمی گرداند. مختصات اتمی XYZXYZXYZ... برای هر اتم موجود در مولکول ترتیب داده شده است. هیچ نسخه ای از مختصات داخلی VMD ساخته نشده است. بنابراین، تغییرات در این آرایه مستقیماً روی مختصات اتم در VMD تأثیر می گذارد. استفاده از آرایه پس از فاصله زمانی سنج به احتمال زیاد باعث خرابی VMD می شود. مزیت حداکثر بهره وری و امکان اصلاح آسان مختصات اتمی بدون عبور از رابط انتخاب اتم است.

✓ `atomselect(molid, frame, selection)`: مجموعه ای از نمایندگان پرچم را برای اتم های روشن / خاموش در انتخاب اتم مشخص شده برمی گرداند. نحو انتخابی همانند کلاس AtomSel است. مجموعه ای از این فرم را می توان در رابطه با تابع take Numeric برای بدست آوردن مختصات انتخاب شده از یک زمان استفاده کرد. ایجاد یک آرایه از این طریق می تواند ۵۰-۱۰۰ برابر سریعتر از تبدیل از یک هدف AtomSel باشد.

۱۰/۶ High-level Python Interface

VMD سه مازول را برای دسترسی و دستکاری در حالت VMD با اشیاء که نشان دهنده اشخاص مهم هستند فراهم می کند. این اشیاء را می توان به عنوان مرجع مربوط به شیء واقعی در VMD تصور کرد: می توانید منابع مورد نظر خود را به همان میزان که می خواهید ایجاد کنید و آنها را حذف کنید، اما تغییر مرجع وضعیت واقعی VMD را تغییر می دهد. این با کلاس AtomSel متفاوت است، جایی که هر نمونه AtomSel مستقل از مولکول ها و تکرارهای VMD است. این کلاس های پراکسی به صورت خالص پایتون نوشته شده اند و از رابط های داخلی سطح پایین تر برای ارتباط با VMD استفاده می کنند.

۱۰/۶/۱ Molecule

کلاس Molecule یک پروکسی برای مولکولهای بارگذاری شده در VMD است. در صورت عدم وجود پروکسی دیگر به یک مولکول معتبر (یعنی اگر این مولکول حذف شده باشد) بیشتر عملکردها ValueError را افزایش می دهد. مثالهای مولکولی روشهای زیر را ارائه می دهند:

✓ `init(id=None)`: ایجاد یک نمونه Molecule جدید بدون هیچ استدلال، یک مولکول خالی جدید در VMD ایجاد می کند. عبور از یک شناسه مولکول معتبر، باعث می شود که نمونه مولکول آینه ای از مولکول مربوطه در VMD باشد.

✓ `int ()`: فرستادن یک مولکول به int، شناسه مولکول را برمی گرداند.

✓ `rename(self, newname)`: نام مولکول را تغییر می دهد.

✓ `name ()`: نام مولکول را برمی گرداند.

✓ `delete ()`: مولکول مربوط به این نمونه Molecule را حذف می کند. دیگر نمی توان از اشیاء استفاده کرد.

✓ `load(filename, filetype=None, first=0, last=-1, step=1, waitfor=-1, volsets=[0])`: بار (نام پرونده، filetype = هیچکدام، اول = ۰، آخرین = -۱، مرحله = ۱، waitfor = -۱، volsets = [۰]): داده های مولکول را از پرونده داده شده بارگیری کنید. نوع پرونده از پسوند پرونده حدس زده می شود؛ با تنظیم گزینه filetype می توان این مورد را نادیده گرفت. کنترل اول، آخر و مرحله ای که فریم ها را برای بارگذاری هماهنگ می کند، در صورت وجود. volsets نشان می دهد که کدام داده های حجمی برای بارگیری از پرونده تنظیم می کند. اگر پرونده بارگیری نشود، IOError را بالا می برد.

✓ `save(filename, filetype=None, first=0, last=-1, step=1, waitfor=-1, sel=-None)`: ذخیره پرونده های زمانی در پرونده داده شده. نوع پرونده از پسوند پرونده حدس زده می شود؛ با تنظیم گزینه filetype می توان این مورد را نادیده گرفت. اول، آخر، و کنترل مرحله ای که می توانید زمان صرفه جویی کنید. تعداد فریم های نوشته شده قبل از اتمام دستور را برمی گرداند. یک نمونه AtomSel را به عنوان sel گذر کنید تا فقط یک انتخاب از اتم ها را در پرونده بنویسید. توجه داشته باشید که این باروش AtomSel.write () متفاوت است و در آن Molecule.save () طیف وسیعی از زمان را می نویسد، در حالی که AtomSel.write () فقط مختصات مربوط به قاب انتخابی را که در حال حاضر انتخاب شده است می نویسد.

✓ `files ()`:

✓ `types ()`: لیستی از نام پرونده ها و انواع پرونده ها را به ترتیب، برای پرونده هایی که در این مولکول بارگذاری شده اند، برمی گرداند.

✓ `numAtoms ()`: تعداد اتمهای موجود در مولکول را برمی گرداند.

✓ `numFrames ()`: تعداد فریم های مختصات موجود در مولکول را برمی گرداند.

✓ `setFrame(frame)`: فریم مختصات را روی مقدار داده شده تنظیم کنید. باید در دامنه [۰، numFrames ()) باشد

✓ `curFrame()`: فریم مختصات فعلی مولکول را برمی گرداند.

✓ `delFrame(first=0, last=-1, step=1)`: دامنه مشخصی از فریم ها را حذف می کند.

✓ `dupFrame(frame=None)`: فریم داده شده را کپی کرده و آن را تا انتها اضافه کنید. اگر فریم هیچ نیست سپس از فریم فعلی استفاده می شود.

✓ `numReps()`: تعداد بازنمودهای مولکولی (تکرارها) در مولکول داده شده را برمی گرداند.

✓ `reps()`: لیستی از اشیاء MoleculeRep را باز می گرداند، یکی برای هر تکرار در مولکول.

✓ `addRep(rep)`: نمونه داده شده MoleculeRep را به مولکول اضافه کنید. تغییرات در تکرار، بر تمام مولکولی که به آنها اضافه شده است تأثیر می گذارد. اگر قبلاً به این مولکول اضافه شده است، ValueError را بالا می برد.

✓ `MoleculeRep.delRep(rep)`: داده شده را از Molecule حذف می کند. تکرار تأثیر نمی گذارد و می تواند به سایر مولکول ها اضافه شود، اما تغییر در آن دیگر بر این مولکول تأثیر نمی گذارد.

✓ `clearReps()`: همه تکرارهای این مولکول را از بین می برد.

✓ `autoUpdate(rep, onoff=None)`: در صورت عدم موفقیت آمیز بودن، وضعیت بروزرسانی خودکار را برای این rep و مولکول تعیین کنید (توجه داشته باشید که وضعیت بروزرسانی خودکار یک پاسخ ممکن است برای مولکول های مختلف متفاوت باشد). وضعیت بروزرسانی خودکار تکرارها را برمی گرداند.

✓ `ssRecalc()`: ساختار ثانویه این مولکول را دوباره محاسبه کنید.

Examples:

```
>>> from VMD import *
>>> from Molecule import *
>>> bR=Molecule()
>>> bR.load('../proteins/brH.pdb')
<snip>
<Molecule.Molecule instance at 0x406d878c>
>>> bR.name()
'molecule'
>>> bR.rename('bR')
<Molecule.Molecule instance at 0x406d878c>
>>> bR.name()
'bR'
>>> bR.numAtoms()
3762
>>> bR.dupFrame()
<Molecule.Molecule instance at 0x406d878c>
>>> bR.numFrames()
2
```

۱۰٫۶٫۲ MoleculeRep

کلاس MoleculeRep، تعریف شده در ماژول Molecule، به گونه ای طراحی شده است که بتوان پیگیری rep را در یک مولکول آسان کرد و به روزرسانی rep را در بسیاری از مولکول ها به طور همزمان انجام داد. روش کار ایجاد نمونه MoleculeRep است، سپس با استفاده از روش Molecule.addRep() می توانید آن را به همان تعداد مولکول اضافه کنید. تنها عملیاتی که روی اشیاء MoleculeRep انجام می شود تغییر خصوصیات آنهاست. وقتی این اتفاق می افتد، تمام مولکولی که به آنها rep اضافه شده است به روز می شود. حذف نمونه MoleculeRep تأثیری ندارد. لیستی از موارد MoleculeRep برای یک مولکول معین رامی توان از روش Molecule.reps() دریافت کرد. کلاس MoleculeRep روشهای زیر را ارائه می دهد:

✓ `init_(style=defStyle, color=defColor, selection=defSelection, materi---`

`al=defMaterial)`: شیء Rep را با سبک، رنگ، انتخاب و خصوصیات مواد اولیه شروع کنید. MoleculeRep اشیاء دارای ویژگی هایی با نامهای مشابه با کلمات کلیدی فوق است. این می تواند مورد استفاده قرار گیرد برای پرس و جو از وضعیت نماینده. این ویژگی ها را مستقیماً تنظیم نکنید. در عوض از روشهای *change استفاده کنید.

✓ `changeStyle(style`

✓ `changeColor(color`

✓ `changeSelection(selection`

✓ `changeMaterial(material`: سبک ترسیم، رنگ، انتخاب اتم و مواد را برای این rep

تنظیم کنید. اگر rep به هر مولکولی اختصاص یابد، مولکول rep بر این اساس به روز می شود. style باید یک سبک رسم معتبر باشد؛ توابع *Style را در زیر مشاهده کنید.

در مثال زیر، مایک مولکول را بار می کنیم، یک VDW شفاف جدید را به مولکول اضافه می کنیم، سپس انتخاب اتم را برای تکرار به «CA» تغییر می دهیم:

```
>>> from VMD import *
>>> from Molecule import *
>>> bR=Molecule()
>>> bR.load('../proteins/brH.pdb')
<snip>
>>> reps=bR.reps()
>>> reps[0].style
'Lines'
>>> vdw=MoleculeRep(style='VDW', material='Transparent')
>>> bR.addRep(vdw)
>>> vdw.changeSelection('name CA')
10.6.3 Draw Style Methods
```

ترکیب تغییر سبک رسم در روش MoleculeRep.changeStyle() نسبتاً ساده است و به راحتی قابل یادآوری است تا زمانی که از مقادیر پیش فرض برای هر سبک استفاده می شود. با این حال، به خاطر سپردن اینکه `rep.changeStyle("CPK")` راه تعیین شعاع پیوند، مقیاس کره و وضوح کره برای CPK کمی دشوارتر است. کلاس Molecule تابعی را برای هر سبک ترسیم تعریف

می‌کند تا تولید رشته‌های مورد نیاز برای انتقال به روشهای `changeStyle` را آسانتر کند. هر تابع برای مشخص کردن پارامترهای سبک رسم، آرگومان‌های کلمه کلیدی را می‌پذیرد و رشته‌ای مناسب برای `changeStyle()` را برمی‌گرداند.

۱۰٫۶٫۴ Saving and Restoring Molecule State

با استفاده از ماژول دشوار از کتابخانه استاندارد Python می‌توان نمونه‌های `Molecule` و `MoleculeRep` را ذخیره کرد. با اطلاعات مربوط به نام، پرونده‌ها و تکرارها، مولکول‌ها ذخیره می‌شوند. پرونده‌ها با مولکول ذخیره نمی‌شوند. هنگامی که نمونه مولکول با استفاده از `pickle.load()` دوباره بازسازی می‌شود، آنها بارگیری می‌شوند. نمونه‌های `MoleculeRep` می‌توانند دشوار شوند. در صورت ترمیم، آنها به هر مولکولی واگذار نخواهند شد.

Tcl عبارات ریاضی را خیلی خوب انجام نمی دهد. این در ارزیابی عبارات کند است و هیچ امکاناتی برای کار با بردار یا ماتریس فراهم نمی کند. از آنجا که دو مورد دوم برای تجزیه و تحلیل ساختار مورد نیاز هستند، ما روالهایی را برای دستکاری آنها اضافه کرده ایم. یک بردار در VMD لیستی از اعداد است. تمام روالهای برداری اما یکی با بردارهای هر طول کار خواهد کرد. `veccross` فقط از بردارهای سه عدد استفاده می کند. ماتریس مجموعه ای از اعداد 4×4 است که به صورت لیستی از ۴ بردار ۴ عددی، به ترتیب ردیف اصلی ذخیره می شود.

در زیر توضیحات و نمونه هایی از همه دستورات آورده شده است. برای مثالهای بیشتری از بردارها، اگرچه بدون مستندات زیاد، اسکریپت مورد استفاده برای آزمایش بردارها در `$env(VMDDIR)/scripts/vmd/test-vectors.tcl` قرار دارد.

از آنجا که Tcl در محاسبات کند است، برخی از این دستورات در ++C مجدداً اجرا شده اند. (تعریف اصلی در توزیع اسکریپت `vmd` است، اما بعداً در داخل VMD تعریف شده است). در بعضی مواقع سرعت زیاد عاملی ۴۰ یا بیشتر است. این دستورات توسط ++C ذکر شده است.

۱۱٫۱ بردارها

✓ `Veczero` - بردار صفر را برمی گرداند، `{000}`

Example:
vmd > veczero
000

✓ `vecadd v1 v2 [v3 ... vn]` (C++) - مجموع بردار کلیه شرایط را برمی گرداند.

Examples:
vmd > vecadd {123}{456}{789}{-11-11-11}
147
vmd > vecadd {0.10.20.40.8}{1123}{3141}
4.12.26.44.8
vmd > vecadd 45
9

✓ `vecmul v1 v2` - بردار ضرب جمله به جمله را برمی گرداند.

Examples:
vmd > vecmul {123}{456}
41018
vmd > vecmul {0.10.20.40.8}{1123}
0.10.20.82.4

✓ `vecsub v1 v2` (C++): تفریق بردار جمله دوم را از اول برمی گرداند

Examples:
vmd > vecsub 63.2
2.8
vmd > vecsub {109.87}{0.10-0.1}
9.99.87.1
vmd > vecsub {12345}{678910}
-5-5-5-5-5

✓ `vecsum v` (C++) - مجموع عناصر را در v برمی گرداند

Examples:
vmd > vecsum {123}
6.0

Chapter 11

فصل یازدهم

بردارها و ماتریس ها

Vectors and matrices

✓ `vecmean v` (C++) - میانگین عناصر موجود در v را برمی گرداند

Examples:
vmd> vecmean {123}
2.0

✓ `vecstddev v` (C++) - انحراف استاندارد عناصر در v را برمی گرداند

Examples:
vmd> vecstddev {12345678910}
2.87228131294

✓ `vecscale c v` (C++)

✓ `vecscale v c` (C++) - بردار مقدار مقیاس c اعمال شده برای هر اصطلاح v را برمی گرداند

Examples:
vmd> vecscale .2 {123}
0.20.40.6
vmd> vecscale {-54-32}-2
10-86-4
vmd> vecscale -23
-6

✓ `vecdot v1 v2` - حاصل نقطه اسکالر دو بردار را برمی گرداند

Examples:
vmd> vecdot {1-23}{456}
12
vmd> vecdot {34}{34}
25
vmd> vecdot {12345}{54321}
35
vmd> vecdot 3-2
-6

✓ `veccross v1 v2` - محصول بردار دو بردار را برمی گرداند.

Examples:
vmd> veccross {100}{010}
001
vmd> veccross {222}{-100}
0-22

✓ `veclength v` - طول مقیاس v ($\|v\|$) را برمی گرداند

Examples:
vmd> veclength 5
5.0
vmd> veclength {512}
13.0
vmd> veclength {3412}
13.0
vmd> veclength {1-23-4}
5.47723

✓ `veclength2 v` - مربع طول مقیاس v ($\|v\|^2$) را برمی گرداند

Examples:
vmd> veclength2 5
25
vmd> veclength2 {512}
169
vmd> veclength2 {3412}
169
vmd> veclength2 {1-23-4}
30

✓ `vecnorm v` - بردار طول v هدایت شده در امتداد v را برمی گرداند

Examples:
vmd> vecnorm -10
-1.0
vmd> vecnorm {11}
0.7071090.707109
vmd> vecnorm {2-31}
0.534522-0.8017830.267261
vmd> vecnorm {22-22-2-2}
0.4082480.408248-0.4082480.408248-0.408248-0.408248

✓ `vecdist v1 v2` - فاصله بین دو بردار ($\|v_2 - v_1\|$) را برمی گرداند

Examples:
vmd> vecdist -1.55.5
7.0
vmd> vecdist {000}{340}
5.0
vmd> vecdist {0123456}{-6-5-4-3-2-10}
15.8745

✓ `vecinvert v` - معکوس افزودنی معکوس ($-v$) را برمی گرداند.

Examples:
vmd> vecinvert -11.1
11.1
vmd> vecinvert {3-45}
-34-5
vmd> vecinvert {0-12-3}
01-23

از آنجا که ماتریس ها وقتی به صورت متن بیان می شوند بسیار بزرگ هستند، تعاریف زیر برای مثال ها استفاده می شود.
 Transidentity - ماتریس شناسایی را برمی گرداند. ✓

Example:
 vmd> transidentity
 {1.00.00.00.0}{0.01.00.00.0}{0.00.01.00.0}{0.00.00.01.0}

transtranspose m - انتقال ماتریس از ماتریس داده شده را برمی گرداند ✓

Example:
 vmd> transtranspose{{01234}{5678}{9101112}{13141516}}
 {05913}{161014}{271115}{381216}

transmult m¹m²[m³... mn] (C++) - ضرب ماتریس از ماتریس های داده شده را برمی گرداند ✓

Examples:
 vmd> set mat1{{1234}{-23-45}{3-45-6}{45-6-7}}
 vmd> set mat2{{1000}{00.7071-0.70710}{00.70710.70710}{0001}}
 vmd> set mat3{{0.866025000}{0100}{-0.500.8660250}{0001}}
 vmd> transmult \$mat1[transidentity]
 {1.02.03.04.0}{-2.03.0-4.05.0}{3.0-4.05.0-6.0}
 {4.05.0-6.0-7.0}
 vmd> transmult \$mat1\$mat2\$mat3
 {0.5124753.53550.6123664.0}{0.7428-0.7071-4.286565.0}
 {-0.583870.70715.5113-6.0}{7.35315-0.7071-6.73603-7.0}

transaxis <x|y|z> amount [deg|rad|pi] - ماتریس تحول مورد نیاز برای چرخش در حول محور مشخص شده را با مقدار مشخصی برمی گرداند. به طور پیش فرض، مقدار آن در درجه های مشخص شده است، اگرچه می تواند به صورت رادیان یا فاکتورهای pi نیز داده شود.

Examples:
 vmd> transaxis x 90
 {1.00.00.00.0}{0.0-3.67321e-06-1.00.0}{0.01.0-3.67321e-060.0}
 {0.00.00.01.0}
 vmd> transaxis y 0.25 pi
 {0.7071070.00.7071070.0}{0.01.00.00.0}
 {-0.7071070.00.7071070.0}{0.00.00.01.0}
 vmd> transaxis z 3.1415927 rad
 {-1.0-2.65359e-060.00.0}{2.65359e-06-1.00.00.0}{0.00.01.00.0}
 {0.00.00.01.0}

transvec v - ماتریس تحول مورد نیاز برای آوردن محور x در طول بردار v را برمی گرداند. ✓
 این ماتریس منحصر به فرد نیست، زیرا چرخش نهایی در اطراف بردار مجاز است. ماتریس از چرخش در اطراف y ساخته می شود، سپس یکی در مورد z.

Examples:
 vmd> transvec{010}
 {-3.67321e-06-1.00.00.0}{1.0-3.67321e-060.00.0}{0.00.01.00.0}
 {0.00.00.01.0}
 vmd> vectrans[transvec{002}]{100}
 0.00.01.0

transvecinv v - تغییر لازم برای آوردن بردار v به محور x را برمی گرداند. این ماتریس معکوس را برای انتقال ایجاد می کند و از چرخشی در مورد z و سپس یکی در مورد y تشکیل شده است.

Examples:
 vmd> transvecinv{0-10}
 {-3.67321e-06-1.00.00.0}{1.0-3.67321e-060.00.0}{0.00.01.00.0}
 {0.00.00.01.0}
 vmd> vectrans[transvecinv{-34-12}]{-34-12}
 13.0-1.8e-055.8e-05
 vmd> transmult[transvec{6-57}][transvecinv{6-57}]
 {0.9999992.29254e-07-6.262e-090.0}{2.29254e-070.999999
 -4.52228e-070.0}{-6.262e-09-4.52228e-071.00.0}{0.00.00.01.0}

transoffset v (C++) - ماتریس تبدیل مورد نیاز برای ترجمه توسط این مجموعه داده را برمی گرداند ✓

Examples:
 vmd> transoffset{100}
 {1.00.00.01}{0.01.00.00}{0.00.01.00}{0.00.00.01.0}
 vmd> transoffset{-65-4.3}
 {1.00.00.0-6}{0.01.00.05}{0.00.01.0-4.3}{0.00.00.01.0}

transabout v amount [deg|rad|pi] - ماتریس تبدیل مورد نیاز برای چرخش توسط مقدار داده شده خلاف جهت عقربه های ساعت در اطراف محور را که از طریق مبدأ و در طول بردار معین می رود، تولید می کند. همانند transvec، واحد مقدار چرخش می تواند درجه، رادیان یا چند برابر pi باشد.

Examples:
 # this is a rotation about x by 180 degrees
 vmd> transabout{100}180
 {1.00.00.00.0}{0.0-1.0-2.65359e-060.0}{0.02.65359e-06
 -1.00.0}{0.00.00.01.0}
 # a rotation about z by 90 degrees
 # (compare this to "transaxis z 90"
 vmd> transabout{001}1.5709 rad
 {0.999624-0.0274140.00.0}{0.0274140.9996240.00.0}
 {0.00.01.00.0}{0.00.00.01.0}
 vmd> transabout{111}1pi
 {-0.3333350.6666650.6666690.0}{0.666668-0.3333340.666666
 0.0}{0.6666660.66667-0.3333320.0}{0.00.00.01.0}

Multiplying vectors and matrices ۱۱,۳

دو دستور برای ضرب یک ماتریس و یک بردار، بردارها و coordtrans وجود دارد. آنها فرض می کنند که بردار به شکل ستون است و پیش از موعد ماتریس را به بردار نشان می دهد. اگر بردار شامل چهار عدد باشد، دو دستور یکسان هستند. اگر بردار سه عنصر داشته باشد، یک چهارم اضافه می شود. ° برای vectrans و ۱ برای Coordtrans. تفاوت در این است که بردارها در طول تحولات تحت تأثیر ترجمه قرار نمی گیرند، در حالی که مختصات هستند.

✓ vectrans m v (C++ - ماتریس m را با بردار v (طول ۴) ضرب کنید. بردار را برمی گرداند

✓ coordtrans m v - ماتریس m را با مختصات v (طول ۳) ضرب کنید. بردار را برمی گرداند

Examples:
vmd> vectrans [transaxis z 90] {1 0 0}
-3.67321e-06 1.0 0.0
vmd> vectrans [transvecinv {-3 4 -12}] {-3 4 -12}
13.0 -1.8e-05 5.8e-05
11.4 Misc. functions and values

چندین رابطه دیگر به بسته بردارها اضافه شده است. اولین متغیر MPI است که حاوی مقدار pi است.

Examples:
vmd> set M_PI
3.14159265358979323846
vmd> expr 90 * (\$M_PI / 180)
1.5708

توابع trans_from_rot, trans_to_rot, trans_from_offset, and trans_to_offset برای بدست آوردن یا تنظیم ماتریس تحول از ماتریس چرخش ۳x۳ یا بردار افسست استفاده می شود. همانطور که در حال حاضر طراحی شده است، این فرض می کند که هیچ اندازه گیری در ماتریس وجود ندارد. Trans_from_offset با transoffset یکسان است و برای کامل بودن وجود دارد.

آخرین مورد، find_rotation_value varname است، که یک نام متغیر را می گیرد و از ابتدای آن عباراتی را که توصیف مقدار چرخش است، استخراج می کند. بقیه داده های موجود در متغیر باقی می مانند و مقدار چرخش در رادیان ها بازگردانده می شود. این توسط آن دسته از توابع که نیاز به چرخش دارند استفاده می شود. مقادیر معتبر عبارتند از: یک عدد، به دنبال آن یکی از rad، radian یا radian برای یک مقدار در radians، کلمه pi برای دادن چرخش در عوامل pi، یا یکی از deg، درجه یا درجه ها برای یک مقدار در درجه. اگر هیچ واحدی داده نشود، فرض می شود که مقدار درجه باشد.

✓ trans[center{xyz}][origin{xyz}][offset{xyz}][axisxamount[rad|deg|pi]]
[axisyamount[rad|deg|pi]][axiszamount[rad|deg|pi]][xamount[rad|deg|pi]]
[yamount[rad|deg|pi]][zamount[rad|deg|pi]][axis{xyz}amount[rad|deg|pi]]
[bond{x1y1z1}{x2y2z2}amount[rad|deg|pi]][angle{x1y1z1}{x2y2z2}{x3y3
z3}amount[rad|deg|pi]] -

این دستور تقریباً می تواند همه کارهایی را که دیگران انجام می دهند و سپس برخی از آنها انجام دهد. این طراحی شده است که اصلی ترین عملکرد مورد استفاده در تولید ماتریس های تبدیل باشد. استفاده صحیح از آن، درک چگونگی عملکرد داخلی آن را فرا می بخشد. سه ماتریس وجود دارد: مرکز، چرخش و افسست. ماتریس مرکز تعیین می کند که مرکز چرخش در کجا قرار دارد. به طور پیش فرض، این مبدأ است، اما می تواند در هر نقطه تغییر کند و به محور تبدیل شود. ماتریس چرخش، چرخش را در مورد آن نقطه ی مرکزگرایی تعریف می کند، و ماتریس افسست ترجمه نهایی را بعد از چرخش تعریف می کند.

به عنوان مثال، برای چرخش در یک نقطه معین، تحولات ۱) ماتریس محور برای آوردن آن نقطه به مبدأ، ۲) چرخش در مورد مرکز و ۳) افسست نهایی برای بازگشت مبدأ به محل اصلی خود است. . گزینه های مختلف فرمان trans ماتریس ها را به روش های مختلف اصلاح می کند.

④ center{xyz} - ماتریس وسط را طوری تنظیم می کند که نقطه xyz منشاء آن شود

④ {offset{xyz} - ماتریس افسست را طوری تنظیم می کند که مبدأ به xyz برسد

④ origin{xyz} - ماتریس های مرکز و افسست را هم xyz تنظیم می کند

④ axis x amount[rad|deg|pi] - چرخش مربوط به محور x را با مقدار داده شده به ماتریس چرخش اضافه می کند

④ [axis y amount[rad|deg|pi] - چرخش در مورد محور y با مقدار داده شده به ماتریس چرخش اضافه می کند

④ axis z amount[rad|deg|pi] - چرخش در مورد محور z را با مقدار داده شده به ماتریس چرخش اضافه می کند

④ axis{xyz}amount[rad|deg|pi] - چرخش مقدار داده شده در مورد بردار داده شده را به ماتریس چرخش اضافه می کند

④ bond{x¹y¹z¹}{x²y²z²}amount[rad|deg|pi] - مرکز و تبدیل های افسست را به نقطه اول تنظیم می کند، و یک چرخش در مورد محور باند را با مقدار معین تعریف می کند.

④ [angle{x1y1z1}{x2y2z2}{x3y3z3}amount[rad|deg|pi] - مرکز و تبدیل افسست را به نقطه دوم تنظیم کرده و چرخشی را در مورد محور عمود بر صفحه ساخته شده توسط سه نقطه تعریف می کند (بردار از محصول متقاطع بردار محاسبه می شود که دو نقطه اول را با آن متصل می کند دو نقطه آخر).

```
vmd> set a "180 deg north"
180 deg north
vmd> find_rotation_value a
3.14159
vmd> set a
north
vmd> set a "1 pi to eat"
1 pi to eat
vmd> find_rotation_value a
3.14159
vmd> set a
to eat
vmd> set a 45
45
vmd> find_rotation_value a
0.785398
vmd> expr $M_PI * 3.0 / 2.0
4.71239
vmd> set a "4.71238 radians"
4.71238 radians
vmd> find_rotation_value a
4.71238
```

در این بخش نحوه استخراج اطلاعات مربوط به مولکولها و اتمها با استفاده از دستور متن molinfo در VMD ارائه شده است.

مثال ها:

دو عملکرد، یکی برای ذخیره موقعیت نمای فعلی و دیگری برای بازیابی آن. با این عملیات موقعیت محور تغییر نمی کند.

```
proc save_viewpoint {} {
  global viewpoints
  if [info exists viewpoints] {unset viewpoints}
  # get the current matrices
  foreach mol [molinfo list] {
    set viewpoints($mol) [molinfo $mol get {
      center_matrix rotate_matrix scale_matrix global_matrix}]
  }
}
proc restore_viewpoint {} {
  global viewpoints
  foreach mol [molinfo list] {
    puts "Trying $mol"
    if [info exists viewpoints($mol)] {
      molinfo $mol set {center_matrix rotate_matrix scale_matrix
        global_matrix} $viewpoints($mol)
    }
  }
}
```

چرخه را از طریق لیست مولکول های نمایش داده شده، چرخاندن هر یک به یک بار. در پایان نشانه های نمایشگر را به حالت اصلی خود برگردانید.

```
# save the current display state
foreach mol [molinfo list] {
  set disp($mol) [molinfo $mol get drawn]
}
# turn everything off
mol off all
# turn each molecule on then off again
foreach mol [molinfo list] {
  if $disp($mol) {
    mol on $mol
    sleep 1
    mol off $mol
  }
}
# turn the original ones back on
foreach mol [molinfo list] {
  if $disp($mol) {mol on $mol}
}
```

آخرین حلقه، که مولکول های در ابتدا کشیده شده را روشن می کند، آنها را همزمان نمی کند. به این دلیل است که برخی از دستورات (آنهايي که از صف فرمان استفاده می کنند) هنگام استفاده مجدد از گرافیک استفاده می کنند. با بروزرسانی صفحه نمایش می توان این کار را غیرفعال کرد (برای اطلاعات بیشتر به بخش ۹٫۳٫۶ مراجعه کنید). با استفاده از این،

Chapter 12

فصل دوازدهم

آنالیز مولکولی

Molecular analysis

حلقه نهایی می شود.

```
#turn the original ones back on
display update off
foreach mol [molinfo list] {
  if $disp($mol) {mol on $mol }
}
display update on
Alternatively, since the drawn option is settable, you could do:
foreach mol [molinfo list] {
  if $disp($mol) {molinfo $mol set drawn 1}
}
```

با این حال، این نشانه را تنظیم نمی کند که صحنه را از نو تغییر دهد، بنابراین نیاز هست شما بازرسم را با نمایش بازرسم ایجاد کنید.

۱۲٫۲ استفاده از دستور atomselect

انتخاب اتم روش اولیه برای دسترسی به اطلاعات مربوط به اتم های موجود در یک مولکول است. در دو مرحله کار می کند. مرحله اول ایجاد یک انتخاب با توجه به متن انتخاب، شناسه مولکول و تعداد قاب اختیاری است. این کار با عملکردی به نام atomselect انجام می شود که نام انتخاب اتم جدید را برمی گرداند. مرحله دوم استفاده از گزینه ایجاد شده برای دسترسی به اطلاعات مربوط به اتمهای موجود در انتخاب ها است.

انتخاب اتم به عنوان یک تابع Tcl انجام می شود. داده های برگشت یافته از atomselect نام تابع مورد استفاده است. نام به شکل atomselect %d است که در آن «%d» یک عدد غیر منفی است (مانند «atomselect»، «atomselect۲۶»، «...»). روش استفاده از عملکرد ایجاد شده توسط دستور atomselect، ذخیره نام در یک متغیر است، سپس از متغیر استفاده کنید تا در صورت لزوم نام را بدست آورید.

```
vmd> set sel [atomselect top "water"]
atomselect3
vmd> $sel text
water
This is equivalent to saying
vmd> atomselect3 text
```

ساده ترین راه تفکر در این باره این است که فرمان اتمی انتخاب یک شیء می کند. برای به دست آوردن اطلاعات از شیء، باید دستور را برای آن ارسال کنید. بنابراین، در مثال فوق (num atomselect۱) به هدف «atomselect۱» دستور «num» ارسال شده است، که از جسم می خواهد تعداد اتمهای موجود را انتخاب کند. این توابع شیء مشتق شده (آزهایی که دارای نام هایی مانند atomselect۳ هستند) گزینه های بسیاری را انتخاب می کنند، همانطور که در بخش ۹٫۳٫۲ توضیح داده شده است،

به عنوان مثال، با توجه به انتخاب

```
vmd> set sel [atomselect top "resid 4"]
atomselect4
```

شما می توانید نام های اتم را برای هر یک از اتم های انتخابی با

```
vmd> $sel get name
```

که به یاد داشته باشید، همان است که

NHCACBCO

```
vmd> atomselect4 get name
```

با ارائه لیستی می توان چندین ویژگی را درخواست کرد، بنابراین اگر می خواهید ببینید کدام اتم ها در ستون فقرات قرار دارند،

```
vmd> $sel get {name backbone}
{N 1}{H 0}{CA 1}{CB 0}{C 1}{O 1}
```

و مختصات اتمی با

```
vmd> $sel get {x y z}
{0.710000 4.211000 1.093000}{-0.026000 3.700000 0.697000}{0.541000
4.841000 2.388000}{-0.809000 4.462000 2.976000}{1.591000 4.371000
3.381000}{2.212000 5.167000 4.085000}
```

توجه داشته باشید که فرمت داده ای که از دستور get دریافت می کنید بستگی به تعداد صفت مورد نظر شما دارد. اگر فقط یک ویژگی را درخواست کنید، مانند مثال دریافت نام در بالا، یک لیست ساده از عناصر را برمی گردانید. از طرف دیگر، اگر دو یا چند ویژگی را درخواست کنید، لیستی از زیر فهرست ها را برمی گردانید. به طور خاص، لیستی از اندازه n است که در آن هر عنصر خود لیستی از اندازه i است، در جایی که n تعداد اتم ها در انتخاب و i تعداد ویژگی های درخواستی است. اگر فقط یک ویژگی را همزمان با بازیابی کنید، اسکریپت های شما سریعتر اجرا می شوند، زیرا در این صورت VMD لازم نیست که زیر نویس ها را برای هر ویژگی ایجاد کند. به یاد داشته باشید که در Tcl می توانید چندین لیست را همزمان با استفاده از دستور foreach لوپ کنید:

```
foreach resid [$sel get resid] resname [$sel get resname] {
  # process each resid and resname here
}
```

یکی از کارکردهای سریع که می توانید با مختصات ایجاد کنید، روشی برای محاسبه مرکز هندسی است (نه مرکز جرم؛ این کمی سخت تر است). این همچنین از برخی از دستورات برداری که در بخش مربوط به بردارها و ماتریسها بحث شده است استفاده می کند [۱۱]، اما باید بتوانید آنها را در متن مشخص کنید.

```
proc geom_center {selection} {
  # set the geometrical center to 0
  set gc [veczero]
  # [$selection get {x y z}] returns a list of {x y z}
  # values (one per atoms) so get each term one by one
  foreach coord [$selection get {x y z}] {
    # sum up the coordinates
    set gc [vecadd $gc $coord]
  }
  # and scale by the inverse of the number of atoms
  return [vecscale [expr 1.0 / [$selection num]] $gc]
}
```

با این تعریف می توانید بگویید (فرض کنید sel با مثال `atomselectio` قبلی ایجاد شده است)

```
vmd> geom_center $sel
0.703168 4.45868 2.43667
```

من به طور مثال به خط مثال می روم. این تابع به عنوان مرکز `geom` نامگذاری شده است و یک پارامتر را به نام خود انتخاب می کند. خط اول متغیر «gc» را بر روی بردار صفر قرار می دهد، که ۰۰ است. در خط دوم کد، دو مورد رخ می دهد.

اول، دستور

```
$selection get {x y z}
```

اجرا می شود، و رشته با نتیجه جایگزین می شود، که هست

```
{0.710000 4.211000 1.093000}{-0.026000 3.700000 0.697000}{0.541000
4.841000 2.388000}{-0.809000 4.462000 2.976000}{1.591000 4.371000
3.381000}{2.212000 5.167000 4.085000}
```

این یک لیست از ۶ اصطلاح است (یکی برای هر اتم در انتخاب) و هر اصطلاح لیستی از سه عنصر، مختصات x ، y و z در آن ترتیب است.

فرمان «foreach» لیست را به شش جمله خود تقسیم می کند و مدت زمان را توسط لیست پایین می آورد و متغیر «coord» را برای هر جمله متوالی تعیین می کند. در داخل لوپ، مقدار `$coord` به جمع کل اضافه می شود.

خط آخر مرکز هندسی اتمها را در انتخاب برمی گرداند. از آنجا که مرکز هندسی به عنوان مجموع بردارهای مختصات تقسیم بر تعداد عناصر تعریف شده است، و تاکنون فقط مبلغ بردارها را محاسبه کرده ام، به معکوس تعداد عناصر احتیاج دارم، که با بیان انجام می شود

```
[selection num$] / \^°expr
```

اعشاری در «\^°» از آنجا که Tcl تقسیم عدد صحیح را انجام می دهد مهم است. سرانجام، از این مقدار برای مقیاس کردن کل بردارهای مختصات (با `vecscale`) استفاده می شود، که مقدار جدید را برمی گرداند، که خود به عنوان نتیجه عمل باز می گردد.

مرکز عملکرد جرم کمی سخت تر است زیرا باید جرم و همچنین مقادیر x ، y ، z را بدست آورید و سپس آن را به اجزای تقسیم کنید. فرمول P برای مرکز جرم است

```
proc center_of_mass {selection} {
# some error checking
if {[ $selection num] <= 0} {
error "center_of_mass: needs a selection with atoms"
}
# set the center of mass to 0
set com [veczero]
# set the total mass to 0
set mass 0
# [ $selection get {x y z}] returns the coordinates {x y z}
# [ $selection get {mass}] returns the masses
# so the following says "for each pair of {coordinates} and masses,
# do the computation ..."
foreach coord [ $selection get {x y z}] m [ $selection get mass] {
# sum of the masses
set mass [expr $mass + $m]
# sum up the product of mass and coordinate
set com [vecadd $com [vecscale $m $coord]]
}
```

```
# and scale by the inverse of the number of atoms
if { $mass == 0 } {
error "center_of_mass: total mass is zero"
}
# The "1.0" can't be "1", since otherwise integer division is done
return [vecscale [expr 1.0/ $mass] $com]
}
vmd> center_of_mass $sel
Info) 0.912778 4.61792 2.78021
```

نقطه مقابل «دریافت» «تنظیم» است. بسیاری از کلمات کلیدی (مهمترین آنها « y »، « x » و « z » می توانند روی مقادیر جدید تنظیم شوند. به عنوان مثال، اجازه می دهد مختصات اتم تغییر یابد، مقادیر اشغال به روز شود یا نیروهای کاربر اضافه شود. همچنین می توانید `resname`، `segid` و غیره را تغییر دهید که انجام این کار در VMD ساده تر از نمونه هایی است که برای ویرایش یک فایل PDB با دست انجام می شود.

```
set sel [atomselect top "index 5"]
$sel get {x y z}
{1.450000 0.000000 0.000000}
$set set {x y z} {{1.6 0 0}}
```

توجه داشته باشید که درست همانطور که گزینه دریافت یک لیست از لیست ها را برگرداند، گزینه تنظیم به یک لیست نیاز دارد، به همین دلیل به مجموعه اضافی از آکولاد ها نیاز داشت. مجدداً، این باید لیستی از عناصر اندازه n باشد که شامل لیستی از اندازه i است. استثنا اگر n برابر با ۱ باشد، لیست به اندازه کافی بار کپی می شود، بنابراین برای هر اتم یک عنصر وجود دارد.

```
# get two atoms and set their coordinates
set sel [atomselect top "index 6 7"]
$sel set {x y z} {{5 0 0}{7.6 5.4 3.2}}
```

در این حالت، اتم با شاخص ۶ مقادیر (x, y, z) خود را به ۵۰۰ می دهد و اتم با نمایه ۷ مختصات خود را به ۵٫۴۷٫۶٫۳٫۲ می تغییر می دهد.

با دستیابی به مختصات، تغییر دادن آنها (مثلاً با اضافه کردن برخی `offset`) و جایگزینی آن، می توانید اتمها را از این طریق جابجا کنید. زیر تابعی است که فقط این کار را انجام می دهد:

```
proc moveby {sel offset} {
foreach coord [ $sel get {x y z}] {
lappend newcoords [vecadd $coord $offset]
}
$sel set {x y z} $newcoords
}
```

و برای استفاده از این عملکرد (در این حالت، برای انتخاب «`moveel$`») یک افست $(x, y, z) = (۰٫۱-۰٫۸, ۹۲٫۸)$ اعمال کنید:

```
moveby $movesel {0.1-2.8 9}
```

با این حال، برای ساده کردن موارد، برخی گزینه ها برای مقابله با حرکات به انتخاب اضافه شده است (این دستورات در ++C نیز اجرا می شوند و بسیار سریعتر از نسخه های Tcl هستند). این توابع `moveby`، `moveto` و `move` هستند. دو مورد بردار موقعیت دارند و دومی ماتریس تحول را می گیرد.

اولین دستور، moveby، با بردار افست داده شده، هریک از اتم های انتخابی را انتخاب می کند.

```
$sel moveby {1-13.4}
```

دوم، moveto، تمام اتمها را در یک انتخاب به یک مختصات معین منتقل می کند (استفاده از این برای انتخاب بیش از یک اتم عجیب خواهد بود، اما این مجاز است). مثال:

```
$sel moveto {-114.3}
```

آخرین آن، حرکت، ماتریس تحول داده شده را در هر یک از مختصات اتم اعمال می کند. این بهترین حالت برای چرخش مجموعه ای از اتم ها در اطراف یک محور معین، مانند موارد استفاده می شود

```
$sel move [trans x 90]
```

که انتخاب را ۹۰ درجه در مورد محور x می چرخاند. البته ممکن است از هر ماتریس تبدیل استفاده شود. مثال مفیدتر مثال زیر است، که اتم های زنجیره جانبی را در اطراف پیوند CA-CB ۱۰ درجه می چرخاند.

```
# get the sidechain atoms (CB and onwards)
set sidechain [atomselect top "sidechain residue 22"]
# get the CA coordinates -- could do next two on one line ...
set CA [atomselect top "name CA and residue 22"]
set CAcoord [lindex [$CA get {x y z}] 0]
# and get the CB coordinates
set CB [atomselect top "name CB and residue 22"]
set CBcoord [lindex [$CB get {x y z}] 0]
# apply a transform of 10 degrees about the given bond axis
$sidechain move [trans bond $CAcoord $CBcoord 10 deg]
```

۱۲,۳ Analysis scripts

در زیر نمونه های دیگری از روالهایی وجود دارد که می توانند برای تجزیه و تحلیل مولکولها استفاده شوند. اینها بهترین روال برای استفاده نیستند زیرا بسیاری از این موارد را می توان با دستور اندازه گیری پیاده سازی کرد، که یک عملکرد داخلی را سریع تر می نامد.

یافتن آبهای نزدیک پروتئین این مثال آبهای نزدیک پروتئین را برای هر قاب از مسیر پیدا می کند و یک فایل PDB را که شامل آن آب ها است، می نویسد:

```
set sel [atomselect top "water and same residue as (within 2 of protein)"]
set n [molinfo top get numframes]
for { set i 0 } { $i < $n } { incr i } {
    $sel frame $i
    $sel update
    $sel writpdb water_$i.pdb
}
```

گزینه frame، قاب انتخاب را تعیین می کند، update به انتخاب اتم می گوید که آبهای نزدیک پروتئین را بازپرداخت کند، و Writpdb آبهای انتخاب شده را به یک فایل می نویسد.

مجموع جرم یک انتخاب

```
proc total_mass {selection} {
    set sum 0
    foreach mass [$selection get mass] {
        set sum [expr {$sum + $mass}]
    }
    return $sum
}
```

به براکت های دارای منحنی بعد از دستور expr در مثال بالا دقت کنید. حذف این براکتها باعث می شود اسکریپت بالا حدود سه برابر آهسته تر اجرا شود.

در اینجا راه دیگری (کمی آهسته تر) برای انجام همین کار وجود دارد. این امر به این دلیل کار می کند که انبوهی که از انتخاب برگشته اند، لیستی از لیست ها است. قرار دادن آن در داخل کوتیشن eval، آن را به دنباله ای از بردارها تبدیل می کند، بنابراین دستور vecadd روی آن کار خواهد کرد.

```
proc total_mass1 {selection} {
    set mass [$selection get mass]
    eval "vecadd $mass"
}
```

حداقل و حداکثر مختصات مقدار حداقل و حداکثر مختصات یک مولکول معین در جهت x، y و z را پیدا کنید (همچنین به دستور اندازه گیری «minmax» مراجعه کنید). این تابع شناسه مولکول را می گیرد و دو بردار را برمی گرداند. اول حاوی مقادیر min و دوم حاوی حداکثر است.

```
proc minmax {molid} {
    set sel [atomselect top all]
    set sx [$sel get x]
    set sy [$sel get y]
    set sz [$sel get z]
    set minx [lindex $sx 0]
    set miny [lindex $sy 0]
    set minz [lindex $sz 0]
    set maxx $minx
    set maxy $miny
    set maxz $minz
    foreach x $sx y $sy z $sz {
        if {$x < $minx} {set minx $x} else {if {$x > $maxx} {set maxx $x}}
        if {$y < $miny} {set miny $y} else {if {$y > $maxy} {set maxy $y}}
        if {$z < $minz} {set minz $z} else {if {$z > $maxz} {set maxz $z}}
    }
    return [list [list $minx $miny $minz] [list $maxx $maxy $maxz]]
}
```

شعاع gyration، شعاع gyration را برای یک انتخاب محاسبه کنید (به اندازه گیری rgyr نیز مراجعه کنید). مربع شعاع gyration به صورت $\frac{1}{2} \text{ mi}$ تعریف شده است. این از عملکرد center_of_mass تعریف شده در این فصل استفاده می کند.

نسخه سریعتر آن را جایگزین مرکز اندازه گیری می کند. توجه داشته باشید که دستور اندازه گیری rgvr همان کارهایی را انجام می دهد که این اسکریپت انجام می شود، فقط خیلی سریعتر.

```
proc gyr_radius {sel} {
  # make sure this is a proper selection and has atoms
  if {[ $sel num] <= 0} {
    error "gyr_radius: must have at least one atom in selection"
  }
  # gyration is sqrt( sum((r(i) - r(center_of_mass))^2) / N)
  set com [center_of_mass $sel]
  set sum 0
  foreach coord [ $sel get {x y z}] {
    set sum [vecadd $sum [veclength2 [vecsub $coord $com]]]
  }
  return [expr sqrt($sum / ([ $sel num] + 0.0))]
}
```

این مورد را در فایل مختصات alanin.pdb اعمال کنید

```
vmd > mol new alanin.pdb
vmd > set sel [atomselect top all]
vmd > gyr_radius $sel
Info) 5.45443
```

ریشه میانگین انحراف مربع، اختلاف rms یک انتخاب بین دو قاب یک مسیر را محاسبه کند. این یک انتخاب انجام داده و مقادیر دو فریم را با هم مقایسه می کند.

```
proc frame_rmsd {selection frame1 frame2} {
  set mol [ $selection molindex]
  # check the range
  set num [molinfo $mol get numframes]
  if { $frame1 < 0 || $frame1 >= $num || $frame2 < 0 || $frame2 >= $num} {
    error "frame_rmsd: frame number out of range"
  }
  # get the first coordinate set
  set sel1 [atomselect $mol [ $selection text] frame $frame1]
  set coords1 [ $sel1 get {x y z}]
  # get the second coordinate set
  set sel2 [atomselect $mol [ $selection text] frame $frame2]
  set coords2 [ $sel2 get {x y z}]
  # and compute the rmsd values
  set rmsd 0
  foreach coord1 $coords1 coord2 $coords2 {
    set rmsd [expr $rmsd + [veclength2 [vecsub $coord2 $coord1]]]
  }
  # divide by the number of atoms and return the result
  return [expr $rmsd / ([ $selection num] + 0.0)]
}
```

در زیر از تابع frame_rmsd برای لیست rmsd مولکول در تمام تراجکتوری ها، نسبت به اولین قاب استفاده شده است.

```
vmd > mol new alanin.psf
vmd > mol addfile alanin.dcd
vmd > set sel [atomselect top all]
vmd > for {set i 0} { $i < [molinfo top get numframes]} {incr i} {
  ? puts [list $i [frame_rmsd $sel $i 0]]
  ? }
0 0.0
10.100078
20.291405
30.523673
....
97 20.0095
98 21.0495
99 21.5747
```

مثال آخر نحوه تنظیم فیلد بتا را نشان می دهد. این بسیار مفید است زیرا یکی از روش های رنگ آمیزی «بتا» است که از مقادیر بتا برای رنگ آمیزی مولکول با توجه به مقیاس رنگ فعلی استفاده می کند. (این نیز می تواند با زمینه اشغال انجام شود.) بنابراین تعریف مجدد مقادیر بتا به شما امکان می دهد مولکول ها را بر اساس تعریف خودتان رنگی کنید. یک مثال مفید، رنگ آمیزی مولکول بر اساس فاصله از یک نقطه خاص است (برای این مورد، رنگ آمیزی یک پروتومر پولیوویروس بر اساس فاصله آن تا مرکز ویروس (°، °، °) به بیرون کشیدن ویژگی های سطح کمک می کند).

```
proc betacolor_distance {sel point} {
  # get the coordinates
  foreach coord [ $sel get {x y z}] {
    # get the distance and put it in the "newbeta" list
    set dist [veclength2 [vecsub $coord $point]]
    lappend newbeta $dist
  }
  # set the beta term
  $sel set beta $newbeta
}
```

و یک روش برای استفاده از آن وجود دارد:

```
# load pdb2plv.ent using anonymous ftp to the PDB
vmd > mol new 2plv
vmd > set sel [atomselect top all]
vmd > betacolor_distance $sel {0 0 0}
```

سپس به منوی گرافیک بروید و «روش رنگ آمیزی» را روی «Beta» تنظیم کنید.

وقتی یکی دو ساختار مشابه دارد، یکی اغلب می خواهد آنها را مقایسه کند. تفاوت بین دو ساختار اشعه ایکس چیست؟ ساختار طی یک شبیه سازی چقدر تغییر کرده است؟ برای پاسخ به این سؤالات، ابتدا باید چگونگی مقایسه دو ساختار را بفهمید، که معمولاً به این معنی است که باید میانگین انحراف مربع ریشه (RMSD) را پیدا کنید.

به طور رسمی، با توجه به موقعیت های اتم N از ساختار X و اتمهای N مربوط به ساختار Y با ضریب وزنی w_i ، RMSD به صورت زیر تعریف می شود:

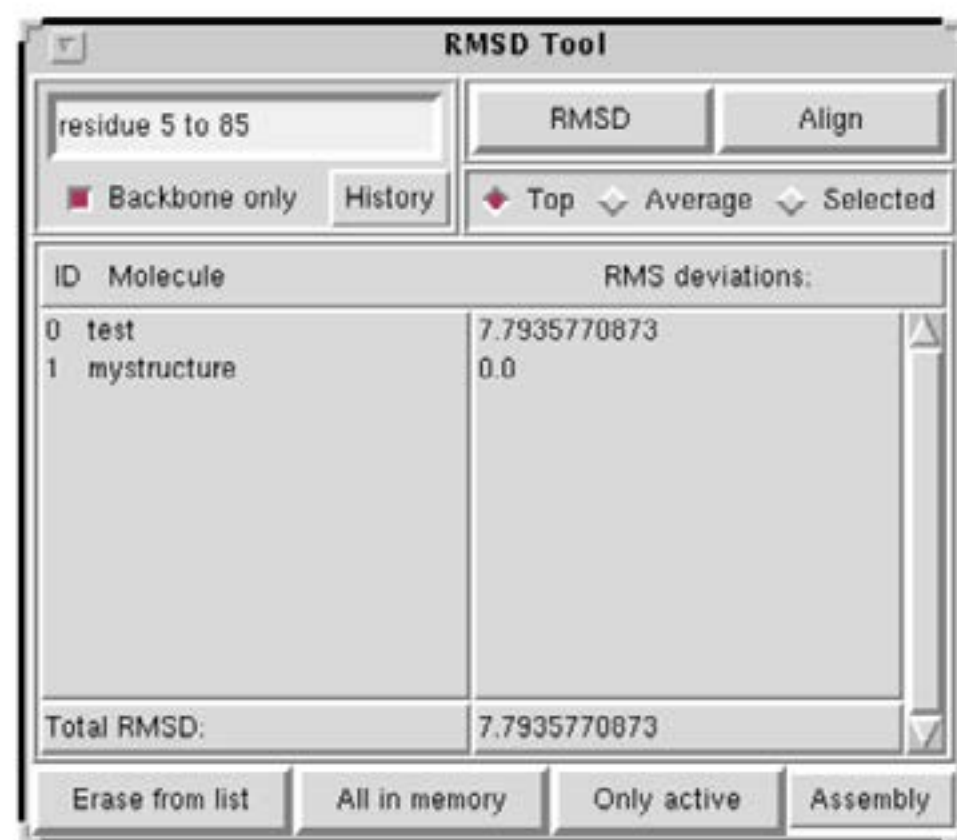
$$RMSD(N; x, y) = \left[\frac{\sum_{i=1}^N w_i \|x_i - y_i\|^2}{N \sum_{i=1}^N w_i} \right]^{\frac{1}{2}}$$

استفاده از این معادله به خودی خود پاسخی را که به دنبال آن هستید، نمی دهد. دو ساختار یکسان را با فاصله کمی تصور کنید. RMSD باید ۰ باشد، اما جبران آن از وقوع آن جلوگیری می کند. آنچه شما واقعاً می خواهید حداقل RMSD بین دو ساختار داده شده است. بهترین جابجایی برای اتم های یک ساختار بر روی ساختار دیگر به منظور به حداقل رساندن RMSD محاسبه می کند. الگوریتم تحول لازم را برای جابجایی یک ساختار بر روی ساختار دیگر به منظور به حداقل رساندن RMSD محاسبه می کند. با پیش نیازهای ریاضی پشت سر گذاشتیم، هنوز باید بتوانیم نحوه مقایسه اتم ها را برای مقایسه مشخص کنیم. اگر می خواهید همه اتم ها را در هر دو ساختار مقایسه کنید، و هر دو تعداد اتم یکسان را دارند، پس مشکل این آسان است - N همه چیز است. این اغلب در شبیه سازی های MD اتفاق می افتد وقتی تنها چیزی که بین دو ساختار متفاوت است مختصات هستند.

اما در مورد توالی های همولوگ چطور؟ در این حالت، تعداد اتم ها متفاوت است زیرا در حالی که تعداد رزیدوها یکسان است، زنجیره های جانبی تعداد متفاوتی از اتم دارند. راه حل معمول تعیین RMSD فقط بر روی اتم های ستون فقرات یا در بعضی از ساختارهای اشعه X است که تنها اتم های C آلفا تعیین شده اند، براساس اتم های C α است. VMD به شما امکان می دهد تا بر اساس هر انتخاب اتمی معتبر، جای مناسب و تراز شوید، تا زمانی که انتخاب اتم تعداد مشابهی از اتم ها را در هر مولکول در حال مقایسه را مشخص می کند.

برای شروع کار با اتصالات و تراز کردن RMS، مورد از RMSD را از فهرست افزونه ها^{۳۱} باز کنید. اکنون باید یک پنجره جدید با عنوان RMSD Tool داشته باشید ابتدا عملکرد حسابگر RMSD را شرح خواهیم داد.

محاسبه RMSD



تصویر ۱۲٫۱: محاسبه RMS و افزونه هم تراز

کلید محاسبه کننده RMSD برای محاسبه فاصله RMS بین مولکول ها استفاده می شود. گوشه سمت چپ بالای منو جایی است که شما تعیین می کنید از کدام اتم ها برای محاسبه استفاده شود. در قسمت ورودی، متن انتخاب اتم را دقیقاً مطابق آنچه می خواهید در پنجره Graphics تایپ کنید. کادر زیر قسمت ورودی با عنوان Backbone only هر اتمی را که تایپ کرده اید فقط در اتم های ستون فقرات انتخابی محدود می کند. در واقع، «and backbone» را به متن انتخاب اتم اضافه می کند.

گوشه سمت راست بالای منو دارای دکمه ای با عنوان RMSD است. تأثیر آن بستگی به این دارد که کدام یک از دکمه های رادیویی Top, Average یا selected انتخاب می شوند. اگر Top انتخاب

شود، VMD فاصله RMS بین مولکول بالا (که معمولاً آخرین مولکول بارگذاری شده است) و هر مولکول دیگر را محاسبه می کند. اگر Average انتخاب شده باشد، ابتدا VMD مختصات x, y, z را از اتمهای انتخاب شده در هر مولکول محاسبه می کند، سپس فاصله RMS هر مولکول را از آن ساختار متوسط محاسبه می کند.

نتایج محاسبات RMS برای هر مولکول در نیمه انتهای فهرست در مرورگر نشان داده شده است. توجه داشته باشید که تا زمانی که کلید RMSD را فشار ندهید، این لیست به روز نمی شود، بنابراین اثرات بارگیری / حذف مولکول ها فوراً منعکس نمی شود. برچسب Total RMSD در پایین منو، میانگین RMSD را برای همه مولکولهای ذکر شده نشان می دهد.

تراز RMS

دکمه تراز RMS متناسب با مولکول ها بر اساس گروه های منتخب اتم است. در حالی که دکمه حسابگر RMSD بدون ایجاد اختلال در مختصات آنها، فاصله RMS بین مولکول ها را پیدا می کند، دکمه تراز RMS در واقع مولکول ها را به سمت موقعیت های جدید سوق می دهد.

این دکمه بسیار ساده است: یک قسمت اتمی را در قسمت ورودی وارد کرده و برای تراز کردن مولکول ها بر اساس اتم های موجود در آن، Align را فشار دهید. اگر RMSD را بین دکمه های ماشین حساب RMSD محاسبه کنید، احتمالاً می یابید که مقادیر متفاوت هستند. دلیل این است که این محاسبه بر اساس موقعیت های فعلی اتم ها انجام می شود.

RMS and scripting ۱۲,۴,۲

همین اقدامات را می توان در سطح اسکریپت انجام داد. رابط متن همچنین از طریق مکانیسم انتخاب اتم، انعطاف پذیری بیشتری به شما می دهد و به شما امکان می دهد اتم ها را برای جا به جایی و مقایسه انتخاب کنید.

محاسبه RMSD

دو انتخاب اتم برای انجام محاسبات RMSD وجود دارد، لیستی از اتم ها برای مقایسه در هر دو مولکول. اولین اتم انتخاب اول با اتم اول انتخاب دوم، پنجم به پنجم و غیره مقایسه می شود. ترتیب واقعی با ترتیب فایل PDB ورودی یکسان است. پس از انجام هر دو انتخاب، محاسبه RMSD، تابع اندازه گیری rmsd را فراخوانی می کند. در اینجا مثالی وجود دارد:

```
set sel1 [atomselect 0 "backbone"]
set sel2 [atomselect 1 "backbone"]
measure rmsd $sel1 $sel2
Info) 10.403014
```

این RMSD را بین اتمهای ستون فقرات مولکول ۰ با مولکول ۱ چاپ می کند. همچنین می توانید از یک عامل وزنی در این محاسبات استفاده کنید. بهترین راه برای درک چگونگی انجام این کار دیدن مثال دیگری است:

```
set weighted_rmsd [measure rmsd $sel1 $sel2 weight mass]
Info) 10.403022
```

در این حالت، وزن با جرم هر اتم تعیین می شود. در واقع، این اصطلاح واقعاً یکی از کلمات کلیدی استاندارد است که در اختیار یک اتم قرار دارد. موارد دیگر شامل فهرست ورزیدو (که استفاده از هر دو نسبتاً عجیب است) و همچنین شارژ، بتا و اشغال. این اصطلاحات آخر در صورتی مفید است که بخواهید مقادیر شخصی خود را برای عوامل وزنی مشخص کنید.

محاسبه تراز

تراز کردن بهترین حالت در دو مرحله انجام می شود. اولین محاسبه تغییر ماتریس $E \times E$ است که مجموعه ای از مختصات را بر روی دیگر قرار می دهد. این کار با دستور measure fit انجام می شود. با فرض انتخاب های مشابه قبلی:

```
set transformation_matrix [measure fit $sel1 $sel2]
Info) {0.971188 0.007163910.238206 -13.2877}
{0.0188176 0.994122 -0.106619 3.25415}{-0.23757 0.108029 0.965345 -2.97617}
{0.0 0.0 0.01.0}
```

مانند محاسبه RMSD، می توانید یک اصطلاح اختیاری <keyword> weight را نیز در انتها اضافه کنید. مرحله بعدی اعمال ماتریس بر روی مجموعه ای از اتم ها با استفاده از دستور move است. تاکنون دو مجموعه مختصات دارید. ممکن است فکر کنید می توانید کاری انجام دهید مانند move sel1 transformation_matrix\$ برای ماتریس بر روی تمام اتم های آن انتخابی اعمال کنید. شما می توانید، اما این انتخاب درستی نیست.

نکته قابل یادآوری این است که sel1 انتخاب برای اتم های ستون فقرات است. شما واقعاً می خواهید کل قطعه ای را که به آن وصل شده است، یا حتی کل مولکول را جابجا کنید. (اینجا جایی

RMSD of 2 is 0.977208
RMSD of 3 is 0.881330
RMSD of 4 is 0.795466
RMSD of 5 is 0.676938
RMSD of 6 is 0.563725
RMSD of 7 is 0.423108
RMSD of 8 is 0.335384
RMSD of 9 is 0.488800
RMSD of 10 is 0.675662
RMSD of 11 is 0.749352
[...]

۱۲٫۵ VMD Script Commands for Colors

به منظور تنظیم دقیق پارامترهای رنگ، به طور معمول نیاز به کنترل های پیچیده تری نسبت به آنچه در GUI ارائه شده است. به همین دلیل، VMD تعدادی از دستورات سطح برنامه نویسی را برای دسترسی به رنگ فراهم می کند. این دستورات به تفصیل در فصل ۹ مورد بحث قرار خواهد گرفت، اما برای اینکه طعم استفاده از آنها را به شما بدهیم، در اینجا چند نمونه آورده شده است که ممکن است فوراً مفید واقع شوید. بیشتر کارها را می توان با دستورات رنگی [and ۹٫۳/۴] و colorinfo [۹٫۳/۵] انجام داد.

۱۲٫۵٫۱ تغییر تعاریف مقیاس رنگ

فرض کنید از بین ۱۰۲۴ رنگ، اولین ۵۱۱ باید قرمز باشد، سپس ۲ سفید و در آخر ۵۱۱ آبی. برای تغییر مقادیر مقیاس رنگ می توانید از دستور «رنگ» استفاده کنید.

```
proc tricolor_scale {} {
  set color_start [colorinfo num]
  display update off
  for {set i 0} {$i < 1024} {incr i} {
    if {$i == 0} {
      set r 1; set g 0; set b 0
    }
    if {$i == 511} {
      set r 1; set g 1; set b 1
    }
    if {$i == 513} {
      set r 0; set g 0; set b 1
    }
    color change rgb [expr $i + $color_start] $r $g $b
  }
  display update on
}
```

tricolor_scale

است که بحث آغاز می شود.) بنابراین شما باید یک انتخاب سوم را تهیه کنید که شامل تمام اتم هایی است که باید جابجا شوند و تغییر را در آن اتم ها اعمال کنید.

```
# molecule 0 is the same molecule used for $sel1
set move_sel [atomselect 0 "all"]
$move_sel move $transformation_matrix
```

به عنوان نمونه ای پیچیده تر، شما می خواهید تمام مولکول ۱ را با مولکول ۹ با استفاده از فقط اتم های ستون فقرات اسید آمینه ۴ تا ۱۰ در هر دو سیستم تراز کنید. در اینجا آمده است:

```
# compute the transformation matrix
set reference_sel [atomselect 9 "backbone and resid 4 to 10"]
set comparison_sel [atomselect 1 "backbone and resid 4 to 10"]
set transformation_mat [measure fit $comparison_sel $reference_sel]
# apply it to all of the molecule 1
set move_sel [atomselect 1 "all"]
$move_sel move $transformation_mat
A simulation example script
```

در اینجا یک اسکریپت طولانی تر وجود دارد که به نظر شما مفید است. مشکل محاسبه RMSD بین هر فریم شبیه سازی و اولین قاب است. معمولاً در یک شبیه سازی سرعت اولیه سراسری^۳ وجود ندارد، بنابراین مرکز جرم حرکت نمی کند، اما به دلیل چرخش های زاویه ای و به دلیل عدم تصورات عددی که به آرامی ایجاد می شوند، اسکریپت قبل از محاسبه RMSD خود مولکول را تراز می کند.

```
# Prints the RMSD of the protein atoms between each \timestep
# and the first \timestep for the given molecule id (default: top)
proc print_rmsd_through_time {{mol top}} {
  # use frame 0 for the reference
  set reference [atomselect $mol "protein" frame 0]
  # the frame being compared
  set compare [atomselect $mol "protein"]
  set num_steps [molinfo $mol get numframes]
  for {set frame 0} {$frame < $num_steps} {incr frame} {
    # get the correct frame
    $compare frame $frame
    # compute the transformation
    set trans_mat [measure fit $compare $reference]
    # do the alignment
    $compare move $trans_mat
    # compute the RMSD
    set rmsd [measure rmsd $compare $reference]
    # print the RMSD
    puts "RMSD of $frame is $rmsd"
  }
}
```

برای استفاده از این، یک مولکول را با انیمیشن بارگذاری کنید (برای مثال، / VMDDIR / protein / \$alanin.DCD از توزیع VMD). سپس print_rmsd_through_time اجرا کنید. خروجی مثال در اینجا نشان داده شده است:

```
vmd> print_rmsd_through_time
RMSD of 0 is 0.000000
RMSD of 1 is 1.060704
```

۱۲٫۵٫۲ ایجاد مجموعه ای از تعاریف رنگ سیاه و سفید

برای نقشه برداری از مقیاس خاکستری روی شناسه های رنگ ۱۶-۰ (۰ = سیاه؛ ۱۶ = سفید):

```
proc make_grayscale {} {
  display update off
  set coloridcount [colorinfo num]
  set colordiv [expr $coloridcount - 1.0]
  for {set i 0} {$i < $coloridcount} {incr i} {
    set val [expr $i / $colordiv]
    color change rgb $i $val $val $val
  }
  display update on
}
```

توجه داشته باشید که به روزرسانی های صفحه نمایش برای زمان تعریف مجدد خاموش هستند، به طوری که هر بار که یک رنگ تغییر می کند، صفحه نمایش مجدداً رسم نمی شود. به این ترتیب روش سریعتر عمل می کند. تنها نکته بد در مورد این ایده این است که رنگ سیاه، سفید می شود و سفید نیز تغییر می کند، بنابراین نام رنگ ها (زرد، نارنجی و غیره) بی فایده می شود.

۱۲٫۵٫۳ تمام مقادیر RGB را به حالت پیش فرض برگردانید

پس از اینکه برخی از تعاریف رنگ تغییر داده شد و شما می خواهید تعاریف پیش فرض را بازیابی کنید، روش زیر ممکن است مفید باشد.

```
proc revert_colors {} {
  display update off
  foreach color [colorinfo colors] {
    color change rgb $color
  }
  display update on
}
```

۱۲٫۵٫۴ ترفند رنگ آمیزی - غلبه بر یک دسته بندی رنگ آمیزی

در حال حاضر هیچ روش رنگ آمیزی تعریف شده توسط کاربر وجود ندارد. اگر X از قبل در VMD تعریف نشده باشد، رنگ آمیزی رزیدو توسط ویژگی «X» سخت می شود. می توان با نادیده گرفتن یکی از مقادیر در PDB یا PSF از این محدودیت جلوگیری کرد. به عنوان مثال، فرض کنید شما می خواهید اتم ها را با فاصله اتم از یک نقطه معین رنگ کنید. یک روش محاسبه مسافت و قرار دادن آن در قسمت اشغال یا بتا فایل PDB است. سپس وقتی مولکول توسط اشغال رنگ می شود، در واقع براساس فاصله رنگ می شود.

همچنین می توانید مثلاً قسمت نام بخش یا حتی نام رزیدو را نادیده بگیرید. نام اتم را نادیده نگیرید، مگر اینکه واقعاً ناامید باشید زیرا VMD از آن برای تعیین اینکه کدام رزیدو ها پروتئین و اسیدهای نوکلئیک هستند استفاده می کند، و از این رو کدام رزیدوها را می توان به صورت لوله یا روبان ترسیم شوند.

فصل سیزدهم

رابط متغیرهای جمعی (Colvars)

Interface of collective variables (Colvars)

در شبیه سازی های دینامیک مولکولی امروزه، اغلب مفید است که تعداد زیادی درجه آزادی یک سیستم فیزیکی را به چند پارامتر کاهش دهیم که توزیع آماری به صورت جداگانه قابل تجزیه و تحلیل است، یا برای تعریف پتانسیل های بایاس برای تغییر دینامیک سیستم در یک روش کنترل شده استفاده می شود. این «پارامترهای نظم»، «متغیرهای جمعی»، «مختصات واکنش» و دیگر اصطلاحات نامیده می شوند.

در اینجا ما از اصطلاح «متغیر جمعی» (کوتاه شده به colvar) استفاده می کنیم، که نشان دهنده عملکرد متمایز مختصات دکارتی اتمی، $\mathbf{x}_i$ با i بین ۱ تا N است، تعداد کل اتم ها:

$$\xi(t) = \xi(\mathbf{x}_i(t), \mathbf{x}_j(t), \mathbf{x}_k(t), \dots), 1 \leq i, j, k \dots \leq N \quad (13.1)$$

ماژول Colvars در VMD ممکن است برای محاسبه این توابع بر روی یک ساختار مولکولی و تجزیه و تحلیل نتایج شبیه سازی های قبلی استفاده شود. این ماژول برای انجام چندین کار همزمان به هنگام یا بعد از شبیه سازی طراحی شده است که رایج ترین آنها عبارتند از:

- ❖ محدودیت ها یا پتانسیل های بایاس را برای چند ستون بکار رفته در سیستم متناسب با انتخاب مجموعه گسترده ای از توابع پایه، بدون محدودیت در تعداد آنها یا تعداد اتم های موجود، اعمال کنید.
- ❖ محاسبه پتانسیل میانگین نیرو (PMF) در طول هر مجموعه از ستونها، با استفاده از روش های مختلف نمونه گیری بهبود یافته، مانند نیروی سازگاری سازنده (ABF)، متادینامیک، MD هدایت شده و نمونه برداری چتر ۳۲. انواع این روشها که از مجموعه ای از ماکت ها استفاده می کنند نیز پشتیبانی می شوند.
- ❖ محاسبه خواص آماری ستونها از قبیل میانگین های در حال اجرا و انحراف معیار، عملکردهای همبستگی جفت ستونها و نمودارهای چند بعدی: این کار یا در زمان اجرا بدون نیاز به ذخیره فایل های مسیر بسیار بزرگ انجام می شود، یا بعد از شبیه سازی با استفاده از VMD و دستور cv تکمیل شده اند.

توجه: اگرچه محدودیت ها و الگوریتم های PMF در درجه اول در طول شبیه سازی ها مورد استفاده قرار می گیرند، اما آنها در VMD نیز برای تست یک ورودی جدید برای یک شبیه سازی وجود دارند، یا برای ارزیابی انرژی آزاد نسبی یک ساختار جدید بر اساس داده های یک محاسبه قبلی. گزینه هایی که فقط در حین شبیه سازی اثر دارند، برای اهداف سازگاری نیز درج می شوند.

برای نشان دادن مختصر انعطاف پذیری ماژول Colvars، تصویر ۱۳٫۱ نمونه ای از پیکربندی غیر مهم را نشان می دهد (ورودی مربوطه را می توان در ۱۳٫۲ یافت).

در اینجا، نحو دستورات و پارامترهای مورد استفاده برای تنظیم و استفاده از ماژول Colvars در VMD را مستند می‌کنیم. یکی از این پارامترها فایل پیکربندی یا متن پیکربندی برای خود ماژول است که نحو آن در ۱۳٫۱٫۲ و در بخش های بعدی توضیح داده شده است.

۱۳٫۱٫۱ Using the cv command

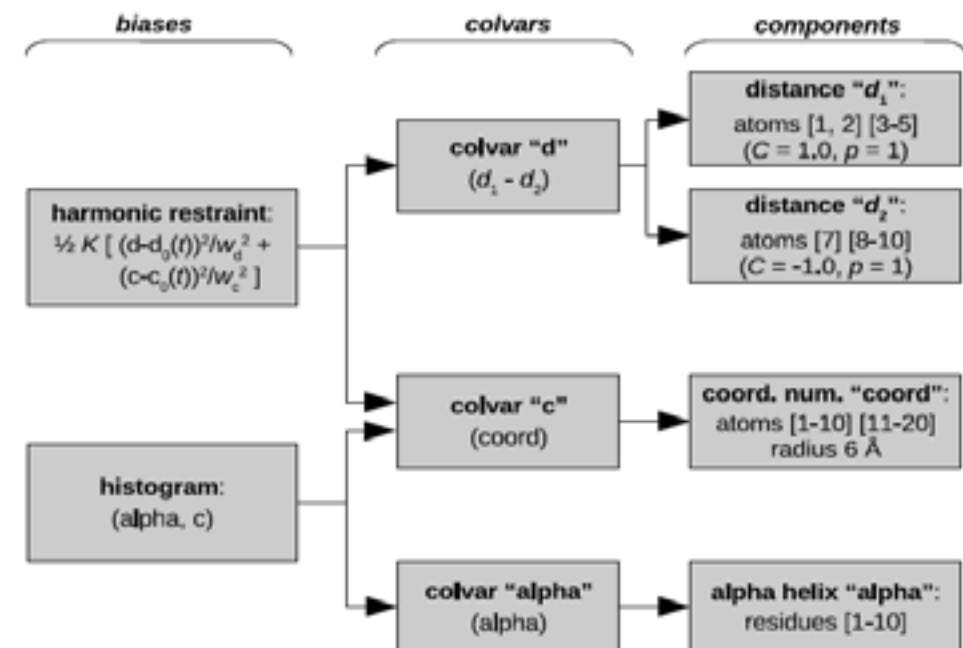
ماژول Colvars از طریق فرمان cv در VMD قابل دسترسی است. برای تنظیم ماژول Colvars برای یک مولکول معین، باید از اولین بار به عنوان `<molid> molid <cv>` استفاده شود. در تمام کاربردهای زیر، دستور cv صرف نظر از وضعیت «top» آن، بر روی همان مولکول ادامه خواهد داد. برای استفاده از دستور cv روی یک مولکول مختلف، ابتدا از `cv Delete` و سپس `<molid> molid <cv>` استفاده کنید. استفاده از دستور cv بدون هیچ استدلال، یک صفحه راهنما را چاپ می‌کند. متغیرها و سوگیری های جمعی را می‌توان از طریق دستور اسکریپت cv با عبارت زیر اضافه کرد، پرس و جو کرد و حذف کرد: `[args <subcommand> cv ...]`. به عنوان مثال، برای جستجوی مقدار متغیر جمعی به نام myVar، از نحو زیر استفاده کنید: مقدار را تنظیم کنید `[cv colvar myVar]`. تمام زیرمجازهای CV در زیر مستند شده است.

مدیریت ماژول colvars

- ✓ `<molid> molid`: ماژول colvars را برای مولکول داده شده تنظیم کنید. `<molid>` شناسه یک مولکول معتبر VMD یا یک عدد صحیح یا top برای مولکول بالا است.
- ✓ `Delete`: ماژول colvars را حذف کنید. پس از این، ماژول را می‌توان دوباره با استفاده از `cv molid` راه‌اندازی کرد.
- ✓ `<file name> configfile`: پیکربندی ۳۳ را از یک فایل بخوانید.
- ✓ `<string> config`: پیکربندی را از رشته داده شده بخوانید. هر دو دستورات فرعی config و configfile ممکن است چندین بار فراخوانی شوند. ۱۳٫۱٫۲ را برای نحو پیکربندی مشاهده کنید.
- ✓ `reset`: تمام پیکربندی داخلی ماژول colvars را حذف کنید.
- ✓ `Version`: نسخه کد colvars را برگردانید.

ورودی و خروجی

- ✓ `list`: لیستی از تمام متغیرهای تعریف شده فعلی را برگردانید. برای چگونگی پیکربندی متغیر جمعی، به ۱۳٫۲، ۱۳٫۴ و ۱۳٫۳ مراجعه کنید.
- ✓ `list biases`: لیستی از همه جهت گیریهای تعریف شده در حال حاضر (به عنوان مثال الگوریتم های نمونه گیری و آنالیز) را برگردانید.



تصویر ۱۳٫۱: نمایش گرافیکی یک پیکربندی Colvars. به نام «d» به عنوان تفاوت بین دو فاصله تعریف شده است: فاصله اول (d1) بین مرکز جرم اتمهای ۱ و ۲ و اتمهای ۳ تا ۵، دوم (d2) بین اتم ۷ و مرکز جرم اتمهای ۸ تا ۱۰ است. اختلاف $d_1 - d_2$ با ضرب این دو با ضریب $C = 1$ یا $C = -1$ بدست می‌آید. کوار به نام «c» عدد هماهنگی است که بین اتم ۱ تا ۱۰ و اتم ۱۱ تا ۲۰ محاسبه می‌شود. محدودیت هارمونیکی هم برای d و c اعمال می‌شود: برای استفاده از همان K ثابت نیرو، هم d و c توسط مقیاس آنها اندازه گیری می‌شود. عرض نوسان و wc. مقدار «آلفا» به عنوان مقدار سوم α - مارپیچ رزیدوهای ۱ تا ۱۰ تعریف می‌شود. مقادیر «c» و «alpha» نیز در کل شبیه سازی به عنوان یک هیستوگرام مشترک ۲ بعدی ثبت می‌شود. توضیحات مفصل در مورد طراحی ماژول Colvars در مرجع ارائه شده است [۴۴]. لطفاً هر زمان که از انتشار این نشانه استفاده کنید، از این مرجع استناد کنید.

✓ `<load <file name`: یک فایل حالت متغیرهای جمعی را که معمولاً در یک شبیه سازی قبلی تولید می شود بارگیری کنید. این پارامتر نیاز دارد که پیکربندی مربوطه قبلاً توسط پیکربندی یا پیکربندی بارگیری شده باشد. برای شرح مختصری از این پرونده، به ۱۳٫۱٫۴ مراجعه کنید. محتویات این پرونده تا زمانی که مولکول VMD دارای مختصات معتبر و به روزرسانی CV باشد مورد نیاز نمی باشد.

✓ `<load <prefix`: مانند مورد فوق، اما بدون پسوند `colvars.state`؛

✓ `<save <prefix`: وضعیت فعلی را در پرونده ای ذخیره کنید که نام آن با استدلال داده شده شروع می شود. اگر در هر یک از سوگیرها فایل های خروجی اضافی تعریف شده باشد، آن ها با استفاده از پیشوند مشابه ذخیره می شوند.

✓ `update`: همه ستونها و سوگیرها را بر اساس مختصات اتمی فعلی محاسبه کنید.

✓ `Printframe`: خلاصه ای از فریم فعلی را با فرمت معادل خطی از فایل مسیر متغیرهای جمعی برگردانید.

✓ `Printframelabels`: برچسب های متنی را برای ستون های خروجی فریم چاپ برگردانید.

✓ `Frame`: تعداد فریم فعلی را که مقادیر `colvar` از آن محاسبه می شود، برگردانید.

✓ `<frame <new frame`: تعداد فریم را تنظیم کنید؛ در صورت موفقیت، کادر غیر صفر ° اگر قاب درخواستی وجود نداشته باشد، باز می گردد.

Accessing collective variables ⓘ

✓ `colvar <name> value`: مقدار فعلی `colvar <name>` را بازگردانید.

✓ `colvar <name> update`: محاسبه مجدد `colvar <name>`؛

✓ `colvar <name> type`: نوع `colvar <name>` را بازگردانید.

✓ `colvar <name> delete`: حذف `colvar <name>`؛

✓ `colvar <name> getconfig`: رشته پیکربندی `colvar <name>`.

✓ `colvar <name> cvcflags <flags`: برای یک `colvar` با چند `cvc` (نام گذاری شده مطابق با ترتیب رشته نام آنها)، مجموعه ای از CVC ها را در ارزیابی های بعدی با توجه به لیست نشانه های ۱/۰ (یک در هر `cvc`) فعال یا غیرفعال کنید.

Accessing biases ⓘ

✓ `bias <name> energy`: بازگشت انرژی فعلی بایاس `<name>`؛

✓ `bias <name> update`: محاسبه مجدد بایاس `<name>`؛

✓ `bias <name> delete`: بایاس `<name>` را حذف کنید؛

✓ `bias <name> getconfig`: بازگشت رشته پیکربندی بایاس `<name>`.

۱۳٫۱٫۲ Configuration syntax for the Colvars module

پیکربندی Colvars معمولاً با استفاده از دستورات `cv configfile` یا `cv config` خوانده می شود. نحو پیکربندی Colvars «keyword value» است، که در آن کلمه کلیدی و مقدار آن با هر فضای سفید از هم جدا می شوند. قوانین زیر اعمال می شود:

✓ کلمات کلیدی غیر حساس به حروف کوچک ۳۴ هستند (مانند `upperBoundary` و `upperboundary` است) است: مقادیر رشته آنها به هر حال حساس به حروف کوچک هستند (به عنوان مثال نام پرونده ها).

✓ یک مقدار طولانی یا لیستی از مقادیر مختلف با استفاده از آکولادها، «{و}» می تواند در چندین خط توزیع شود: اکولاد «{» باید در همان خط کلمه کلیدی رخ دهد، به دنبال یک شخصیت فضایی یا موارد دیگر. فضای سفید؛ بند بند «{» می تواند بعد از آن در هر موقعیتی باشد.

✓ بسیاری از کلمات کلیدی تو در تو هستند و فقط در یک متن خاص معنی دار هستند: برای هر کلمه کلیدی مستند به شرح زیر، کلید واژه «والد» که چنین زمینه ای را تعریف می کند نیز نشان داده شده است.

✓ دستور Tcl به طور کلی در دسترس نیست، اما می توان از متغیرهای Tcl یا گسترش براکت از دستورات در یک رشته پیکربندی استفاده کرد، هنگامی که این از طریق `cv config` فرمان منتقل می شود...: به عنوان مثال می توان انتخاب اتم `sel$` به یک گروه اتمی با استفاده از `atomNumbers { [$sel get serial` تبدیل کرد (۱۳٫۳٫۱ را ببینید)

✓ اگر یک کلمه کلیدی که به مقدار بولین نیاز دارد (مانند `yes|on|true or no|off|false`) بدون یک مقدار صریح ارائه شده است، به 'yes|on|true' پیش فرض می کند. به عنوان مثال، 'outputAppliedForce' ممکن است به صورت خلاصه شده ی 'outputAppliedForce' on استفاده شود.

✓ کاراکتر هش # پیام را نشان می دهد: تمام متن در همان خط به دنبال این کاراکتر نادیده گرفته می شوند.

✓ کلمات کلیدی زیر در متن گلوبال پیکربندی `colvars` در دسترس هستند، یعنی در داخل کلمات کلیدی دیگر لانه ندارند:

✓ `colvarsTrajFrequency` (فرکانس تراجکتوری مقدار `Colvar`)

متن: گلوبال

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

مقدار پیش فرض: ۱۰۰

توضیحات: مقادیر هر `colvar` (و سایر مقادیر مرتبط، در صورت درخواست) در فایل شبیه سازی به نام `outputName.colvars.traj` ارسال می شود. اگر مقدار ۰ باشد، چنین فایل تراجکتوری نوشته نشده است. برای بهینه سازی خروجی در حافظه موقت قرار می گیرد و دیسک همزمان می شود وقتی که فایل شروع مجدد نوشته می شود.

✔ colvarsTrajAppend (ضمیمه به فایل تراجکتوری؟)

متن: گلوبال

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: در صورت فعال بودن این نشانه، و فایلی با همان نام فایل تراجکتوری از قبل

موجود است، داده های جدید به آن فایل پیوست می شوند. در غیر اینصورت، یک فایل

جدید با همین نام ایجاد می شود که فایل قبلی را بازنویسی می کند.

✔ colvarsRestartFrequency (فرکانس راه اندازی مجدد ماژول Colvar)

متن: گلوبال

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

مقدار پیش فرض: RestartFreq

توضیحات: اجازه می دهد تا فرکانس راه اندازی مجدد متفاوت برای ماژول Colvars را

انتخاب کنید. تعریف دوباره آن ممکن است مفید باشد برای ردیابی تکامل زمان آن دسته

از خصوصیات معدودی که به دلایل فضای دیسک برای فایل تراجکتوری نوشته نشده اند.

✔ indexFile (پرونده فهرست برای انتخاب اتم (قالب "ndx" در گرومکس))

متن: گلوبال

مقادیر قابل قبول: نام فایل UNIX

توضیحات: این گزینه یک فایل فهرست (معمولاً با پسوند ndx) را که توسط ابزار ndx از

GROMACS تولید شده است، می خواند. این کلمه کلیدی ممکن است برای بارگذاری

چندین پرونده فهرست تکرار شود: همان نام گروه نمی تواند در چندین پرونده فهرست

نمایش داده شود. سپس نام گروههای فهرست موجود در این پرونده برای تعریف

گروههای اتمی با کلمه کلیدی indexGroup قابل استفاده است. سایر روشهای پشتیبانی

شده برای انتخاب اتمها در ۱۳/۳ توضیح داده شده است.

✔ Smp (آیا باید SMP موازی استفاده شود)

متن: گلوبال

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: روشن است

توضیحات: اگر این نشانه فعال باشد (پیش فرض)، از موازی SMP بر روی موضوعات برای

محاسبه متغیرها و بایاس ها استفاده می شود، مشروط بر اینکه این پشتیبانی توسط

VMD انجام شود.

✔ Smp (آیا باید SMP موازی استفاده شود)

متن: گلوبال

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: روشن است

توضیحات: اگر این نشانه فعال باشد (پیش فرض)، از موازی SMP بر روی موضوعات برای محاسبه

متغیرها و بایاس استفاده می شود، مشروط بر اینکه این پشتیبانی توسط VMD انجام شود.

✔ Analysis (تجزیه و تحلیل آماری زمان اجرا را روشن کنید)

متن: گلوبال

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: در صورت فعال بودن این نشانه، به هر colvar دستور داده می شود هرگونه تجزیه

و تحلیل آماری را که از قبل تنظیم شده است، مانند توابع همبستگی یا میانگین های در حال

اجرا و انحرافات استاندارد، انجام دهد. برای جزئیات بیشتر به بخش ۱۳/۲/۵ مراجعه کنید.

مثال زیر همان پیکربندی نشان داده شده در تصویر ۱۳/۱ را تعریف می کند. گزینه های موجود در بلوک

های colvar در ۱۳/۲ و ۱۳/۴ شرح داده شده است، مواردی که در بلوک های هارمونیک و هیستوگرام

در ۱۳/۵ قرار دارند. توجه: به جز colvar، هیچ یک از کلمات کلیدی نشان داده شده اجباری نیست.

```
colvar {
# difference of two distances
name d
width 0.2 # 0.2 °A of estimated fluctuation width
distance {
componentCoeff 1.0
group1 { atomNumbers 12 }
group2 { atomNumbers 3 4 5 }
}
distance {
componentCoeff -1.0
group1 { atomNumbers 7 }
group2 { atomNumbers 8 9 10 }
}
}
colvar {
name c
coordNum {
cutoff 6.0
group1 { atomNumbersRange 1-10 }
group2 { atomNumbersRange 11-20 }
}
}
colvar {
name alpha
alpha {
psfSegID PROT
residueRange 1-10
}
}
harmonic {
colvars d c
centers 3.0 4.0
forceConstant 5.0
}
```

۱۳٫۲ Defining collective variables and their properties

در پرونده پیکربندی، هر colvar توسط کلمه کلیدی colvar تعریف شده و گزینه های پیکربندی آن در بریس های فروری مشخص می شود: colvar {...}. یکی از این گزینه ها نام یک جزء colvar است: برای مثال، از جمله the colvar {...} rmsd را به عنوان یک تابع RMSD تعریف می کند. در اکثر برنامه ها فقط از یک جزء استفاده می شود، و مؤلفه آن برابر با colvar است. لیست کامل اجزای colvar را می توان در بخش ۱۳٫۴ یافت، با نحو انتخاب اتم ها در بخش ۱۳٫۳. در بخش زیر چندین گزینه برای کنترل رفتار یک colvar واحد، صرف نظر از نوع آن، ذکر شده است.

۱۳٫۲٫۱ General options for a collective variable

گزینه های زیر به طور پیش فرض مورد نیاز نیست. با این حال، چهار مورد اول اغلب استفاده می شود:

✓ Name (نام این colvar)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: رشته

مقدار پیش فرض: «colvar» + شناسه عددی

توضیحات: نام رشته ای حساس به مورد منحصر به فرد است که به مائول Colvars اجازه می دهد تا این Colvars را به صورت ابهام مشخص کند. همچنین در پرونده مسیر برای نشان دادن ستون های مربوط به این ستون استفاده می شود.

✓ Width (مقیاس نوسانات Colvar یا وضوح برای روشهای مبتنی بر شبکه)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

مقدار پیش فرض: ۱٫۰

توضیحات: این عدد واحد فیزیکی برابر با مقدار colvar دارد و یک واحد colvar مؤثر را تعریف می کند. الگوریتم های بایاس از آن برای اهداف مختلف استفاده می کنند. محدودیت های هارمونیک (۱۳٫۵٫۴) از آن برای تنظیم واحد فیزیکی ثابت نیرو استفاده می کنند، که برای محدودیت های چند بعدی شامل ستون هایی با واحدها یا مقیاسهای مختلف مفید است که بعداً توسط یک ثابت نیروی مقیاس بندی شده تعریف می شود. histogram (۱۳٫۵٫۷) و بایاس ABF (۱۳٫۵٫۱۱) آن را به عنوان فاصله شبکه در جهت این متغیر تفسیر می کنند. Metadynamics (۱۳٫۵٫۳) از آن برای تعیین عرض قله های تازه اضافه شده استفاده می کند. در موارد دیگر، ساده تر است که مقدار پیش فرض ۱ را حفظ کنید، به این ترتیب ثابت نیروی هارمونیک در واحد بدنی معمولی آنها فراهم می شود. در صورت نیاز به عرض غیر وحدت توسط برنامه، مقدار مطلوب به برنامه وابسته است، اما اغلب می توان به عنوان یک تخمین ارائه شده توسط کاربر از دامنه نوسانات برای colvar

```
}
histogram{
colvars calpha
}
```

بخش ۱۳٫۲ بدون در نظر گرفتن شکل عملکردی خاص آن، چگونگی تعریف یک colvar و رفتار آن را توضیح می دهد. برای تعریف ستون هایی متناسب با یک سیستم فیزیکی خاص، بخش ۱۳٫۳ نحوه انتخاب اتم ها را مستند می کند، و بخش ۱۳٫۴ همه فرم های کاربردی موجود را که ما آنها را «اجزای colvar» می نامیم، لیست می کند. سرانجام، در بخش ۱۳٫۵ روشها و الگوریتم های موجود برای انجام شبیه سازی های مغرضانه و تجزیه و تحلیل چند بعدی از ستونها ذکر شده است.

۱۳٫۲٫۳ (Input state file (optional

گذشته از پیکربندی ستونها، ممکن است یک فایل حالت ورودی اختیاری برای بارگذاری داده های مربوطه از یک شبیه سازی قبلی ارائه شود. نام این فایل از طریق cv load <file name> تهیه شده است.

۱۳٫۲٫۴ Output files

در طی یک شبیه سازی با متغیرهای جمعی تعریف شده، سه فایل خروجی زیر نوشته شده است:

✓ یک فایلی با نام outputName.colvars.state: این فایل با فرمت ASCII است.

✓ اگر پارامتر colvarsRestartFrequency بزرگتر از صفر باشد، یک پرونده راه اندازی مجدد با نام restart- Name.colvars.state در مراحل مختلفی نوشته می شود: این پرونده معادل فایل state نهایی است.

✓ اگر پارامتر colvarsTrajFrequency از ۰ بیشتر باشد (پیش فرض: ۱۰۰)، یک فایل مسیر در طول شبیه سازی نوشته شده است: نام آن با نام outName.colvars.traj است. برخلاف فایل state، نیازی به راه اندازی مجدد شبیه سازی نیست، اما می تواند بعداً برای پردازش و تجزیه و تحلیل بعد از آن استفاده شود.

سایر فایل های خروجی ممکن است با روشهای خاصی که بر روی ستونها اعمال می شوند (مثلاً با روش ABF، به ۱۳٫۵٫۱ یا روش متادینامیک مراجعه کنید. ۱۳٫۵٫۳ را ببینید). مانند فایل تراجکتوری colvar، آنها فقط برای تجزیه و تحلیل لازم هستند، نه ادامه یک شبیه سازی. نام همه این پرونده ها با پیشوند نام خروجی شروع می شود.

تصور کرد. در این موارد، معمولاً باید در یک اجرای شبیه سازی بسیار کوتاه، کوچکتر از یا مساوی با انحراف استاندارد از colvar تنظیم شود.

lowerBoundary (حاشیه فوقانی colvar) ✓

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: اعشاری

توضیحات: پایین ترین انتهای فاصله زمانی از مقادیر «مربوط» را برای colvar تعریف می کند. این عدد می تواند یک مرز فیزیکی واقعی یا یک عدد تعریف شده توسط کاربر باشد. همراه با upperBoundary و عرض، از آن برای تعریف یک شبکه از مقادیر در امتداد colvar استفاده می شود (برای colvars بر اساس distanceVec، distanceDir و جهت گیری در دسترس نیست). این گزینه بر پویایی تأثیر نمی گذارد: برای محدود کردن یک colvar در یک بازه مشخص، باید از گزینه های lowWall و lowWallConstant استفاده شود.

upperBoundary (حاشیه فوقانی colvar) ✓

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: اعشاری

توضیحات: به طور مشابه با LowBoundary، بالاترین مقدار ممکن یا مجاز را تعریف می کند.

hardLowerBoundary (این که آیا مرز پایین حد فیزیکی پایین است) ✓

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: این گزینه بر نتایج شبیه سازی تأثیر نمی گذارد، اما برخی از بهینه سازی های داخلی را فعال می کند. بسته به تعریف ریاضی آن، یک colvar می تواند مرزهای «طبیعی» ای داشته باشد: برای مثال، یک colvar فاصله از مرز «طبیعی» پایین تر در ۰. برخورددار است. تنظیم این گزینه به مازول Colvars دستور می دهد که مرز پایین تعریف شده توسط کاربر «طبیعی» باشد. برای محدوده فیزیکی مقادیر هر مؤلفه به بخش ۱۳/۴ مراجعه کنید.

hardUpperBoundary (این که آیا مرز فوقانی حد بالایی فیزیکی مقادیر colvar است) ✓

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: آنالوگ به hardLowerBoundary.

expandBoundaries (اجازه دهید در صورت لزوم دو مرز را گسترش دهید) ✓

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: در صورت تعریف، روشهای بایاس و آنالیز ممکن است کپی های مربوط به خود را از LowerBoundary و UpperBoundary نگه داشته و آنها را برای قرار دادن مقادیر متناسب در محدوده اولیه گسترش دهند. در حال حاضر، این گزینه توسط بایاس متادینامیک (۱۳/۵/۳) مورد استفاده قرار می گیرد تا تمام تپه های آن به طور کامل در داخل شبکه حفظ شود. این گزینه زمانی نمی تواند مورد استفاده قرار گیرد که مرزهای اولیه از قبل کامل دوره يك colvar دوره ای باشد.

subtractAppliedForce (نیروهای تعصب را در کل نیرو برای این Colvar قرار ندهید) ✓

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: اگر colvar از محاسبه نیروی کل پشتیبانی می کند (نگاه کنید به ۱۳/۴/۳)، تمام نیروهایی که با استفاده از بایاس به این Colvar اعمال می شوند از کل نیرو خارج می شوند. این کلمه کلیدی اجازه می دهد تا برخی از محاسبه «نیروی سیستم» موجود در مازول Colvars قبل از نسخه ۲۰۱۶-۲۰۰۸ بازیابی شود. لطفا توجه داشته باشید که به دلیل تغییر در موتورهای شبیه سازی زیرین (در درجه اول NAMD) دیگر از بین بردن سایر نیروهای خارجی (از جمله نیروهای جانبداری که بر روی یک Colvar مختلف اعمال می شود) پشتیبانی نمی شود. این گزینه ممکن است هنگام ادامه شبیه سازی قبلی که حذف نیروهای خارجی / اعمال شده ضروری است مفید باشد. برای همه شبیه سازی های جدید استفاده از این گزینه توصیه نمی شود.

۱۳/۲/۲ Artificial boundary potentials (walls)

گزینه های زیر برای تعریف محدودیت ها (پتانسیل های محدود کننده) برای این Colvar مفید است. برای اعمال محدودیت های حرکتی یا محدودیت بیش از یک Colvar همزمان، گزینه مناسب تر استفاده از بایاس هارمونیک است (۱۳/۵/۴).

lowerWallConstant (ثابت نیروی دیواره پایین (kcal / mol / U۲)) ✓

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

توضیحات: مقدار ثابت نیرو را برای محدود کردن محدودیت در colvar، به صورت پتانسیل «نیمه هارمونیک» تعریف می کند. در صورت تعریف، پتانسیل در LowWall یا در غیر اینصورت پایین تر از مرز شروع می شود. واحد انرژی ثابت kcal / mol است، در حالی که

واحد فضایی U همان مقدار colvar است.

✓ lowerWall (موقعیت دیوار پایین)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: اعشاری

مقدار پیش فرض: lowBoundary

توضیحات: مقداری را نشان می دهد که در آن محدودیت محدود کننده ای بر روی دالان

اعمال می شود، به صورت پتانسیل «نیمه هارمونیکی». اجازه می دهد تا موقعیت

متفاوتی از دیوار نسبت به lowBoundary داشته باشید.

✓ upperWallConstant (ثابت نیروی دیواره بالا (kcal / mol / U^۲))

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

توضیحات: آنالوگ به پایین WallConstant.

✓ upperWall (موقعیت دیوار فوقانی)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: اعشاری

مقدار پیش فرض: upperBoundary

توضیحات: آنالوگ به LowWall

Trajectory output ۱۳٫۲٫۳

✓ outputValue (خروجی یک تراجکتوری برای این colvar)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: روشن است

توضیحات: اگر colvarsTrajFrequency غیر صفر است، مقدار این colvar در فایل

تراجکتوری هر مرحله colvarsTrajFrequency در ستون با عنوان «<name>» نوشته

شده است.

✓ outputVelocity (برای این کولوار یک مسیر سرعت تولید کنید)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: اگر colvarsTrajFrequency تعریف شده باشد، سرعت محاسبه شده با

اختلاف اختلاف محدود این colvar در فایل تراجکتوری تحت برچسب «<v <name>»

نوشته شده است.

✓ outputEnergy (برای این colvar یک مسیر انرژی تولید کنید)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: این گزینه فقط برای Lagrangian colvars گسترش یافته اعمال می شود.

اگر colvarsTrajFrequency تعریف شده باشد، انرژی جنبشی درجه و آزادی گسترده و

انرژی بالقوه چشمه مهارکننده بر روی برچسب «<Ek <name>» و «<Ep <name>» در فایل

تراجکتوری نوشته می شود.

✓ outputTotalForce خروجی یک تراجکتوری نیروی کل را برای این colvar

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: اگر colvarsTrajFrequency تعریف شده باشد، مقدار

کل این ستون (یعنی پیش بینی تمام نیروهای کل اتمی بر روی این

ستون - نگاه کنید به معادله (۱۳٫۱۹) در بخش ۱۳٫۵٫۱) به پرونده مسیر

تحت برچسب "fs_<name>" نوشته شده است. برای Lagrangian

colvars گسترش یافته، «نیروی کل» که توسط درجه گسترده آزادی احساس می شود، صرفاً

نیرویی از چشمه هارمونیک است. توجه: همه مؤلفه ها از این گزینه پشتیبانی نمی کنند.

واحد فیزیکی این نیرو kcal / mol است که بر اساس واحد U colvar تقسیم می شود.

✓ outputAppliedForce (خروجی یک تراجکتوری نیروی اعمال شده برای این colvar

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: اگر colvarsTrajFrequency تعریف شده باشد، کل نیروی اعمال شده بر روی

این کوار توسط تعصبات و محدود کردن پتانسیل ها (دیوارها) درون ماژول Colvars در زیر

برچسب "fa_<name>" به مسیر نوشته می شود. برای ستونهای گسترده لاگرانژی، این

نیرو به جای خود کولر هندسی، در واقع در سطح گسترده آزادی اعمال می شود. واحد

فیزیکی این نیرو kcal / mol است که توسط واحد colvar تقسیم می شود.

ExtendedLagrangian ۱۳,۲,۴

گزینه های زیر پویایی سیستم گسترش یافته را امکان پذیر می سازند، جایی که یک colvar توسط یک چشمه هارمونیک به یک درجه آزادی اضافی (ذره ساختگی) وصل می شود. سپس تمام نیروهای محرمانه و محصور در درجه آزادی گسترده اعمال می شوند. colvar هندسی «واقعی» (عملکرد مختصات دکارتی) فقط نیروی حاصل از چشمه هارمونیک را احساس می کند. این به خصوص هنگامی مفید است که با یک بایاس ABF (۱۳/۵,۱) برای انجام شبیه سازی eABF (۱۳/۵,۲) ترکیب شود.

extendedLagrangian (درجه آزادی گسترده را اضافه کنید)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: ذره ای تخیلی را اضافه می کند که توسط یک چشمه هارمونیک به آن با آبشار وصل می شود. جرم ساختگی و نیروی ثابت پتانسیل جفت از پارامترهای extTimeConstant و ExtFluctuaction، که در زیر شرح داده شده است، مشتق می شوند. نیروهای بایاس بر روی colvar بیشتر از اینکه به طور مستقیم بر روی اتمها انجام شود، روی این ذره ساختگی اعمال می شوند. این فرمالیسم Lagrangian کسترش یافته را که در برخی از شبیه سازی های متادینامیک مورد استفاده قرار می گیرد، پیاده سازی می کند.

extendedFluctuation (انحراف معیار بین colvar و ذرات ساختگی (واحد colvar))

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

توضیحات: با تنظیم انحراف معمولی بین کولوار و میزان افزایش آزادی به دلیل نوسانات حرارتی، سختی بهار را برای حالت ExtLagrangian تعریف می کند. ثابت نیروی بهار از نظر داخلی به عنوان kBT / σ^2 محاسبه می شود، جایی که σ ارزش مقدار افزایش یافته تولید است.

extendedTimeConstant (دوره نوسان ذرات ساختگی (fs))

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

مقدار پیش فرض: ۲۰۰

توضیحات: با تنظیم دوره نوسان ساز نوسان ساز هارمونی که توسط ذرات ساختگی و چشمه تشکیل شده است، توده بی اثر ذرات ساختگی را تعریف می کند. این دوره باید بسیار بزرگتر از مرحله زمانی MD باشد تا از ادغام دقیق معادله حرکت ذرات طولانی استفاده شود. جرم ساختگی به صورت داخلی به عنوان τ (kBT / $2\pi\sigma^2$) محاسبه می شود، که در آن τ دوره است و σ نوسانی معمولی است (به بالا مراجعه کنید).

extendedTemp (درجه حرارت برای افزایش درجه آزادی (K))

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

مقدار پیش فرض: دمای ترموستات

توضیحات: درجه حرارت مورد استفاده برای محاسبه ثابت نیروی اتصال از متغیر توسعه یافته (رجوع کنید به جریان انعطاف extendedFluctuation) و در صورت لزوم به عنوان دمای هدف برای دینامیک Langevin گسترش یافته (نگاه کنید به گسترش LangevinDamping). این معمولاً باید در مقدار پیش فرض خود باقی بماند.

extendedLangevinDamping (عامل میرایی برای پویایی توسعه یافته Langevin)

(1 – ps)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

مقدار پیش فرض: ۱/۰

توضیحات: اگر این غیر صفر باشد، درجه آزادی گسترده تحت پویایی Langevin در دمای افزایش یافته دما قرار می گیرد. نیروی اصطکاک منهای تمدید شده است لنگوین برابر با سرعت برابر است. این مفید است زیرا مختصات پویایی گسترده ممکن است در رژیم غیر تعادل گذرا از ABF گرم شود. از مقادیر میرایی متوسط، برای محدود کردن اصطکاک چسبناک (به طور بالقوه کاهش سرعت نمونه برداری پخش شده) و سرو صدای تصادفی استفاده کنید (افزایش واریانس اندازه گیری های آماری). اگر مطمئن نیستید، از مقدار پیش فرض استفاده کنید.

Statistical analysis of collective variables ۱۳,۲,۵

هنگامی که تجزیه و تحلیل کلمات کلیدی گلوبال در پرونده پیکربندی تعریف شده است، می توان محاسبات زمان اجرا از ویژگی های آماری برای ستون های فردی را انجام داد. در حال حاضر، انواع مختلفی از توابع همبستگی زمانی، میانگین های در حال اجرا و اجرای انحرافات استاندارد در دسترس است.

corrFunc (یک تابع همبستگی زمانی را محاسبه می کنید؟)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: این که آیا یک تابع همبستگی زمانی باید برای این colvar محاسبه شود

corrFuncWithColvar (نام Colvar برای عملکرد همبستگی)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: رشته

توضیحات: به طور پیش فرض، عملکرد همبستگی خودکار (ACF) این colvar، ξ_i ، محاسبه می شود. هنگامی که این گزینه مشخص شده است، عملکرد همبستگی به جای آن با یک ravelloc دیگر، ξ_j محاسبه می شود، که باید از همان نوع (اسکالر، بردار یا کوآترینیون) باشد.

✔ corrFuncType (نوع عملکرد همبستگی)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: سرعت، مختصات یا مختصات p_2

مقدار پیش فرض: سرعت

توضیحات: با مختصات یا سرعت، تابع همبستگی $iC = h(t) = \xi_i(t) \cdot \xi_j(t + \tau)$ بین متغیرهای ξ_i و ξ_j یا سرعت آنها محاسبه می شود. (ξ_i ، ξ_j) محصول مقیاس زمانی است که بین مقادیر مقیاس یا بردار محاسبه می شود، در حالی که برای کوآترینیون ها این کیهان بین دو محور چرخش مربوطه است. با مختصات p_2 ، مرتبه دوم چند جمله ای erdnegeL، $(\theta) \text{soc} = 2 - 1/\xi_i$ ، به جای enisoc استفاده می شود.

✔ corrFuncNormalize (عملکرد همبستگی زمانی عادی می شود؟)

متن: ravelloc

مقادیر قابل قبول: naeloob

مقدار پیش فرض: روشن است

توضیحات: در صورت فعال بودن، مقدار تابع همبستگی در $t = 0$ به ۱ عادی می شود. در غیر

این صورت، برابر است با $\langle \xi_i, \xi_j \rangle$

✔ corrFuncLength (طول عملکرد همبستگی زمان)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

مقدار پیش فرض: ۱۰۰۰

توضیحات: طول (در تعداد امتیاز) عملکرد همبستگی زمان.

✔ corrFuncStride (عملکرد عملکرد همبستگی زمانی)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

مقدار پیش فرض: ۱

توضیحات: تعداد مراحل بین دو مقدار از عملکرد همبستگی زمان.

✔ corrFuncOffset (افست عملکرد همبستگی زمان)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

مقدار پیش فرض: ۰

توضیحات: زمان شروع (در تعداد مراحل) عملکرد همبستگی زمان (پیش فرض: $t = 0$).

توجه: مقدار در $t = 0$ همیشه برای نرمال سازی استفاده می شود.

✔ corrFuncOutputFile (پرونده خروجی برای عملکرد همبستگی زمان)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: نام پرونده UNIX

مقدار پیش فرض: <name>.corrfunc.dat

توضیحات: عملکرد همبستگی زمان در این پرونده ذخیره می شود.

✔ runAve (انحراف متوسط و استاندارد در حال اجرا را محاسبه کنید)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: این که آیا میانگین و انحراف استاندارد در حال اجرا باید برای این colvar

محاسبه شود.

✔ runAveLength (طول پنجره متوسط در حال اجرا)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

مقدار پیش فرض: ۱۰۰۰

توضیحات: طول (در تعداد نقطه) پنجره متوسط در حال اجرا.

✔ runAveStride (مقادیر میانگین مقادیر پنجره در حال اجرا)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

مقدار پیش فرض: ۱

توضیحات: تعداد مراحل بین دو مقدار در پنجره متوسط در حال اجرا.

✔ runAveOutputFile (پرونده خروجی برای انحراف متوسط و استاندارد در حال اجرا)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: نام پرونده UNIX

مقدار پیش فرض: <name>.runave.dat

توضیحات: میانگین و انحراف استاندارد در حال اجرا در این پرونده ذخیره می شود.

۱۳,۳,۱ Selection keywords

برای تعریف متغیرهای جمعی، اتمها معمولاً توسط گروه انتخاب می شوند. هر گروه با نامی مشخص می شود که از لحاظ جزء colvar خاص منحصر به فرد است (به عنوان مثال برای یک مؤلفه مسافت، نام دو گروه، گروه ۱ و گروه ۲ است). این نام پس از بندهای محدود از کلمات کلیدی انتخاب، دنبال می شود: اینها ممکن است بصورت جداگانه یا ترکیبی با یکدیگر استفاده شوند و هر کدام از آنها می توانند بارها تکرار شوند. انتخاب افزایشی است: هر کلمه کلیدی اتم های متناظر را به انتخاب اضافه می کند، به طوری که می توان مجموعه های مختلف اتم را با هم ترکیب کرد. با این حال، اتمهای شامل چندین کلمه کلیدی فقط یک بار شمارش می شوند. در زیر یک نمونه پیکربندی برای یک گروه اتمی به نام «اتم» آورده شده است، که از ترکیب غیرمعمول متنوعی از کلمات کلیدی انتخاب استفاده می کند:

```
atoms{
# add atoms 1 and 3 to this group (note: the first atom in the system is 1)
atomNumbers{
13
}
# add atoms starting from 20 up to and including 50
atomNumbersRange 20-50
# add index group (requires a .ndx file to be provided globally)
indexGroup Water
# add all the atoms with occupancy 2 in the file atoms.pdb
atomsFile atoms.pdb
atomsCol O
atomsColValue 2.0
# add all the C-alphas within residues 11 to 20 of segments "PR1" and "PR2"
psfSegID PR1PR2
atomNameResidueRange CA 11-20
atomNameResidueRange CA 11-20
}
```

انتخاب نتیجه شده شامل اتم های ۱ و ۳ است، بین ۲۰ تا ۵۰ و گروه های شاخص به نام «آب». شاخص های این گروه از فایل ارائه شده توسط indexFile، در بخش جهانی پرونده پیکربندی، خوانده می شوند.

در نسخه فعلی، ماژول Colvars انتخاب اتم VMD را مستقیماً دستکاری نمی کند: با این وجود، اینها را می توان با استفاده از کلمات کلیدی انتخاب مانند atomNubs، به گروههای اتمی در رشته تنظیمات colvars تبدیل کرد. لیست کامل کلمات کلیدی انتخاب موجود در VMD است:

✓ atomNumbers (لیست اعداد اتم)

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: لیستی از عدد صحیح مثبت از فضای جدا

توضیحات: این گزینه تمام اتمهایی را که تعداد آنها در لیست است به گروه اضافه می کند. تعداد اولین اتم در سیستم ۱ است: برای تبدیل از انتخاب VMD، از «atomselect

get serial» استفاده کنید.

✓ indexGroup (نام گروه فهرست مورد استفاده (فرمت GROMACS))

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: رشته

توضیحات: اگر نام یک فایل فهرست بندی توسط indexFile ارائه شده است، این گزینه می تواند یک گروه فهرست را از آن پرونده انتخاب کند: از اتم های آن گروه فهرست برای تعریف گروه فعلی استفاده می شود.

✓ atomNumbersRange (اتمها در یک محدوده عددی)

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: <Starting number>-<Ending number>

توضیحات: این گزینه در گروه شامل تمام اتمهایی است که تعداد آنها در محدوده مشخص شده است. تعداد اولین اتم در سیستم ۱ است.

✓ atomNameResidueRange (با نامهای اتمی در طیف وسیعی از اعداد رزیدو)

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: <Atom name> <Starting residue>-<Ending residue>

توضیحات: این گزینه تمام اتم ها را با نام ارائه شده در گروه رزیدو در محدوده معین به گروه اضافه می کند.

✓ psfSegID (شناسه قطعه PSF)

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: لیست رشته ها از فاصله جداگانه (حداکثر ۴ کاراکتر)

توضیحات: در این گزینه شناسه قطعه PSF برای atomNameResidueRange تعیین می شود. مقادیر متعدد ممکن است ارائه شود که مطابق با موارد متعدد atomNameResidueRange به ترتیب وقوع آنهاست. این گزینه فقط در صورت استفاده از پرونده توپولوژی PSF ضروری است.

✓ atomsFile (نام فایل PDB برای انتخاب اتم)

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: نام فایل UNIX

توضیحات: این گزینه اتم ها را از پرونده PDB ارائه شده انتخاب می کند و آنها را با توجه به نشانه های عددی موجود در ستون atomsCol به گروه اضافه می کند. توجه: توالی اتم های موجود در فایل PDB ارائه شده باید با توپولوژی سیستم مطابقت داشته باشد.

✓ atomsCol (ستون PDB برای استفاده از پرچم های انتخاب اتم)

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: Z یا O، B، X، Y

توضیحات: این گزینه مشخص می کند که کدام ستون PDB در atomsFile برای تعیین

اینکه کدام اتم‌ها در گروه قرار دارند استفاده می‌شود.

atomsColValue (پرچم انتخاب اتم در ستون PDB) ✓

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

توضیحات: در صورت تعریف، این مقدار در atomsCol اتم‌هایی را در اتم‌های موجود در گروه

مشخص می‌کند. در صورت عدم تعریف، تمام اتم‌هایی با مقدار غیر صفر در atomsCol

گنجانده شده‌اند.

dummyAtom (موقعیت اتم ساختگی (A°)) ✓

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: (x, y, z) سه گانه

توضیحات: این گزینه به جای انتخاب هر اتم، این گروه را به یک ذره مجازی در موقعیت

ثابت در فضا تبدیل می‌کند. این مثلاً مفید است به جای مرکز هندسه گروه با موقعیتی

تعریف شده توسط کاربر.

۱۳,۳,۲ Moving frame of reference

گزینه‌های زیر یک محاسبه خودکار یک ترجمه بهینه (centerReference) یا چرخش بهینه

(rotateReference) را تعریف می‌کند، که موقعیت‌های این گروه را به مجموعه مختصات مرجع

ارائه شده سوپرایز می‌کند. به عنوان مثال، این امر به شما امکان می‌دهد تا به طور موثری از

ستون‌های خاص اثرات لرزش مولکولی و انتشار را حذف کنید. با توجه به مجموعه‌ای از موقعیت

های اتمی x_i, ξ, colvar را می‌توان در مجموعه‌ای از موقعیت‌های ترجمه شده به صورت $x_i' = R(x_i -$

$x^C) + x^{\text{ref}}$. x^C مرکز هندسی x_i است، R ماتریس چرخش بهینه به سمت موقعیت‌های

مرجع و x^{ref} مرکز هندسی موقعیت‌های مرجع است.

مؤلفه‌هایی که بر اساس مسافت‌های زوجی تعریف می‌شوند، به طور طبیعی تحت ترجمه

های روتونی گلوبال ثابت هستند. در عوض، مؤلفه‌های دیگر تحت تأثیر چرخش‌ها یا ترجمه‌های

جهانی قرار گرفته‌اند: با این وجود، در صورت بیان در چارچوب مرجع یک گروه از اتم‌ها، با استفاده

از گزینه‌های centerReference و rotateReference، می‌توانند بدون تغییر باشند. سرانجام،

چند مؤلفه توسط کنوانسیون با استفاده از یک قاب ترجمه شده به صورت روتین (به عنوان مثال

حداقل RMSD) تعریف می‌شوند: برای این مؤلفه‌ها، به طور پیش فرض، CenterReference و

rotateReference فعال می‌شوند. در برنامه‌های معمولی، تنظیمات پیش فرض منجر به رفتار

مورد انتظار می‌شود.

centerReference (ضمناً ترجمه‌ها را برای این گروه حذف کنید) ✓

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: در صورت فعال بودن این گزینه، مرکز هندسه گروه مطابق با موقعیت‌های مرجع

ارائه شده توسط RefPositions یا RefPositionsFile خواهد بود. اجزای Colvar فقط

به موقعیت‌های تراز شده دسترسی خواهند داشت. توجه: مگر در مواردی که مشخص شده

باشد، rmsd و eigenveector به طور پیش فرض این گزینه را روشن می‌کنند.

rotateReference (چرخش‌ها را به طور ضمنی برای این گروه حذف کنید) ✓

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: در صورت فعال بودن این گزینه، مختصات این گروه به صورت مطلوب

در موقعیت‌های مرجع ارائه شده توسط RefPositions یا RefPositionsFile قرار

می‌گیرند. چرخش اگر در مرکز باشد، در غیر این صورت در اطراف مرکز هندسه انجام

خواهد شد. الگوریتم مورد استفاده همان استفاده شده توسط مؤلفه جهت یابی

colvar است [۴۶]. نیروهای اعمال شده بر روی اتم‌های این گروه نیز بطور ضمنی به

قاب اصلی برگردانده می شوند. توجه: مگر در مواردی که مشخص شده باشد، rmsd و eigenveector به طور پیش فرض این گزینه را روشن می کنند.

✔ refPositions (موقعیت های مرجع برای اتصالات (A^0))

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: لیست جداگانه (x, y, z) از فاصله

توضیحات: این گزینه لیستی از مختصات مرجع برای centerReference یا rotateReference را فراهم می کند. اگر فقط centerReference فعال باشد، این لیست می تواند شامل یک سه گانه (x, y, z) باشد. اگر rotateReference نیز فعال باشد، لیست باید به اندازه گروه اتمی باشد.

✔ refPositionsFile (پرونده حاوی موقعیت های مرجع برای نصب)

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: نام پرونده UNIX

توضیحات: این کلمه کلیدی مختصات مرجع را برای قرار گرفتن در پرونده داده شده فراهم می کند، و با یکپارچه سازی مجدد با عکس العمل های اختصاصی است. قالب پرونده قابل قبول XYZ یا PDB است. موقعیتهای اتمی بسته به سه سناریوی زیر متفاوت خوانده می شوند: (۱) پرونده دقیقاً به همان اندازه اتم های گروه شامل: همه موقعیت ها به ترتیب خوانده می شوند. (ب) پرونده حاوی مختصات برای کل سیستم است: فقط موقعیت های مربوط به شاخص های عددی گروه اتمی خوانده می شوند. (iii) اگر پرونده یک پرونده PDB است و refPositionsCol مشخص شده است، موقعیت ها با توجه به مقدار ستون refPositionsCol (که ممکن است مشابه atomsCol باشد) خوانده می شوند.

✔ refPositionsCol (ستون PDB حاوی پرچم های اتمی)

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: Z یا O, B, X, Y

توضیحات: مانند atomsCol for atomsFile، نشان می دهد از کدام ستون برای شناسایی اتم هادر refPositionsFile استفاده شود (اگر این یک پرونده PDB است).

✔ refPositionsColValue (نشانه انتخاب اتم در ستون PDB)

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

توضیحات: آنالوگ به atomsColValue، اما برای refPositionsCol کاربرد دارد.

✔ fittingGroup (از مجموعه ای متناوب از اتم ها برای تعریف ترجمه استفاده کنید)

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: Block fittingGroup ... value مقدار پیش فرض: خود این گروه

توضیحات: اگر مرکز یا مرجع یا rotateReference تعریف شده باشد، این کلمه کلیدی

یک گروه اتمی متناوب را برای محاسبه مطلوب ترجمه تعریف می کند. اگر ساختار گروه درگیر تغییر چشمگیری داشته باشد، از این گزینه برای تعریف چرخش مداوم استفاده کنید (یک علامت معمولی پیام «هشدار: چرخش ناپیوسته!» است).

مثال زیر نحو متناسب سازی گروه را نشان می دهد: گروهی به نام «اتم» تعریف شده است، از جمله ۸ اتم $C\alpha$ از یک پروتئین از ۱۰۰ رزیدو. یک roto-translation بهینه به طور خودکار با قرار دادن اثر $C\alpha$ از بقیه پروتئین بر روی مختصات تهیه شده توسط یک پرونده PDB محاسبه می شود.

```
# Example: defining a group "atoms", with its coordinates expressed
# on a roto-translated frame of reference defined by a second group
atoms{
  psfSegID PROT
  atomNameResidueRange CA 41-48
  centerReference yes
  rotateReference yes
  fittingGroup{
    # define the frame by fitting the rest of the protein
    psfSegID PROT PROT
    atomNameResidueRange CA 1-40
    atomNameResidueRange CA 49-100
  }
  refPositionsFile all.pdb # can be the entire system
}
```

دوگزینه زیر مقادیر پیش فرض مناسب برای اکثر قریب به اتفاق برنامه ها دارند و فقط برای پشتیبانی از موارد نادر و خاص ارائه می شوند.

✔ enableFitGradients (سهم ترجمه روتایی در شیب colvar را درج کنید)

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: روشن است

توضیحات: وقتی مرکز یا مرجع یا rotateReference روشن است، شیب برخی از ستون ها شامل اصطلاحات متناسب با $\partial R / \partial x_i$ (شیب چرخشی) و $\partial x_C / \partial x_i$ (شیب های ترجمه) هستند. بطور پیش فرض، این شرایط در کل شیب ها محاسبه می شود. اگر این گزینه خاموش باشد، آنها نادیده گرفته می شوند. در مورد حداقل اجزای RMSD، این نشانه به طور خودکار غیرفعال می شود زیرا سهم آن مشتقات به شیب ها لغو می شوند.

✔ enableForces (نیروهایی را از این آغوش به این گروه اعمال کنید)

متن: گروه اتمی

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: روشن است

توضیحات: اگر این گزینه خاموش باشد، هیچ نیرویی از این colvar برای این گروه

اعمال نمی شود.

سایر نیروها تحت تأثیر قرار نمی گیرند (یعنی نیروهای موتور MD، از ستون های دیگر و سایر نیروهای خارجی). برای اتم های ساختگی، این گزینه به طور پیش فرض خاموش است.

۱۳,۳,۳ Treatment of periodic boundary conditions

هنگامی که شرایط مرزی دوره ای تعریف می شود، ماژول Colvars نیاز دارد که مختصات هر قطعه مولکولی به هم پیوسته باشد، بدون اینکه «پرش» انجام شود وقتی یک قطعه تا حدودی در نزدیکی یک مرز تناوبی پیچیده می شود. ماژول Colvars هنگام محاسبه مرکز هندسه گروه بر این فرض متکی است، اما اگر این گروه از مولکولهای مختلفی بگذرد، ممکن است این وضعیت شکست بخورد. به طور کلی، اگر هر گروه اتمی یک یا چند مورد از موارد زیر را برآورده کند، بسته بندی مختصات بر محاسبه ستونها تأثیر نمی گذارد:

✓ فقط توسط یک اتم تشکیل شده است.

✓ آن توسط یک جزء colvar استفاده می کند که از مرکز هندسه آن استفاده نمی کند، بلکه فقط

از مسافت های زوج (فاصله dihedralPC، alpha، hBond، coordNum، Inv) استفاده می کند.

✓ آن توسط یک جزء colvar استفاده می شود که اجزای نادرست کارتیزی مرکز جرم خود را نادیده می گیرد (مانند عناصر x و y مرکز جرم غشاء مدل سازی شده با فاصله Z).

اگر هیچ یک از این شرایط برآورده نشود، بسته بندی ممکن است بر محاسبه متغیرهای جمعی تأثیر بگذارد: یک راه حل ممکن استفاده از بسته بندی pbc یا باز کردن pbc قبل از پردازش مسیر با ماژول Colvars است.

۱۳,۳,۴ Performance a Colvars calculation based on group size

در شبیه سازی های انجام شده با برنامه های انتقال پیام (مانند NAMD یا LAMMPS)، محاسبه انرژی و نیروها (یعنی موازی سازی) در گره های مختلف و همچنین بر روی هسته های پردازنده هر گره توزیع می شود. مختصات اتمی به طور معمول در یک گره جمع می شوند، جایی که محاسبه متغیرهای جمعی و سوگیری آنها انجام می شود. این بدان معنی است که برای شبیه سازی بیش از تعداد زیادی گره، یک محاسبه Colvars ممکن است بالاسری قابل توجهی داشته باشد، که از هزینه های انتقال مختصات اتمی به یک گره و پردازش آنها ناشی می شود.

عملکرد می تواند به روش های مختلف بهبود یابد:

✓ محاسبه متغیرها، مؤلفه ها و سوگیری ها می تواند بر روی هسته های پردازشی گره که

ماژول Colvars در آن اجرا شده است توزیع شود. در حال حاضر، وزن مساوی به هر Colvar

یا هر يك از اجزای آن ستونها اختصاص داده شده است که بیش از يك جزء را شامل می شود. عملکرد شبیه سازی هایی که از بسیاری از ستونها یا مؤلفه ها استفاده می کنند به طور خودکار بهبود می یابد. برای شبیه سازی هایی که از یک تخته بزرگ بزرگ استفاده می کنند، ممکن است توصیه شود آن را در چندین مؤلفه تقسیم کنید، که سپس در هسته های موجود توزیع می شود. در صورت چاپ، پیام «موازی سازی SMP در دسترس است.» در دسترس بودن گزینه را نشان می دهد (در یک ارتباط بعدی از VMD پشتیبانی خواهد شد).

✓ به عنوان یک قاعده کلی، اندازه گروه های اتمی باید نسبتاً کوچک نگه داشته شوند (تا حدود هزاران اتم بسته به اندازه کل سیستم در مقایسه). برای به دست آوردن یک تخمین از هزینه محاسباتی یک colvar بزرگ، می توان از یک محاسبه تست همان colvar در VMD استفاده کرد (اشاره: از دستور time Tcl برای اندازه گیری هزینه اجرای به روزرسانی CV استفاده کنید).

۱۳,۴ Collective variable components (basis functions)

هر colvar توسط يك یا چند مؤلفه تعریف می شود (معمولاً فقط يك قطعه). هر مؤلفه شامل یک کلمه کلیدی است که یک فرم کاربردی را مشخص می کند، و یک بلوک تعریف در زیر آن کلمه کلیدی، مشخص کردن اتم های درگیر و هر پارامتر اضافی (برش، مقادیر «مرجع»، ...) وجود دارد.

انواع اجزای به کار رفته در یک colvar، خاصیت آن colvar را تعیین می کند، و کدام روش های بایاس یا آنالیز را می توان استفاده کرد. در بیشتر موارد، colvar یک عدد واقعی را برمی گرداند، که توسط یک یا چند نمونه از اجزای زیر محاسبه می شود:

➤ distance: فاصله بین دو گروه؛

➤ distanceZ: پیش بینی یک بردار فاصله در یک محور؛

➤ distanceXY: پیش بینی یک بردار مسافت در صفحه؛

➤ distanceInv: میانگین فاصله بین دو گروه اتم (به عنوان مثال فاصله مبتنی بر NOE)؛

➤ angle: زاویه بین سه گروه؛

➤ dipoleAngle: زاویه بین دو گروه و دو قطب یک گروه سوم؛

➤ coordNum: تعداد هماهنگی بین دو گروه؛

➤ selfCoordNum: تعداد هماهنگی اتم ها در یک گروه؛

➤ hBond: پیوند هیدروژن بین دو اتم؛

➤ Rmsd: میانگین انحراف مربع ریشه (RMSD) از مجموعه مختصات مرجع؛

➤ Eigenvector: پیش بینی مختصات اتمی بر روی یک بردار؛

➤ orientationAngle: زاویه چرخش مناسب ترین حالت از مجموعه مختصات مرجع؛

➤ orientationProj: کوسینوس orientationProj؛

➤ spinAngle: طرح ریزی متعامد به محور چرخش مناسب ترین حالت از مجموعه مختصات مرجع؛

➤ Tilt: پیش بینی در یک محور چرخش به بهترین وجه از مجموعه ای از مختصات مرجع؛

↻ Gyration: شعاع چرخش گروهی از اتمها؛

↻ Inertia: لحظه بی تحرک گروه اتمی؛

↻ inertiaZ: لحظه تحرک گروهی از اتمهای اطراف محور انتخابی؛

↻ Alpha: محتوای α - مارپیچ از یک بخش پروتئین.

↻ dihedralPC: طرح ریزی دی هدرال ای ستون فقرات پروتئین بر روی یک جزء اصلی دی هدرال ها.

برخی از مؤلفه ها مقیاس را برنمی گردانند، اما مقادیر بردار را نشان می دهند. آنها فقط می توانند با مقادیر برداری از همان نوع ترکیب شوند، مگر در یک متغیر جمعی نوشته شده.

↻ distanceVec: وکتور فاصله بین دو گروه؛

↻ distanceDir: واحد بردار موازی با distanceVec؛

↻ cartesian: بردار مختصات دکارتی اتمی؛

↻ Orientation: چرخش مناسب ترین، به عنوان یک کواترنون واحد بیان شده است؛

در ادامه، کلیه انواع مؤلفه موجود به همراه واحدهای فیزیکی آنها و مقادیر محدود کننده در صورت وجود ذکر شده است. از این مقادیر محدود کننده می توان برای تعریف حاشیه های پایین و فوقانی در colvar مادری استفاده کرد.

برای هر نوع مؤلفه، کلمات کلیدی تنظیمات موجود ذکر شده است: وقتی دو مؤلفه کلمات کلیدی خاصی را به اشتراک می گذارند، مؤلفه دوم به سادگی به اسناد اول مربوط به آن کلمه کلیدی مراجعه می کند. کلمات کلیدی موجود برای انواع مختلف ترکیبات در پایان ذکر شده است.

۱۳٫۴٫۱ List of available colvar components

فاصله: فاصله مرکز فاصله بین دو گروه.

مسافت فاصله {a ...} یک جزء فاصله بین دو گروه اتمی، گروه ۱ و گروه ۲ را مشخص می کند.

لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

↻ group1 (گروه اول اتم ها)

متن: فاصله

مقادیر قابل قبول: بلوک گروه ۱ {...}

توضیحات: گروه اول اتم ها.

↻ group2 مشابه گروه ۱

↻ forceNoPBC (به جای فاصله مطلق تصویر مطلق را محاسبه کنید؟)

متن: فاصله

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خیر

توضیحات: به طور پیش فرض، در محاسبات با شرایط مرزی دوره ای ۳۵، مؤلفه مسافت

فاصله را مطابق با قرارداد حداقل تصویر برمی گرداند. اگر این پارامتر روی بله تنظیم شود،

PBC نادیده گرفته می شود و فاصله بین مختصات مطابق با داخلی حفظ می شود. این

تنها در تعداد محدودی از موارد خاص، مثلاً مفید است. برای توصیف فاصله بین نقاط

از راه دور یک ماکرومولکول واحد، که نمی تواند در مرزهای سلولی دوره ای تقسیم شود،

و برای آن فاصله حداقل تصویر ممکن است نتیجه اشتباه را به دلیل یک سلول دوره ای

نسبتاً کوچک بدهد.

↻ oneSiteTotalForce (فقط تعداد کل گروه را اندازه می گیرید؟)

متن: زاویه، dipoleAngle، دو سطحی

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خیر

توضیحات: اگر این گزینه به بله تنظیم شود، کل نیرو در امتداد یک میدان بردار اندازه

گیری می شود (به بخش ۱۳/۵/۱ مراجعه کنید به معادله ۱۳/۱۹) که فقط شامل اتم های

گروه ۱ است. این گزینه فقط برای ABF یا بایاس های مرسوم که نیروهای کل را محاسبه

می کند، مفید است. برای جزئیات بیشتر به بخش ۱۳/۵/۱ مراجعه کنید.

مقدار برگشتی یک عدد مثبت است (در A°)، از ۰ تا بزرگترین فاصله بین متقابل ممکن در

شرایط مرزی انتخاب شده (با PBC ها، حداقل کنوانسیون تصویر استفاده می شود مگر

اینکه گزینه forceNoPBC تنظیم نشده باشد).

distanceZ: طرح ریزی یک بردار مسافت در یک محور.

بلوک فاصله a ... ZZ یک جزء طرح ریزی فاصله را تعیین می کند، که می تواند اندازه

گیری فاصله بین دو گروه پیش بینی شده بر روی یک محور یا موقعیت یک گروه در امتداد

چنین محور باشد. محور را می توان با استفاده از یک گروه مرجع و یک بردار ثابت یا به

صورت پویا بر اساس دو گروه مرجع تعریف کرد.

لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

↻ main (گروه اصلی اتمها)

متن: distanceZ

مقادیر قابل قبول: مسدود کردن اصلی {...}

توضیحات: گروه اتم هایی که موقعیت r آنها اندازه گیری می شود.

↻ Ref (گروه مرجع اتم ها)

متن: distanceZ

مقادیر قابل قبول: Block ref ...

توضیحات: گروه مرجع اتم ها. موقعیت مرکز جرم آن ۲۱ در زیر ذکر شده است.

↻ ref2 (گروه مرجع ثانویه)

متن: distanceZ

مقادیر قابل قبول: Block ref۲ ...

مقدار پیش فرض: هیچ

توضیحات: گروه اختیاری از اتم های مرجع، که موقعیت r_2 آن برای تعریف یک محور طرح ریزی پویا قابل استفاده است: $e = (\|r_2 - r_1\|)^{-1} \times (r_2 - r_1)$ در این حالت، مبدا $r_m = (r_1 + r_2) / 2$ و مقدار مؤلفه $e \cdot (r - r_m)$ است.

✓ Axis (محور پیش بینی (A°))

متن: distanceZ

مقادیر قابل قبول: (x, y, z) سه گانه

مقدار پیش فرض: (۰٫۰، ۰٫۰، ۰٫۰)

توضیحات: سه مؤلفه این بردار محور پیش بینی e را برای بردار فاصله $r - r_1$ که به مراکز گروه های ref و main می پیوندد تعریف می کند. مقدار مؤلفه سپس $e \cdot (r - r_1)$ است. بردار باید به عنوان سه مؤلفه که توسط کاما از هم جدا شده و در پرانتز محصور شده باشد، نوشته شود.

✓ forceNoPBC به تعریف ForceNoPBC (مؤلفه مسافت) مراجعه کنید

✓ oneSiteTotalForce به تعریف oneSiteTotalForce (مؤلفه مسافت) مراجعه کنید

این مؤلفه عددی (در آنگستروم) را برمی گرداند که دامنه آن با شرایط مرزی انتخاب شده تعیین می شود. به عنوان مثال، اگر از محور z در یک شبیه سازی با مرزهای تناوبی استفاده می شود، مقدار برگشتی بین $-bz/2$ و $bz/2$ قرار دارد، در حالی که bz طول جعبه در امتداد z است (اگر forceNoPBC تنظیم شود این رفتار غیرفعال میشود).

distanceXY: ماژول طرح ریزی وکتور فاصله در صفحه.

بلوک فاصله XY {...} مسافتی را که در یک صفحه پیش بینی شده است، تعریف می کند و همان کلمات کلیدی را به عنوان فاصله مؤلفه Z، یعنی اصلی، ref، یا ref2 یا محور و oneSiteTotalForce می پذیرد. این هنجار طرح ریزی بردار فاصله بین اصلی و Ref را روی هواپیما متعامد به محور باز می گرداند. محور با استفاده از پارامتر محور یا به عنوان بردار که به ref و ref2 می پیوندد تعریف می شود (فاصله Z را در بالا ببینید).

لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۶/۴):

✓ main: تعریف اصلی (مؤلفه distanceZ) را ببینید

✓ ref: تعریف تعریف (مؤلفه distanceZ) را ببینید

✓ ref2: تعریف Ref2 (مؤلفه distanceZ) را ببینید

✓ axis: تعریف محور (مؤلفه distanceZ) را ببینید

✓ forceNoPBC: به تعریف ForceNoPBC (مؤلفه مسافت) مراجعه کنید

✓ oneSiteTotalForce: به تعریف oneSiteTotalForce (مؤلفه مسافت) مراجعه کنید

distanceVec: بردار فاصله بین دو گروه.

بلوک distanceVec {...} یک مؤلفه بردار مسافت را تعریف می کند، که همان کلمات کلیدی را به عنوان مسافت مؤلفه می پذیرد: گروه ۱، گروه ۲ و forceNoPBC. مقدار آن سه

بردار است که به مراکز جرم گروه ۱ و گروه ۲ می پیوندد.

لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ \group: تعریف گروه ۱ (مؤلفه مسافت) را ببینید

✓ \group2: مشابه گروه ۱

✓ oneSiteTotalForce: به تعریف oneSiteTotalForce (مؤلفه مسافت) مراجعه کنید

distanceDir: بردار واحد فاصله بین دو گروه.

بلوک distanceDir {...} یک مؤلفه بردار واحد فاصله را تعریف می کند، که همان کلمات

کلیدی را به عنوان مسافت مؤلفه می پذیرد: گروه ۱، گروه ۲ و forceNoPBC. یک بردار

واحد ۳ بعدی $d = (dx, dy, dz)$ را با برمی گرداند $|d| = 1$

لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ \group: تعریف گروه ۱ (مؤلفه مسافت) را ببینید

✓ \group2: مشابه گروه ۱

✓ oneSiteTotalForce: به تعریف oneSiteTotalForce (مؤلفه مسافت) مراجعه کنید

distanceInv: میانگین فاصله بین دو گروه اتم.

بلوک distanceInv {...} فاصله متوسط تعمیم یافته بین دو گروه اتم ۱ و ۲ را با وزن $n/1$

وزن نشان می دهد:

$$d_{1,2}^{[n]} = \left(\frac{1}{N_1 N_2} \sum_{i,j} \left(\frac{1}{\|d^{ij}\|} \right)^n \right)^{-1/n}$$

جایی که $\|d^{ii}\|$ به ترتیب بین اتم های i و z در گروه ۱ و ۲ قرار دارد و n یک عدد صحیح است.

لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ \group: تعریف گروه ۱ (مؤلفه مسافت) را ببینید

✓ \group2: مشابه گروه ۱

✓ oneSiteTotalForce: به تعریف oneSiteTotalForce (مؤلفه مسافت) مراجعه کنید

✓ exponent (ضریب n در معادله ۱۳/۲)

متن: distanceInv

مقادیر قابل قبول: حتی عدد صحیح مثبت

مقدار پیش فرض: ۶

توضیحات: نمایانگر مسافت هایی که قبل از میانگین گرفتن در مسافت فرد قرار دارد را

مشخص می کند. مقدار پیش فرض ۶ برای مثال برای اعمال محدودیت های مبتنی بر

مسافت NOE اندازه گیری مفید است.

این مؤلفه عددی را در A° برمی گرداند، از ۰ تا بزرگترین فاصله ممکن در شرایط حاشیه ای

انتخاب شده.

distancePairs: مجموعه فاصله بین دو گروه.

بلوک distancePairs {...} متغیر ابعادی $N_2 \times N_1$ را تعریف می کند که شامل تمام فاصله های متقابل بین اتم های دو گروه است. برای مثال می توان با استفاده از ویژگی scriptedFunction، متغیر جدیدی را تعریف کرد که در دو گروه تعریف شده است. لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ \group: تعریف گروه ۱ (مؤلفه مسافت) را ببینید

✓ \group2: مشابه گروه ۱

✓ forceNoPBC: به تعریف ForceNoPBC (مؤلفه مسافت) مراجعه کنید

این مؤلفه بردار ابعادی $N_2 \times N_1$ را نشان می دهد، هر کدام از ۰ تا بزرگترین فاصله ممکن در شرایط مرزی انتخاب شده است.

cartesian: بردار مختصات دکارتی اتمی

بلوک cartesian {...} تعریف یک مؤلفه را بر می گرداند وکتور مسطح حاوی مختصات دکارتی همه اتم های شرکت کننده، به ترتیب $(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n)$.

لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ atoms (گروه اتم ها)

زمینه: دکارتی

مقادیر قابل قبول: بلوک اتمها {...}

توضیحات: اتمهایی را تعریف می کند که مختصات آنها مقدار جزء را تشکیل می دهد. اگر rotateReference یا centerReference تعریف شوند، مختصات در چهارچوب مرجع ارجاع ارزیابی می شوند.

زاویه: زاویه بین سه گروه.

بلوک angle {...} زاویه ای را تعریف می کند و شامل سه بلوک گروه ۱، گروه ۲ و گروه ۳ می شود و سه گروه را تعریف می کند. یک زاویه (به درجه) را در فاصله زمانی [۰:۱۸۰] برمی گرداند.

لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ \group: تعریف گروه ۱ (مؤلفه مسافت) را ببینید

✓ \group2: مشابه گروه ۱

✓ \group3: مشابه گروه ۱

✓ oneSiteTotalForce: به تعریف OneSiteTotalForce (مؤلفه مسافت) مراجعه کنید

dipoleAngle: زاویه بین دو گروه و دو قطب از گروه سوم.

بلوک dipoleAngle {...} زاویه ای را تعریف می کند، و شامل سه بلوک گروه ۱، گروه ۲ و گروه ۳ است که سه گروه را تعریف می کند، گروه ۱ گروهی است که قطر محاسبه می شود. یک زاویه (به درجه) را در فاصله زمانی [۰:۱۸۰] برمی گرداند.

لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ \group: تعریف گروه ۱ (مؤلفه مسافت) را ببینید

✓ \group2: مشابه گروه ۱

✓ \group3: مشابه گروه ۱

✓ oneSiteTotalForce: به تعریف OneSiteTotalForce (مؤلفه مسافت) مراجعه کنید

dihedral: زاویه پیچشی بین چهار گروه.

بلوک dihedral {...} زاویه پیچشی را تعریف می کند و شامل بلوک های گروه ۱، گروه ۲، گروه ۳ و گروه ۴ می شود و چهار گروه را تعریف می کند. این یک زاویه (در درجه) درون فاصله [۰:۱۸۰] را برمی گرداند. مائول Colvars تمام فاصله بین دوزاویه را با در نظر گرفتن تناوبی محاسبه می کند. به عنوان مثال، مقادیر مرجع برای محدودیت ها یا محدوده محدوده را می توان با استفاده از هر تعداد واقعی انتخاب تعریف کرد.

لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ \group: تعریف گروه ۱ (مؤلفه مسافت) را ببینید

✓ \group2: مشابه گروه ۱

✓ \group3: مشابه گروه ۱

✓ oneSiteTotalForce: به تعریف OneSiteTotalForce (مؤلفه مسافت) مراجعه کنید

coordNum: شماره هماهنگی بین دو گروه.

بلوک coordNum {...} یک شماره هماهنگی (یا تعداد تماس ها) را تعریف می کند، که عملکرد متر را محاسبه می کند)، که $(n(d/d_0) - 1)/(m(d/d_0) - 1)$ در آن d_0 فاصله «کات آف»، و m و n نمایانگرهایی هستند که می توانند رفتار طولانی مدت و سفتی آن را کنترل کنند.» این عملکرد بر روی همه جفت اتم ها در گروه ۱ و گروه ۲ خلاصه می شود:

$$C(\text{group1}, \text{group2}) = \sum_{i \in \text{group1}} \sum_{j \in \text{group2}} \frac{1 - (|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|/d_0)^n}{1 - (|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|/d_0)^m} \quad (13.3)$$

لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ \group: تعریف گروه ۱ (مؤلفه مسافت) را ببینید

✓ \group2: مشابه گروه ۱

✓ Cutoff (بردار فاصله مرجع (A°))

زمینه: coordNum

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

مقدار پیش فرض: ۴/۰

توضیحات: این عدد فاصله تعویض را برای تعریف مخاطب میان جمعی تعریف می کند:

برای $d \ll d_0$ ، عملکرد تغییر

$(m(d/d_0) - 1)/(n(d/d_0) - 1)$ نزدیک به ۱ است، در $d = d_0$ مقدار n/m با $2/1$ پیش فرض n و m دارد و در $d \gg d_0$ تقریباً مثل $dm - n$ به صفر می‌رسد. از این رو، برای یک رفتار مناسب، m باید بزرگتر از n باشد.

✓ cutoff^۳ (بردار فاصله مرجع (A°))

زمینه: coordNum

مقادیر قابل قبول: «سه گانه اعشار مثبت» (x, y, z)

مقدار پیش فرض: ($4_7^\circ, 4_7^\circ, 4_7^\circ$)

توضیحات: سه مؤلفه این بردار سه برش مختلف d_0 را برای هر جهت تعریف می‌کند. این گزینه با برش متقابل است.

✓ expNumer (توان شماره)

زمینه: coordNum

مقادیر قابل قبول: حتی عدد صحیح مثبت

مقدار پیش فرض: ۶

توضیحات: این عدد نشانگر n برای عملکرد تعویض را تعیین می‌کند.

✓ expDenom (توان مخرج)

زمینه: coordNum

مقادیر قابل قبول: حتی عدد صحیح مثبت

مقدار پیش فرض: ۱۲

توضیحات: این عدد نشانگر m برای عملکرد تعویض را تعیین می‌کند.

✓ group2CenterOnly (فقط از مرکز جرم گروه ۲ استفاده کنید)

زمینه: coordNum

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: اگر این گزینه روشن باشد، فقط مخاطبین بین هر اتم در گروه ۱ و مرکز جرم گروه ۲ محاسبه می‌شود (به طور پیش فرض، مبلغ بر همه جفت اتم‌ها در گروه ۱ و گروه ۲ گسترش می‌یابد). اگر group2 یک dummyAtom است، این گزینه بصورت پیش فرض روی yeskl تنظیم شده است.

این مؤلفه یک عدد بدون بعد را باز می‌گرداند، که از حدود ۰ است (همه مسافت‌های بین فاصله بسیار بزرگتر از برش هستند) تا $Ngroup2 \times Ngroup1$ (همه مسافت‌ها از برش کمتر است) یا $Ngroup1$ در صورت استفاده از گروه2CenterOnly استفاده می‌شود. به دلایل عملکرد، حداقل یکی از گروه‌های گروه ۱ و گروه ۲ باید از اندازه محدود باشد یا باید از Group2CenterOnly استفاده شود: ارزش حلقه در همه جفت‌ها به عنوان $Ngroup2 \times Ngroup1$ افزایش می‌یابد.

selfCoordNum: تعداد هماهنگی بین اتم‌های درون یک گروه.

بلوک {...}selfCoordNum یک تعداد هماهنگی را به طور مشابه با اجزای coordNum تعریف می‌کند، اما این عملکرد بر روی جفت اتم در گروه ۱ خلاصه می‌شود:

$$C(\text{group1}) = \sum_{i \in \text{group1}} \sum_{j > i} \frac{1 - (|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|/d_0)^n}{1 - (|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|/d_0)^m} \quad (13.4)$$

کلمات کلیدی پذیرفته شده توسط selfCoordNum زیرمجموعه ای از مواردی است که توسط coordNum پذیرفته شده است، یعنی گروه ۱ (در اینجا تمام اتم‌هایی که باید در نظر گرفته شوند)، expNumer، cutoff، expDenom و.

لیست کلید واژه‌ها (همچنین گزینه‌های اضافی را ببینید. $13_4/4_4$):

✓ group1: تعریف گروه ۱ (مؤلفه coordNum) را ببینید

✓ group2: مشابه گروه ۱

✓ Cutoff: تعریف قطع (مؤلفه coordNum) را ببینید

✓ cutoff^۳: تعریف cutoff^۳ (مؤلفه coordNum) را ببینید

✓ expNumer: به تعریف expNumer (مؤلفه coordNum) مراجعه کنید

✓ expDenom: به تعریف expDenom (مؤلفه coordNum) مراجعه کنید

این مؤلفه یک عدد بدون بعد را نشان می‌دهد، که از حدود ۰ (همه مسافت‌های بین فاصله ای بسیار بزرگتر از cut off) به $(1 - Ngroup1) \times Ngroup1$ (همه مسافت‌ها در cut off) باز می‌گردد. به دلایل عملکردی، گروه ۱ باید در اندازه محدود شده باشد، زیرا ارزش حلقه در همه جفت‌ها به عنوان گروه ۲ رشد می‌کند.

hBond: پیوند هیدروژن بین دو اتم.

بلوک {...}hBond پیوند هیدروژنی را تعریف می‌کند، که به عنوان یک شماره هماهنگی (اولویت 13_3) بین دهنده و اتم‌های پذیرنده اجرا می‌شود. بنابراین، کات آف گزینه‌های مشابه را می‌پذیرد (با مقدار پیش فرض متفاوت از 3_3 درجه آنگستروم، expNumer (با مقدار پیش فرض ۶) و expDenom (با مقدار پیش فرض ۸). بر خلاف coordNum، باید دو عدد اتم، پذیرنده و دهنده تعریف شود. این یک عدد تخصیصی را برمی‌گرداند، با مقادیر بین ۰ (پذیرنده و اهداکننده خیلی خارج از کات آف) و ۱ (پذیرنده و اهداکننده بسیار خیلی نزدیک به کات آف).

لیست کلید واژه‌ها (همچنین گزینه‌های اضافی را ببینید. $13_4/4_4$):

✓ acceptor (تعداد اتم پذیرنده)

متن: hBond

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

توضیحات: شماره ای که از همان کنوانسیون به عنوان atomNumbers استفاده می‌کند.

✓ donor مشابه پذیرنده

✓ cutoff تعریف قطع (مؤلفه coordNum) را ببینید

توجه: مقدار پیش فرض ۳/۳ درجه سانتی گراد است.

✓ expNumer به تعریف expNumer (مؤلفه coordNum) مراجعه کنید

توجه: مقدار پیش فرض ۶ است.

✓ expDenom به تعریف expDenom (مؤلفه coordNum) مراجعه کنید

توجه: مقدار پیش فرض ۸ است.

rmsd: میانگین ریشه جابجایی مربعات (RMSD) از موقعیت های مرجع.

بلوک {...} rmsd میانگین جایگزینی مربع ریشه (RMSD) گروه اتم را با توجه به ساختار مرجع تعریف می کند. برای هر مجموعه مختصات $\{x_1(t), x_2(t), \dots, x_N(t)\}$ ، مولفه colvar rmsd چرخش بهینه $x(\text{ref}) \rightarrow U\{x_i(t)\}$ را محاسبه می کند که به بهترین نحو مختصات $\{x_i(t)\}$ را بر روی مجموعه ای از مختصات مرجع $\{x_i(\text{Ref})\}$. مختصات فعلی و مرجع در مرکز هندسه متمرکز شده اند، $x(\text{cog}(t))$ و $x(\text{ref})\text{cog}$. میانگین جابجایی مربع ریشه به شرح زیر تعریف می شود:

$$\text{RMSD}(\{x_i(t)\}, \{x_i^{(\text{ref})}\}) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| U(x_i(t) - x_{\text{cog}}(t)) - (x_i^{(\text{ref})} - x_{\text{cog}}^{(\text{ref})}) \right|^2} \quad (13.5)$$

چرخش بهینه $x(\text{ref}) \rightarrow U\{x_i(t)\}$ در فرمالیسم توسعه یافته در مرجع محاسبه می شود [۴۶]، که وابستگی مداوم $x(\text{ref}) \rightarrow U\{x_i(t)\}$ را با توجه به $\{x_i(t)\}$ تضمین می کند. لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ atoms (گروه اتم)

متن: rmsd

مقادیر قابل قبول: اتم {...} بلوک

توضیحات: گروه اتمی را که RMSD از آنها باید محاسبه شود، تعریف می کند. گزینه های مناسب بهینه (مانند RefPositions و rotateReference) معمولاً نباید در این بلوک تنظیم شوند. استثناء این قانون موارد ویژه ای است که در بند استفاده پیشرفته در زیر مورد بحث قرار گرفته است.

✓ refPositions (مختصات مرجع)

متن: rmsd

مقادیر قابل قبول: لیست جداگانه (x, y, z) از فاصله

توضیحات: این گزینه (منحصر به فرد با refPositionsFile) مختصات مرجع را تعیین می کند. اگر فقط centerReference روشن باشد، این لیست می تواند یک سه گانه (x, y, z) باشد. اگر rotateReference نیز فعال باشد، لیست باید به اندازه گروه اتمی باشد. این گزینه مستقل از گزینه ای است که با همان کلید واژه در بلوک اتم ها وجود دارد (نگاه کنید به ۱۳/۳/۲). حالت دوم (و گزینه های مناسب اتصالات مربوط به گروه اتمی) به طور

معمول مورد نیاز نیست، و باید به کلی حذف شود به جز موارد استفاده پیشرفته.

✓ refPositionsFile (پرونده مختصات مرجع)

✓ متن: rmsd

مقادیر قابل قبول: نام پرونده UNIX

توضیحات: این گزینه (متقابل منحصر به فرد با refPositions) نام پرونده را برای مختصات مرجع مقایسه می کند. قالب همان روشی است که توسط تعریف refPositionsFile در تعریف گروه اتمی ارائه شده است (نگاه کنید به ۱۳/۳/۲).

✓ refPositionsCol (ستون PDB حاوی پرچم های اتمی)

متن: rmsd

مقادیر قابل قبول: Z یا O، B، X، Y

توضیحات: اگر refPositionsFile یک پرونده PDB است که شامل تمام اتم های توپولوژی می باشد، ممکن است این گزینه برای تنظیم کدام قسمت PDB برای نشانه گذاری مختصات مرجع برای اتم ها فراهم شود.

✓ refPositionsColValue (پرچم انتخاب اتم در ستون PDB)

متن: rmsd

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

توضیحات: در صورت تعریف، این مقدار در ستون refPositionsCol PDB از پرونده refPositionsFile را مشخص می کند که موقعیت های اتمی برای چه چیزی خوانده می شود. در غیر این صورت، تمام موقعیت هایی با ارزش غیر صفر خوانده می شوند.

این مؤلفه یک عدد واقعی مثبت (در درجه A) را برمی گرداند.

استفاده پیشرفته از مولفه rmsd.

در کاربرد استاندارد همانطور که در بالا توضیح داده شد، مؤلفه rmsd حداقل RMSD را محاسبه می کند، یعنی مختصات فعلی به صورت بهینه بر روی مختصات مرجع مشابه که برای محاسبه مقدار RMSD استفاده می شوند، قرار می گیرند. خود تناسب توسط جسم گروه اتمی انجام می شود، که پارامترهای آن به طور خودکار توسط مؤلفه rmsd تنظیم می شوند. با این حال، برای کاربردهای بسیار خاص، کنترل فرآیند اتصالات به طور جداگانه از تعریف مختصات مرجع، ارزیابی انواع مختلف مقادیر RMSD غیر حداقل مفید است. این امر می تواند با تنظیم گزینه های مرتبط (بازپس گیری و غیره) صریحاً در بلوک گروه اتمی به دست آید. این موارد برای موارد غیر استاندارد زیر امکان پذیر است:

- * استفاده از ترجمه بهینه، اما هیچ چرخشی (rotateReference خاموش)، برای بایاس یا محدود کردن شکل و جهت گیری، اما موقعیت گروه اتمی نیست.

- * چرخش بهینه، و بدون ترجمه (translateReference خاموش)، برای

بایاس یا محدود کردن شکل و موقعیت، اما جهت گیری گروه اتمی نیست.

- * غیرفعال کردن استفاده از ترجمه های مناسب بهینه سازی شده، که به مولفه RMSD امکان انحراف اتم ها از موقعیت های ثابت در قاب آزمایشگاهی را رمزگشایی می کند: این امر باعث می شود محدودیت های موقعیتی سفارشی در ماژول Colvars وجود داشته باشد.
- * تناسب موقعیتهای اتمی در مختصات مرجع مختلف از آنچه در محاسبات RMSD مورد استفاده قرار می گیرد.
- * چرخش بهینه و / یا ترجمه از یک گروه اتمی جداگانه، تعریف شده از طریق fittingGroup: RMSD انحراف از مختصات مرجع را در یک قاب جداگانه و متحرک منعکس می کند.

eigenveector: طرح ریزی مختصات اتمی بر روی یک بردار.

بلوک {eigenveector,...} پیش بینی مختصات گروهی از اتم ها (یا دقیق تر انحرافات آنها از مختصات مرجع) را بر روی یک بردار در R^{3n} تعریف می کند، جایی که n تعداد اتم های گروه است. مقدار محاسبه شده کل پیش بینی است:

$$p(\{\mathbf{x}_i(t)\}, \{\mathbf{x}_i^{(ref)}\}) = \sum_{i=1}^n \mathbf{v}_i \cdot \left(U(\mathbf{x}_i(t) - \mathbf{x}_{cog}(t)) - (\mathbf{x}_i^{(ref)} - \mathbf{x}_{cog}^{(ref)}) \right), \quad (13.6)$$

همانطور که در مؤلفه U، rmsd ماتریس چرخش بهینه است، $\mathbf{x}_{cog}(t)$ و $\mathbf{x}_{cog}(ref)$ به ترتیب مراکز هندسه موقعیتهای فعلی و مرجع هستند و $\mathbf{v}_i$ مؤلفه های بردار برای هر اتم هستند. گزینه های مثال برای $(\mathbf{v}_i)$ یک عامل ویژه از ماتریس کوواریانس (حالت ضروری) یا یک حالت عادی سیستم است. فرض بر این است که در $\mathbf{v}_i = 0$ غیر این صورت، ماژول Colvars هنگام خواندن آنها از پیکربندی، $\mathbf{v}_i$ را بطور خودکار متمرکز می کند. لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

- ✓ atoms: تعریف اتم ها (مولفه rmsd) را ببینید
- ✓ refPositions: تعریف تعریف پیشنهادات (مولفه rmsd) را ببینید
- ✓ refPositionsFile: به تعریف RefPositionsFile (مولفه rmsd) مراجعه کنید
- ✓ refPositionsCol: تعریف refPositionsCol (مولفه rmsd) را ببینید
- ✓ refPositionsColValue: تعریف refPositionsColValue (مولفه rmsd) را ببینید
- ✓ vector (اجزای بردار)

زمینه: eigenveector

مقادیر قابل قبول: لیست جداگانه (x, y, z) از فاصله

توضیحات: این گزینه (متقابل منحصر به فرد با vectorFile) مقادیر مؤلفه های بردار را تعیین می کند

- ✓ vectorFile (پرونده PDB حاوی مؤلفه های بردار)

زمینه: eigenveector

مقادیر قابل قبول: نام پرونده UNIX

توضیحات: این گزینه (به طور متقابل با وکتور) نام یک فایل PDB را تعیین می کند که در آن اجزای برداری از قسمت های X، Y و Z خوانده می شوند. توجه: پرونده PDB دارای اعداد دقیق و ثابت است: در بعضی موارد ممکن است بردار دقیقاً نمایش داده نشود و به جای آن باید از بردار استفاده شود.

- ✓ vectorCol (ستون PDB برای نشانه گذاری اتم های شرکت کننده استفاده می شود)

زمینه: eigenveector

مقادیر قابل قبول: O یا B

توضیحات: مشابه با atomsCol.

- ✓ vectorColValue (مقدار استفاده شده برای نشانه گذاری اتم های شرکت کننده در فایل PDB)

زمینه: eigenveector

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

توضیحات: مشابه با atomsColValue.

- ✓ differenceVector (بردار ۳ بعدی تفاوت بین بردار و بازتاب ها است)

زمینه: eigenveector

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: اگر این گزینه روشن باشد، اعداد ارائه شده توسط وکتور یا vectorFile به عنوان مجموعه ای دیگر از موقعیت ها تفسیر می شوند، $\mathbf{x}'_i$: وکتور $\mathbf{v}_i$ سپس به عنوان $\mathbf{v}_i$ یا $\mathbf{x}'_i - \mathbf{x}(ref)_i$ تعریف می شود.

این اجازه می دهد تا به راحتی یک ξ colvar به عنوان یک پیش بینی در مورد تحول خطی بین دو مجموعه موقعیت، «A» و «B» تعریف شود. برای راحتی، این بردار همچنین نرمال می شود به طوریکه $\xi = 0$ وقتی اتم ها در مجموعه موقعیت های «A» و $\xi = 1$ در مجموعه موقعیت های «B» قرار دارند.

این مؤلفه عددی را (در درجه آنگستروم) برمی گرداند، که مقدار آن بین کوچکترین و بزرگترین موقعیتهای مطلق در سلول واحد در طی شبیه سازی ها متغیر است (همچنین distanceZ مراجعه کنید). به دلیل عادی سازی در معادله. ۱۳/۶، این محدوده به تعداد اتم های درگیر بستگی ندارد.

gyration: شعاع gyration گروهی از اتمها.

بلوک {gyration,...} پارامترهای محاسبه شعاع gyration گروهی از موقعیتهای اتمی را تعریف می کند: $\{\mathbf{x}_1(t), \mathbf{x}_2(t), \dots, \mathbf{x}_N(t)\}$ با توجه به مرکز هندسه، $\mathbf{x}_{cog}(t)$:

$$R_{\text{gyr}} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\mathbf{x}_i(t) - \mathbf{x}_{\text{cog}}(t)|^2} \quad (13.7)$$

این مؤلفه باید دارای یک بلوک $\{\text{atom} \dots\}$ برای تعریف گروه اتمی باشد و عدد مثبتی را نشان دهد که در درجه A بیان شده است.

لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ atoms: تعریف اتم ها (مولفه rmsd) را ببینید

inertia: لحظه کل عدم تحرک گروهی از اتمها.

اینرسی بلاک $\{\dots\}$ پارامترها را برای محاسبه لحظه کل عدم تحرک گروهی از موقعیتهای اتمی $\{\mathbf{x}_1(t), \mathbf{x}_2(t), \dots, \mathbf{x}_N(t), t\}$ با توجه به مرکز هندسه آنها تعریف می کند. $\text{xcog}(t)$:

$$I = \sum_{i=1}^N |\mathbf{x}_i(t) - \mathbf{x}_{\text{cog}}(t)|^2 \quad (13.8)$$

توجه داشته باشید که تمام جرمهای اتمی برای سادگی روی \ تنظیم می شوند. این مؤلفه باید دارای یک بلوک $\{\text{atoms} \dots\}$ برای تعریف گروه اتمی باشد و عدد مثبتی را بیان کند که در درجه A۲ بیان شده است.

لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ atoms: تعریف اتم ها (مولفه rmsd) را ببینید

inertiaZ: لحظه کل عدم تحرک گروهی از اتمهای اطراف محور انتخابی.

بلوک $\{\text{inertiaZ} \dots\}$ پارامترهایی را برای محاسبه مؤلفه در امتداد محور e از لحظه تحرک گروهی از موقعیتهای اتمی $\{\mathbf{x}_1(t), \mathbf{x}_2(t), \dots, \mathbf{x}_N(t), t\}$ با توجه به مرکز هندسه، $\text{xcog}(t)$ تعریف می کند:

$$I_e = \sum_{i=1}^N ((\mathbf{x}_i(t) - \mathbf{x}_{\text{cog}}(t)) \cdot \mathbf{e})^2 \quad (13.9)$$

توجه داشته باشید که تمام جرمهای اتمی برای سادگی روی \ تنظیم می شوند. این مؤلفه باید دارای یک بلوک $\{\text{atoms} \dots\}$ اتم برای تعریف گروه اتمی باشد و عدد مثبتی را بیان کند که در درجه A۲ بیان شده است.

لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ atoms: تعریف اتم ها (مولفه rmsd) را ببینید

✓ axis (محور پیش بینی (A°))

متن: اینرسی

مقادیر قابل قبول: (x, y, z) سه گانه

مقدار پیش فرض: (۱/۰, ۰/۰, ۰/۰)

توضیحات: سه مؤلفه این بردار محور ریزی (هنگام نرمال شدن) را تعریف می کند.

جهت گیری: جهت گیری از مختصات مرجع.

بلوک $\{\text{orientation} \dots\}$ همان چرخش بهینه را که در مؤلفه rmsd به کار رفته است برمی گرداند تا مختصات $\{\mathbf{x}_i(t)\}$ را بر روی مجموعه ای از مختصات مرجع $\{\mathbf{x}(\text{ref})_i\}$ قرار دهد. چنین مؤلفه ای بردار چهار بعدی $q = (q^0, q^1, q^2, q^3)$ با $q^0 = 1$ برمی گرداند. این quaternion چرخش بهینه $\{\mathbf{x}(\text{ref})_i\} \rightarrow \{\mathbf{x}_i(t)\}$ را با توجه به فرمالیسم در مرجع بیان می کند [۴۶]. (q^0, q^1, q^2, q^3) quaternion همچنین می تواند به صورت $(2/\cos(\theta), 2/\sin(\theta))$ نوشته شود، جایی که θ زاویه است و u محور عادی چرخش است. به عنوان مثال، چرخش ۹۰ درجه در اطراف محور z به صورت «(۰/۷۰۷, ۰/۰, ۰/۰, ۰/۷۰۷)» بیان شده است. اسکریپت quaternion۲matrix.tcl توابع Tcl را برای تبدیل به و از یک ماتریس چرخش 4×4 با فرمت مناسب برای استفاده در VMD فراهم می کند.

در مورد مولفه rmsd، گزینه های موجود عبارتند از: atoms، refPositionsFile، refPositionsCol و refPositionsColValue. توجه: refPositions و refPositionsFile مجموعه ای از موقعیت هایی را نشان می دهد که چرخش بهینه محاسبه می شود، اما این چرخش برای مختصات اتم های در نظر گرفته نشده است: در عوض از آن برای تعریف خود متغیر استفاده می شود.

لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ atoms: تعریف اتم ها (مولفه rmsd) را ببینید

✓ refPositions: تعریف refPositions (مولفه rmsd) را ببینید

✓ refPositionsFile: به تعریف RefPositionsFile (مؤلفه rmsd) مراجعه کنید

✓ refPositionsCol: تعریف refPositionsCol (مولفه rmsd) را ببینید

✓ refPositionsColValue: تعریف refPositionsColValue (مولفه rmsd) را ببینید

✓ closestToQuaternion (چرخش مرجع)

زمینه: جهت گیری

مقادیر قابل قبول: چهار گانه «(q^۰, q^۱, q^۲, q^۳)»

مقدار پیش فرض: (۰/۰, ۰/۰, ۰/۰, ۱/۰) (چرخش «null»)

توضیحات: بین دو چهارم معادل (q^۰, q^۱, q^۲, q^۳) و (q^۰-, q^۱-, q^۲-, q^۳-) نزدیکتر به (۰/۰, ۰/۰, ۰/۰, ۱/۰) انتخاب می شود. این امر هنگامی که مقادیر نمونه زیرمجموعه کمتری از چرخشهای ممکن است، تجسم مسیر colvar را ساده می کند. توجه: این فقط بر خروجی تأثیر می گذارد، هرگز پویایی نیست.

نکته: متوقف کردن چرخش یک پروتئین. برای متوقف کردن چرخش یک ماکرومولکول

دراز در محلول (و استفاده از یک جعبه ناهمسانگرد برای صرفه جویی در مولکول های آب)، می توان یک قطعه colvar را با یک جزء جهت یابی تعریف کرد، و آن را محدود به جهت گیری هارمونیک در اطراف چرخش هویت، ($0^\circ, 90^\circ, 180^\circ$). فقط جهت گیری کلی ماکرومولکول تحت تأثیر قرار می گیرد، و نه درجه های درونی آزادی آن. کاربر همچنین باید مراقب باشد که ماکرومولکول توسط یک زنجیره ساخته شده باشد، یا بسته دیگر را غیرفعال کند.

orientationAngle: زاویه چرخش از مختصات مرجع.

بلوک orientationAngle {...} همان گزینه های پایه را با جهت گیری مؤلفه قبول می کند: اتم ها، بازپرداخت ها، refPositionsCol، refPositionsFile و refPositionsColValue. مقدار برگشتی زاویه چرخش θ بین موقعیتهای فعلی و مرجع است. این زاویه در درجه ای در محدوده $[0^\circ; 180^\circ]$ بیان می شود.

لیست کلید واژه ها (هم چنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ atoms: تعریف اتم ها (مولفه rmsd) را ببینید

✓ refPositions: تعریف refPositions (مولفه rmsd) را ببینید

✓ refPositionsFile: به تعریف RefPositionsFile (مؤلفه rmsd) مراجعه کنید

✓ refPositionsCol: تعریف refPositionsCol (مولفه rmsd) را ببینید

✓ refPositionsColValue: تعریف refPositionsColValue (مولفه rmsd) را ببینید

orientationProj: کسینوس زاویه چرخش از مختصات مرجع.

بلوک orientationProj {...} همان گزینه های پایه را با جهت گیری مؤلفه قبول می کند: اتم ها، بازپرداخت ها، refPositionsCol، refPositionsFile و refPositionsColValue.

مقدار برگشتی زاویه چرخش θ بین موقعیتهای فعلی و مرجع است.

لیست کلید واژه ها (هم چنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ atoms: تعریف اتم ها (مولفه rmsd) را ببینید

✓ refPositions: تعریف refPositions (مولفه rmsd) را ببینید

✓ refPositionsFile: به تعریف RefPositionsFile (مؤلفه rmsd) مراجعه کنید

✓ refPositionsCol: تعریف refPositionsCol (مولفه rmsd) را ببینید

✓ refPositionsColValue: تعریف refPositionsColValue (مولفه rmsd) را ببینید

spinAngle: زاویه چرخش حول محور معین.

چرخش کامل که با جهت گیری توصیف شده است می تواند به صورت اختیاری به دو زیرشکننده تقسیم شود: یکی چرخش «چرخش» در اطراف e، و دیگر چرخش «شیب» در اطراف یک محور متعادل به spinAngle. e. مؤلفه زاویه چرخش زیر چرخشی «چرخش» در اطراف e را اندازه گیری می کند.

لیست کلید واژه ها (هم چنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ atoms: تعریف اتم ها (مولفه rmsd) را ببینید

✓ refPositions: تعریف refPositions (مولفه rmsd) را ببینید

✓ refPositionsFile: به تعریف RefPositionsFile (مؤلفه rmsd) مراجعه کنید

✓ refPositionsCol: تعریف refPositionsCol (مولفه rmsd) را ببینید

✓ refPositionsColValue: تعریف refPositionsColValue (مولفه rmsd) را ببینید

✓ axis (محور چرخش ویژه A°)

متن: شیب

مقادیر قابل قبول: (x, y, z) سه گانه

مقدار پیش فرض: ($0^\circ, 90^\circ, 180^\circ$)

توضیحات: سه مؤلفه این بردار محور چرخش ویژه را برای محاسبه اجزای شیب و SpinAngle تعریف می کند.

spinAngle: مؤلفه یک زاویه (به درجه) را در فاصله زمانی دوره ای باز می گرداند $[0^\circ; 180^\circ]$.

توجه: مقدار spinAngle تقریباً در همه جا یک تابع مداوم است، به استثنای تنظیمات با زاویه «شیب» مربوطه برابر با 180° (یعنی مؤلفه شیب برابر با -1 است): در این موارد، spinAngle تعریف نشده است. اگر چنین تنظیماتی پیش بینی می شود، با استفاده از همان محور e، یک colvar شیب را تعیین کنید، و آن را با دیواره پایین تر به دور از -1 مهار کنید.

شیب: کسینوس چرخش متعامد به یک محور معین.

شیب مؤلفه میزان حرکت زاویه زیر چرخش «شیب» را اندازه گیری می کند، که با چرخش «چرخش» همراه است چرخش کامل گروهی از اتم ها را فراهم می کند. کسینوس زاویه شیب به جای خود زاویه شیب پیاده سازی شده است، زیرا دومی حتی برای یک سیستم ایزوتروپیک به طور ناهموار توزیع می شود: به عنوان یک قیاس، زاویه θ را در سیستم مختصات کروی در نظر بگیرید. شیب مؤلفه به گزینه های مشابه spinAngle متکی است، از جمله تعریف محور e. مقادیر شیب اعداد واقعی در فاصله هستند $[-1; 1]$: مقدار 1 جهت گیری کاملاً موازی با e (زاویه شیب $= 0^\circ$) را نشان می دهد، و مقدار -1 represents نشان دهنده جهت گیری ضد موازی است.

لیست کلید واژه ها (هم چنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳/۴/۴):

✓ atoms: تعریف اتم ها (مولفه rmsd) را ببینید

✓ refPositions: تعریف refPositions (مولفه rmsd) را ببینید

✓ refPositionsFile: به تعریف RefPositionsFile (مؤلفه rmsd) مراجعه کنید

✓ refPositionsCol: تعریف refPositionsCol (مولفه rmsd) را ببینید

✓ refPositionsColValue: تعریف refPositionsColValue (مولفه rmsd) را ببینید

✓ axis: تعریف محور (مؤلفه spinAngle) را ببینید

آلفا: محتوای α -مارپیچ از یک بخش پروتئین

$\sin(\varphi N)$, $\cos(\varphi N)$ است. توجه داشته باشید که زوایای φ_1 و ψ_N تأثیر کمی در ترکیب زنجیره دارند و به دنبال اجرای dPCA در نرم افزار آنالیز کارما، دور انداخته می شوند. [۴۹] برای یک مؤلفه اصلی داده شده (بردار ویژه) ضرایب $(k_i)_{i \geq 1}^{N-1}$ ، طرح ریزی ترکیب فعلی ستون فعلی است:

$$\xi = \sum_{n=1}^{N-1} k_{4n-3} \cos(\psi_n) + k_{4n-2} \sin(\psi_n) + k_{4n-1} \cos(\phi_{n+1}) + k_{4n} \sin(\phi_{n+1}) \quad (13.13)$$

dietaryPC علاوه بر موارد زیر، پارامترهای مشابه با جزء آلفا را برای تعریف رزیدوهای مربوطه (anges و Rueue و psfSegID) تعریف می کند:

لیست کلید واژه ها (همچنین گزینه های اضافی را ببینید. ۱۳٫۴٫۴):

- ✓ **residueRange**: تعریف resueRange (جزء آلفا) را ببینید
- ✓ **psfSegID**: تعریف psfSegID (مؤلفه آلفا) را ببینید
- ✓ **hBondCoeff**: تعریف hBondCoeff (جزء آلفا) را ببینید
- ✓ **angleRef**: تعریف angleRef (مؤلفه آلفا) را ببینید
- ✓ **angleTol**: تعریف angleTol (جزء آلفا) را ببینید
- ✓ **hBondCutoff**: تعریف hBondCutoff (جزء آلفا) را ببینید
- ✓ **hBondExpNumer**: تعریف hBondExpNumer (جزء آلفا) را ببینید
- ✓ **hBondExpDenom**: تعریف hBondExpDenom (جزء آلفا) را ببینید
- ✓ **vectorFile** (فایل حاوی دوسطحی PCA eigenvector (s))

زمینه: dihedralPC

مقادیر قابل قبول: نام فایل

توضیحات: یک فایل متنی حاوی ضرایب ناقل ناقل PCA بر روی مختصات کسین و سینوس. بردارها باید در ستونها ترتیب داده شوند، مانند پرونده های خروجی توسط کارما. [۴۹]

✓ **vectorNumber** (فایل حاوی دوسطحی s PCA eigenvector))

زمینه: dihedralPC

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

توضیحات: تعداد ویژه ای که برای این مؤلفه مورد استفاده قرار می گیرد.

۱۳٫۴٫۲ کلیدواژه های پیکربندی مشترک بین همه ی مولفه ها

برای به دست آوردن ترکیبی چند جمله ای یا هر کارکرد تهیه شده توسط کاربر توسط عملکرد scriptedFunction، گزینه های زیر می تواند برای هر یک از اجزای colvar فوق استفاده شود.

✓ **name** (نام این مؤلفه)

متن: هر جزء

مقادیر قابل قبول: رشته

مقدار پیش فرض: نوع مؤلفه + شناسه عددی

توضیحات: نام رشته ای حساس به مورد منحصر به فرد است که به مائول Colvars اجازه می دهد تا این مؤلفه را شناسایی کند. برای مثال، هنگام ترکیب چندین مؤلفه از طریق یک تابع scriptedF، مفید است.

✓ **scalable** (تلاش برای محاسبه این مؤلفه به صورت موازی؟)

متن: هر جزء

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: در صورت وجود، روشن است

توضیحات: اگر روی (پیش فرض) تنظیم شده باشد، مائول Colvars سعی خواهد کرد این مؤلفه را بطور موازی محاسبه کند تا سربار کاهش یابد. اینکه آیا این گزینه در دسترس است بستگی به نوع مؤلفه دارد: در حال حاضر پشتیبانی شده عبارتند از: فاصله، Z، distanceXY، فاصله Vec، فاصله دایرکتوری، زاویه و شکل. این پرچم بر هزینه محاسباتی تأثیر می گذارد، اما بر نتایج عددی تأثیر نمی گذارد: بنابراین، فقط باید برای اهداف اشکال زدایی یا آزمایش خاموش شود.

۱۳٫۴٫۳ استفاده ی پیشرفته و ملاحظات خاص

اجزای دوره ای

مؤلفه های زیر تعداد واقعی را که در یک بازه دوره ای قرار دارند برمی گرداند:

✓ **dihedral**: زاویه پیچشی بین چهار گروه؛

✓ **spinAngle**: زاویه چرخش حول محور از پیش تعریف شده در بهترین حالت از مجموعه

مختصات مرجع.

در برخی شرایط، فاصله Z نیز می تواند دوره ای باشد، یعنی وقتی که شرایط مرزی دوره ای (PBC) در شبیه سازی تعریف می شود و محور distanceZ موازی با یک بردار سلول واحد است.

کلمات کلیدی زیر می توانند در مؤلفه های دوره ای استفاده شوند (و در جای دیگر غیرقانونی هس تند):

✓ **Period** (دوره مؤلفه)

متن: distanceZ

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

مقدار پیش فرض: ۰٫۰

توضیحات: تنظیم این عدد، امکان استفاده از distZZ را به عنوان یک مؤلفه دوره ای فراهم می کند: به طور پیش فرض، فاصله Z به صورت دوره ای محسوب نمی شود. کلمه کلید پشتیبانی می شود، اما در داخل کلیه یا spinAngle بی ارتباط نیست، زیرا دوره آنها همیشه ۳۶۰ درجه است.

✔ wrapAround (مرکز فاصله زمانی بسته بندی متغیرهای دوره ای)

زمینه: distanceZ، دو سطحی یا spinAngle

مقادیر قابل قبول: اعشاری

مقدار پیش فرض: ۰٫۰

توضیحات: به طور پیش فرض، مقادیر اجزای دوره ای در حدود صفر متمرکز شده اند، از $-P/2$ تا $P/2$ ، که در آن دوره P است. تنظیم این شماره فاصله بین این مقدار است. این می تواند برای سهولت در خروجی مفید باشد، یا پایین تر و بالایی را به ترتیبی تنظیم کند که در غیر این صورت مجاز نیست.

از نظر داخلی، تمام اختلافات بین دو مقدار یک colvar تناوبی از حداقل سطح تصویر پیروی می کند: آنها بر اساس دو تصویر دوره ای که نزدیک به یکدیگر هستند محاسبه می شوند.

توجه: ترکیبات خطی یا چند جمله ای از اجزای دوره ای ممکن است وقتی قطعات از مرز تناوبی عبور کنند بی معنی می شوند. از چنین ترکیباتی با دقت استفاده کنید: دامنه مقادیر احتمالی هر مؤلفه را در یک شبیه سازی مشخص تخمین بزنید و از wrapAround استفاده کنید تا هر زمان ممکن این مشکل را محدود کنید.

اجزای غیر مقیاس.

هنگامی که یکی از مؤلفه های زیر استفاده می شود، colvar تعریف شده مقداری را نشان می دهد که یک عدد مقیاس پذیر نیست:

✔ distanceVec: وکتور ۳ بعدی فاصله بین دو گروه؛

✔ distanceDir: بردار واحد ۳ بعدی فاصله بین دو گروه؛

✔ orientation: بردار واحد ۴ بعدی که نشان دهنده چرخش مناسب ترین حالت از مجموعه

مختصات مرجع است.

فاصله بین دو بردار واحد ۳ بعدی به عنوان زاویه بین آنها محاسبه می شود. فاصله بین دو کوآرنیم به عنوان زاویه بین دو بردار واحد ۴ بعدی محاسبه می شود: از آنجا که جهت گیری نشان داده شده توسط q برابر با مسیری است که با -q نشان داده می شود، فاصله بین دو کوآرتر با توجه به نزدیکترین دو تصویر متقارن محاسبه می شود. .

اجزای غیر مقیاس محدودیت های زیر را دارند:

✔ محاسبه کل نیروها (گزینه outputTotalForce) در حال حاضر عملی نشده است.

✔ هر colvar فقط می تواند یک جزء غیر مقیاس داشته باشد.

✔ برنده بر روی شبکه (abf)، هیستوگرام و متادینامیک با استفاده از Grid) در حال حاضر برای

ستونها بر اساس چنین مؤلفه هایی اجرا نمی شود.

توجه: در حالی که این محدودیتها بر روی ستونهای منفرد بر اساس اجزای غیر مقیاس

اعمال می شود، هیچ محدودیتی بر تعداد ستونهای مقیاس تنظیم نشده است. برای

محاسبه هیستوگرام های چند بعدی و PMF ها، از مجموعه هایی از ستون های رنگی با

اندازه دلخواه استفاده کنید.

محاسبه کل نیروها.

علاوه بر محدودیت هایی که به دلیل نوع مقدار محاسبه شده (مقیاس پذیر یا غیر

مقیاس پذیر) وجود دارد، در محاسبه نیروی کل، می توان محدودیت نهایی ایجاد کرد

(گزینه inputTotalForce یا استفاده از تمایل abf). کل نیروهای موجود در حال حاضر

فقط برای مؤلفه های زیر در دسترس هستند: فاصله، فاصله Z، فاصله XY، زاویه، دو

سطحی، rmsd، eigenveector و gyration.

۱۳٫۴٫۴ Linear and polynomial combinations of components

برای گسترش مجموعه ای از تعاریف احتمالی $\xi(r)$ (colvars)، چند مؤلفه $q_i(r)$ را می توان با این

فرمول خلاصه کرد:

$$\xi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i [q_i(\mathbf{r})]^{n_i} \quad (13.14)$$

که در آن هر مؤلفه با ضریب منحصر به فرد c_i (۱٫۰ به طور پیش فرض) نماینده عدد صحیح مثبت n_i (۱ به طور پیش فرض) ظاهر می شود.

هر مجموعه ای از اجزاء می توانند درون یک colvar ترکیب شوند، به شرط آنکه آنها همان نوع

مقادیر (مقیاس، بردار واحد، بردار یا چهارگوش) را برگردانند. به طور پیش فرض، colvar مجموع

اجزای آن است. با استفاده از پارامترهای زیر که برای همه مؤلفه ها مشترک است، می توانید ترکیب

خطی یا چند جمله ای (معادله (۱۳٫۱۴)) بدست آورید:

✔ componentCoeff (ضریب این مؤلفه در colvar)

متن: هر جزء

مقادیر قابل قبول: اعشاری

مقدار پیش فرض: ۱٫۰

توضیحات: قبل از افزودن به مجموع، ضریب که این مؤلفه ضرب می شود (بعد از افزایش

به مؤلفه Exp) را تعیین می کند.

✓ componentExp (نمایه این مؤلفه در colvar)

متن: هر جزء

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح

مقدار پیش فرض: ۱

توضیحات: قبل از افزودن به جمع، قدرتی را که مقدار این مؤلفه در آن بالا می رود، تعریف می کند. هنگامی که این نمایانگر از ۱ (مقدار غیرخطی) متفاوت باشد، کل نیروهای و نیروی Jacobian در دسترس نیستند، و این امر باعث می شود که colvar برای محاسبات ABF مناسب نباشد.

مثال: برای تعریف میانگین یک colvar در قسمت‌های مختلف سیستم، به سادگی در یک بلوک colvar یک سری از اجزای یک نوع را تعیین کنید (برای گروه‌های اتمی مختلف اعمال می شود)، و به هر یک از مؤلفه ها یک componentCoeff از ۱/N اختصاص دهید.

۱۳٫۴٫۵ Colvars as scripted functions of components

هنگامی که اسکریپت پشتیبانی می شود (به طور پیش فرض در VMD)، ممکن است یک colvar به عنوان یک ترکیب خطی یا چند جمله ای به عنوان یک عملکرد اختصاصی از اجزای آن تعریف شود. هنگام اجرای توابع عمومی مختصات دکارتی و نه توابع اجزای موجود، مؤلفه دکارتی ممکن است بسیار مفید باشد.

نمونه ای از colvar رسم شده پیچیده در مثال ۱۰، در قالب متغیرهای جمعی مبتنی بر مسیری که توسط Branduardi و همکاران تعریف شده است آورده شده است. روشهای مورد نیاز Tcl در دایرکتوری colvartools ارائه شده است.

✓ scriptedFunction (محاسبه colvar به عنوان یک تابع نویسی شده از اجزای آن)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: رشته

توضیحات: اگر این گزینه مشخص شود، colvar به عنوان یک تابع scripted از مقادیر اجزای آن محاسبه می شود. برای این منظور، کاربر باید دوروش Tcl را تعریف کند: محاسبه <scriptttedFunction> و محاسبه گر <scriptttedFunction>، هر دو پارامترهای زیادی را قبول می کنند که colvar دارای مؤلفه ها است. مقادیر مؤلفه ها به ترتیب مشخص شده توسط رشته های نام طبقه بندی شده آنها به آن مراحل منتقل می شوند. توجه داشته باشید که اگر همه مؤلفه ها از یک نوع باشند، اسامی پیش فرض آنها به ترتیبی که تعریف شده اند طبقه بندی می شوند، به طوری که فقط برای ترکیبات اجزای انواع مختلف باید نام ها مشخص شود. حساب <scriptttedFunction> باید یک مقدار از

نوع <scribtedFunctionType>، متناسب با مقدار colvar را برگرداند. محاسبه گر <scriptttedFunction> باید یک لیست Tcl را که مشتقات تابع را با توجه به هر مؤلفه دارد، برگرداند. اگر هم عملکرد و هم بعضی از مؤلفه ها بردار هستند، شیب واقعاً یک ماتریس Jacobian است که باید به عنوان یک بردار خطی به ترتیب ردیف اصلی منتقل شود، یعنی برای یک تابع $\nabla x f_1(xz): \nabla x f_2(xz)$.

✓ scriptedFunctionType (نوع مقدار برگشتی توسط scripted colvar)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: رشته

مقدار پیش فرض: مقیاس پذیر

توضیحات: اگر یک colvar به عنوان یک تابع scripted تعریف شده باشد، نوع آن با انواع اجزای آن محدود نمی شود. با استفاده از این پرچم، کاربر می تواند مشخص کند که colvar مقیاس پذیر است یا یکی از انواع بردار زیر است: وکتور ۳ (یک بردار سه بعدی)، واحد وکتور واحد ۳ (یک بردار سه بعدی عادی) یا کوآترنیون واحد (یک چهارم نرمال) یا بردار (برداری که اندازه آن توسط scriptedFunctionVectorSize مشخص شده است). مقادیر غیر مقیاس باید به عنوان لیست های دارای فاصله فضایی، به عنوان مثال منتقل شوند. «۳.۲۱».

✓ scriptedFunctionVectorSize (ابعاد مقدار بردار يك colvar اسکریپت شده)

متن: colvar

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

توضیحات: این پارامتر فقط زمانی معتبر است که scriptedFunctionType روی بردار تنظیم شده باشد. طول بردار مقدار colvar را که توسط تابع بازگردانده می شود، تعریف می کند.

همه روشهای بایاس و آنالیز (اجرا، هارمونیک، هیستوگرام و متادینامیک) گزینه های زیر را

تشخیص می دهند:

✓ name (شناسه تمایل)

متن: تعصب colvar

مقادیر قابل قبول: رشته

مقدار پیش فرض: <نوع تمایل> <شاخص بایاس>

توضیحات: این رشته برای شناسایی روش تمایل یا آنالیز در پیام های خروجی و نام برخی

از فایل های خروجی استفاده می شود.

✓ Colvars (متغیرهای جمعی درگیر)

متن: بایاس colvar

مقادیر قابل قبول: لیست جدا از فضا از نامهای colvar

توضیحات: این گزینه تمام ستونهایی را که این تمایل یا آنالیز در آن اعمال خواهد شد، با

نام انتخاب می کنید.

✓ outputEnergy (انرژی جریان تمایل را در پرونده مسیر بنویسید)

متن: بایاس colvar

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: اگر این گزینه انتخاب شده باشد و colvarsTrajFrequency صفر نباشد،

مقدار فعلی انرژی بایاس در طول شبیه سازی به فایل مسیر نوشته خواهد شد.

۱۳٫۵٫۱ Adaptive Biasing Force

برای توضیحات کامل در مورد روش Adaptive Biase Force، به مرجع مراجعه کنید [۵۱]. برای

جزئیات بیشتر در مورد این اجرای، به منابع [۵۲] و [۵۳] مراجعه کنید. هنگام انتشار تحقیقاتی که از

این قابلیت استفاده می کند، لطفاً به منابع [۵۱] و [۵۳] استناد کنید.

استفاده متناوب از این ویژگی، استفاده از پتانسیل های بایاس زبانه بندی شده سفارشی در یک

یا چند ستون است. inputPrefix و updateBias را در زیر مشاهده کنید. ترکیبی از ABF با ویژگی

Lagrangian گسترده شده (۱۳٫۲٫۴) از متغیرها، تولید نوع سیستم گسترش یافته ABF (۱۳٫۵٫۲) را

تولید می کند.

ABF بر اساس طرح ادغام ترمودینامیکی (TI) برای محاسبه پروفایل انرژی آزاد است. انرژی آزاد به

عنوان تابعی از مجموعه متغیرهای جمعی $i = \{i\} \in [n, 1]$ ، از توزیع کانونی $P(\xi)$ تعریف شده است:

$$A(\xi) = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{P}(\xi) + A_0 \quad (13.15)$$

در فرمالیسم TI، انرژی آزاد از شیب آن بدست می آید، که به طور کلی به شکل میانگین نیرویی که

بر روی آن اعمال می شود، محاسبه می شود:

$$\nabla_{\xi} A(\xi) = \langle -F_{\xi} \rangle_{\xi} \quad (13.16)$$

چندین فرمول که شکل (۱۳٫۱۶) هستند ارائه شده است. این پیاده سازی تا حدودی به فرمول

کلاسیک [۵۴]، و تا حدی به یک طرح متنوع تر که منشأ یک اثر توسط Ruiz-Montero و همکاران

است متکی است. [۵۵]، تعمیم یافته توسط den Otter [۵۶] و توسط متغیرهای Ciccotti و

همکاران به چندین متغیر گسترش یافت. [۵۷] یک سیستم را در معرض محدودیت های فرم $\sigma k(x)$

$= 0$. در نظر بگیرید. اجازه دهید $i \in [n, 1]$ زمینه برداری دلخواه انتخاب شود $R^3N \rightarrow R^3N$ که

برای همه i, j و k تأیید می کند:

$$\mathbf{v}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \xi_j = \delta_{ij} \quad (13.17)$$

$$\mathbf{v}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \sigma_k = 0 \quad (13.18)$$

سپس موارد زیر را نگه می دارد:

$$\frac{\partial A}{\partial \xi_i} = \langle \mathbf{v}_i \cdot \nabla_{\mathbf{x}} V - k_B T \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v}_i \rangle_{\xi} \quad (13.19)$$

جایی که V عملکرد انرژی بالقوه است. $\mathbf{v}_i$ را می توان به عنوان جهت تعادل نیرویی که در متغیر i

ی اندازه گیری می شود، تفسیر کرد، در حالی که اصطلاح دوم در میانگین به سهم آنتروپی هندسی

مربوط می شود که به عنوان یک اصلاح ژاکوبی در فرمالیسم کلاسیک ظاهر می شود [۵۴].

شرط (۱۳٫۱۷) اظهار داشت که جهتی که در آن نیروی کل بر روی آن اندازه گیری می شود، شیب

متعادل به شیب i است، بدین معنی که نیروی اندازه گیری شده در i بر روی i عمل نمی کند.

معادله (۱۳٫۱۸) به این معنی است که نیروهای محدود کننده از جهتهایی که در آن شیب انرژی آزاد

اندازه گیری می شود، متعارف هستند، به طوری که این اندازه گیری به طور مؤثر بر روی درجه های

نامحدود آزادی انجام می شود.

در چارچوب ABF ، F_{ξ} در سطلهای محدوده سائز ξ جمع می شود و بدین ترتیب تخمین گرادیان انرژی

آزاد را مطابق معادله ارائه می دهد (۱۶/۱۳). نیروی جانبی که در طول متغیرهای جمعی برای غلبه بر موانع انرژی آزاد به کار گرفته می شود، محاسبه می شود:

$$\mathbf{F}^{ABF} = \alpha(N_{\xi}) \times \nabla_{\mathbf{x}} \tilde{A}(\xi) \quad (13.20)$$

که در آن برآورد فعلی گرادیان انرژی آزاد را در نقطه فعلی در زیر فضای متغیر جمعی نشان می دهد، و $\alpha(N)$ یک عامل مقیاس گذاری است که از ° به ۱ افزایش می یابد به عنوان تعداد محلی نمونه N افزایش می یابد. برای جلوگیری از اثرات عدم تعادل در مرحله اولیه شبیه سازی، هنگامی که تخمین شیب دارای یک واریانس بزرگ است. برای جزئیات بیشتر به پارامتر fullSamples در زیر مراجعه کنید. با شروع نمونه گیری از فضای فاز، برآورد به تدریج تصفیه می شود. نیروی تمایل وارد شده در معادلات حرکت تضمین می کند که در سطل محور اطراف، نیروهایی که در امتداد متغیرهای جمعی انتخاب شده عمل می کنند به طور متوسط به صفر رسیده اند. سرانجام، با توجه به اینکه سطح انرژی بی اعتبار از تعصب انطباق پذیرفته شده است، تحول سیستم به طور عمده توسط انتشار اداره می شود. اگرچه این پیاده سازی ABF در اصل می تواند در بعد دلخواه مورد استفاده قرار گیرد، اما یک فضای متغیر جمعی با ابعاد بالاتر احتمالاً منجر به مشکلات نمونه برداری خواهد شد. معمولاً تعداد متغیرها یکی یا دو است.

الزامات ABF در مورد متغیرهای جمعی

شرایط زیر باید برای یک شبیه سازی ABF امکان پذیر باشد و یک تخمین دقیق از مشخصات انرژی آزاد تولید کند. توجه داشته باشید که این الزامات هنگام استفاده کاربرد ندارد روش ABF با سیستم توسعه یافته (۲/۵/۱۳).

۱. فقط در ترکیبات خطی از اجزای colvar می توان در محاسبات ABF استفاده کرد.
۲. در دسترس بودن نیروهای کل ضروری است. در محاسبات ABF از اجزای colvar زیر استفاده می شود: فاصله، مسافت xy، فاصله z، زاویه، دیواره، غرق شدن، rmsd و eigenveector. گروه های اتمی ممکن است توسط اتم های تصنعی جایگزین نشوند، مگر اینکه در صورت وجود با مشخص کردن oneSiteTotalForce از اندازه گیری نیرو خارج شوند.
۳. تعامد متقابل colvars. در یک محاسبه چند بعدی ABF، معادله (۱۷/۱۳) باید برای هر دو ستون ξ و ζ برآورده شود. موارد مختلفی این شرط تعامد را برآورده می کنند:
۴. ξ و ζ براساس مجموعه های غیر همپوشانی اتم ها تشکیل شده اند.
۵. اتم های درگیر در اندازه گیری نیرو در ξ در تعریف ζ شرکت نمی کنند. این را می توان با استفاده از گزینه oneSiteTotalForce از فاصله، زاویه، و اجزای دیجیتال (به عنوان مثال: زاویه های ψ ، ϕ Ramachandran) بدست آورد.
۶. ξ و ζ از لحاظ ساختاری متعامد هستند. موارد مفید عبارت است از جمع و تفاوت دو مؤلفه یا فاصله z و فاصله xy با استفاده از همان محور.

۷. تعامد متقابل اجزا: هنگامی که چندین مؤلفه در یک colvar جمع می شوند، فرض بر این است که بردارهای آنها vi (معادله ۱۹/۱۳) متقابلاً متعامد هستند. مواردی که در پاراگراف قبل برای colvars توضیح داده شده است، اعمال می شود.

۸. تعامدی بودن ستونها و محدودیتهای: معادله ۱۸/۱۳ به دوروش ساده قابل قبول است، در صورت عدم وجود اتم محدود در اندازه گیری نیرو (نگاه کنید به نکته ۳ در بالا) یا جفت اتمهایی که توسط یک پیوند محدود شده عضو هستند بخشی از یک گروه اتمی هستند که فقط از طریق مرکز آن (مرکز جرم یا مرکز هندسی) در اندازه گیری نیرو مداخله می کند. در حالت دوم، سهم دو اتم در سمت چپ معادله ۱۸/۱۳ لغو می شود. به عنوان مثال، تمام اتمهای یک مولکول آب سفت و سخت TIP۳P را می توان با اطمینان در یک گروه اتمی بکار برد که در یک مؤلفه از راه دور قرار دارد.

پارامترهای ABF

ABF به پارامترهای متغیرهای جمعی بستگی دارد تا شبکه ای که شیب انرژی آزاد در آن محاسبه می شود، تعیین کند. در جهت هر یک از colvar، شبکه از زیر لبه های پایین تا بالا و مرز قرار می گیرد و عرض سطل (فاصله شبکه) توسط پارامتر عرض تنظیم می شود (نگاه کنید به ۱/۲/۱۳). پارامترهای خاص زیر را می توان در بخش تنظیمات ABF تنظیم کرد:

- ✓ name: تعریف نام (روشهای بایاس و تحلیل) را ببینید
- ✓ colvars: به تعریف colvar (روشهای بایاس و تحلیل) مراجعه کنید
- ✓ fullSamples (تعداد نمونه های موجود در سطل قبل از استفاده از ABF)

متن: abf

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

مقدار پیش فرض: ۲۰۰

توضیحات: برای جلوگیری از اثرات عدم تعادل به دلیل نوسانات زیاد نیرو که در امتداد ستونها اعمال می شود، توصیه می شود فقط پس از شروع برآورد، تخمین زده شود. اگر fullSamples غیر صفر باشد، نیروی بایاس کننده اعمال شده توسط ضریب $\alpha(N)$ بین ° تا ۱ مقیاس بندی می شود. اگر تعداد نمونه های N در سطل فعلی بیشتر از fullSamples باشد، فاکتور یکی است. اگر کمتر از نیمی از نمونه های کامل باشد، فاکتور صفر است و هیچ تعصبی اعمال نمی شود. بین این دو آستانه، عامل از یک سطح شیب دار خطی از ° تا ۱ دنبال می کند: $\alpha(N) = (2N / \text{fullSamples}) - 1$.

✓ maxForce (حداکثر مقدار نیروی ABF)

متن: abf

مقادیر قابل قبول: اعشار مثبت (هر قطعه در هر کوثر)

مقدار پیش فرض: غیرفعال است

توضیحات: این گزینه یک کلاه بر بزرگی نیروی تحریک کننده به طور مؤثر توسط این تمایل ABF در هر colvar اعمال می کند. این می تواند در حضور مفردها در PMF مانند دیوارهای سخت مفید باشد، جایی که تفکیک نیرو به طور متوسط بسیار نادرست می شود و باعث می شود که انتشار

colvar در تکینگی گیر کند. برای فعال کردن این درپوش، یک مقدار غیر منفی برای هر colvar ارائه دهید. واحد نیرو kcal / mol است که توسط واحد colvar تقسیم می شود.

✓ hideJacobian (اصطلاح آنتروپی هندسی را از شیب انرژی آزاد محاسبه شده حذف کنید؟)

متن: abf

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خیر

توضیحات: در چند مورد خاص، که مهمترین آنها متغیرهای مبتنی بر فاصله است، تعریف متناوب از پتانسیل میانگین نیرو بطور سنتی استفاده می شود، که اصطلاح jacobian را توصیف نمی کند تا اثر آنتروپی هندسی بر توزیع متغیر را حذف کند. این نتایج، به عنوان مثال، در پتانسیل ذرات ذره از میانگین نیروی صاف بودن در جداسازی های بزرگ. تنظیم این پارامتر بله باعث می شود که داده های خروجی از آن کنوانسیون پیروی کنند، با حذف این سهم از شیب های خروجی در حالی که در داخل از آن اصلاح داخلی را استفاده می کنید تا از نمونه برداری یکنواخت اطمینان حاصل شود. برای ستون های با اجزای متعدد مجاز نیست.

✓ outputFreq (فرکانس (در زمان سنج) که در آن پرونده های داده ABF تازه می شوند)

متن: abf

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

مقدار پیش فرض: فرکانس راه اندازی مجدد مائول Colvars

توضیحات: پرونده های حاوی تخمین گرادیان انرژی آزاد و هیستوگرام نمونه گیری (و PMF در محاسبات یک بعدی) در فاصله زمانی معین روی دیسک نوشته می شوند.

✓ historyFreq (فرکانس (در زمان سنج) که پرونده های تاریخ ABF انباشته می شوند)

متن: abf

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

مقدار پیش فرض: °

توضیحات: اگر این عدد غیر صفر باشد، تخمین گرادیان انرژی و هیستوگرام نمونه گیری (و PMF در محاسبات تک بعدی) در فواصل زمانی معین به پرونده های دیسک اضافه می شوند. نام پرونده های تاریخ از پیشوند مشابه پرونده های خروجی استفاده می کند، با پیوست «hist.».

✓ inputPrefix (پیشوند نام پرونده برای خواندن داده های ABF)

متن: abf

مقادیر قابل قبول: لیست رشته ها

توضیحات: در صورت تنظیم این پارامتر، برای هر مورد موجود در لیست، ABF سعی می کند یک گرادیان و پرونده های نمونه برداری به نام های grad. inputPrefix> و >count. inputPrefix> را بخواند. این کار در هنگام راه اندازی انجام می شود و وضعیت اولیه الگوریتم ABF را تنظیم می کند. داده های کلیه پرونده های ارائه شده به طور مناسب ترکیب می شوند. همچنین، تعریف شبکه (مقادیر حداقل و حداکثر، عرض) همانند اجرای فعلی نیست. این دستور برای جمع آوری داده های

شبیه سازی در مناطق مختلف از فضای متغیر جمعی، یا تغییر مقادیر مرز colvar یا عرض مفید است. توجه داشته باشید که توصیه نمی شود که از آن برای جابجایی به پهنای کوچکتر استفاده کنید، زیرا برخی از سطل های خالص در شبکه داده ها خالی باقی می ماند. این گزینه با خواندن داده ها از یک پرونده راه اندازی مجدد (فرمان بارگذاری cv) سازگار نیست.

✓ applyBias (تمایل ABF را اعمال می کنید؟)

متن: abf

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: بله

توضیحات: اگر این تنظیم شده باشد خیر، محاسبه به طور عادی پیش می رود اما نیروی تعهد سازنده اعمال نمی شود. داده ها هنوز برای محاسبه گرادیان انرژی آزاد جمع آوری شده است. این بیشتر برای اهداف آزمایش در نظر گرفته شده است و نباید از آن در شبیه سازی های معمول استفاده شود.

✓ updateBias (تمایل ABF را به روز کنید؟)

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: بله

توضیحات: اگر این تنظیم شده باشد خیر، نیروی بایوس اولیه (به عنوان مثال خوانده شده از پرونده راه اندازی مجدد یا از طریق inputPrefix) در طول شبیه سازی به روز نمی شود. در نتیجه، یک بایاس ثابت اعمال می شود. این می تواند مورد استفاده قرار گیرد برای استفاده از پتانسیل تعصب جدول بندی شده برای هر ترکیبی از ستونها. برای این منظور، باید یک فایل شیب حاوی شیب پتانسیل مورد استفاده (منفی نیروی بایاس)، و یک پرونده شمارش که حاوی فقط مقادیر بزرگتر از fullSamples است، تهیه کند. این پرونده ها باید با پارامترهای شبکه ستون ها مطابقت داشته باشند.

🔗 فایل های خروجی

بایاس ABF فایل های زیر را تولید می کند، همه در فرمت متنی چند ستونی:

✓ outputName.grad: برآورد فعلی از شیب انرژی آزاد (شبکه)، در چند قطعه.

✓ outputName.count: هیستوگرام نمونه های جمع آوری شده، در همان شبکه.

✓ outputName.pmf: فقط برای محاسبات یک بعدی، پروفایل انرژی یکپارچه آزاد یا PMF.

اگر چندین تمایل ABF به طور هم زمان تعریف شود، نام آنها برای تولید نام فایل های منحصر به فرد برای خروجی، همانطور که در grad.inputName.abf است وارد شده است. این کار نباید بطور معمول انجام شود و می تواند به نتایج بی معنا منجر شود: این کار را فقط در صورتی انجام دهید که بدانید چه می کنید!

اگر فضای colvar به بخش هایی (ویندوز) تقسیم شده باشد که در آن شبیه سازی های ABF مستقل انجام شده است، داده های حاصل می توانند با استفاده از گزینه inputPrefix که در بالا توضیح داده شده است ادغام شوند (اجرای مرحله ° کافی است).

❶ پس-پردازش: بازسازی یک سطح انرژی آزاد چند بعدی

اگر یک محاسبه یک بعدی انجام شود، شیب انرژی آزاد تخمین زده شده به طور خودکار یکپارچه می شود و پتانسیل میانگین نیرو با نام پرونده `outputName>.pmf` با فرمت متنی ساده نوشته می شود که توسط بیشتر نقشه ها و تجزیه و تحلیل داده ها قابل خواندن است. برنامه ها (به عنوان مثال gnuplot).

در بعد ۲ یا بیشتر، یکپارچه سازی شیب گسسته غیر پیش پا افتاده می شود. یکپارچه سازی نرم افزار مستقل `abf` برای انجام آن کار ارائه شده است. `abf_integrate` داده های شیب را می خواند و از آن برای انجام شبیه سازی مونت کارلو (M-C) در فضای متغیر جمعی گسسته شده استفاده می کند (به طور خاص، در همان شبکه استفاده شده توسط `ABF` برای تفکیک شیب انرژی آزاد). به طور پیش فرض، یک تمایل وابسته به سابقه (مشابه مطابق با متادینامیک) استفاده می شود: در هر مرحله از M-C، تمایل در موقعیت فعلی با مقدار از پیش تعیین شده (ارتفاع تپه) افزایش می یابد. پس از همگرایی، این تمایل به صورت مطلوب با شیب زیرزمینی خنثی می شود. برای به دست آوردن تخمین سطح انرژی آزاد منفی است. `abf_integrate` با استفاده از خط فرمان فراخوانی می شود:

```
abf_integrate <gradient.file> [-n <nsteps>] [-t <temp>] [-m (0|1)] [-h <hill.height>] [-f <factor>]
```

ابتدا نام فایل شیب ارائه می شود و به ترتیب پارامترهای دیگر. در زیر با مقدار پیش فرض آنها در براکت های مربع توضیح داده شده است:

✔ `n-`: تعداد مراحل M-C که باید انجام شود. به طور پیش فرض، تعداد حداقل مراحل بر

اساس اندازه شبکه انتخاب می شود، و ادغام تا زمانی که یک معیار همگرایی برآورده شود اجرا می شود (بر اساس RMSD بین گرادیان هدف و شیب PMF واقعی)

✔ `t-`: درجه حرارت برای نمونه برداری M-C (نامربوط به دمای شبیه سازی) [K ۵۰۰]

✔ `m-`: از نمونه گیری بایاس مانند متادینامیک استفاده می کنید؟ (۰ = نادرست) [۱]

✔ `h-`: افزایش برای بایاس وابسته به سابقه («ارتفاع تپه») [۰٫۱ کیلو کالری در مول]

✔ `f-`: اگر غیر صفر باشد، از این فاکتور برای مقیاس افزایش در مرحله به مرحله در نیمه دوم

نمونه برداری M-C برای پالایش برآورد انرژی آزاد استفاده می شود [۰٫۵]

استفاده از مقادیر پیش فرض کلیه پارامترها در بیشتر موارد باید نتایج منطقی را ارائه دهد.

`abf_integrate` فایل های خروجی زیر را تولید می کند:

✔ `gradient file>.pmf`: محاسبه سطح انرژی آزاد

✔ `gradient file>.histo`: هیستوگرام نمونه گیری M-C (به روش ساده ای قابل استفاده

نیست) اگر تمایل وابسته به تاریخ اعمال شده باشد)

✔ `gradient file>.est`: شیب تخمینی سطح انرژی آزاد محاسبه شده (از اختلافات محدود)

✔ `gradient file>.dev`: انحراف بین گرادیان عددی ارائه شده توسط کاربر و شیب واقعی

سطح انرژی آزاد محاسبه شده. مقیاس RMS این زمینه بردار به عنوان معیار همگرایی

استفاده می شود و به طور دوره ای در حین ادغام نمایش داده می شود.

توجه: به طور معمول، همزمان با همگرایی، زمینه بردار «انحراف» از بین نمی رود. این اتفاق می افتد زیرا تخمین عددی شیب دقیقاً از پتانسیل ناشی نمی شود، به دلیل تقریبی عددی که برای بدست آوردن آن استفاده می شود (نمونه گیری محدود و گسسته سازی در یک شبکه).

(Extended-system Adaptive Biasing Force (eABF ۱۳٫۵٫۲)

سیستم توسعه یافته eABF (ABF) نوعی از ABF است (۱۳٫۵٫۱) که در آن تمایل مستقیماً به متغیر جمعی اعمال نمی شود، بلکه مختصات مختصری («متغیر ساختگی») است که با توجه به پویایی نیوتنی یا لانژوین به صورت پویا تحول می یابد. . چنین مختصات گسترده ای برای استفاده از کلمات کلیدی `extendedLagrangian` و مرتبط با آن برای یک `colvar` خاص فعال شده است (۱۳٫۲٫۴). نظریه eABF و اجرای کنونی به تفصیل در مرجع مستند شده است [۵۸].

تعیین تمایل ABF بر روی `colvar` که در آن گزینه `extendedLagrangian` فعال است، EABF را انجام خواهد داد. گزینه اختصاصی وجود ندارد.

متغیر گسترده λ توسط پتانسیل هارمونیک q با $colvar\ z = \xi$ ($z - \lambda$) $(2/k)$ همراه است. تحت پویایی eABF، بایاس انطباقی در λ تخمین در حال اجرا از میانگین نیروی فنر است:

$$F^{bias}(\lambda^*) = \langle k(\lambda - z) \rangle_{\lambda^*} \quad (13.21)$$

که در آن پیرانتز های زاویه ای، میانگین کانونی شرط شده توسط $\lambda = \lambda^*$ را نشان می دهد. در زمان های شبیه سازی طولانی، eABF یک هیستوگرام مسطح از متغیر توسعه یافته λ ، و یک هیستوگرام مسطح ξ ، تولید می کند که شکل دقیق آن به قدرت اتصال بستگی دارد، همانطور که توسط افزایش یافته تولید در کوثر تعریف شده است. جفت شدگی برای اکتشاف سریعتر و همگرایی باید تا حدی سست باشد، اما به اندازه کافی قوی است که تمایل به غلبه بر موانع موجود در طول `colvar` کمک کند. [۵۸] توزیع `colvar` ممکن است با ترسیم نمودار هیستوگرام آن، که در پرونده شبیه سازی eABF به پرونده `outputName.zcount` نوشته شده است، ارزیابی شود. توجه داشته باشید که یک بایاس هیستوگرام (۱۳٫۵٫۷) که بر روی یک لایه باریک `Lagrangian` اعمال می شود، به درجه گسترده آزادی λ دسترسی خواهد یافت، نه به `colvar` اولیه ξ ؛ با این حال، هیستوگرام مشترک ممکن است صریحاً با ذکر نام `colvar` دو بار در یک ردیف در پارامتر `colvars` بلوک هیستوگرام درخواست شود. `PMF` eABF از مختصات λ است، دقیقاً مشخصات انرژی آزاد ξ نیست. این کمیت را می توان بر اساس تخمینگر CZAR محاسبه کرد.

❷ برآوردگر CZAR از انرژی آزاد

برآوردگر محدود شده با میانگین تعدیل شده CZAR (Z) به تفصیل در مرجع توصیف شده است [۵۸]. این به طور خودکار در شبیه سازی eABF، صرف نظر از تعداد ستون های درگیر محاسبه می شود. توجه داشته باشید که ABF ممکن است روی ترکیبی از ستون های طولانی و غیر تمدید نیز

اعمال شود. در این حالت، CZAR هنوز تخمین بی طرفانه از گرادیان انرژی آزاد ارائه می دهد. CZAR شیب انرژی آزاد را به عنوان زیر تخمین می زند:

$$A'(z) = -\frac{1}{\beta} \frac{d \ln \bar{\rho}(z)}{dz} + k(\langle \lambda \rangle_z - z). \quad (13.22)$$

که در آن colvar $z = \xi(q)$ است، λ متغیر توسعه یافته به صورت هماهنگ با z با یک نیروی ثابت k است، و $\rho(z)$ توزیع مشاهده شده (هیستوگرام) از z است، که تحت تأثیر تمایل EABF است. فقط یک پارامتر اختیاری برای برآوردگر CZAR وجود دارد:

✓ writeCZARwindowFile (داده های داخلی را از CZAR به یک پرونده جداگانه بنویسید؟)

متن: abf

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خیر

توضیحات: هنگامی که این گزینه فعال باشد، شبیه سازی eABF پرونده ای را شامل می شود که دارای نیروی مهار کننده میانگین متوسط z است با نام `inputName.zgrad`. همان اطلاعات همیشه در پرونده حالت `colvars` درج شده است، که برای شروع مجدد شبیه سازی eABF کافی است. این پرونده جداگانه فقط در هنگام پیوستن به پنجره های مجاور از یک شبیه سازی طبقه بندی eABF، یا برای ادامه شبیه سازی در یک پنجره گسترده تر یا محاسبه یک برآورد CZAR از PMF، در طیف گسترده ای از مختصات (ها) مفید است.

شبیه به ABF، برآوردگر CZAR دو پرونده خروجی را با فرمت متن چند رنگی تولید می کند:

✓ `outputName.czar.grad`: برآورد فعلی از شیب انرژی آزاد (شبکه)، در چند قطعه.

✓ `outputName.czar.pmf`: فقط برای محاسبات یک بعدی، مشخصات انرژی آزاد یکپارچه

یا PMF.

هیستوگرام نمونه گیری همراه با برآوردگر z ، CZAR-هیستوگرام است، که در پرونده `outputName.zcount` نوشته شده است.

۱۳,۵,۳ Metadynamics

روش متادی نامیک از پتانسیل وابسته به تاریخ استفاده می کند [۵۹] که به هر نوع ستون تعمیم می دهد و روش های سیلابی ساختاری [۶۰] و ارتفاع محلی [۶۱]، که در ابتدا برای استفاده به عنوان `colvars` از اجزای اصلی یک ماتریس کواریانس یا مجموعه ای تعمیم داده شده است. به ترتیب زاویه های دیهلی. پتانسیل متادینامیک روی `colvar` ها $(\xi = \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{Ncv})$ به شرح زیر است:

$$V_{meta}(\xi(t)) = \sum_{t'=\delta t, 2\delta t, \dots}^{t' \leq t} W \prod_{i=1}^{N_{cv}} \exp\left(-\frac{(\xi_i(t) - \xi_i(t'))^2}{2\sigma_{\xi_i}^2}\right), \quad (13.23)$$

جایی که V_{meta} پتانسیل وابسته به تاریخ است که بر روی مقادیر فعلی `colvars` عمل می کند، و فقط به مقادیر قبلی بستگی دارد. V_{meta} به عنوان مجموعه ای از تپه های دافع کننده گاوسی `NCV` بصورت `Ncv` ساخته شده است، که ارتفاع آن یک W انرژی ثابت W انتخاب شده است، و مراکز آن پیکربندی های قبلاً $(\xi, \xi(\delta t), \xi(2\delta t), \dots)$ کاوش شده است.

در طی شبیه سازی، سیستم به نزدیکترین حد ممکن از پتانسیل «مؤثر» (نیروی متوسط $A^*(\xi)$) تبدیل می شود، که این مجموعه پتانسیل «واقعی» (اساسی نیروی متوسط $A(\xi)$) و پتانسیل متادینامیک است. بنابراین $V_{meta}(\xi)$ ، در هر زمان معین، احتمال مشاهده پیکربندی متناسب با $(-k_B T) A^*(\xi)$ است: این نیز احتمال دارد که یک «تپه» جدید گاوسی در آن پیکربندی اضافه شود. اگر شبیه سازی برای مدت زمان کافی اجرا شود، هر حداقل محلی با جمع آوری «تپه» های گاوسی لغو می شود. در آن مرحله پتانسیل «مؤثر» (میانگین نیروی $A^*(\xi)$) ثابت است و $-V_{meta}(\xi)$ یک برآوردگر دقیق از پتانسیل «واقعی» (میانگین نیروی است $A(\xi)$)، مگر اینکه برای یک ماده افزودنی ثابت اضافه کند:

$$A(\xi) \simeq -V_{meta}(\xi) + K \quad (13.24)$$

با فرض اینکه مجموعه متغیرهای جمعی کلیه درجات مربوط به آزادی را در بر می گیرد، خطای پیش بینی شده تخمین تابع ساده ای از زمان همبستگی τ_{ξ} `colvars`، و پارامترهای تعریف شده توسط کاربر ξ ، W و δt . در کاربرد های معمولی، یک قاعده خوب می تواند انتخاب نسبت $W / \delta t$ بسیار کوچکتر از $\kappa_B T / \tau_{\xi}$ باشد، جایی که τ_{ξ} طولانی ترین در بین زمان های همبستگی ξ زمان است: σ_{ξ} سپس وضوح PMF محاسبه شده را دیکته می کند.

برای فعال کردن یک محاسبه متادینامیک، یک بلوک متادینامیک باید در پرونده پیکربندی `colvars` تعریف شود. کلمات کلیدی اجباری آن `colvars` است، که تمام متغیرهای درگیر را نشان می دهد، و `hillWeight` که پارامتر وزن W را مشخص می کند. پارامترهای δt و σ مشخص شده توسط کلید واژه های اختیاری `newHillFrequency` و `hillWidth`:

✓ `name`: تعریف نام (روشهای بایاس و تحلیل) را ببینید

✓ `colvars`: به تعریف `colvars` (روشهای بایاس و تحلیل) مراجعه کنید

✓ outputEnergy: به تعریف outputEnergy (روشهای تعصب و تحلیل) مراجعه کنید

✓ hillWeight (ارتفاع هر تپه (کیلو کالری / مول))

متن: متادینامیک

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

توضیحات: این گزینه ارتفاع W تپه های گاوسی را که در این اجرا اضافه می شود، تعیین می کند.

مقادیر پایین نمونه برداری دقیق تری از میزان آزادی سیستم با قیمت زمان های شبیه سازی طولانی

تر را برای تکمیل یک محاسبه PMF بر اساس متادینامیک ارائه می دهند.

✓ newHillFrequency (فرکانس ایجاد تپه)

متن: متادینامیک

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

مقدار پیش فرض: ۱۰۰۰

توضیحات: این گزینه تعدادی از مراحل ادغام را تعیین می کند که پس از آن یک تپه جدید به پتانسیل

متادینامیک اضافه می شود. مقدار آن پارامتر δt را در eq تعیین می کند. ۱۳/۲۳. مقادیر بالاتر برای

تکمیل یک محاسبه PMF نمونه برداری دقیق تری در قیمت زمان شبیه سازی طولانی تر ارائه می

دهد.

✓ hillWidth (عرض نسبی یک تپه گوسی با توجه به عرض colvar)

متن: متادینامیک

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

مقدار پیش فرض: ۲/

توضیحات: عرض گاوسی در امتداد هر رنگ، σ_i ، محصولی بین این عدد و پارامتر colvar است که

با عرض داده می شود (نگاه کنید به ۱۳/۲). چنین محصولی در خروجی استاندارد VMD چاپ می

شود. مقدار پیش فرض این عدد یک تابع تپه گاوسی را می دهد که حجم آن برابر است با محصول

wi، حجم یک bin هیستوگرام (نگاه کنید به ۱۳/۵۷) و W. نکته: از این ویژگی برای تخمین کسری

از colvar استفاده کنید. فضای تحت تمایل گاوسی در یک زمان شبیه سازی معین. با استفاده از

UseGrids، مقدار پیش فرض نیز خطاهای گسسته قابل قبول را به دست می دهد [۴۴]: برای

تجسم صاف تر، این پارامتر ممکن است افزایش یابد و عرض با همان نسبت کاهش یابد. توجه:

مقادیر کوچکتر از ۱ توصیه نمی شود.

🔗 پرونده های خروجی

هنگامی که شبکه های درون یابی فعال هستند (رفتار پیش فرض)، PMF هر مرحله

colvarsRestartFrequency را به outputName.pmf می نویسد. دو گزینه زیر امکان کنترل این

رفتار و ردیابی همگرایی آماری را فراهم می آورد:

✓ writeFreeEnergyFile (بطور دوره ای PMF را برای تجسم بنویسید)

متن: متادینامیک

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: روشن است

توضیحات: هنگامی که useGrids و این گزینه روشن است، PMF در هر مرحله

colvarsRestartFrequency نوشته می شود.

✓ keepFreeEnergyFiles (تمام پرونده های PMF را نگه دارید)

متن: متادینامیک

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: هنگام نوشتن FreeEnergyFile و این گزینه روشن است، شماره مرحله در نام پرونده

گنجانده می شود، بنابراین یک سری پرونده های PMF تولید می کند. با مقایسه PMF های جدا

شده توسط زمان های کوتاه، فعال کردن این گزینه می تواند برای پیگیری دقیق تر همگرایی شبیه

سازی مفید باشد.

توجه: وقتی تپه های گاوسی نزدیک به حاشیه های پایین مرز یا فوقانی قرار گرفته اند (نگاه کنید

به ۱۳/۲۱) و از شبکه های درون یابی استفاده می شود (رفتار پیش فرض)، کوتاه شدن آنها می تواند

منجر به خطاهای انباشت شود. در این موارد، به عنوان یک اندازه گیری از تحمل پذیری در برابر

خطای تمام تپه های گاوسی در نزدیکی مرزها در فایل وضعیت خروجی قرار دارند و هر زمان که

colvar خارج از مرزهای شبکه قرار بگیرد، به صورت تحلیلی محاسبه می شوند. (چنین اندازه گیری از

صحت محاسبه محافظت می کند و فقط توسط hardLowerBoundary یا hardUpperBoundary

غیرفعال می شود.) برای جلوگیری از، از دست دادن تدریجی عملکرد و رشد پرونده پرونده، یکی از راه

حل های زیر توصیه می شود:

✓ فعال کردن گزینه expandBoundaries، به طوری که مرزهای شبکه به طور خودکار در هر

زمان لازم محاسبه می شود. در نتیجه pmf شکافهای خود را متناسب با آن گسترش می دهد.

✓ تنظیم چاههای lowWall و upperWall در فاصله زمانی محدود توسط LowBoundary و

UpperBoundary.

🔗 تنظیم عملکرد

گزینه های زیر هزینه محاسباتی محاسبات متادینامیک را کنترل می کنند، اما نتایج را تحت تأثیر قرار

نمی دهند. مقادیر پیش فرض انتخاب شده اند تا چنین هزینه هایی را بدون از بین بردن دقت به

حداقل برسانند.

✓ useGrids (تپه ها را با شبکه ها در هم آمیخت)

متن: متادینامیک

مقادیر قابل قبول: بولین

مقدار پیش فرض: روشن است

توضیحات: این گزینه تمام تپه ها را برای بهبود عملکرد، تجمع انرژی و شیب آنها در دو شبکه جداگانه

از مساوی تفکیک می کند. شبکه ها با مقادیر سطح پایین، بالایی و عرض برای هر colvar تعریف شده اند. در حال حاضر، این گزینه برای کلیه انواع متغیرها به استثنای انواع غیر مقیاس (distDir یا جهت گیری) پیاده سازی شده است. اگر ExpainBoundaries در یکی از colvarها تعریف شده باشد، شبکه ها بطور خودکار در راستای colvar گسترش می یابند.

✓ rebinGrids (شبکه ها را هنگام خواندن یک فایل موردی حساب کنید)

متن: متادینامیک

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: هنگام راه اندازی مجدد از یک پرونده دولت، پارامترهای شبکه (مرزها و عرضها) که در پرونده دولت ذخیره شده اند، روی موارد موجود در پرونده پیکربندی غلبه می کنند. فعال کردن این گزینه شبکه ها را مجبور می کند تا با پرونده های موجود در پرونده پیکربندی فعلی مطابقت داشته باشند.

🔗 متادینامیک دمای مناسب

گزینه های زیر پیکربندی رویکرد متادینامیک «well-tempered» [۶۳] را تعریف می کنند:

✓ wellTempered (متادینامیک تنظیم پذیر را انجام دهید)

متن: متادینامیک

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: در صورت فعال بودن، این پرچم باعث ایجاد متادینامیک به خوبی مطابق توضیحات باردوچی و همکاران می شود. [۶۳] به جای متادینامیک استاندارد انجام شود. پارامتر biasTemperature سپس مورد نیاز است.

✓ biasTemperature (بایاس دما برای متادینامیک دما مناسب)

متن: متادینامیک

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

توضیحات: هنگام اجرای متادینامیک در بازه زمانی طولانی، فضای متغیر جمعی در دمای $T + \Delta T$ تغییر یافته نمونه برداری می شود. در متادینامیک معمولی، درجه حرارت «افزایش» $T \Delta$ به طور مداوم با زمان افزایش می یابد. در عوض، در متادینامیک تنظیم پذیر باید $T \Delta$ از طریق biasTemperature توسط کاربر تعریف شود. PMF نوشتاری شامل ضریب $(T + \Delta T) / (T \Delta)$ مقیاس گذاری [۶۳] است. یک انتخاب دقیق $T \Delta$ ، نمونه برداری و همگرایی را تعیین می کند، و از این رو برای موفقیت یک شبیه سازی متادینامیک تنظیم پذیر بسیار مهم است.

🔗 متادینامیک چند تکرار

گزینه های زیر محاسبات متادینامیک را با بیش از یک تکرار تعریف می کنند:

✓ multipleReplicas (متادینامیک چند تکرار)

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: اگر این گزینه روشن باشد، می توان چندین تکرار (مستقل) از همان سیستم را همزمان اجرا کرد و تپه های آنها برای به دست آوردن یک PMF واحد [۶۴] ترکیب می شوند. ماکت ها با مقدار replicaID مشخص می شوند. ارتباطات توسط پرونده ها انجام می شود: هر ماکت باید بتواند فایل های ایجاد شده توسط دیگران را بخواند، که مسیرهای آنها از طریق فایل همانند ارتباط با فایل ارسال می شود. این فایل، و فایل های ذکر شده در آن، هر مرحله از replicaUpdateFrequency خوانده می شوند. هر بار که پرونده حالت colvarsRestartFrequency (colvars) نوشته می شود، فایل: «outputName.colvars.name.replicaID.state» نیز نوشته شده است، که حاوی حالت تمایل متادینامیک برای replicaID است. در مراحل زمانی بین colvarsRestartFrequency، تپه های جدید به طور موقت به فایل نوشته می شوند:

«outputName.colvars.name.replicaID.hills» که به عنوان یک بافر ارتباطی عمل می کند. این فایل ها فقط برای برقراری ارتباط مورد نیاز هستند و ممکن است پس از شروع یک MD جدید با یک نام متفاوت حذف شوند.

✓ replicaID (شناسه مربوط به این ماکت را تنظیم کنید)

متن: متادینامیک

مقادیر قابل قبول: رشته

توضیحات: اگر multipReplicas روشن است، این گزینه یک شناسه منحصر به فرد برای این ماکت تعیین می کند. همه ماکتها باید از تنظیمات متغیر جمعی یکسان استفاده کنند، به جز ارزش این گزینه.

✓ replicasRegistry (پرونده پایگاه داده های متعدد ماکت)

متن: متادینامیک

مقادیر قابل قبول: نام فایل UNIX

مقدار پیش فرض: «name.replica.files.txt»

توضیحات: اگر multipReplicas روشن است، این گزینه مسیر فایل پایگاه داده همانندها را تعیین می کند.

✓ replicaUpdateFrequency (هر چند وقت یک بار تپه ها بین ماکت ها ارتباط برقرار

می کنند)

متن: متادینامیک

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

مقدار پیش فرض: newHillFrequency

توضیحات: اگر multipReplicas روشن است، این گزینه تعداد مراحل را که پس از آن هر ماکت (دوباره) فایل های دیگر ماکت ها را می خواند، تعیین می کند. کمترین مقدار معنی دار این تعداد newHillFrequency است. اگر دسترسی به سیستم فایل بر عملکرد شبیه سازی تأثیر بگذارد، می توان این تعداد را با قیمت کاهش هماهنگی بین ماکت ها افزایش داد. مقادیر بالاتر از colvarsRestartFrequency ممکن است عملکرد را به میزان قابل توجهی بهبود ندهد.

✓ dumpPartialFreeEnergyFile (بطور دوره ای سهم مربوط به PMF را از این ماکت بنویسید)

متن: متادینامیک

مقادیر قابل قبول: boolean مقدار پیش فرض: روشن است

توضیحات: هنگامی که multipReplicas روشن است، فایل inputName.pmf شامل PMF ترکیبی از همه ماکت ها است، به شرط روشن بودن UseGrids (پیش فرض). با فعال کردن این گزینه، یک فایل اضافی به نام outputName.partial.pmf تولید می شود، که می تواند برای نظارت سریع سهم هر ماکت در PMF مفید باشد.

🔗 سازگاری و پردازش پس از آن

گزینه های زیر فقط برای برنامه هایی است که فراتر از محاسبه PMF با متادینامیک ممکن است مفید باشد:

✓ name (نام این نمونه متادینامیک)

متن: متادینامیک

مقادیر قابل قبول: رشته

مقدار پیش فرض: «متا» + شماره رتبه

توضیحات: در این گزینه نام این مثال متادینامیک مشخص می شود. در حالی که توصیه نمی شود بیش از یک نمونه متادینامیک را در همان شبیه سازی استفاده کنید، این امر به شما امکان می دهد هر نمونه را از سایرین متمایز کنید. اگر بیش از یک نمونه متادینامیک وجود داشته باشد، نام این تمایل در نام پرونده های خروجی متادینامیک مانند مثال درج شده است. فایل .pmf.

✓ keepHills (هر تپه جداگانه را به فایل موردی بنویسید)

متن: متادینامیک

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: هنگامی که useGrids و این گزینه روشن است، تمام تپه ها به صورت تحلیلی، در کنار شبکه های آنها، در پرونده حالت ذخیره می شوند. این امر باعث می شود بعداً از گاوسی های تحلیلی دقیق برای rebinGrids استفاده شود. برای پیگیری تاریخچه تپه های اضافه شده، writeHillsTrajectory ارجح است.

✓ writeHillsTrajectory (نوشتن log تپه های جدید)

متن: متادینامیک

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: روشن است

توضیحات: در صورت فعال بودن این گزینه، یک login توسط بایاس متادینامیک با نام outputName.hills.traj.colvars. <name> نوشته شده است، که می تواند برای دنبال کردن سری زمانی تپه ها مفید باشد. هنگامی که multipReplicas روشن است، نام آن به outputName.colvars.hills.traj.<replicaID>. <name> تغییر می کند. این پرونده می تواند برای تجسم سریع موقعیت های همه تپه های اضافه شده مورد استفاده قرار گیرد، در صورتی که newHillFrequency با colvarsRestartFrequency مطابقت ندارد.

۱۳٫۵٫۴ Harmonic restraints

از روش بایزانی هارمونیک ممکن است برای اجرای محدودیت های ثابت یا متحرک، از جمله انواع MDSteered و TargetedMD استفاده شود. در مدت زمان اجرای حداقل رساندن انرژی، به حداقل رساندن محدود اجازه می دهد، به عنوان مثال. برای محاسبه سطوح انرژی پتانسیل آرام. در متن ماژول Colvars، پتانسیل های هارمونیک با توجه به تعریف کتاب رفرنس آنها منظور شده است:

$$V(\xi) = \frac{1}{2}k \left(\frac{\xi - \xi_0}{w_\xi} \right)^2 \quad (13.25)$$

توجه داشته باشید که این از پتانسیل های زاویه ای و اتصال هارمونیک در میدان های نیرو ۳۷ معمول متفاوت است، جایی که عامل نیمی از آن به طور معمول حذف می شود و در نتیجه تعریف غیر استاندارد از ثابت نیرو انجام می شود. فرمول بالا شامل مقیاس w_ξ طول مشخصه از ξ colvar (عرض کلمه کلیدی، نگاه کنید به ۱۳٫۲٫۱ است) برای تعریف محدودیت چند بعدی با یک نیروی متحد ثابت:

$$V(\xi_1, \dots, \xi_M) = \frac{1}{2}k \sum_{i=1}^M \left(\frac{\xi_i - \xi_0}{w_\xi} \right)^2 \quad (13.26)$$

اگر محدودیت های چند بعدی یک بعدی یا یکدست تعریف شده و هیچ استفاده دیگری برای پارامتر w_ξ وجود ندارد، می توان پارامتر width را در مقدار پیش فرض خود ۱ قرار داد. یک محدودیت هارمونیک توسط یک بلوک {...} هارمونیک تنظیم می شود، که ممکن است (علاوه بر colvar گزینه استاندارد) کلمات کلیدی زیر را در بر بگیرد:

- ✓ name: تعریف نام (روشهای بایاس و تحلیل) را ببینید
- ✓ colvars: به تعریف colvar (روشهای بایاس و تحلیل) مراجعه کنید
- ✓ outputEnergy: به تعریف outputEnergy (روشهای تمایل و تحلیل) مراجعه کنید
- ✓ forceConstant (ثابت نیروی مقیاس پذیر (kcal / mol))

متن: هارمونیک

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

مقدار پیش فرض: ۱٫۰

توضیحات: این مقدار ثابت مقیاس k برای پتانسیل هارمونیک را تعیین می کند (معادل ۱۳٫۲۶). برای اطمینان از سازگاری برای محدودیت های چند بعدی، از نظر داخلی بر اساس مربع عرض خاص برای هر colvar درگیر (که به طور پیش فرض ۱ است) تقسیم می شود، به گونه ای که تمام colvar ها بطور مؤثر بدون ابعاد و از اندازه متناسب هستند. به عنوان مثال، تعیین یک نیروی ثابت مقیاس ۱۰

کیلوکالری در مول که بر روی دو colvar عمل می کند، زاویه ای با عرض ۵ درجه و فاصله با عرض ۵٫۰ درجه سانتیگراد، ثابت کننده های نیروی واقعی ۴٫۰ کیلوکالری در مول است. ۲ برای زاویه و ۴۰ kcal / °Å^۲ mol برای فاصله.

✓ centers (مراکز محدودیت اولیه هارمونیک)

متن: هارمونیک

مقادیر قابل قبول: لیست جدا از فضا از مقادیر colvar

توضیحات: مراکز (مقادیر تعادل) محدودیت، ξ_0 ، در اینجا وارد شده اند. تعداد مقادیر باید تعداد ستون های درخواستی باشد. در صورت بازگشت یک بردار واحد یا یک بردار، و اگر مقدار colvar مربوطه یک مقیاس مقیاس، «(x، y، z)» را برگرداند، و یک چهار برابر و «(q۰، q۱، q۲، q۳)» این یک کوآترنیون چرخشی را برمی گرداند. اگر یک colvar تناوبی یا تقارن داشته باشد، هنگام محاسبه پتانسیل هارمونیک، نزدیکترین تصویر آن به مرکز مهار در نظر گرفته می شود. نکته: مجموعه ای از محدودیت های محدودکننده را می توان با تعریف چندین ستون و اعمال یک یا چند محدودیت هارمونیک در گروههای مختلف از colvars بر روی یک سیستم اعمال کرد. در بعضی موارد، ده ها نوبت تعریف می شود، اما مقدار آن ممکن است مرتبط نباشد: برای محدود کردن اندازه پرونده مسیر colvars، ممکن است عاقلانه باشد که خروجی Value را برای چنین متغیرهای «کمکی» غیرفعال کنید، و این امکان را برای «موارد مربوطه» فعال باقی بگذارید.

محدودیت های متحرک: دینامیک مولکولی هدایت شده

گزینه های زیر اجازه می دهد تا در طی یک شبیه سازی، به تدریج مراکز محدودیت های هارمونیک تغییر کنند. هنگامی که مراکز به طور مداوم تغییر می یابند، یک MD هدایت شده در یک فضای متغیر جمعی انجام می شود.

✓ targetCenters (مراکز مهار را به سمت این اهداف هدایت کنید)

متن: هارمونیک

مقادیر قابل قبول: لیست جدا از فضا از مقادیر colvar

توضیحات: زمان تعریف، مراکز فعلی در طی شبیه سازی به سمت این مقادیر منتقل می شوند. به طور پیش فرض، این مراکز در کل مراحل targetNumSteps با درون یابی خطی، با اسپریت MD هدایت شده منتقل می شوند. اگر targetNumStages روی یک مقدار nonzero تنظیم شود، این تغییر در مراحل گسسته انجام می شود و هر مرحله پایدار targetNumSteps است. این حالت دوم ممکن است برای نمونه برداری از پنجره های متوالی در زمینه شبیه سازی نمونه چتر ۳۸ استفاده شود. هنگام ادامه اجرای شبیه سازی، مراکز مشخص شده در فایل پیکربندی <colvarsConfig> توسط آنهایی که در فایل راه اندازی مجدد <colvarsInput> ذخیره شده لغو می شوند. برای انجام MD هدایت شده در یک فضای دلخواه از colvar ها، استفاده از این گزینه و فعال کردن outputAppliedForce در هر یک از colvar های درگیر کافی است.

✓ targetNumSteps (تعداد مراحل فرمان)

متن: هارمونیک

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

توضیحات: در تبدیل های تک مرحله ای (مداوم)، تعداد مراحل MD مورد نیاز برای حرکت مراکز محدود (یا ثابت نیرو) به سمت مقادیر مشخص شده با targetCenters یا targetForceConstant را مشخص می کند. پس از رسیدن به مقادیر هدف، مراکز (ثابت نیرو) ثابت نگه داشته می شوند. در تحولات چند مرحله ای، این تعداد مراحل MD را در هر مرحله تعیین می کند.

✓ outputCenters (مراکز فعلی را در فایل تراجکتوری بنویسید)

متن: هارمونیک

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: اگر این گزینه انتخاب شده و colvarsTrajFrequency صفر نباشد، موقعیت های مراکز بازدارنده در طول شبیه سازی به فایل مسیر نوشته می شوند. این گزینه اجازه می دهد تا به راحتی PMF را از پرونده های مسیر colvars در محاسبه MD هدایت شده استخراج کنید.

✓ outputAccumulatedWork (اثر انباشته شده از محدودیت متحرک را در فایل تراجکتوری

بنویسید)

متن: هارمونیک

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: اگر این گزینه انتخاب شود، targetCenters تعریف می شود و colvarsTrajFrequency صفر نیست، کار جمع شده از ابتدای شبیه سازی به فایل تراجکتوری نوشته می شود. اگر شبیه سازی از یک فایل موردی قبلی ادامه داشته باشد، کار قبلی انباشته شده در انتگرال درج شده است. این گزینه اجازه می دهد تا به راحتی PMF را از پرونده های مسیر colvars در محاسبه MD هدایت شده استخراج کنید.

🔗 توجه به راه اندازی مجدد شبیه سازی های محدود کننده حرکت

اطلاعات مربوط به مرحله و مرحله فعلی شبیه سازی با محدودیت های متحرک در پرونده راه اندازی مجدد (state file) ذخیره می شوند. بنابراین، چنین شبیه سازی ها می توانند در چند تکه اجرا شوند، و مستقیماً با استفاده از همان پرونده پیکربندی colvars دوباره راه اندازی شوند. در صورت راه اندازی مجدد، مقادیر پارامترهایی مانند targetCenters، targetNumSteps و غیره نباید به صورت دستی تغییر کنند.

محدودیت های متحرک: نمونه گیری چتری

مراکز محدودیت های هارمونیک همچنین می توانند در مراحل گسسته تغییر کنند: در این موارد یک شبیه سازی نمونه چتر یک بعدی انجام می شود. پنجره های نمونه برداری در شبیه سازی به ترتیب انجام می شوند. سپس با استفاده از پرونده مسیر colvars، برای ارزیابی زمان همبستگی

بین پنجره های متوالی، و محاسبه توزیع فراوانی نوار مورد علاقه در هر پنجره، استفاده می شود. علاوه بر این، توزیع فرکانس در یک شبکه از پیش تعریف شده می تواند به طور خودکار با استفاده از بایاس هیستوگرام بدست آید (نگاه کنید به ۵٫۷/۱۳).

برای فعال سازی شبیه سازی نمونه چتر، می توانید از کلمات کلیدی مشابه در قسمت قبل استفاده کنید، علاوه بر این موارد زیر:

✓ targetNumStages (تعداد مراحل فرمان)

متن: هارمونیک

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح غیر منفی

مقدار پیش فرض: °

توضیحات: اگر غیر صفر باشد، تعداد مراحل را که در آن مراکز مهار یا ثابت نیرو به مقادیر هدف آنها تغییر می کند، تعیین می کنید. اگر صفر باشد، تغییر مداوم است. هر مرحله مراحل MDN targetNumSteps طول می کشد. برای نمونه برداری از هر دو انتهای تحول، شبیه سازی باید برای $\text{targetNumSteps} \times (\text{targetNumStages} + 1)$ اجرا شود.

🔗 تغییر نیروی ثابت

ثابت نیروی مهار هارمونیک ممکن است تغییر کند و به تعادل برسد [۶۵].

✓ targetForceConstant (نیروی ثابت را به سمت این مقدار تغییر دهید)

متن: هارمونیک

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

توضیحات: وقتی تعریف شد، ForceConstant فعلی در طول شبیه سازی به سمت این مقدار منتقل می شود. تکامل زمان ثابت نیرو توسط پارامتر targetForceExponent دیکته می شود (به تصویر زیر مراجعه کنید). به طور پیش فرض، ثابت در کل نیرو در کل مراحل targetNumSteps تغییر می کند. این کار برای معرفی یا حذف محدودیت ها به شیوه متریقی مفید است. اگر targetNumStages روی یک مقدار غیر صفر تنظیم شود، این تغییر در مراحل گسسته انجام می شود و هر مرحله پایدار targetNumSteps است. این حالت دوم ممکن است برای محاسبه تغییر انرژی آزاد تطبیقی مرتبط با محدودیت، در فرمالیسم های FEP یا TI مورد استفاده قرار گیرد. برای راحتی، کد تخمینی از مشتقات انرژی آزاد برای استفاده در TI را ارائه می دهد. محاسبه انرژی کامل تر (بخصوص در رابطه با تجزیه و تحلیل همگرایی)، در حالی که توسط ماژول Colvars مورد استفاده قرار نمی گیرد، می تواند با پردازش مسیر colvars انجام شود، اگر colvarsTrajFrequency روی یک مقدار مناسب کم باشد. با این وجود، لازم به ذکر است که محاسبات انرژی بدون محدودیت با تعیین یک PMF برای مختصات محدود، می تواند با استفاده از یک مسیر غیرمستقیم با کارآیی بیشتری انجام شود. [۶۵]

✓ targetForceExponent (نمایانگر در وابستگی زمانی ثابت نیرو)

متن: هارمونیک

مقادیر قابل قبول: اعشاری برابر یا بیشتر از ۱۰

مقدار پیش فرض: ۱۰

توضیحات: ضریب، α را در تابعی که برای تغییر مقدار ثابت نیرو به عنوان تابعی از زمان استفاده می کند، تعیین می کند. نیرو با توجه به یک پارامتر جفت سازی λ تغییر یافته است، به قدرت α افزایش یافته است: $k^0 - \lambda \alpha (k^1 + k \lambda = k^0$ ، جایی که k^0 و k^1 مقادیر اولیه، جریان و نهایی نیروی ثابت هستند. . پارامتر λ بصورت خطی از ۰ تا ۱، هموار، یا در targetNumStages به طور مساوی با مراحل گسسته، یا طبق یک برنامه دلخواه تنظیم شده با lambdaSchedule تکامل می یابد. هنگامی که مقدار اولیه ثابت نیرو صفر باشد، یک نمایانگر بزرگتر از ۱۰ اثرات معرفی محدودیت را با سرعت بیشتری نسبت به یک وابستگی خطی توزیع می کند، و اطمینان می دهد که هیچ خاصیتی در مشتقات انرژی آزاد محدودکننده با توجه به لامبدا مقدار ۴ یافته شده است که در بعضی از آزمایشات نتایج خوبی کسب می کند.

✔ targetEquilSteps (تعداد مراحل از برآورد TI کنار گذاشته شده است)

متن: هارمونیک

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

توضیحات: تعداد مراحل موجود در هر مرحله را که تعادل در نظر گرفته می شوند و از برآورد مشتق انرژی آزاد محدود کننده گزارش شده در خروجی، تعریف می کند.

✔ lambdaSchedule (برنامه لامبدا نقاط برای تغییر ثابت نیرو)

متن: هارمونیک

مقادیر قابل قبول: لیست اعداد واقعی بین ۰ تا ۱

توضیحات: اگر همراه با targetForceConstant مشخص شده باشد، ترتیب توالی مقادیر λ گسسته را که برای مراحل مختلف استفاده می شود، تعیین می کنید.

۱۳,۵,۵ Linear restraints

از روش بایاس محدود کننده خطی برای به حداقل رساندن یک شبیه سازی استفاده می شود. به طور کلی استحکام منحصر به فرد از بایاس برای هر مرکز CV وجود دارد، به این معنی که باید ثابت باشد که بایاس قدرت را به طور خاص برای مرکز CV بدانید. این ثابت نیرو را می توان با استفاده از آزمایش شبیه سازی هدایت شده شرح داده شده در بخش ۱۳/۵/۶ یافت. لطفاً هنگام استفاده از Pitera و Chodera را ذکر کنید [۶۶].

✔ name: تعریف نام (روشهای بایاس و تحلیل) را ببینید

✔ colvars: به تعریف colvars (روشهای بایاس و تحلیل) مراجعه کنید

✔ forceConstant (ثابت نیروی مقیاس پذیر (kcal / mol))

متن: خطی

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

مقدار پیش فرض: ۱۰

توضیحات: این یک ثابت نیروی مقیاس پذیر برای تمایل خطی را تعریف می کند. برای اطمینان از استحکام برای محدودیتهای چند بعدی، از نظر داخلی برای هر یک از colvars درگیر (که به طور پیش فرض ۱ است) از نظر داخلی تقسیم می شود، به گونه ای که تمام colvars بطور مؤثر بدون ابعاد و از اندازه متناسب هستند.

✔ centers (مراکز مهار خطی اولیه)

متن: خطی

مقادیر قابل قبول: لیست جدا از فضا از مقادیر colvar

توضیحات: مراکز (مقادیر تعادل) محدودیت در اینجا وارد می شوند. تعداد مقادیر باید تعداد colvar های درخواستی باشد. در صورت بازگشت یک بردار واحد یا یک بردار، و اگر مقدار آن برابر باشد، یک مقدار اعشاری عدد اعشاری را نشان می دهد. یک کواترنیون چرخشی را برمی گرداند. اگر یک colvar تناوبی یا تقارن داشته باشد، نزدیکترین تصویر آن به مرکز مهار هنگام محاسبه پتانسیل خطی در نظر گرفته می شود.

۱۳,۵,۶ Adaptive Linear Bias/Experiment Directed Simulation

شبیه سازی جهت آزمایش از یک بایاس خطی با ثابت نیروی متغیر را اعمال میکند. لطفاً هنگام استفاده از این ویژگی، وایت و ووت [۶۷] را استناد کنید. بر خلاف آن مرجع، نیروی ثابت در اینجا با width مطابق با بایاس colvar مقیاس بندی می شود. در White and Voth، هر ثابت نیرو توسط مرکز تنظیم colvars مقیاس بندی می شود. بایاس به یک تمایل خطی تبدیل می شود، پس از آن این حداقل تمایل ممکن خواهد بود. شما همچنین ممکن است شبیه سازی را متوقف کنید، واسطه ثابت نیرو (ForceConst) موجود در فایل مسیر colvars را بگیرید و سپس یک بایاس خطی را با آن ثابت اعمال کنید. تمام یادداشت ها در مورد واحدهای شرح داده شده در بخش های ۱۳/۵/۵

و ۵/۴/۱۳ نیز در اینجا اعمال می شود. این یک شبیه سازی معتبر از هیچ گروه خاص آماری نیست و فقط یک الگوریتم بهینه سازی است تا زمانی که بایاس همگرا شود.

✓ name: تعریف نام (روشهای بایاس و تحلیل) را ببینید

✓ colvars: به تعریف colvars (روشهای بایاس و تحلیل) مراجعه کنید

✓ centers (مراکز متغیر جمعی)

متن: alb

مقادیر قابل قبول: لیست جدا از فضا از مقادیر colvar

توضیحات: مرکز مورد نظر (مقادیر تعادلی) که در طی بایاس خطی تطبیقی جستجو می شود. تعداد مقادیر باید تعداد colvar های درخواستی باشد. هر مقدار یک مقدار اعشاری است اگر colvar مربوطه یک اسکالر را برگرداند، یک سه تایی (x, y, z) اگر یک بردار واحد یا یک بردار و یک کوادراپلت q_0, q_1, q_2, q_3 اگر آن یک کواترنیون چرخشی را میچرخاند. اگر یک colvar تناوبی یا تقارن داشته باشد، نزدیکترین تصویر آن به مرکز مهار هنگام محاسبه پتانسیل خطی در نظر گرفته می شود.

✓ updateFrequency (مدت زمان بروزرسانی ها)

متن: alb

مقادیر قابل قبول: یک عدد صحیح

توضیحات: این، N، تعداد مراحل شبیه سازی است که برای استفاده از هر به روزرسانی بایاس استفاده می شود. این تعیین می کند که سیستم پس از تغییر در نیروی ثابت ($N/2$)، چقدر طول می کشد تا تعادل برقرار شود، چه مدت آمار برای یک تکرار جمع آوری می شود ($N/2$)، و چقدر سریع انرژی به سیستم اضافه می شود (حداکثر، $N/2$ ، که در آن A forceRange است). تا زمانی که ثابت نیرو همگرا نشود، روشی که شرح داده شده روشی بهینه سازی است و نه یکپارچه سازی یک مجموعه آماری خاص. این مهم است که هر مرحله باید از مرحله آخر با هم مرتبط نباشد تا تکرارها مستقل باشد. بنابراین، N باید حداقل دو برابر زمان همبستگی متغیر جمعی باشد. همچنین سیستم باید بتواند انرژی را به همان سرعت $N/2$ از بین ببرد، که می توان با تنظیم پارامترهای ترموستات نیز این کار را انجام داد. از نظر عملی، N با موفقیت قابل توجهی کوتاه تر از زمان همبستگی متغیرهای جمعی متمایل آزمایش شده و هنوز به درستی همگرا شده است.

✓ forceRange (دامنه مورد انتظار ثابت نیرو در واحدهای انرژی)

متن: alb

مقادیر قابل قبول: لیستی از اعداد اعشاری از فضای جدا

مقدار پیش فرض: $3k_B T$

توضیحات: این بزرگترین مقدار ثابت نیرو است که فرد انتظار دارد. اگر این پارامتر خیلی کم باشد، شبیه سازی همگرا نمی شود. اگر خیلی زیاد باشد، شبیه سازی باعث می شود زمان کاوش مقادیر بسیار بزرگ تلف شود. مقدار $3k_B T$

در سیستمهای ارائه شده به عنوان گزینه اول خوب عمل کرده است. این پارامتر در طول یک شبیه سازی به صورت پویا تنظیم می شود. فایده این است که یک حدس بد برای forceRange قابل

اصلاح است. با این وجود، این می تواند باعث شود مقادیر زیادی انرژی با گذشت زمان به سیستم اضافه شود. برای جلوگیری از این بروزرسانی پویا، hardForceRange yes را به عنوان پارامتر اضافه کنید

✓ rateMax (حداکثر سرعت تغییر نیرو ثابت است)

متن: alb

مقادیر قابل قبول: لیستی از اعداد واقعی فضای مجزا

توضیحات: این پارامتر اختیاری کنترل می کند که از این تمایل چه مقدار انرژی به سیستم اضافه می شود. تنظیم این کار به طور جداگانه از به روزرسانی فرکانس و forceRange می تواند باعث ایجاد تغییرات بزرگ در تمایل شود اما با سرعت پایین Max مانع از تغییرات بزرگ انرژی می شود که می تواند منجر به بی ثباتی در شبیه سازی شود.

۱۳,۵,۷ Multidimensional histograms

از ویژگی هیستوگرام برای ضبط توزیع مجموعه ای از متغیرهای جمعی در قالب یک نمودار N-بعدی استفاده می شود. این عملکرد به عنوان یک «بایاس متغیر جمعی» عمل می کند و با اضافه کردن یک بلوک هیستوگرام به پرونده پیکربندی Colvars فراخوانی می شود. مانند هر روش دیگر بایاس و تجزیه و تحلیل، هنگامی که یک هیستوگرام به یک colvar extensions system ($4/2/13$) اعمال می شود، به جای مختصات «درست» به مقدار مختصات ساختگی دست پیدا می کند. هیستوگرام مشترک colvar «درست» و مختصات ساختگی را می توان با مشخص کردن نام colvar دوبار در یک ردیف در پارامتر colvars بدست آورد: نمونه اول به عنوان colvar «درست»، و دوم به عنوان ساختگی درک می شود. علاوه بر نام پارامترهای رایج و colvars که در بالا توضیح داده شد، یک بلوک هیستوگرام می تواند پارامتر زیر را تعریف کند:

✓ name: تعریف نام (روشهای بایاس و تحلیل) را ببینید

✓ colvars: به تعریف colvars (روشهای بایاس و تحلیل) مراجعه کنید

✓ outputFreq (فرکانس (در زمان بندی) که در آن پرونده های هیستوگرام تجدید می شوند)

زمینه: هیستوگرام

مقادیر قابل قبول: عدد صحیح مثبت

مقدار پیش فرض: colvarsRestartFrequency

توضیحات: داده های هیستوگرام در فاصله زمانی معین به پرونده ها نوشته می شوند. مقدار ° ایجاد این فایل ها را غیرفعال می کند (توجه: همه داده ها برای ادامه یک شبیه سازی هنوز در پرونده مورد گنجانده شده اند)

✓ outputFile (هیستوگرام را روی یک فایل بنویسید)

زمینه: هیستوگرام

مقادیر قابل قبول: نام پرونده UNIX

مقدار پیش فرض: outputName. <name>.dat

توضیحات: نام فایل حاوی داده های هیستوگرام (قالب چند ستونی)، که در هر مرحله از outputFreq نوشته می شود. برای مورد ویژه ۲ متغیر، ممکن است از Gnuplot برای تجسم این پرونده استفاده شود.

✓ outputFileDX (هیستوگرام را روی یک فایل بنویسید)

زمینه: هیستوگرام

مقادیر قابل قبول: نام پرونده UNIX

مقدار پیش فرض: outputName. <name>.dat

توضیحات: نام فایل حاوی داده های هیستوگرام (فرمت OpenDX)، که در هر مرحله از outputFreq نوشته می شود. برای مورد ویژه دارای ۳ متغیر، ممکن است از VMD برای تجسم این پرونده استفاده شود.

✓ gatherVectorColvars (با متغیرهای بردار به عنوان مشاهدات متعدد از یک متغیر

مقیاس رفتار کنید؟)

زمینه: هیستوگرام

مقادیر قابل قبول: نام پرونده UNIX

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: وقتی این گزینه روشن است، اجزای یک colvar چند بعدی

(به عنوان مثال یکی از آنها مبتنی بر cartesian, distancePairs یا یک بردار از اعداد مقیاس داده شده توسط scriptedFunction) به عنوان مشاهدات متعدد از یک متغیر مقیاس پذیر رفتار می شوند. این نتیجه می دهد که هیستوگرام برای هر مرحله شبیه سازی یا تکرار روزرسانی CV چندین بار جمع می شود). وقتی چندین متغیر بردار در هیستوگرام گنجانده شود، اینها باید از طول یکسانی برخوردار باشند، زیرا اجزای آنها با هم جمع می شوند. به عنوان مثال، اگر ξ, λ و τ به ترتیب سه متغیر ابعاد ۵، ۵ و ۱ هستند، برای هر تکرار ۵ سه قطعه (i) ، ξ_i, λ_i و τ_i (در یک هیستوگرام سه بعدی جمع می شوند).

✓ weights (با متغیرهای بردار به عنوان مشاهدات متعدد از یک متغیر مقیاس پذیر برخورد

کنید؟)

زمینه: هیستوگرام

مقادیر قابل قبول: لیست اعشار جدا شده با اسپیس

مقدار پیش فرض: تمام وزنها برابر با ۱

توضیحات: هنگامی که embVectorColvars روشن است، اجزای هر Colvar چند بعدی با وزن متفاوت جمع می شوند. به عنوان مثال، اگر x و y دو متغیر جداگانه دکارتی هستند که در همان گروه اتم ها تعریف شده اند، هیستوگرام مربوط به D را می توان بر اساس هر اتم وزن کرد: برای

محاسبه نقشه چگالی الکترونی، می توان از وزنها [sel get atomicnumber\$] در تعریف هیستوگرام استفاده کرد.

🔗 تعریف شبکه برای هیستوگرام های چند بعدی

مانند نمودارهای ABF و متادینامیک، هیستوگرام از پارامترهای lowBoundary، upperBoundary و عرض برای تعریف شبکه خود استفاده می کند. اگر یک بلوک پیکربندی histogramGrid rid {...} در پیکربندی هیستوگرام فراهم شود، این مقادیر قابل رد شدن هستند. گزینه های پشتیبانی شده در این بلوک تنظیمات عبارتند از:

✓ lowerBoundaries (مرزهای پایین شبکه)

زمینه: histogramGrid

مقادیر قابل قبول: لیست اعشار جدا شده با اسپیس

توضیحات: این گزینه کوچکترین مرزهای شبکه را تعیین می کند، و هر مقدار تغریف شده با کلمه کلیدی lowerBoundary از هر colvar را نادیده می گیرد. توجه داشته باشید که در هنگام روشن بودن gatherVectorColvars، هر متغیر بردار بطور خودکار به عنوان یک مقیاس سنج رفتار می شود و برای آن باید یک مقدار واحد ارائه شود.

✓ upperBoundaries: مشابه با lowerBoundaries

✓ widths: مشابه با lowerBoundaries

۱۳٫۵٫۸ Probability distribution-restraints

بایاس histogramRestraint پتانسیل مداوم بسیاری از متغیرها (یا یک متغیر تک بعدی) را با هدف باز تولید یک توزیع آماری یک بعدی که توسط کاربر ارائه می شود، پیاده سازی می کند. متغیرهای $(\xi_1, \dots, \xi_M)$ به عنوان مشاهدات متعدد از یک متغیر تصادفی ξ با توزیع احتمال ناشناخته تفسیر می شوند. این پتانسیل هنگامی به دست می آید که هیستوگرام $h(\xi)$ ، به عنوان مجموعه ای از توابع گاوس با محوریت $(\xi_1, \dots, \xi_M)$ تخمین زده شود که برابر است با هیستوگرام مرجع $h_0(\xi)$:

$$V(\xi_1, \dots, \xi_M) = \frac{1}{2}k \int (h(\xi) - h_0(\xi))^2 d\xi \quad (13.27)$$
$$h(\xi) = \frac{1}{M\sqrt{2\pi\sigma^2}} \sum_{i=1}^M \exp\left(-\frac{(\xi - \xi_i)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (13.28)$$

این بایاس هنگامی که در ترکیب با متغیر چندبعدی distancePairs استفاده می شود، این الگوریتم

تصفیه را در برابر آزمایش های ESR / DEER که توسط Shen et al منتشر شده است، پیاده سازی می کند.

این بایاس به طور مشابه با بایاس هیستوگرام با گزینه ی gatherVectorColvars رفتار می کند با این تفاوت مهم که همه متغیرها جمع می شوند، در نتیجه یک هیستوگرام یک بعدی ایجاد می شود. نسخه های آینده شامل پشتیبانی از هیستوگرام های چند بعدی خواهد بود.

لیست گزینه ها به شرح زیر است:

✓ name: تعریف نام (روشهای بایاس و تحلیل) را ببینید

✓ colvars: به تعریف colvar (روشهای بایاس و تحلیل) مراجعه کنید

✓ outputEnergy: به تعریف outputEnergy (روشهای تمایل و تحلیل) مراجعه کنید

✓ lowerBoundary (مرز پایینی شبکه colvar)

زمینه: histogramRestraint

مقادیر قابل قبول: اعشاری

توضیحات: پایین ترین فاصله زمانی را که توزیع مرجع $h^0(\xi)$ تعریف شده است تعریف می کند. دقیقاً یک مقدار باید ارائه شود، زیرا فقط نسخه های یک بعدی توسط نسخه فعلی پشتیبانی می شوند.

✓ upperBoundary: مشابه با LowBoundary

✓ width عرض شبکه colvar

زمینه: histogramRestraint

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

توضیحات: فاصله شبکه را در جایی که توزیع مرجع $h^0(\xi)$ تعریف شده تعریف می کند.

✓ gaussianSigma (انحراف استاندارد از گاوسی تقریبی)

زمینه: histogramRestraint

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

مقدار پیش فرض: عرض ۲

توضیحات: پارامتر σ را در eq تعریف می کند. ۱۳/۲۸.

✓ forceConstant (ثابت نیرو (kcal / mol))

زمینه: histogramRestraint

مقادیر قابل قبول: اعشاری مثبت

مقدار پیش فرض: 10^6

توضیحات: پارامتر k را در معادله ۱۳.۲۷ تعریف می کند.

✓ refHistogram (هیستوگرام مرجع $h^0(\xi)$)

زمینه: histogramRestraint

مقادیر قابل قبول: لیست اعشار مثبت از M جدا شده با اسپیس

توضیحات: مقادیر $h^0(\xi)$ را متوالی ارائه می دهد. کنوانسیون نقطه میانی استفاده می شود، یعنی اولین نکته ای که باید در آن وارد شود برای $lowerBoundary + width / 2$ است. اگر انتگرال $h^0(\xi)$

به نرمالسازی نشده باشد، $h^0(\xi)$ قبل از استفاده بطور خودکار از بین می رود.

✓ refHistogramFile (هیستوگرام مرجع $h^0(\xi)$)

زمینه: histogramRestraint

مقادیر قابل قبول: نام پرونده UNIX

توضیحات: مقادیر $h^0(\xi)$ را به عنوان محتویات پرونده مربوطه (متقابل منحصر به فرد با refHistogram) ارائه می دهد. قالب آن از نوع فایل متنی است که هر سطر حاوی مقادیر فضای جدا شده از ξ و $h^0(\xi)$ است. همان عرف عددی مانند refHistogram استفاده می شود.

✓ writeHistogram (بطور دوره ای هیستوگرام $h^0(\xi)$ بنویسید)

متن: متادینامیک

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: در صورت وجود، $h^0(\xi)$ در هر مرحله colvarsRestartFrequency روی فایلی با نام outputName.<name>.hist.dat نوشته می شود. این برای تشخیص همگرایی $h^0(\xi)$ در برابر $h^0(\xi)$ مفید است.

۱۳,۵,۹ Scripted biases

به جای استفاده از روشهای بایاس که در بالا توضیح داده شد، می توان از تعصبات ارائه شده در زمان اجرا به عنوان اسکریپت Tcl استفاده کرد. این گزینه، همچنین در NAMD موجود است، می تواند برای تست یک الگوریتم جدید که در یک شبیه سازی MD مورد استفاده قرار می گیرد، مفید باشد.

✓ scriptedColvarForces (نیروهای سفارشی و نوشتاری را روی Colvar فعال کنید)

متن: جهانی

مقادیر قابل قبول: boolean

مقدار پیش فرض: خاموش است

توضیحات: در صورت فعال بودن این پرچم، یک روش Tcl با نام calc_colvar_forces که یک پارامتر را بپذیرد، باید توسط کاربر تعریف شود. این کار در هر زمان، با شماره مرحله فعلی به عنوان پارامتر، بین محاسبه colvarها و استفاده از نیروهای بایاس اجرا می شود. این روش ممکن است از دستور cv برای دسترسی به مقادیر colvars و اعمال نیرو بر روی آنها استفاده کند، و به طور موثری بایاس های متغیر جمعی سفارشی را تعریف کند.

فصل چهاردهم

تنظیم بخش‌های VMD

Set up VMD sections

چندین روش برای تغییر رفتار VMD از تنظیمات پیش فرض وجود دارد، هم در نحوه شروع برنامه و هم در نحوه رفتار برنامه در طی یک جلسه. در این فصل فایل‌های داده، گزینه های خط فرمان و متغیرهای محیطی که برای تنظیم یک بخش VMD استفاده می شوند، توصیف شده است.

این فایل ها ظاهر و رفتار اولیه VMD را در ابتدا کنترل می کنند و ممکن است متناسب با سلیقه خاص هر کاربر تنظیم شوند. نسخه های پیش فرض این پرونده ها در دایرکتوری نصب VMD قرار می گیرند (در یونیکس این معمولاً /usr/local/lib/vmd است، در ویندوز این به طور پیش فرض در C:\Program Files\University of Illinois\VMD). هر کاربر ممکن است نسخه های خود را در مورد برخی از این فایل ها مشخص کند، اما اگر این کار انجام نشود، از دستورات و مقادیر موجود در فایل های پیش فرض استفاده می شود. به این ترتیب، یک مدیر ممکن است رفتار پیش فرض VMD را برای همه کاربران تنظیم کند، در حالی که هر کاربر این گزینه داده می شود که هرطور بخواهد رفتار پیش فرض را تغییر دهد. چندین پارامتر قابل تنظیم نیز ممکن است به چند روش تنظیم شود، از جمله استفاده از گزینه های خط فرمان یا متغیرهای محیط. ترتیب تقدم این روشها به شرح زیر است (بالاترین تقدم به کمترین):

➤ گزینه های خط فرمان.

➤ تنظیمات متغیر محیط

➤ پیش فرض داخلی، همانطور که توسط پارامترهای قابل تنظیم مشخص شده است. اینها فقط در صورتی استفاده می شوند که هیچ مقدار دیگری توسط سایر روشهای ذکر شده در این لیست مشخص نشده باشد. راهنمای نصب نحوه تغییر این مقادیر پیش فرض هنگام تهیه VMD را شرح می دهد.

۱۴٫۱ گزینه‌های خط فرمان VMD

زمان شروع، گزینه های خط فرمان زیر ممکن است به VMD داده شود. توجه داشته باشید که اگر گزینه خط دستوری با یک خط تیره (-) شروع نمی شود و جزئی از گزینه دیگر نیست، فرض می شود که نام یک فایل است و پسوند آن با پسوندی که توسط افزونه مناسب ثبت شده است مطابقت دارد. بنابراین، دستور Unix

```
vmd molecule.pdb
```

VMD را شروع کرده و یک مولکول را از پرونده molecule.pdb بارگذاری می کند، در حالی که این دستور

```
vmd molecule.psf molecule.dcd
```

ساختار مربوطه و فایل های مختصات در همان مولکول قرار داده خواهد شد. در سیستم عامل ویندوز، باید فراخوانی VMD را با دستور شروع ویندوز شروع کنید

```
start vmd molecule.pdb
```

✓ -h|--help: خلاصه گزینه های خط فرمان را روی کنسول چاپ کنید.

✓ -e filename: پس از اجرای اولیه، دستورات متن را با نام فایل اجرا کنید و سپس عملکرد

طبیعی را از سر بگیرید.

✓ -python: بعد از شروع، قبل از اجرای دستورات در فایل مشخص شده توسط -e (در صورت

وجود)، به مفسر پایتون بروید و مفسر متن را در حالت پایتون بگذارید.

✓ **filename**: فایل مشخص شده را در راه انداز بارگیری کنید. نوع فایل از پسوند نام فایل مشخص خواهد شد؛ اگر پسوند نام فایل وجود نداشته باشد، و نام پرونده حاوی ۴ حرف باشد، فرض بر این است که کد دسترسی PDB است و بر این اساس بارگیری می شود. در غیر این صورت فرمت PDB فرض می شود.

✓ **<filename> filetype**: فایل مشخص شده را با استفاده از نوع فایل داده شده بارگیری کنید.

✓ **f-**: تمام پرونده های بعدی را در همان مولکول بارگذاری کنید. این پیش فرض است. یک مولکول جدید برای هر فراخوانی از **f-** ایجاد می شود. بنابراین، **f-vmd ۱.۱ pdb-f.۲ pdb.۳** pdb.۱ و pdb.۲ را در همان مولکول و **۳.۳ pdb** در یک مولکول متفاوت قرار می دهد.

✓ **m-**: تمام پرونده های بعدی را در مولکول های جداگانه بارگیری کنید. برای بارگیری چندین مولکول حاوی یک یا چند فایل ممکن است گزینه های **f-** و **m-** چندین بار در خط فرمان مشخص شود.

✓ **-none | caveforms | cave | text | win | dispdev <**: نوع نمایش گرافیکی مورد استفاده را مشخص کنید. دستگاه های نمایشگر احتمالی شامل موارد زیر است:

✱ **win**: یک پنجره نمایش گرافیکی استاندارد.

✱ **text**: پنجره نمایش گرافیکی را ارائه نکنید.

✱ **cave**: از محیط مجازی CAVE برای نمایش استفاده کنید، ویندوز غیرفعال است.

✱ **caveforms**: از محیط مجازی CAVE برای نمایش استفاده کنید و ویندوز را فعال کنید. این با استفاده از **display machine-** مفید است: ° برای نمایش از راه دور ویندوز هنگام CAVE از صفحه محلی استفاده می کند.

✱ **none**: همانند **text**.

با استفاده از گزینه های متن **-dispdev** و **e-** می توان از **VMD** به عنوان فیلتر برای تبدیل پرونده های مختصات به تصاویر ارائه شده استفاده کرد.

✓ **dist z-**: فاصله از صفحه تصویر **VMD** را مشخص کنید.

✓ **y-height**: ارتفاع صفحه تصویر **VMD** را مشخص کنید.

✓ **pos x y-**: موقعیت پنجره نمایش گرافیک را مشخص کنید. موقعیت (x, y) تعداد پیکسل ها از گوشه سمت چپ پایین صفحه نمایش تا گوشه سمت چپ پایین پنجره گرافیکی است.

✓ **size x y-**: اندازه را در پیکسل در پنجره نمایش گرافیکی را مشخص کنید.

✓ **nt-**: عنوان **VMD** را در هنگام راه اندازی نمایش ندهید.

✓ **-eofexit**: هنگام رسیدن EOF در **stdin**، از **VMD** خارج شوید. به عنوان مثال، وقتی یک اسکریپت به **VMD** هدایت می شود. ترکیب متن **input.tcl eofexit -dispdev text vmd** **output.log** > برای اسکریپت نویسی حالت دسته ای ۳۹ مفید است.

✓ **-startup filename**: به جای فایل پیش فرض از نام فایل به عنوان اسکریپت فرمان راه اندازی **VMD** استفاده کنید. **vmdrc** یا **vmd.rc** فایل.

✓ **-args**: آرگومان های خط فرمان بعدی را به مترجم متن منتقل کنید. مترجم **Tcl** این آرگومان ها را در متغیر لیست **argv** ذخیره می کند. به طور پیش فرض، هیچ استدلالی در این متغیر ذخیره نمی شود.

✓ **[-level debug**: خروجی پیام های اشکال زدایی را روشن کنید و به صورت اختیاری سطح اشکال زدایی فعلی را تنظیم کنید (۱= چند پیام ... ۵= بسیاری از پیام های شفاهی). توجه داشته باشید این تنها در صورتی مفید است که **VMD** با گزینه اشکال زدایی گنجانده شده باشد.

۱۴٫۲ Environment Variables (متغیرهای محیطی)

چندین متغیر محیطی توسط **VMD** برای تعیین محل پرونده ها و فهرست های خاص استفاده می شود. این متغیرها از طریق آراییه **env** برای رابط متن قابل دسترسی هستند. این متغیرها عبارتند از:

✓ **DISPLAY**: (تنها با یونیکس) نمایشگر **X-Windows** که **VMD** برای نمایش ویندوزها و منوهای **VMD** و همچنین پنجره گرافیکی باید از آن استفاده کند. اگر این متغیر محیط توسط **VMDGDSP** نادیده گرفته نشود، تمام ویندوزهای **VMD** به این نمایشگر هدایت می شوند.

✓ **VMDDIR**: دایرکتوری حاوی پرونده های داده **VMD** (مانند این فایل راهنما) و اجرایی با معماری خاص. به طور پیش فرض، این **usr / local / lib / vmd /** در سیستم های یونیکس و **C: \ Program Files \ University of Illinois \ VMD** در سیستم های ویندوز است.

✓ **VMDDIR**: دایرکتوری که **VMD** باید برای پرونده های داده موقت استفاده کند. به طور پیش فرض، این **tmp /** یا **usr / tmp** در سیستم های یونیکس و **C: ** در ویندوز است.

✓ **VMDCUSTOMIZESTARTUP**: (فقط یونیکس) نام یک اسکریپت **C-shell** برای منبع قبل از اجرای فرآیند واقعی **VMD**. این اسکریپت پوسته می تواند شامل دستوراتی باشد که برای اجرای فضا مخصوص ماشین، گرافیک و سایر تنظیمات لازم برای اجرای **VMD** لازم است. این می تواند هر چیزی از یک اسکریپت ساده باشد که پورت سریال مناسب برای یک **Spaceball** را بر اساس نام میزبان تنظیم می کند، یا می تواند یک اسکریپت پیچیده برای روشن کردن یک سیستم پروژکتور، ورود به سیستم نمایشی، پیکربندی ویژگی های استریو فریم لاک چند صفحه نمایش و غیره باشد.

✓ **VMDBABELBIN**: مسیر کامل و نام فایل برنامه **babel**، که توسط **VMD** برای تبدیل ساختار / مختصات فایل های مولکولی به فایل های **PDB** که **VMD** در واقع می تواند از آن استفاده کند، استفاده شده است. اگر این صریح تنظیم نشده باشد، اسکریپت راه اندازی **VMD** سعی در یافتن **babel** در مسیر فعلی خواهد کرد. اگر **babel** یافت نشد یا نصب نشده است، **VMD** قادر به خواندن قالب های پرونده مولکولی غیر از فایل های **PSF**، **PDB** و باینری

DCD نخواهد بود.

✓ **VMDFILECHOOSE**: مشخص کننده انتخاب فایل برای بارگیری و ذخیره فایلها از رابط کاربری گرافیکی. در حال حاضر، این باید یا FLTK باشد که از انتخاب کننده فایل مستقل پلتفرم Fltk یا Tk استفاده می کند که از انتخاب پرونده Tk استفاده می کند. انتخاب فایل Tk به طور پیش فرض است و از یک رابط بومی ویندوز در سیستم عامل های ویندوز استفاده می کند. انتخاب کننده فایل Fltk در تمام سیستم عامل ها یکسان به نظر می رسد، از تکمیل برگه پشتیبانی می کند اما حروف درایو را ندارد، و احتمالاً مناسب ترین برای محیط های یونیکس است. انتخاب فایل می تواند در هر زمان با تغییر متغیر محیط (به عنوان مثال، در Tcl، تنظیم FLTK (VMDFILECHOOSE) env) در هر زمان موردنظر قرار گیرد.

✓ **VMDFORCECPUCOUNT**: حداکثر تعداد CPU یا هسته های CPU را که VMD هنگام اجرا بر روی سیستم رایانه ای چند پردازنده یا چند هسته ای باید استفاده کند را مشخص می کند. به طور پیش فرض، VMD از تمام پردازنده های موجود در دستگاه میزبان استفاده می کند. این گزینه می تواند برای جلوگیری از اشغال زیاد CPU با VMD یا ساکن ماندن آن با سیاست های واگذاری کار مورد نیاز در سیستم های سوپرکامپیوتر، هنگام اجرای حالت دسته ای استفاده شود.

✓ **VMDCAVEMEM**: (فقط یونیکس) این اندازه پیش فرض پهنه حافظه مشترک که توسط VMD هنگام شروع CAVE اختصاص می یابد را نادیده می گیرد. متغیر باید عدد صحیحی از مگابایت باشد. از آنجا که این تنها حافظه مشترک به اشتراک گذاشته شده است، و فقط یک بار انجام می شود، باید مقدار کافی را انتخاب کنید تا بزرگترین پهنه مورد نظر برای ارائه در VMD را در بخش CAVE حمل کند. مقدار پیش فرض مگر اینکه ۸۰ مگابایت مشخص شده باشد. مقادیر ۲۰۰MB تا ۵۱۲MB معمولاً برای سیستمهای مولکولی بزرگ حاوی چند صد هزار اتم مورد نیاز است.

✓ **VMDFREEVRMEM**: (فقط یونیکس) این اندازه پیش فرض پهنه حافظه مشترک که توسط VMD هنگام راه اندازی FreeVR اختصاص داده می شود را نادیده می گیرد. متغیر باید عدد صحیحی از مگابایت باشد. از آنجا که این تنها حافظه مشترک به اشتراک گذاشته شده است، و فقط یک بار انجام می شود، شما باید مقدار کافی را انتخاب کنید تا بزرگترین صحنه مورد نظر برای ارائه در VMD را در آن جلسه FreeVR به حساب بیاورید. مقدار پیش فرض مگر اینکه ۸۰ مگابایت مشخص شده باشد. مقادیر ۲۰۰MB تا ۵۱۲MB معمولاً برای سیستمهای مولکولی بزرگ حاوی چند صد هزار اتم مورد نیاز است.

✓ **VMDFORCECONSOLETTY**: (فقط یونیکس)، فقط برای خوشه ها در نظر گرفته شده است) این متغیر محیطی، با وجود آنچه سیستم عامل می گوید، کنسول متن را به عنوان یک ترمینال تعاملی مورد استفاده قرار می دهد، این تنها برای اجرای یک جلسه تعاملی VMD در یک گره خوشه ای Clustermatic یا Scyld Linux مفید است.

✓ **VMDGDISPLAY**: (فقط یونیکس) نام نمایشگر X-Windows که VMD برای نمایش

پنجره گرافیکی از آن استفاده خواهد کرد. این متغیر محیط فقط در سیستم های یونیکس استفاده می شود. با استفاده از متغیرهای environment DISPLAY و VMDGDISPLAY، پنجره گرافیکی VMD را می توان در یک صفحه جداگانه از ویندوز و منوها قرار داد. این امر به ویژه هنگام نمایش تظاهرات ۳ بعدی با استفاده از پروژکتور مفید است. پنجره ها و منوها را می توان در یک صفحه نمایش متفاوت از گرافیک ها نگه داشت تا مخاطب را منحرف نکند.

✓ **VMDGLSLVERBOSE**: خطاهای تشخیصی گرد آورنده زبان Shading OpenGL فقط در صورت تنظیم این متغیر محیط، چاپ می شوند.

✓ **VMDHTMLVIEWER**: نام دستوری که یک مرورگر وب را در پس زمینه اجرا می کند Netscape، Mozilla، Firefox یا هر آنچه را که ترجیح می دهید) که VMD باید از آن برای نمایش اسناد HTML استفاده کند (مانند این فایل راهنما). به طور پیش فرض، در UNIX، این موزیلا است. (مثال های مورد استفاده در

```
Tcl: set env(VMDHTMLVIEWER) "mozilla-remote openURL(%s)", set env-  
v(VMDHTMLVIEWER)  
"mozilla %s &")
```

✓ **VMDIMAGEVIEWER**: نام برنامه خارجی برای استفاده برای نمایش عکس های فوری VMD (یا تصاویر دیگر)، در قالب های مختلف.

✓ **VMDIMMERSADESKFLIP**: یک حالت ویژه پیش نمایش استریو معکوس / بازتاب شده برای استفاده را فعال کنید نمایشگرهای آزمایشی مبتنی بر پانل های LCD، صفحات فاز و شکاف پرتو.

✓ **VMDMACENABLEEEEXTENSIONS**: پسوندهای ارائه دهنده OpenGL عملکرد گرا را که به طور پیش فرض غیرفعال هستند فعال کنید. این الحاقات برای ایجاد ناپایداری در برخی از سیستم های MacOS X مشاهده شده است.

✓ **VMDMAXAASAMPLES**: حداکثر عمق نمونه خوش نماسازی چند نمونه OpenGL درخواستی را با یک مقدار مشخص شده توسط کاربر را نادیده بگیرید. پیش فرض VMD معمولاً ۸ نمونه در هر پیکسل است. برخی از کارتهای ویدئویی با تعداد زیادی از نمونه های خوش نماسازی ۴۰ عملکرد ضعیفی نشان می دهند و باید به ۵ یا نمونه کمتر در هر پیکسل محدود شود.

✓ **VMDMSECDELAYHACK**: تأخیر تعیین شده توسط کاربر را اضافه کنید که باعث می شود VMD هر بار که صحنه مولکولی را روی صفحه نمایش می دهد، برای مدت مشخصی از میلی ثانیه بخوابد. این ویژگی به عنوان راه حلی برای درایورهای نمایشگر ضعیف است که باعث می شود اگر سیستم VMD مجاز به اجرای بدون محدودیت در حداکثر نرخ ترسیم باشد، سیستم پنجره پاسخگو نباشد.

✓ **VMD: VMDMSMSUSEFILE** را طوری راه اندازی کنید تا از طریق رابط شبکه مبتنی بر سوکت، با MSMS از طریق سیستم فایل ارتباط برقرار کند. از این گزینه می توان استفاده کرد که رابط سوکت به دلایلی به درستی کار نکند. این رفتار پیش فرض هنگام استفاده از VMD

در ویندوز است.

✓ **VMD: VMDNOCUDA**: راه اندازی کنید که از شتاب GPU مبتنی بر CUDA استفاده نکند، حتی اگر پشتیبانی CUDA در آن تدوین شده باشد، و دستگاههای دارای توانایی CUDA در هنگام راه اندازی شناسایی می شوند. این می تواند در مواردی استفاده شود که درایورهای GPU یا GPU برای محاسبات غیرقابل اعتماد باشند، برای محک زدن در مقابل پیاده سازی های فقط CPU، و برای جلوگیری از استفاده VMD از یک GPU که قبلاً توسط سایر فرایندهای اجرا در همان دستگاه مشترک باشد.

✓ **VMD: VMDCUDADEVICEMASK**: این متغیر محیطی، VMD را برای اجرای الگوریتم های شتابدهنده GPU در یک زیر مجموعه خاص از GPU ها، مبتنی بر ماسک شش ضلعی محدود می کند. به عنوان مثال، برای اجازه دادن به ارائه تنها دو GPU اول، یکی از این ماسک ها را بر روی 2^x تنظیم می کند. برای استفاده از تنها GPU دوم، ماسک 2^x تنظیم می شود.

✓ **VMD: VMDDISABLESTEREO**: (یونیکس) از فعال کردن ویژگی های صفحه نمایش استریوسکوپ VMD جلوگیری می کند. این معمولاً فقط به عنوان راه حل برای درایورهای صفحه نمایش باگی استفاده می شود.

✓ **VMD: VMDPREFERSTEREO**: (یونیکس، MacOS X) در سیستم های یونیکس با استفاده از X11، این متغیر محیطی به کاربران NVidia Quadro اجازه می دهد تا از جستجوی بصری معمولی X11 نادیده بگیرند، و از جستجوی تصاویری با قابلیت چند نمونه به نفع تصاویر استریو استفاده کنید. VMD هنوز هم در ابتدای سعی دارد تا تصاویر پیچیده تری را به دست آورد، اما در صورت انتخاب بین استریو و چند نمونه به عنوان گزینه های متقابل منحصر به فرد، این متغیر توانایی مجبور کردن استفاده از استریو در صورت موجود را فراهم می کند. در MacOS X، این متغیر محیطی به VMD می گوید که در صورت رد درخواست، یک پنجره نمایشگر استریو را ایجاد کند، حتی در معرض خطر خاتمه برنامه باشد.

✓ **VMD: VMDSCRDIST**: فاصله تا صفحه تصویر VMD.

✓ **VMD: VMDSCRHEIGHT**: ارتفاع صفحه تصویر VMD.

✓ **VMD: VMDSCRPOS**: موقعیت پنجره گرافیکی (x، y). VMD،

✓ **VMD: VMDSCRSize**: اندازه پنجره گرافیکی (x، y). VMD،

✓ **VMD: VMD_EXCL_GL_EXTENSIONS**: استفاده از پسوندهای OpenGL را مطابق با نامهای رسمی افزونه OpenGL غیرفعال کنید. این در حالی است که فقط در هنگام مواجهه با مشکلات پایداری شدید ناشی از درایورهای صفحه نمایش باگی، مورد استفاده قرار می گیرد.

✓ **VMD: VMDSHEARSTEREO**: استفاده از یک حالت طرح ریزی پرسپکتیو جایگزین را که می تواند باعث بهبود صفحه نمایش استریوسکوپ شود را فعال کنید. بیشتر از فرمول استریو ماتریس برش یو نه چرخش چشم استفاده می کند.

✓ **VMD: VMDSIMPLEGRAPHICS**: راه مجبور به استفاده از ویژگیهای گرافیکی کاملاً حداقلی و بدون استفاده از پسوندهای OpenGL می کند. در اصل، چیزی جز آرایه های راس

bread-and-butter و رندر حالت فوری استفاده نخواهد شد. این حالت فقط در شرایطی استفاده می شود که شخص با مشکلات پایداری شدید ناشی از درایورهای صفحه نمایش دارای اشکال مواجه باشد.

✓ **VMD: VMDWIREGL**: این متغیر محیطی چندین ویژگی گرافیکی را توسط WireGL و Chromium که پشتیبانی نمی شوند (یا ضعیف پشتیبانی می شوند) را غیرفعال می کند. این متغیر با اجرای عمومی تر در نسخه آینده جبران خواهد شد.

✓ **VMD: VMDOPTIXDEVICE**: این متغیر محیطی، VMD را برای انجام ردیابی پرتوهای شتاب یافته GPU OptiX در یک پردازنده گرافیکی خاص محدود می کند.

✓ **VMD: VMDOPTIXDEVICEMASK**: این متغیر محیطی، VMD را برای انجام ردیابی شعاع GPU OptiX در زیر مجموعه خاصی از GPU ها، بر اساس یک ماسک شش ضلعی محدود می کند. به عنوان مثال، برای اجازه دادن به ارائه تنها دو GPU اول، یکی از این ماسک ها را بر روی 2^x تنظیم می کند. برای استفاده از تنها GPU دوم، ماسک 2^x تنظیم می شود.

✓ **VMD: VMDOPTIXNODISPLAYGPUS**: این متغیر محیطی، VMD را برای انجام ردیابی پرتوهای GPUaccelerated OptiX در پردازنده های GPU که به صفحه نمایش وصل نیستند، محدود می کند تا از ایجاد طولانی مدت حالت دسته ای تفاسیر OptiX با مداخله در جلسات تعاملی VMD یا سایر برنامه های رومیزی جلوگیری کند.

✓ **VMD: VMDOPTIX_CLUSTER**: این متغیر محیط، URL دسترسی از راه دور را برای تفاسیر VMD OptiX روی خوشه های از راه دور NVIDIA VCA تعیین می کند.

✓ **VMD: VMDOPTIXVCACONFIG**: این متغیر محیطی، فهرست پیکربندی رندر خوشه ای VCA را برای رندهای VMD OptiX بر روی خوشه های از راه دور NVIDIA VCA، به عنوان مثال، برای به نفع افزایش تجزیه موازی تصویر-فضا، یا برعکس برای افزایش عملکرد نمونه گیری تصادفی انتخاب می کند.

✓ **VMD: VMDOPTIXVCANODES**: تعداد گره های خوشه ای VCA برای درخواست بخش رندر تعاملی VMD OptiX.

✓ **VMD: VMDOPTIX_USER**: این متغیر محیط نام کاربر از راه دور را برای رندهای VMD OptiX در خوشه های از راه دور NVIDIA VCA تعیین می کند.

✓ **VMD: VMDOPTIX_PASSWD**: این متغیر محیط، رمز عبور دسترسی از راه دور را برای تفاسیر VMD OptiX بر روی خوشه های از راه دور NVIDIA VCA تعیین می کند.

✓ **VMD: VMDOPTIXBITRATE**: این متغیر محیط بیت مورد استفاده برای پخش از راه دور ویدئو را کنترل می کند وقتی VMD ردیابی شعاع متقابل را بر روی خوشه NVIDIA VCA از راه دور انجام می دهد. یک مقدار معمولی خوب برای وضوح بالا، به عنوان مثال، تصاویر تصاویر 4K، ۱۵۰۰۰۰۰۰ خواهد بود.

✓ **VMD: VMDOPTIXBUILDER**: این متغیر محیط اجازه می دهد تا ساختار شتاب پیش فرض سریع اما حافظه فشرده «Trbv» توسط «MedianBvh» یا الگوریتم های دیگر که به این

سرعتی نیستند نادیده گرفته شود، اما هنگام ارائه صدها میلیون شی که می توانند حافظه GPU بسیار کمتری داشته باشند. در غیر این صورت باعث خطای GPU خارج از حافظه می شوید.

✓ **VMDOPTIXIMAGESIZE**: این متغیر محیطی به کاربر اجازه می دهد تا با جبار از وضوح تصاویر اجرا شده نادیده گرفته شود، و پارامترهای ارتفاع و عرض تصویر ورودی را که معمولاً از VMD استفاده می کند نادیده بگیرد. این متغیر به ویژه هنگام ترکیب ردیابی شعاع تعاملی با VR HMD، که در آن ابعاد تصویر ردیابی شده اشعه به طور کلی باید بیش از ۳ resolution وضوح افقی بالاتر از صفحه نمایش VR HMD، و حداقل وضوح عمودی ۲ useful بالاتر باشد، مفید است.

✓ **VMDOPTIXAOMAXDIST**: این متغیر محیط، حداکثر فاصله انسداد در مختصات چشم را به جای پیش فرض بی نهایت، برای استفاده هنگام محاسبه عامل انسداد محیط برای یک نقطه ضربه مشخص می کند. با قرار دادن این مقدار کم تا متوسط، ناحیه داخلی سازه های بسته مانند کپسید ویروس با سایه های نرم همانطور که با AO معمولی انجام می شود، روشن خواهد شد. بدون کاهش فاصله انسداد، سطوح بسته کاملاً در سایه قرار می گیرند.

✓ **VMDOPTIXHEADLIGHT**: این متغیر محیط، یک نور موقعیتی را که همیشه در مرکز پروژکتور قرار دارد، برای فضای داخلی کپسیدهای ویروس و موارد مشابه مفید می سازد.

✓ **VMDOPTIXDOMEMASTER**: این متغیر محیطی به کاربر اجازه می دهد تا به زور از حالت طرح ریزی فعال فعلی VMD ۳-D پرهیز کند (فقط «Orthographic» یا «Perspective» در حال حاضر در رندر مبتنی بر OpenGL اجرا می شوند)، به ردیاب شعاع OptiX اجازه می دهد تا تصاویر نیمکره ای را برای اینگونه تولید کند. سیستم های طرح ریزی «فولدوم» نامیده می شوند مانند سیستم هایی که معمولاً در نمای دیجیتالی مورد استفاده قرار می گیرند.

✓ **VMDOPTIXEOUIRECTANGULAR**: این متغیر محیطی به کاربر اجازه می دهد تا به زور از حالت طرح ریزی فعال فعلی VMD ۳-D پرهیز کند (فقط «Orthographic» یا «Perspective» در حال حاضر در رندر مبتنی بر OpenGL اجرا می شوند)، به ردیاب پرتوی OptiX اجازه می دهد فیلم های VR همه سویی تولید کند، به عنوان مثال. برای YouTube

✓ **VMDOPTIXSTEREO**: این متغیر محیطی به کاربر اجازه می دهد تا با جبار از حالت طرح ریزی سه بعدی استریوسکوپی فعال فعلی VMD که در حال حاضر فعال است نادیده گرفته شود و به ردیاب اشعه OptiX اجازه دهد فیلم های VR همه گیرنده استریوسکوپی تولید کند، به عنوان مثال. برای YouTube

✓ **VMDOSPRAYAOMAXDIST**: این متغیر محیط، حداکثر فاصله انسداد در مختصات چشم را به جای پیش فرض بی نهایت، برای استفاده هنگام محاسبه عامل انسداد محیط برای یک نقطه ضربه مشخص می کند. با قرار دادن این مقدار کم تا متوسط، ناحیه داخلی سازه های بسته مانند کپسید ویروس با سایه های نرم همانطور که با AO معمولی انجام می شود، روشن خواهد شد. بدون کاهش فاصله انسداد، سطوح بسته کاملاً در سایه قرار می گیرند.

✓ **VMDOSPRAYMPI**: این متغیر محیط امکان استفاده از حالت رندر حافظه توزیع شده

MPI از OSPRay را در صورت استفاده از VMD در کتابخانه OSPRay فراهم می کند.

✓ **VMDOSPRAYIMAGESIZE**: این متغیر محیطی به کاربر اجازه می دهد تا به وضوح از وضوح تصاویر برای رؤیت نادیده گرفته شود، و پارامترهای ارتفاع و عرض تصویر ورودی را که معمولاً از VMD استفاده می کند نادیده بگیرد. این متغیر محیطی امکان تغییر تصاویر بسیار بزرگ را بدون تغییر وضوح صفحه نمایش VMD آسان می کند.

Startup Files ۱۴,۳

Core Script Files ۱۴,۳,۱

در ادامه، مقدار **VMDDIR** \$ دایرکتوری نصب vmd است. در طول نصب اصلی این مقدار **INSTALLLIBDIR** است. همچنین می توانید با نگاه کردن به چند سطر اول از اسکریپت راه اندازی vmd `which vmd (head ')` یا با شروع VMD و با استفاده از مجموعه فرمان `set env (VMDDIR)` پیدا کنید. همانطور که در جای دیگر ذکر شد، VMD از مفسر Tcl استفاده می کند. VMD اسکریپت های Tcl را در ابتدا، که در توزیع VMD وجود دارد، می خواند. مکان اسکریپت ها توسط متغیر محیط TCL **LIBRARY** تعیین می شود، که در اسکریپت راه اندازی vmd روی `tcl / scripts / VMDDIR $` تنظیم شده است. علاوه بر این، VMD دارای فهرست خاص خود در مورد روالهای اصلی Tcl است. مهمترین این `scripts / vmd / vmdinit.tcl` \$VMDDIR است. این پرونده دستورات اولیه سازی Tcl را تنظیم می کند، برخی از متغیرهای محیط را تعریف می کند و فهرست اسکریپت vmd را به مسیر `autoindex` Tcl اضافه می کند. بیشتر پرونده های دیگر از طریق مسیر خودکار ارجاع می شوند. چند اسکریپت غیر Tcl در این فهرست وجود دارد. در حال حاضر این اسکریپت های perl هستند که برای دستور `urllload` و راه اندازی وب سرویس گیرنده استفاده می شوند (به بخش ۹,۳/۲ و بخش ۱۴,۴ مراجعه کنید).

User Script Files ۱۴,۳,۲

یک فایل دستور زمان اجرا نوشته شده توسط کاربر، `vmdrc` در یونیکس، `vmd.rc` در ویندوز، می تواند با لیستی از دستورات متن اولیه VMD برای پردازش استفاده شود. این پرونده ممکن است برای سفارشی کردن ظاهر اولیه صفحه شخصی کاربر و تنظیم ویژگی های مناسب نمایش برای نمایش در استریو تغییر یابد. اگر وجود نداشته باشد از مقادیر پیش فرض استفاده می شود.

بعد از شروع همه چیز، VMD فایل راه اندازی را با استفاده از معادل بازی دستور vmdrc می خواند. این پرونده شامل دستورات متنی است که برای اجرای VMD درست مثل اینکه در دستورات کنسول متن VMD وارد شده باشد. این پرونده می تواند شامل هر تعداد دستور باشد، از جمله خطوط خالی و خطوط نظر (که با کاراکتر # شروع می شوند). اگر هنگام خواندن این پرونده خطایی رخ داد، دستور خطا رد می شود و پردازش پرونده ادامه می یابد.

VMD این پرونده را در سه مکان در یونیکس جستجو می کند. ./. vmdrc، \$HOME و vmdrc \$VMDDIR /. در ویندوز، VMD در ./. vmd.rc، \$HOME و vmd.rc \$VMDDIR /. را جستجو می کند. فقط اولین پرونده موجود در آن خوانده شده و پردازش می شود.

برای توصیف دستورات متن VMD که ممکن است در این پرونده وجود داشته باشد، به فصل ۹ مراجعه کنید. همچنین در بخش ۵/۱۳ چگونگی قرار دادن دستورات در پرونده vmdrc برای شخصی سازی رفتار کلیدهای داغ بحث شده است. در اینجا نمونه ای از پرونده راه اندازی آورده شده است:

```
# add personalized keyboard shortcuts
user add key E echo on
user add key e echo off
user add key g display reset
user add key A stage location bottom
user add key m mol list
# position the stage and axes
axes location lowerleft
stage location off
# position and turn on menus
menu main move 5 196
menu display move 386 90
menu graphics move 5 455
menu files move 5 496
menu main on
# start the scene a-rockin'
rock y by 1
```

۱۴,۴ (Using VMD as a WWW Client (for chemical/* documents

موزاییک، نت نت و احتمالاً سایر مرورگرها می توانند پیکربندی شوند تا از VMD به عنوان یک برنامه کمکی برای مشاهده برخی اسناد شیمیایی / * استفاده کنند.

۱۴,۴,۱ MIME types

هنگامی که یک مرورگر وب سندی را از سرور دریافت می کند، در واقع دو قطعه اطلاعات به دست می آید: سرتیترا ۴۱ و بدنه. این سرتیترا حاوی اطلاعاتی در مورد پیام و بدن است. یکی از مهمترین قطعه داده ها، به نام نوع MIME، آنچه در متن توصیف می شود را مشخص می کند. به عنوان مثال، به یک تصویر GIF نوع MIME از تصویر gif داده می شود، یک تصویر JPEG تصویر jpg است و ارسال نامه برنامه / ارسال است. طبقه ای از انواع، chemical/*، برای مدل های شیمیایی ایجاد شده است بنابراین نوع MIME برای فایل های chemical/pdb، PDB است، برای XYZ chemical/xyz و غیره است.

🔗 برنامه های کمکی

مرورگر وب از نوع MIME برای تعیین چگونگی مشاهده بدنه پیام استفاده می کند. برخی از اسناد توسط خود مرورگر مشاهده می شوند، مانند text/html که اسناد HTML را توصیف می کند. در موارد دیگر، مرورگر مجبور است برنامه دیگری راه اندازی کند. از اینجا به بعد، ما شرح خواهیم داد که چگونه Mosaic و Netscape این کار را انجام می دهند. ابتدا، پیغام پیام دریافتی را در پرونده موقت ذخیره می کند. سپس پرونده های نامه پستی جهانی و محلی را اسکن می کند تا مشخص کند کدام برنامه برای مشاهده نوع MIME داده شده استفاده می شود. برنامه، که باید یک نام پرونده را در خط فرمان بگیرد، سپس اجرا می شود. با خارج شدن برنامه، پرونده موقت حذف می شود.

۱۴,۴,۲ Setting up your .mailcap

نسخه های یونیکس از VMD دارای یک پرچم خط فرمان فوق العاده whelhelper است که باعث می شود VMD در پس زمینه شروع نشود، به طوری که زمان خواندن فایل های موقت بارگیری شده توسط مرورگر وب را دارد. این پرچم خط فرمان فقط کمی ساده تر از اسکریپت Chemical۲vmd است، زیرا بستگی به نصب پرل ندارد، بنابراین ممکن است برای بعضی موارد مناسب تر باشد. در دایرکتوری نصب VMD (\$VMDDIR / scripts / vmd) یک اسکریپت perl به نام Chemical۲vmd وجود دارد که یک فایل دستور VMD ایجاد کرده و VMD را اجرا می کند. از آنجا که VMD فرایند فراخوانی را مسدود نمی کند، Netscape و دیگر مرورگرهای وب نمی توانند مستقیماً با VMD تماس بگیرند، زیرا آنها نمی دانند چه موقع پرونده موقت حاوی مولکول یا داده های دیگر را حذف کنید. اسکریپت VMD Chemical۲vmd را با گزینه خط فرمان e- شروع می کند که اسکریپت

VMD یا پرونده مولکول ذخیره شده را اجرا می کند.

همچنین امکان نصب اسکریپت قبلی در پرونده جهانی. mailcap وجود دارد تا در دسترس همه قرار گیرد. برای اطلاع از چگونگی استفاده از مرورگر (های) وب خود باید با اسناد و مدارک مشاوره کنید

Example sites ۱۴,۴,۳

برخی از وب سایت های ارسال کننده انواع chemical/pdb عبارتند از: پروتئین داده بانکی در <http://www.rcsb.org/> و «Molecules R US» در <http://www.nih.gov/htbin/pdb>.

1. William Humphrey, Andrew Dalke, and Klaus Schulten. VMD - Visual Molecular Dynamics. J. Mol. Graphics, 14:33-38, 1996.

2. R. Sharma, T. S. Huang, V. I. Pavlovic, K. Schulten, A. Dalke, J. Phillips, M. Zeller, W. Humphrey, Y. Zhao, Z. Lo, and S. Chu. Speech/gesture interface to a visual computing environment for molecular biologists. In Proceedings of 13th ICPR 96, volume 3, pages 964-968, 1996.

3. Rajeev Sharma, Michael Zeller, Vladimir I. Pavlovic, Thomas S. Huang, Zion Lo, Stephen Chu, Yunxin Zhao, James C. Phillips, and Klaus Schulten. Speech/gesture interface to a visual-computing environment. IEEE Comp. Graph. App., 20:29-37, 2000.

4. Simon Cross, Michelle M. Kuttell, John E. Stone, and James E. Gain. Visualization of cyclic and multi-branched molecules with VMD. J. Mol. Graph. Model., 28:131-139, 2009.

5. John E. Stone, Axel Kohlmeyer, Kirby L. Vandivort, and Klaus Schulten. Immersive molecular visualization and interactive modeling with commodity hardware. Lect. Notes in Comp. Sci., 6454:382-393, 2010.

6. John E. Stone, Kirby L. Vandivort, and Klaus Schulten. Immersive out-of-core visualization of large-size and long-timescale molecular dynamics trajectories. Lect. Notes in Comp. Sci., 6939:1-12, 2011.

7. John E. Stone, William R. Sherman, and Klaus Schulten. Immersive molecular visualization with omnidirectional stereoscopic ray tracing and remote rendering. 2016 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshop (IPDPSW), pages 1048-1057, 2016.

8. Michael Zeller, James C. Phillips, Andrew Dalke, William Humphrey, Klaus Schulten, Rajeev Sharma, T. S. Huang, V. I. Pavlovic, Y. Zhao, Z. Lo, and S. Chu. A visual computing environment for very large scale biomolecular modeling. In Proceedings of the 1997 IEEE International Conference on Application-specific Systems, Architectures and Processors (ASAP), pages 3-12. IEEE Computer Society Press, 1997.

9. John E. Stone, Justin Gullingsrud, Paul Grayson, and Klaus Schulten. A system for interactive molecular dynamics simulation. In John F. Hughes and Carlo H. Séquin, editors, 2001 ACM Symposium on Interactive 3D Graphics, pages 191-194, New York, 2001. ACM SIGGRAPH.

10. Matthieu Chavent, Tyler Reddy, Joseph Goose, Anna Caroline E. Dahl, John E. Stone, Bruno Jobard, and Mark S.P. Sansom. Methodologies for the analysis of instantaneous lipid diffusion in MD simulations of large membrane systems. Faraday Discuss., 169:455-475, 2014.

11. Benjamin G. Levine, John E. Stone, and Axel Kohlmeyer. Fast analysis of molecular dynamics trajectories with graphics processing units-radial distribution function histogramming. J. Comp. Phys., 230:3556-3569, 2011.

12. John Stone and Mark Underwood. Rendering of numerical flow simulations using MPI. In Second MPI Developer's Conference, pages 138-141. IEEE Computer Society Technical Committee on Distributed Processing, IEEE Computer Society Press, 1996.

13. John E. Stone. An Efficient Library for Parallel Ray Tracing and Animation. Master's thesis, Computer Science Department, University of Missouri-Rolla, April 1998.

14. John E. Stone, Barry Isralewitz, and Klaus Schulten. Early experiences scaling VMD molecular visua

متابع

Sources

- 28.** John E. Stone, Juan R. Perilla, C. Keith Cassidy, and Klaus Schulten. GPU-accelerated molecular dynamics clustering analysis with OpenACC. In Robert Farber, editor, *Parallel Programming with OpenACC*, pages 215-240. Morgan Kaufmann, Cambridge, MA, 2016.
- 29.** John E. Stone, Jan Saam, David J. Hardy, Kirby L. Vandivort, Wen-mei W. Hwu, and Klaus Schulten. High performance computation and interactive display of molecular orbitals on GPUs and multi-core CPUs. In *Proceedings of the 2nd Workshop on General-Purpose Processing on Graphics Processing Units*, ACM International Conference Proceeding Series, volume 383, pages 9-18, New York, NY, USA, 2009. ACM.
- 30.** John E. Stone, David J. Hardy, Jan Saam, Kirby L. Vandivort, and Klaus Schulten. GPUaccelerated computation and interactive display of molecular orbitals. In Wen-mei Hwu, editor, *GPU Computing Gems*, chapter 1, pages 5-18. Morgan Kaufmann Publishers, 2011.
- 31.** John E. Stone, Michael J. Hallock, James C. Phillips, Joseph R. Peterson, Zaida LutheySchulten, and Klaus Schulten. Evaluation of emerging energy-efficient heterogeneous computing platforms for biomolecular and cellular simulation workloads. *2016 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshop (IPDPSW)*, pages 89-100, 2016.
- 32.** John E. Stone, Antti-Pekka Hynninen, James C. Phillips, and Klaus Schulten. Early experiences porting the NAMD and VMD molecular simulation and analysis software to GPUaccelerated OpenPOWER platforms. *Lect. Notes in Comp. Sci.*, 9945:188-206, 2016.
- 33.** Michael Krone, John E. Stone, Thomas Ertl, and Klaus Schulten. Fast visualization of Gaussian density surfaces for molecular dynamics and particle system trajectories. In *EuroVis Short Papers 2012*, pages 67-71, 2012.
- 34.** Elijah Roberts, John E. Stone, and Zaida Luthey-Schulten. Lattice microbes: Highperformance stochastic simulation method for the reaction-diffusion master equation. *J. Comp. Chem.*, 34:245-255, 2013.
- 35.** John E. Stone, Kirby L. Vandivort, and Klaus Schulten. GPU-accelerated molecular visualization on petascale supercomputing platforms. In *Proceedings of the 8th International Workshop on Ultrascale Visualization, UltraVis '13*, pages 6:1-6:8, New York, NY, USA, 2013. ACM.
- 36.** Melih Sener, John E. Stone, Angela Barragan, Abhishek Singharoy, Ivan Teo, Kirby L. Vandivort, Barry Isralewitz, Bo Liu, Boon Chong Goh, James C. Phillips, Lena F. Kourkoutis, C. Neil Hunter, and Klaus Schulten. Visualization of energy conversion processes in a light harvesting organelle at atomic detail. In *Proceedings of the International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, SC '14*. IEEE Press, 2014.
- 37.** Juan R. Perilla, Boon Chong Goh, John Stone, and Klaus Schulten. Chemical visualization of human pathogens: the Retroviral Capsids. *Proceedings of the 2015 ACM/IEEE Conference on Supercomputing*, 2015. (4 pages).
- 38.** John E. Stone, Melih Sener, Kirby L. Vandivort, Angela Barragan, Abhishek Singharoy, Ivan Teo, Joao V. Ribeiro, Barry Isralewitz, Bo Liu, Boon Chong Goh, James C. Phillips, Craig MacGregor-Chatwin, Matthew P. Johnson, Lena F. Kourkoutis, C. Neil Hunter, and Klaus Schulten. Atomic detail visualization of photosynthetic membranes with GPU-accelerated ray

ization and analysis jobs on Blue Waters. In *Extreme Scaling Workshop (XSW)*, 2013, pages 43-50, Aug. 2013.

- 15.** I. Wald, G. Johnson, J. Amstutz, C. Brownlee, A. Knoll, J. Jeffers, J. Gunther, and P. Navratil. OSPRay - a CPU ray tracing framework for scientific visualization. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, 23(1):1-1, 2017.
- 16.** John E. Stone, James C. Phillips, Peter L. Freddolino, David J. Hardy, Leonardo G. Trabuco, and Klaus Schulten. Accelerating molecular modeling applications with graphics processors. *J. Comp. Chem.*, 28:2618-2640, 2007.
- 17.** John D. Owens, Mike Houston, David Luebke, Simon Green, John E. Stone, and James C. Phillips. GPU computing. *Proc. IEEE*, 96:879-899, 2008.
- 18.** Christopher I. Rodrigues, David J. Hardy, John E. Stone, Klaus Schulten, and Wen-mei W. Hwu. GPU acceleration of cutoff pair potentials for molecular modeling applications. In *CF'08: Proceedings of the 2008 conference on Computing Frontiers*, pages 273-282, New York, NY, USA, 2008. ACM.
- 19.** David J. Hardy, John E. Stone, and Klaus Schulten. Multilevel summation of electrostatic potentials using graphics processing units. *J. Paral. Comp.*, 35:164-177, 2009.
- 20.** Volodymyr Kindratenko, Jeremy Enos, Guochun Shi, Michael Showerman, Galen Arnold, John E. Stone, James Phillips, and Wen-mei Hwu. GPU clusters for high performance computing. In *Cluster Computing and Workshops, 2009. CLUSTER '09. IEEE International Conference on*, pages 1-8, 2009.
- 21.** John E. Stone, David J. Hardy, Ivan S. Ufimtsev, and Klaus Schulten. GPU-accelerated molecular modeling coming of age. *J. Mol. Graph. Model.*, 29:116-125, 2010.
- 22.** John E. Stone, David Gohara, and Guochun Shi. OpenCL: A parallel programming standard for heterogeneous computing systems. *Comput. in Sci. and Eng.*, 12:66-73, 2010.
- 23.** Jeremy Enos, Craig Steffen, Joshi Fullop, Michael Showerman, Guochun Shi, Kenneth Esler, Volodymyr Kindratenko, John E. Stone, and James C. Phillips. Quantifying the impact of GPUs on performance and energy efficiency in HPC clusters. In *International Conference on Green Computing*, pages 317-324, 2010.
- 24.** John E. Stone, David J. Hardy, Barry Isralewitz, and Klaus Schulten. GPU algorithms for molecular modeling. In Jack Dongarra, David A. Bader, and Jakub Kurzak, editors, *Scientific Computing with Multicore and Accelerators*, chapter 16, pages 351-371. Chapman & Hall/CRC Press, 2011.
- 25.** David J. Hardy, Zhe Wu, James C. Phillips, John E. Stone, Robert D. Skeel, and Klaus Schulten. Multilevel summation method for electrostatic force evaluation. *J. Chem. Theor. Comp.*, 11:766-779, 2015.
- 26.** John E. Stone, Ryan McGreevy, Barry Isralewitz, and Klaus Schulten. GPU-accelerated analysis and visualization of large structures solved by molecular dynamics flexible fitting. *Faraday Discuss.*, 169:265-283, 2014.
- 27.** Abhishek Singharoy, Ivan Teo, Ryan McGreevy, John E. Stone, Jianhua Zhao, and Klaus Schulten. Molecular dynamics-based refinement and validation with Resolution Exchange MDFF for sub-5 Å cryo-electron microcopy maps. *eLife*, 10.7554/eLife.16105, 2016. (66 pages).

dynamics simulations. *J. Chem. Phys.*, 121:2904-2914, 2004.

53. J. H´enin, G. Fiorin, C. Chipot, and M. L. Klein. Exploring multidimensional free energy landscapes using time-dependent biases on collective variables. *J. Chem. Theory Comput.*, 6(1):35-47, 2010.

54. A. Carter, E. G. Ciccotti, J. T. Hynes, and R. Kapral. Constrained reaction coordinate dynamics for the simulation of rare events. *Chem. Phys. Lett.*, 156:472-477, 1989.

55. M. J. Ruiz-Montero, D. Frenkel, and J. J. Brey. Efficient schemes to compute diffusive barrier crossing rates. *Mol. Phys.*, 90:925-941, 1997.

56. W. K. den Otter. Thermodynamic integration of the free energy along a reaction coordinate in cartesian coordinates. *J. Chem. Phys.*, 112:7283-7292, 2000.

57. Giovanni Ciccotti, Raymond Kapral, and Eric Vanden-Eijnden. Blue moon sampling, vectorial reaction coordinates, and unbiased constrained dynamics. *ChemPhysChem*, 6(9):1809-1814, 2005.

58. A. Lesage, T. Leli`evre, G. Stoltz, and J. H´enin. Smoothed biasing forces yield unbiased free energies with the extended-system adaptive biasing force method. *J. Phys. Chem. B.* (submitted).

59. A. Laio and M. Parrinello. Escaping free-energy minima. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 99(20):12562-12566, 2002.

60. Helmut Grubmüller. Predicting slow structural transitions in macromolecular systems: Conformational flooding. *Phys. Rev. E*, 52(3):2893-2906, Sep 1995.

61. T. Huber, A. E. Torda, and W.F. van Gunsteren. Local elevation - A method for improving the searching properties of molecular-dynamics simulation. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*, 8(6):695-708, DEC 1994.

62. G. Bussi, A. Laio, and M. Parrinello. Equilibrium free energies from nonequilibrium metadynamics. *Phys. Rev. Lett.*, 96(9):090601, 2006.

63. Alessandro Barducci, Giovanni Bussi, and Michele Parrinello. Well-tempered metadynamics: A smoothly converging and tunable free-energy method. *Phys. Rev. Lett.*, 100:020603, 2008.

64. P. Raiteri, A. Laio, F. L. Gervasio, C. Micheletti, and M. Parrinello. Efficient reconstruction of complex free energy landscapes by multiple walkers metadynamics. *J. Phys. Chem. B*, 110(8):3533-9, 2005.

65. Yuqing Deng and Benoît Roux. Computations of standard binding free energies with molecular dynamics simulations. *J. Phys. Chem. B*, 113(8):2234-2246, 2009.

66. Jed W. Pitera and John D. Chodera. On the use of experimental observations to bias simulated ensembles. *J. Chem. Theory Comput.*, 8:3445-3451, 2012.

67. A. D. White and G. A. Voth. Efficient and minimal method to bias molecular simulations with experimental data. *J. Chem. Theory Comput.*, ASAP, 2014.

tracing. *Parallel Computing*, 55:17-27, 2016.

39. Steven G. Parker, James Bigler, Andreas Dietrich, Heiko Friedrich, Jared Hoberock, David Luebke, David McAllister, Morgan McGuire, Keith Morley, Austin Robison, and Martin Stich. OptiX: a general purpose ray tracing engine. In *ACM SIGGRAPH 2010 papers*, SIGGRAPH '10, pages 66:1-66:13, New York, NY, USA, 2010. ACM.

40. James C. Phillips, John E. Stone, Kirby L. Vandivort, Timothy G. Armstrong, Justin M. Wozniak, Michael Wilde, and Klaus Schulten. Petascale Tcl with NAMD, VMD, and Swift/T. In *SC'14 workshop on High Performance Technical Computing in Dynamic Languages*, SC '14. IEEE Press, 2014.

41. Mark D. Klein and John E. Stone. Unlocking the full potential of the Cray XK7 accelerator. In *Cray User Group Conf.* Cray, May 2014.

42. John E. Stone, Peter Messmer, Robert Sisneros, and Klaus Schulten. High performance molecular visualization: In-situ and parallel rendering with EGL. 2016 IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium Workshop (IPDPSW), pages 1014-1023, 2016.

43. En Cai, Pinghua Ge, Sang Hak Lee, Okunola Jeyifous, Yong Wang, Yanxin Liu, Katie Wilson, Sung Jun Lim, Michelle Baird, John Stone, Kwan Young Lee, Michael Davidson, Hee Jung Chung, Klaus Schulten, Andrew Smith, William Green, and Paul R. Selvin. Stable small quantum dots for synaptic receptor tracking on live neurons. *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, 126:12692-12696, 2014.

44. G. Fiorin, M. L. Klein, and J. H´enin. Using collective variables to drive molecular dynamics simulations. *Mol. Phys.*, 111(22-23):3345-3362, 2013.

45. M. Iannuzzi, A. Laio, and M. Parrinello. Efficient exploration of reactive potential energy surfaces using car-parrinello molecular dynamics. *Phys. Rev. Lett.*, 90(23):238302, 2003.

46. E A Coutsias, C Seok, and K A Dill. Using quaternions to calculate RMSD. *J. Comput. Chem.*, 25(15):1849-1857, 2004.

47. [47] Yuguang Mu, Phuong H. Nguyen, and Gerhard Stock. Energy landscape of a small peptide revealed by dihedral angle principal component analysis. *Proteins*, 58(1):45-52, 2005.

48. Alexandros Altis, Phuong H. Nguyen, Rainer Hegger, and Gerhard Stock. Dihedral angle principal component analysis of molecular dynamics simulations. *J. Chem. Phys.*, 126(24):244111, 2007.

49. Nicholas M Glykos. Carma: a molecular dynamics analysis program. *J. Comput. Chem.*, 27(14):1765-1768, 2006.

50. Davide Branduardi, Francesco Luigi Gervasio, and Michele Parrinello. From a to b in free energy space. *J Chem Phys*, 126(5):054103, 2007.

51. Eric Darve, David Rodr´iguez-G´omez, and Andrew Pohorille. Adaptive biasing force method for scalar and vector free energy calculations. *J. Chem. Phys.*, 128(14):144120, 2008.

52. J. H´enin and C. Chipot. Overcoming free energy barriers using unconstrained molecular

واژگان	شماره صفحه
آرژنین	۷۱
آرگومان	۱۴۳
آسپارازین	۷۱
آلانین	۷۱
آنالیز وبایاس	۲۵۸
آنالیز scripts	۱۹۶
آنالیز Statistical	۲۲۳
ابزار مصورسازی دینامیک مولکولی (VMD)	۵
استریو آناگلیف	۸۵
استریو جانبی HDTVS	۸۵
استریو چهارگانه CrystalEyes	۸۵
اسید نوکلئیک nfrag	۷۶
اسید نوکلئیک pfrag	۷۶
انتقال پیام LAMMPS	۲۳۲
اوربیتال	۹
برآوردگر CZAR	۲۶۵
برنامه نویسی (TCL) Tool Command Language	۶
برنامه نویسی پایتون	۶
پارالل	۱۳۶
پروتکل IMD	۱۱۴
تابع RMSD	۲۱۷

68. Rong Shen, Wei Han, Giacomo Fiorin, Shahidul M Islam, Klaus Schulten, and Benoît Roux. Structural refinement of proteins by restrained molecular dynamics simulations with noninteracting molecular fragments. PLoS Comput. Biol., 11(10):e1004368, 2015.

۱۲۴	فاصله سوئیچینگ غیرمتصل.
۱۲۴	فاصله کات آف غیرمتصل
۲۵	فایل ورودی Raster۳D
۱۴۴	فرمان volmap ils
۱۷	قالب گرافیکی Targa
۱۴۷	کات آف واندروالسی CHARMM
۶	کتابخانه VRPN
۱۵۴	کلاس AtomSel
۱۷۷	کلاس MoleculeRep
۲۸	کلید کنترل فوری Molecule MoveS
۲۸	کلید کنترل فوری Rep MoveS
۲۸	کلید کنترلی فوری Rotate Mode
۱۸۴	ماتریس v transvec
۶۷	ماده Transparent
۲۰۹	ماژول Colvars
۱۷۱	ماژول molrep
۱۵۴	ماژول Tkinter
۱۷۱	ماژول trans
۲۷۰	متادینامیک
۲۵	متغیر محیطی VMDBABELBIN
۳۳	متغیر محیطی VMDHTMLVIEWER
۱۵۳	محیط PYTHONHOME
۱۵۴	محیط PYTHONPATH

۲۰۱	تراز RMS
۹۳	تصاویر استریوسکوپی
۲۲۰	خروجی Trajectory
۳۲	درايور joystick
۳۱	درايور Spaceball
۱۱۸	دستور atomselect
۲۱۳	دستور cv configfile
۱۱۸	دستور mdffi
۱۹۱	دستور molinfo
۱۴۱	دستور volmap
۱۰۷	رزیدو
۹۱	رندر TachyonInternal
۹۱	رندر TachyonLOptiXInternal
۹۱	رندر TachyonLOSPRayInternal
۲۷۴	روش بایزانی هارمونیک
۲۱۶	روش ABF
۲۵۸	روش Adaptive Biase Force
۲۰	روش coloring
۲۰	روش drawing
۱۶۵	روش evaltcl
۲۶۷	روش Metadynamics
۵۷	روش Representation
۹	سخت افزار GPU

The growth and development of new educational tools and software, along with practical, technical, and specialized requirements, have made the need to update and improve the quantitative and qualitative level of resources and course contents more evident than ever before. The development of applications for emerging educational topics and areas such as data display methods and statistical studies, tools related to displaying three-dimensional images, virtual reality, augmented reality, software capable of displaying the structures of molecules. Since various courses in related fields require the use of visualization software at the molecular scale, appropriate software that has special capabilities and at the same time is easy to use was examined, and among these, the molecular dynamics visualization software (VMD) was selected as the best option that has special capabilities and features. This book has been compiled with a practical approach for all students, professors and researchers in molecular and biological structures related fields, focusing on the capabilities and special cutting edge features of this software.

Ali Alizadeh
Faculty Member, Tehran University of Medical Sciences
MohammadAmin Jadidi Kouhbanani
Farahnaz Behzad

۲۳	مسیر CRD
۲۳۳	موازی سازی SMP
۹	موتور رهگیری پرتویی Tachyon
۲۵۳	مولفه dihedralS
۲۵۳	مولفه spinAngleS
۱۶	میوگلوبین
۲۱	نسخه عملکرد GUI
۳۴	نشانگر مولکول Top
۶	نقشه CryoEM
۵۶	نمایه QuickSurf
۵۳	نمایه Ribbons
۵۵	نمایه Twister
۱۴۲	نمونه برداری Ligand Implicit Ligand
۱۰	هسته CPU
۴۲	هموار سازی Antialiasing
۲۸۱	هیستوگرام Multidimensional
۱۶	هیستیدین