

# **Manual**

## **BioBlender 2.1**

**2021-07-13**

# Índice

- 1.** ¿Qué es BioBlender?
- 2.** Requisitos
- 3.** Instalar BioBlender
- 4.** Importar un archivo PDB
- 5.** Cambiar las formas de representar la molécula en el espacio 3D
- 6.** Calcular y visualizar el Potencial Lipofílico de la molécula (MLP)
- 7.** Calcular y vizualizar el potencial electrostático (EP)
- 9.** Exportar el archivo PDB
- 8.** Exportar Película
- 9.** Calcular el NMA
- 10.** Apuntes importante para su conocimiento.

## ¿Qué es BioBlender?

BioBlender es un paquete de software basado en el software de modelado 3D de código abierto Blender.

La biología funciona a nanoscala, con objetos invisibles para el ojo humano. Con BioBlender es posible mostrar algunos de los caracteres que pueblan nuestras células, en base a datos científicos y al más alto nivel de manipulación 3D. Científicos de todo el mundo estudian proteínas a nivel atómico y depositan información en el repositorio público Protein Data Bank, donde cada molécula se describe como la lista de sus átomos y sus coordenadas 3D.

Con BioBlender, los usuarios pueden manejar proteínas en el espacio 3D, mostrar su superficie de una manera fotorrealista y elaborar movimientos de proteínas sobre la base de conformaciones conocidas. Mostrando sus características de superficie utilizando un código visual basado en texturas y efectos especiales de partículas.

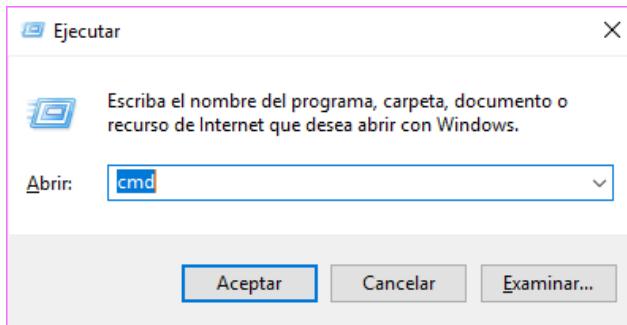
BioBlender es una implementación de Blender, un programa de código abierto, distribuido libremente, multiplataforma, interoperable y compatible de animación 3D, efectos visuales y videojuegos.

# Requisitos

- Instalar Python 3.7.5 o posterior
- Instalar Blender 2.92 o posterior
- Instalar Pymol
- Instalar las librerías Numpy y Prody

Para instalar estas librerías:

1. Abrir la consola de windows (**Windows + R**)
2. Escriba cmd



3. Luego en la consola de Windows escriba:

```
pip install numpy
```

4. Una vez terminado, proceda a instalar Prody:

```
pip install Prody
```

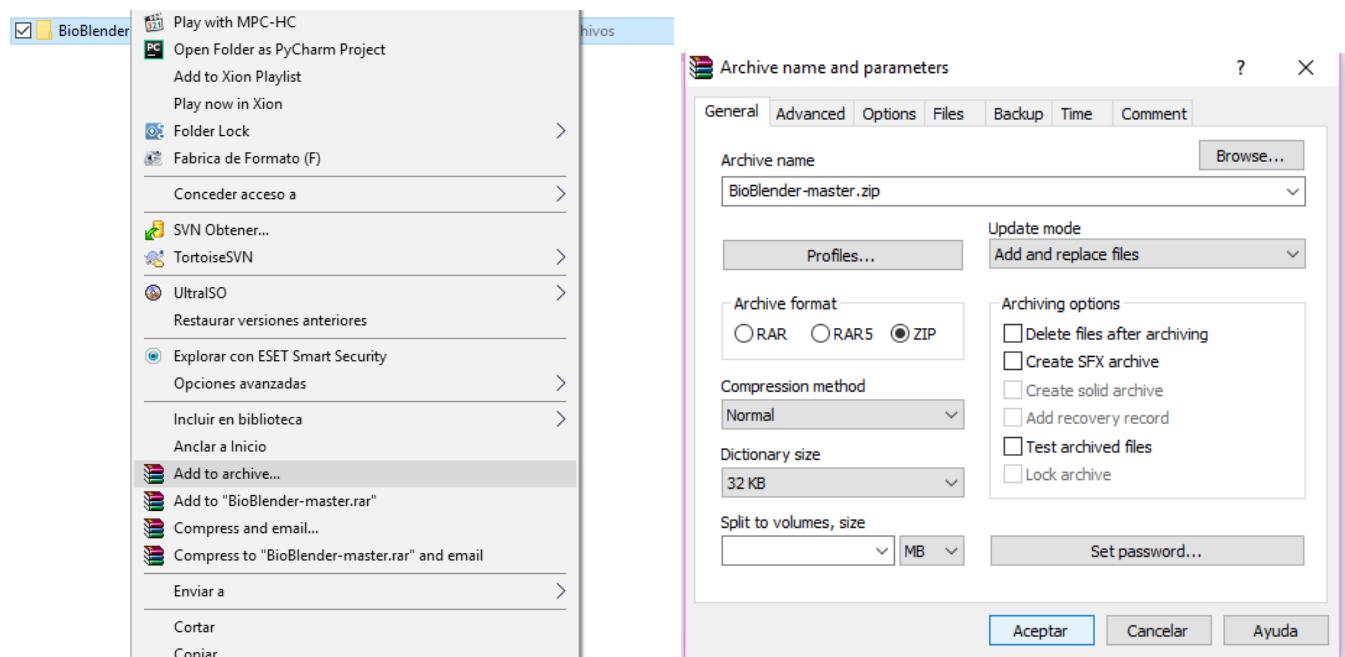
5. Por último. Necesario para el correcto funcionamiento de la librería Prody:

```
pip install scipy
```

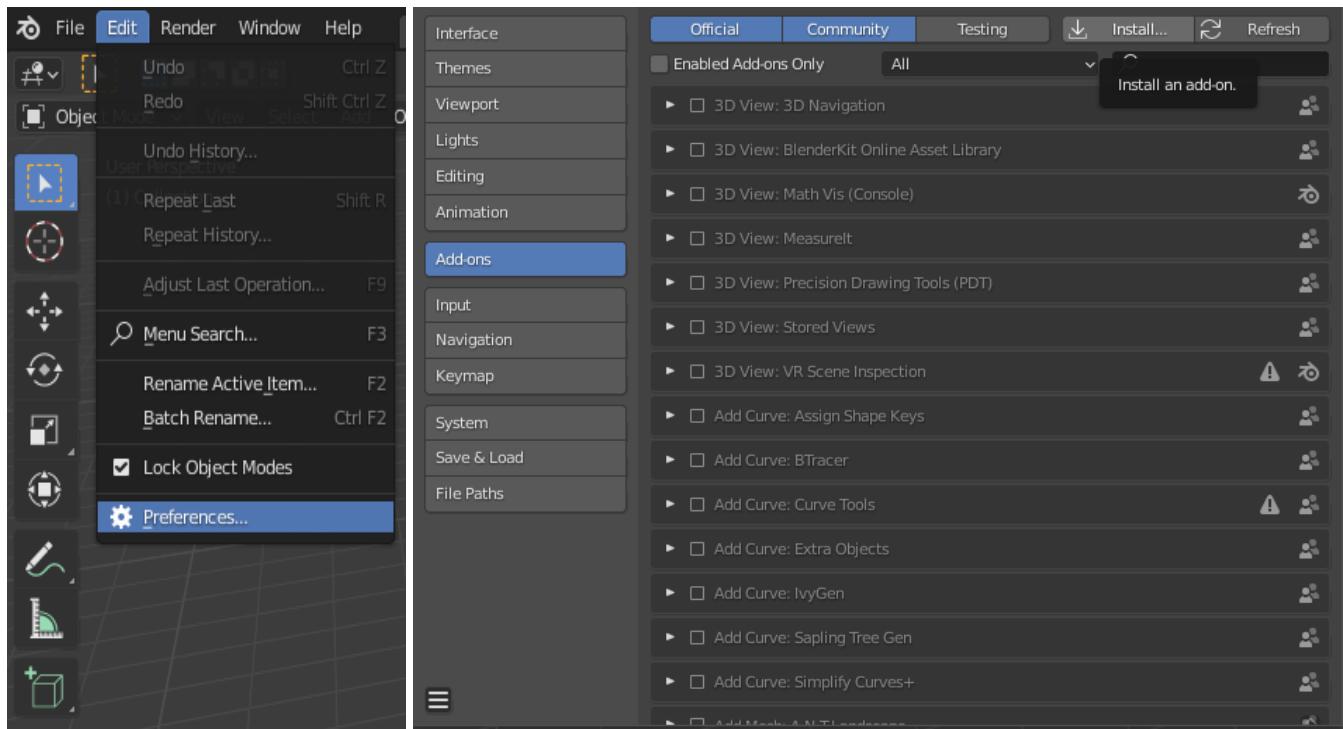
# ¿Cómo instalar BioBlender?

- **Pasos:**

1. Comprimir la carpeta BioBlender-master en un archivo .zip (En caso de que la carpeta no esté comprimida)



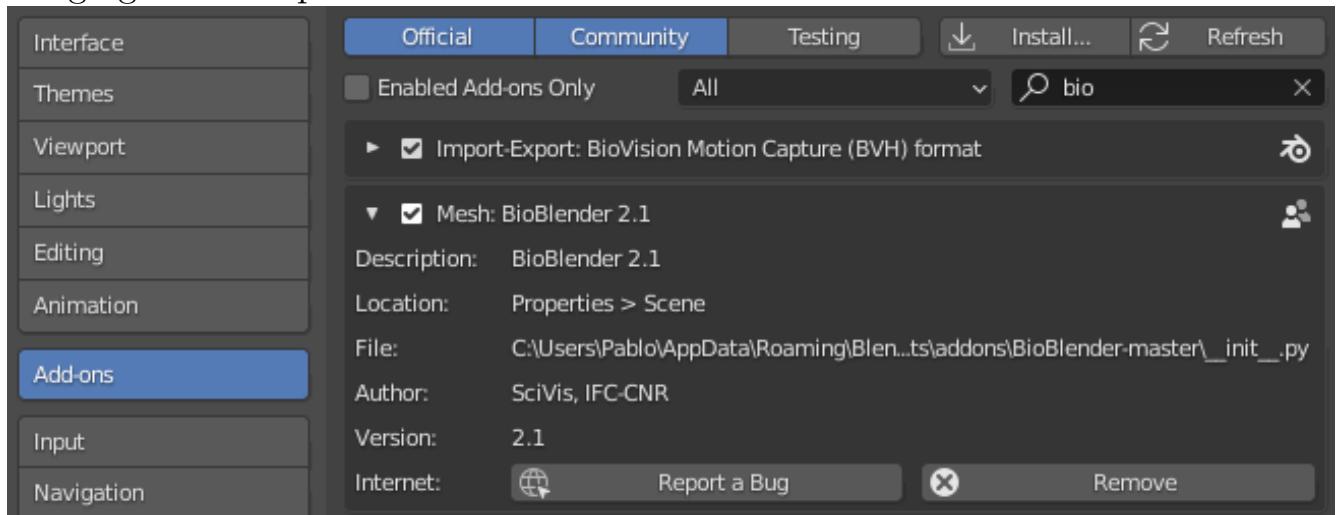
2. Una vez comprimida la carpeta abrir el Blender y agregar el archivo BioBlender-master.zip a Blender. Para esto tiene que abrir:  
Editar(Edit) > Preferencias (Preferences) > Complementos (Add-Ons) > Instalar un complemento (Install an Add-Ons). Aquí busca el directorio, selecciona el archivo .zip y presiona Instalar Complemento (Install Add-Ons)



3. Una vez agregado el BioBlender debe activarse automáticamente, pero en caso de que no se haya activado, se dirige a :

Editar(Edit) > Preferencias (Preferences) > Complementos (Add-Ons) y marca la casilla junto al lado del nombre del módulo para su activación.

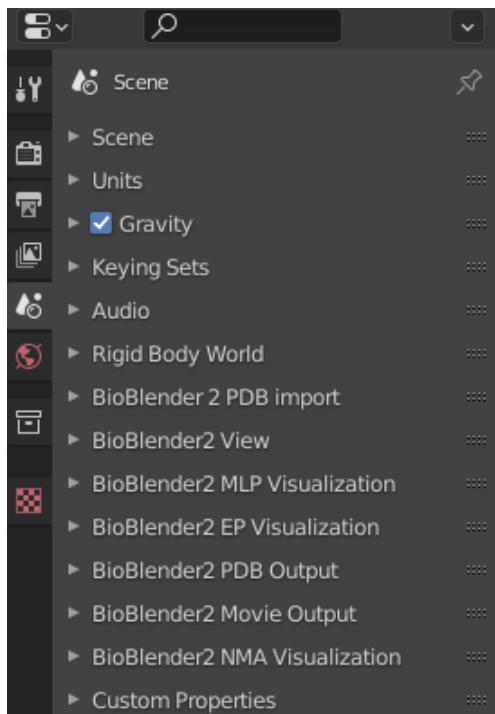
Luego guarde las preferencias de usuario.



## Importar archivo PDB

**Nota:** Si usted desea eliminar todos los objetos que se cargan automáticamente al abrir Blender, presione la tecla **a**, luego la tecla **x** y **Enter**. Si desea que Blender siempre se abra sin objetos en la escena, presione **Ctrl + u**, para que se guarde la escena en la que se encuentra.

Las funciones de BioBlender se encuentran en el Panel de Propiedades > **Scene**.



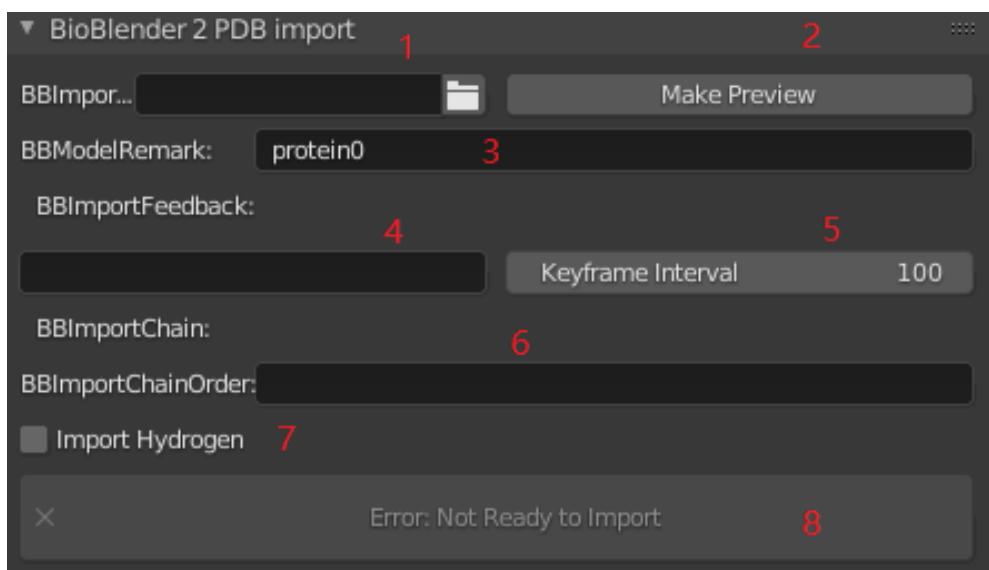
**Protein Data Bank (PDB)** es una base de datos de la estructura tridimensional de las proteínas y ácidos nucleicos. Estos datos, generalmente obtenidos mediante cristalografía de rayos X o resonancia magnética nuclear, son enviados por biólogos y bioquímicos de todo el mundo. Están bajo el dominio público y pueden ser usados libremente. El BioBlender tiene la posibilidad de leer archivos en formato pdb y obtener información de sus átomos para representarlos en el espacio.

HEADER	VIRAL PROTEIN	26-JAN-20	6LU7	SCALE1	0.010211	0.000000	0.004665	0.000000		
TITLE	THE CRYSTAL STRUCTURE OF COVID-19 MAIN PROTEASE IN COMPLEX WITH AN			SCALE2	0.000000	0.012582	0.000000	0.000000		
TITLE	2 INHIBITOR N3			SCALE3	0.000000	0.000000	0.021223	0.000000		
COMPND	MOL_ID: 1;			ATOM	1	N	SER A	1	-32.073	9.085
COMPND	2 MOLECULE: SARS-COV-2 MAIN PROTEASE;			ATOM	2	CA	SER A	1	-32.156	8.073
COMPND	3 CHAIN: A;			ATOM	3	C	SER A	1	-30.857	8.000
COMPND	4 ENGINEERED: YES;			ATOM	4	O	SER A	1	-30.047	8.926
COMPND	5 MOL_ID: 2;			ATOM	5	CB	SER A	1	-32.483	6.704
COMPND	6 MOLECULE: N-[(5-METHYLISSOXAZOL-3-YL)CARBOXYL]ALANYL-L-VALYL-N-1~-			ATOM	6	OG	SER A	1	-31.312	6.067
COMPND	7 ((R, Z)-4-(BENZOLOXY)-4-OXO-1-((3R)-2-OXOPYRROLIDIN-3-			ATOM	7	N	GLY A	2	-30.665	6.892
COMPND	8 YL)METHYL)BUT-2-ENYL-L-LEUCINAMIDE;			ATOM	8	CA	GLY A	2	-29.510	6.712
COMPND	9 CHAIN: C;			ATOM	9	C	GLY A	2	-29.828	6.996
COMPND	10 ENGINEERED: YES			ATOM	10	O	GLY A	2	-30.810	7.663
SOURCE	MOL_ID: 1;			ATOM	11	N	PHE A	3	-28.974	6.479
SOURCE	2 ORGANISM_SCIENTIFIC: SEVERE ACUTE RESPIRATORY SYNDROME CORONAVIRUS			ATOM	12	CA	PHE A	3	-29.155	6.661
SOURCE	3 2;			ATOM	13	C	PHE A	3	-27.790	6.744
SOURCE	4 ORGANISM_COMMON: SARS-COV-2;			ATOM	14	O	PHE A	3	-26.981	5.820
SOURCE	5 ORGANISM_TAXID: 2697049;			ATOM	15	CB	PHE A	3	-29.978	5.522
SOURCE	6 EXPRESSION_SYSTEM: ESCHERICHIA COLI BL21(DE3);			ATOM	16	CG	PHE A	3	-30.635	5.875
SOURCE	7 EXPRESSION_SYSTEM_TAXID: 469008;			ATOM	17	CD1	PHE A	3	-31.642	6.824
SOURCE	8 EXPRESSION_SYSTEM_VECTOR_TYPE: PLASMID;			ATOM	18	CD2	PHE A	3	-30.247	5.261
SOURCE	9 EXPRESSION_SYSTEM_PLASMID: PGEX-6P-1;			ATOM	19	CE1	PHE A	3	-32.251	7.155
SOURCE	10 MOL_ID: 2;			ATOM	20	CE2	PHE A	3	-30.851	5.586
SOURCE	11 SYNTHETIC: YES;			ATOM	21	CZ	PHE A	3	-31.854	6.534
SOURCE	12 ORGANISM_SCIENTIFIC: SYNTHETIC CONSTRUCT;			ATOM	22	N	ARG A	4	-27.541	7.844
SOURCE	13 ORGANISM TAXID: 32630			ATOM	23	CA	ARG A	4	-26.277	8.066
KEYWDS	PROTEASE, VIRAL PROTEIN			ATOM	24	C	ARG A	4	-26.545	8.642
EXPDTA	X-RAY DIFFRACTION			ATOM	25	O	ARG A	4	-27.552	9.320
AUTHOR	X.LIU,B.ZHANG,Z.JIN,H.YANG,Z.RAO			ATOM	26	CB	ARG A	4	-25.367	9.020
REVDAT	6 18-MAR-20 6LU7 1 JRNL			ATOM	27	CG	ARG A	4	-24.669	8.388
REVDAT	5 11-MAR-20 6LU7 1 COMPND SOURCE			ATOM	28	CD	ARG A	4	-23.342	7.771
REVDAT	4 26-FEB-20 6LU7 1 REMARK			ATOM	29	NE	ARG A	4	-22.460	7.579
REVDAT	3 19-FEB-20 6LU7 1 TITLE JRNL			ATOM	30	CZ	ARG A	4	-21.235	7.068
REVDAT	2 12-FEB-20 6LU7 1 TITLE COMPND JRNL REMARK			ATOM	31	NH1	ARG A	4	-20.744	6.693
REVDAT	2 1 SHEET LINK SITE ATOM			ATOM	32	NH2	ARG A	4	-20.502	6.930
REVDAT	1 05-FEB-20 6LU7 0			ATOM	33	N	LYS A	5	-25.636	8.362
JRNL	AUTH 2 Z.JIN,X.DU,Y.XU,Y.DENG,M.LIU,Y.ZHAO,B.ZHANG,X.LI,L.ZHANG,			ATOM	34	CA	LYS A	5	-25.667	9.020
JRNL	AUTH 2 C.PENG,Y.DUAN,J.YU,L.WANG,K.YANG,F.LIU,R.JIANG,X.YANG,T.YOU,			ATOM	35	C	LYS A	5	-25.399	10.504
JRNL	AUTH 3 X.LIU,X.YANG,F.BAI,H.LIU,X.LIU,L.GUDATT,W.XU,G.XIAO,C.QIN,			ATOM	36	O	LYS A	5	-24.261	10.908
JRNL	AUTH 4 Z.SHI,H.JIANG,Z.RAO,H.YANG			ATOM	37	CB	LYS A	5	-24.643	8.396
JRNL	TITL STRUCTURE OF MPRO FROM COVID-19 VIRUS AND DISCOVERY OF ITS			ATOM	38	CG	LYS A	5	-25.062	8.413

## Pasos para importar el PDB:

1. Seleccionar el archivo PDB que se desea importar, para esto BioBlender cuenta con 2 opciones:
  - Buscar en el ordenador local el archivo PDB y seleccionarlo.
  - Escribir solo el nombre del PDB que desea importar. Esto se basa en escribir con solo 4 letras el identificador del PDB, el cual se va a buscar en el repositorio <http://www.pdb.org/> (Necesita Internet)
2. Leer el archivo PDB, dando click en **Make Preview**.
3. Una vez leído se muestra el nombre del modelo a importar.
4. Muestra una lista de números, estos números son los modelos que contiene el PDB. Esta lista usted tiene la posibilidad de modificarla e importar el modelo que usted desee.
5. Usted puede modificar el intervalo de los fotograma entre cada modelo donde dice **Keyframe Interval**

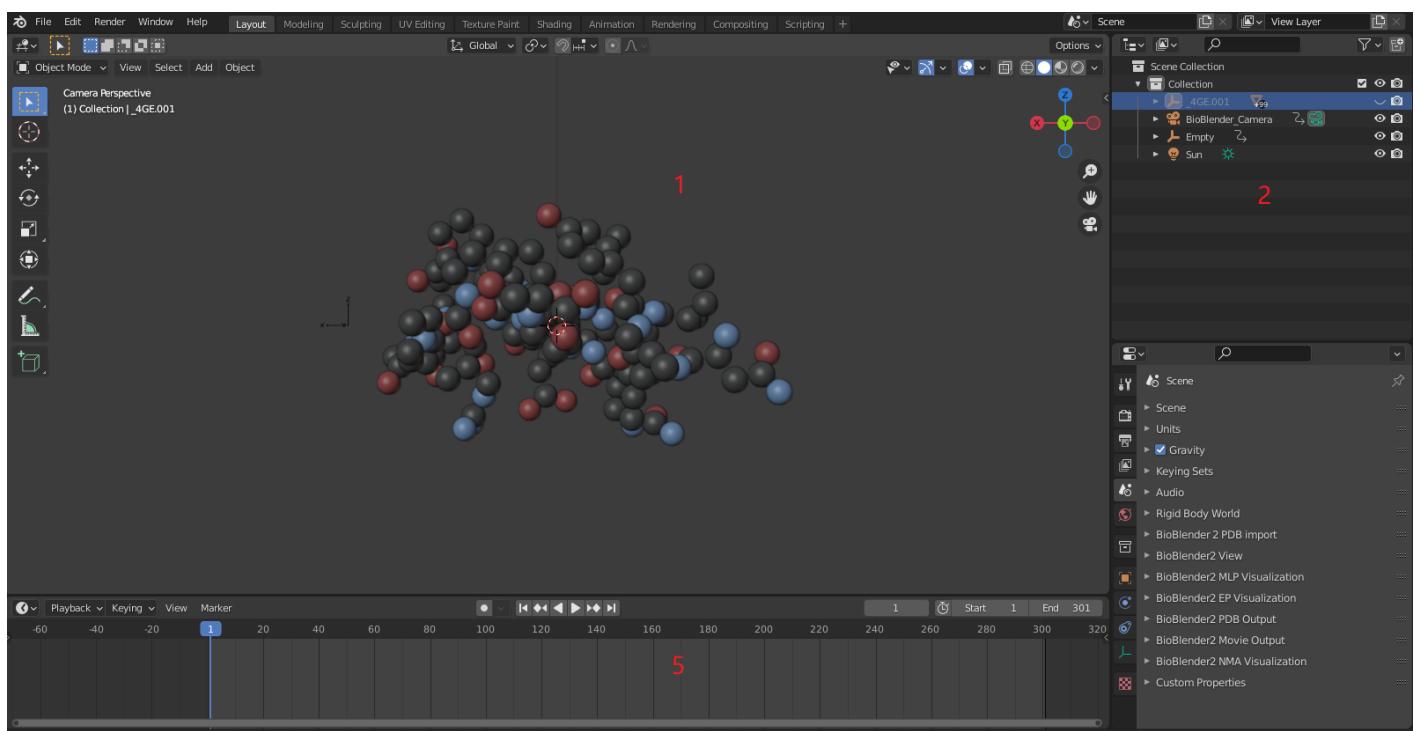
6. Luego aparece una lista de las cadenas que contiene el PDB.
7. También BioBlender le da la posibilidad de importar o no, los hidrógenos.
8. Por último presiona el click en **Import PDB**, una vez que el archivo está cargado y leído. El tiempo que dura en importar el PDB es proporcional al tamaño de la molécula. Si usted quiere representar una molécula de gran tamaño se demorará el proceso, ya que la importación se comporta de manera exponencial.



### Una vez importado el archivo PDB podrá apreciar:

1. La molécula representada en la escena.
2. La lista de elementos que fueron creados durante su importación.
3. En la lista de elementos va a encontrar una Cámara para visualizar la molécula en el espacio 3D y renderizarla.
  - Presionando la tecla **Num 0** la vista de la escena se traslada a la vista de cámara.
  - Si presiona la tecla **N**, teniendo la cámara seleccionada, podrá modificar su ubicación, rotar, trasladar y escalar.

4. También podremos encontrar un elemento que contiene el nombre del PDB importado (Seleccionado en este ejemplo), el cual tiene como hijos (dentro de él) todos los átomos importados. Este elemento padre, no está visible en la escena, para evitar la vista indeseada de líneas que conllevan a cada uno de sus hijos, por tanto si usted desea mover todos los átomos, selecciona el elemento padre, dirige el mouse hacia la escena y presiona la tecla **N**, la cual contiene las opciones antes expuestas.
5. Usted puede observar los fotogramas, los cuales representan la animación del cambio de un modelo a otro en el PDB. En este ejemplo el PDB contiene 4 modelos, por lo que llegan hasta 301, esto se debe a que el primer modelo se encuentra en el fotograma 1, luego el segundo en 101 y así sucesivamente hasta llegar al final de los modelos.(En este ejemplo se escogió un intervalo de 100 fotogramas)

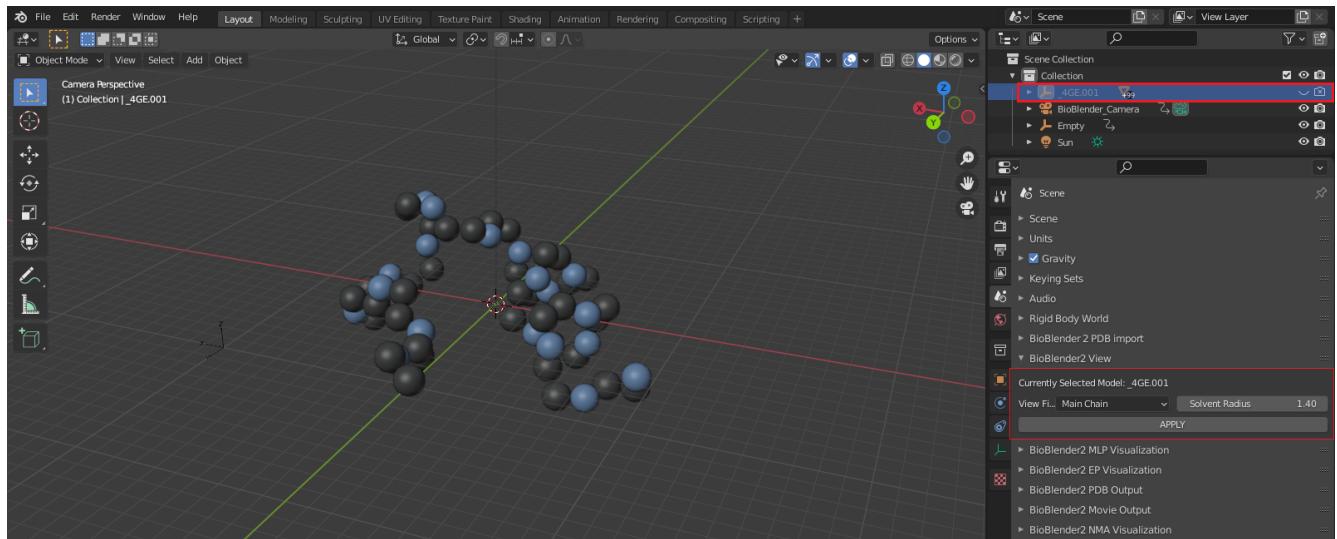


# Cambiar las formas de representar la molécula en el espacio 3D

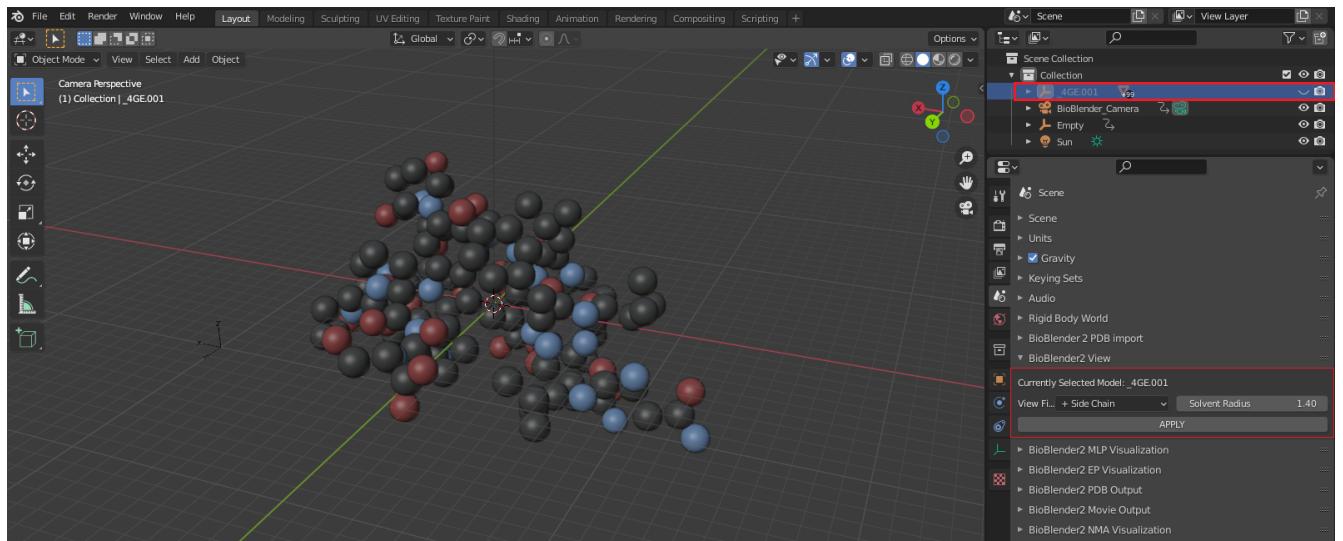
Una vez importado el PDB usted puede cambiar la forma en la que se representan los átomos de la molécula, así como observar su superficie. Para ello BioBlender cuenta con varias opciones:

**Nota:** Primero tiene que seleccionar el modelo con el que se desea trabajar. Una vez seleccionado en el panel **BioBlender2 View** se muestra el nombre del mismo. Si se observa la etiqueta **No model selected**, verifique nuevamente la selección del modelo.

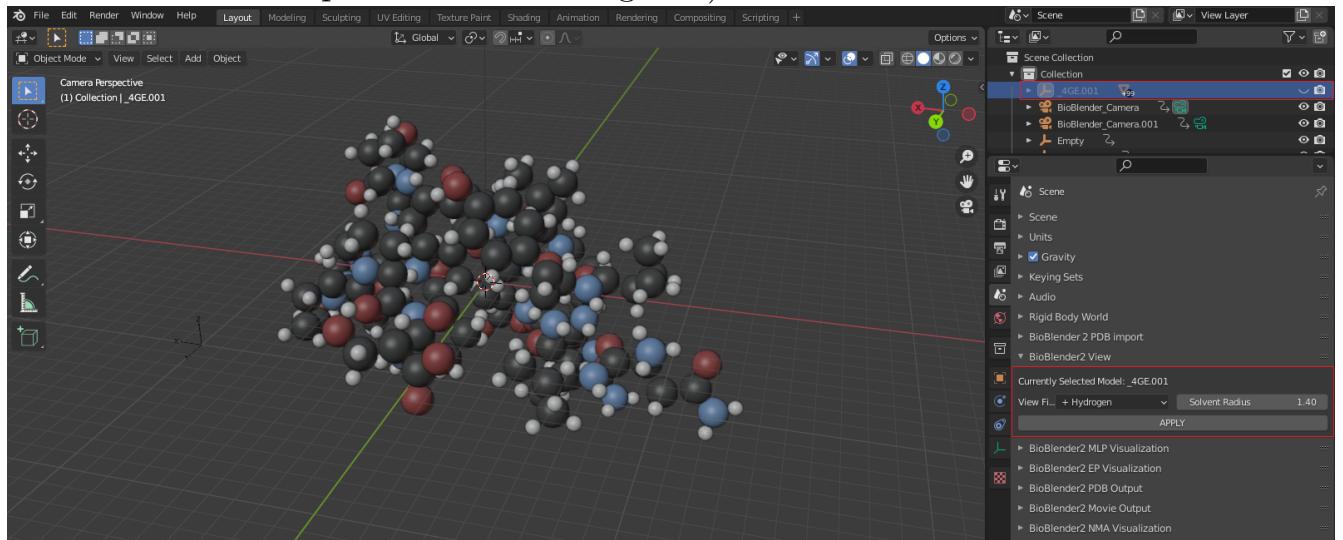
- **Main Chain:** Muestra la cadena principal



- **+ Side Chain:** Muestra la cadena principal más las cadenas laterales.



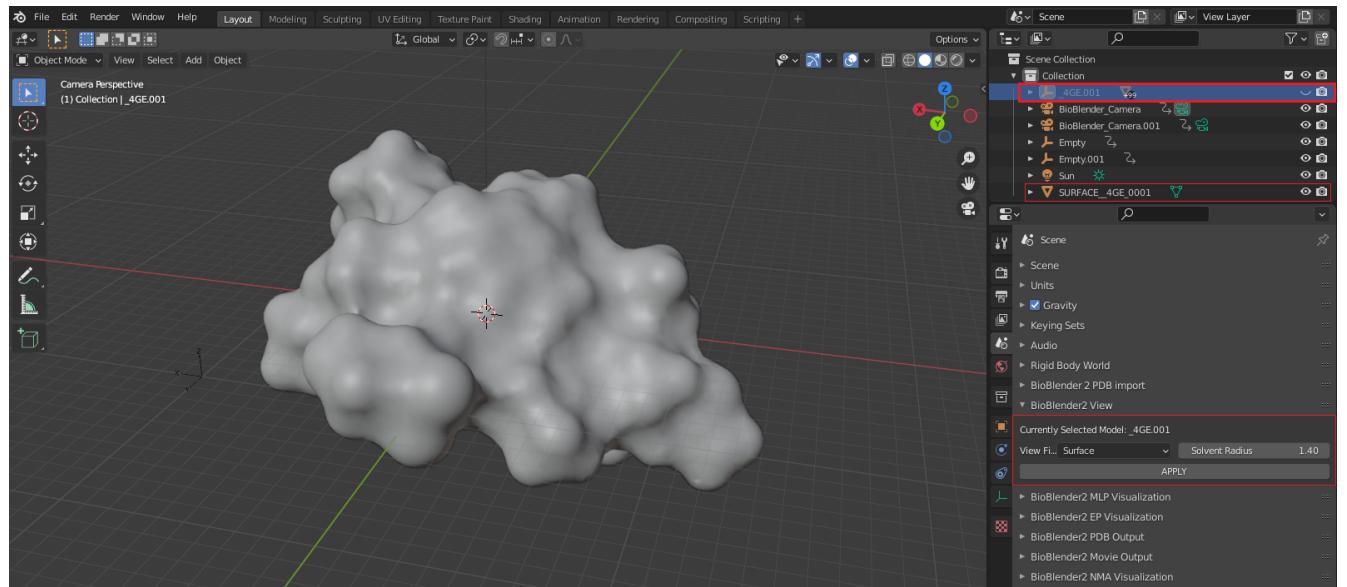
- **+ Hydrogen:** Muestra todos los átomos importados más los hidrógenos. (Esto solo ocurre si se importaron los hidrógenos)



- **Superficie:** Calcula la superficie de la molécula (Por medio del programa externo PyMol) y la muestra en la escena. Esta opción cuenta con la propiedad **Solvent Radius**, parámetro necesario para calcular la superficie.

- **Solvent Radius:** representa el radio del agua y presenta por defecto un valor de 1.40. Si este valor es más elevado puede calcular la superficie en menor tiempo.

- Una vez calculada la superficie automáticamente se va a agregar un elemento en la escena. Este posee como nombre: "SURFACE\_ ", seguido del nombre del PDB + " \_ " y luego el número de fotograma en que se encuentra. Ejemplo: "SURFACE\_6r2x\_0001".
- Si ya usted calculó una superficie del modelo y aún la superficie sigue en la lista de objetos, si desea calcular nuevamente la superficie en el mismo número de fotogramas, no la calculará porque encontrará el elemento ya creado. Evitando la repetición de los mismos objetos.



Recuerde primero tiene que seleccionar el modelo con el que se desea trabajar antes de realizar cualquiera de estas acciones.

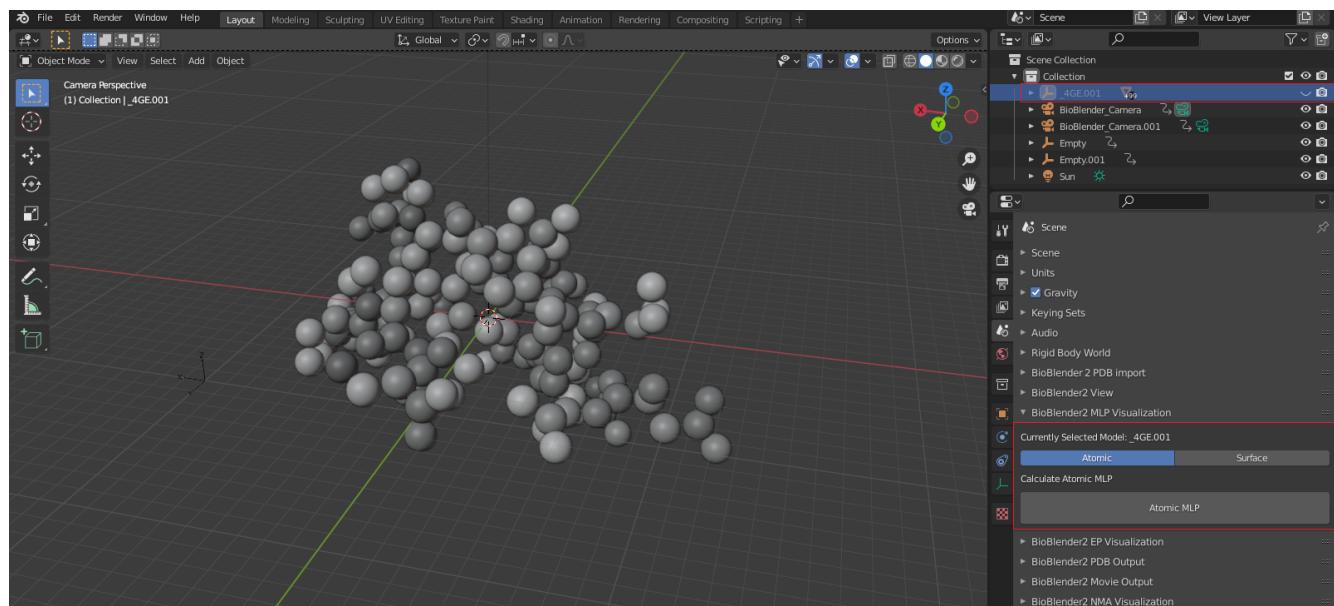
# Calcular y visualizar el Potencial Lipofílico de la molécula (MLP)

BioBlender cuenta con la posibilidad de calcular el MLP, para esto es necesario la utilización del software externo Pymol, el cual realiza los cálculos y para representar la superficie se utiliza el script pyMLP, incluido en el paquete de software BioBlender. Luego estos cálculos y superficies son importados al Blender para su representación.

**Nota:** Primero tiene que seleccionar el modelo con el que se desea trabajar. Una vez seleccionado en el panel **BioBlender2 MLP Visualization** se muestra el nombre del mismo. Si se observa la etiqueta **No model selected**, verifique nuevamente la selección del modelo.

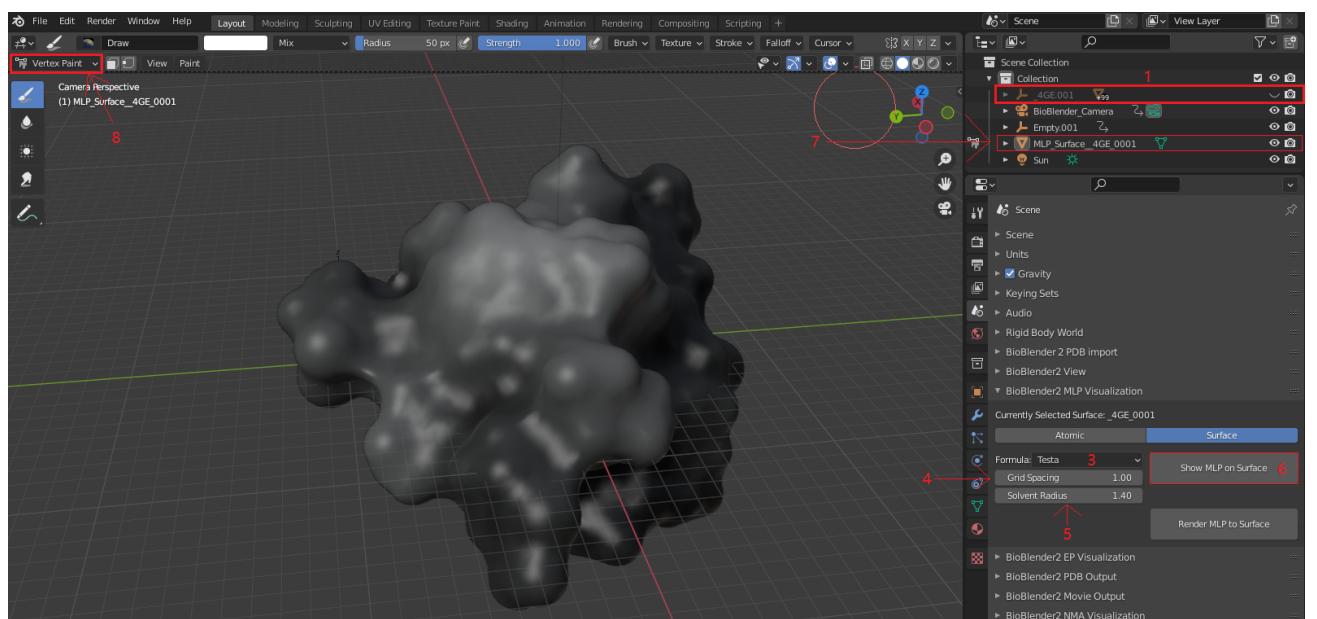
Bioblender cuenta de dos opciones en la función "MLP Visualization":

- **Calcular el MLP atómico (Atomic MLP):** Para ello primero tiene que seleccionar el modelo a utilizar en la lista de elementos.(En este caso no es necesaria la utilización del software externo Pymol)



- **Calcular el MLP en la superficie (MLP on Surface):** Para representar la superficie se utiliza pyMLP, la cual obtiene los valores calculados por PyMol . Para su correcto funcionamiento es necesario seguir una lista de pasos.

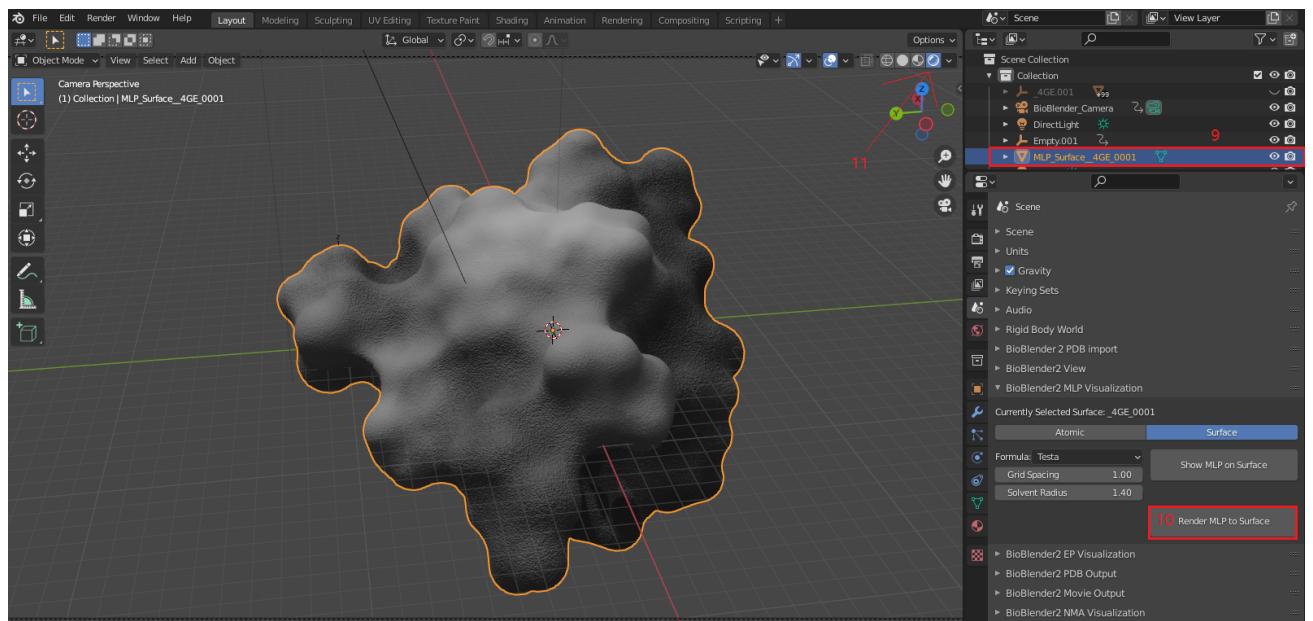
1. Seleccionar el modelo a utilizar en la lista de elementos. Una vez seleccionado en el panel "BioBlender2 MLP Visualization" se muestra el nombre del mismo. Si se observa la etiqueta **No model or surface selected**, verifique nuevamente la selección del modelo.
2. Si anteriormente había creado una superficie a través de las opciones de las diferentes vistas de la molécula elimínela.
3. Seleccionar la fórmula por la que va a calcular el MLP
4. Seleccionar el espaciado de la cuadrícula.
5. Seleccionar el radio del solvente.
6. Click en **Show MLP on Surface**.
7. Una vez mostrada la superficie automáticamente se va a agregar un elemento en la escena. Este posee como nombre: "MLP\_Surface", seguido del nombre del PDB + "\_" y luego el número del fotograma en que se encuentra.
8. La superficie se muestra en el modo objeto de la escena, por lo que se ve solamente la superficie del objeto. Para observar el MLP en la superficie en la escala de gris seleccione la superficie generada, y luego cambie el modo de interacción con el objeto a **"Pintar Vértices"** (Vertex Paint).



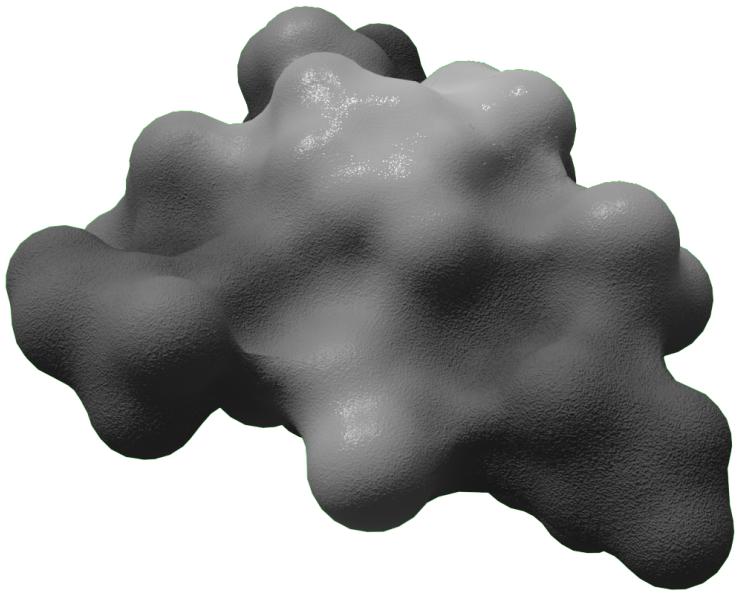
9. Seleccionar la superficie creada. Una vez seleccionada la superficie, en el panel "BioBlender2 MLP Visualization" se muestra el nombre de la misma. Si se observa la etiqueta **No model or surface selected**, verifique nuevamente la selección de ella.

## 10. Click en **Render MLP to Surface**

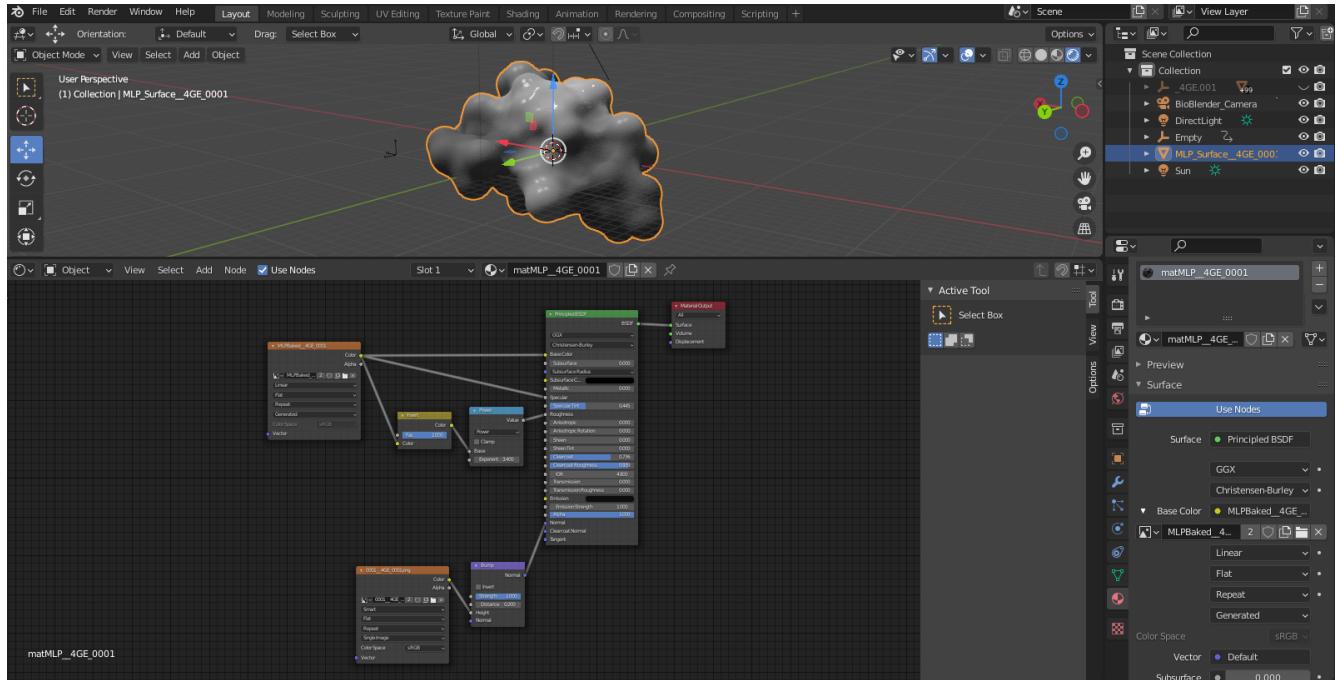
11. Una vez creada la superficie puede seleccionar en la vista de sombreado (Viewport Shading), la opción "Procesado" (Rendered), para mostrar la sombra de los objetos en el espacio 3D. De esta forma se puede observar la textura generada para la molécula.



12. Ya la molécula presenta la superficie con el MLP y su textura, lista para el renderizado.



La textura de la molécula se simplifica después de una serie de pasos en un material con la utilización de los nodos de sombreado, creado en el "Editor de Sombreado" (Shader Editor). Si usted desea jugar con sus parámetros y obtener una forma diferente de representación, seleccione la superficie de la molécula y abra el Editor de Sombreado a continuación.



## Calcular y visualizar el Potencial Electrostático (EP)

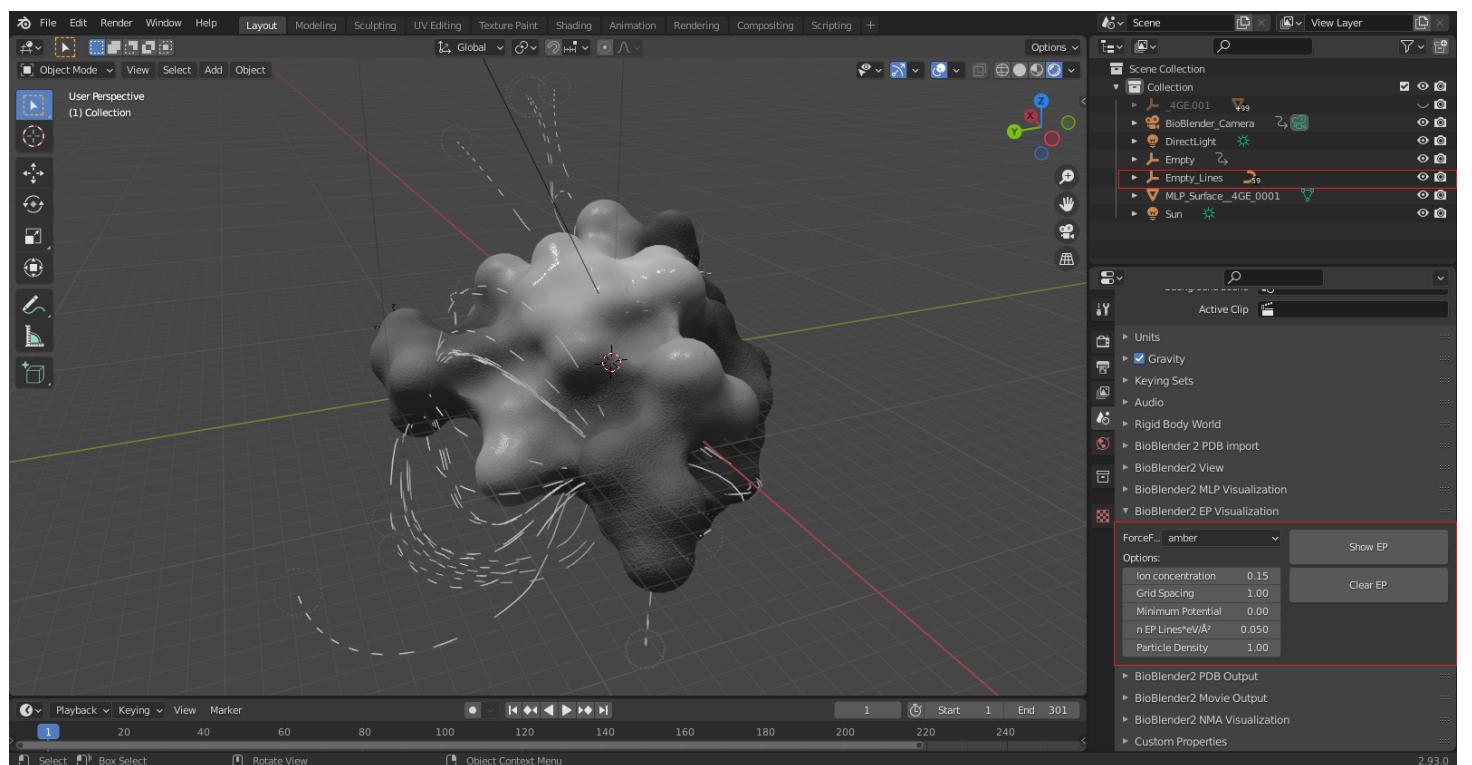
BioBlender cuenta con la posibilidad de calcular el potencial electrostático de la molécula y mostrar en la escena sus líneas potenciales. Para esto BioBlender necesita la utilización del software externo **apbs** para la realización de los cálculos del potencial y energía; y del software **SCIVIS** para calcular las líneas y exportarlas en un archivo .txt que posteriormente BioBlender leerá y hará posible su visualización en la escena.

### Pasos para calcular el EP

1. No es necesario seleccionar el modelo, ya que el EP se calcula para todas las moléculas en la escena.
2. Esta función cuenta con diversas propiedades las cuales pueden ser modificadas acorde con lo que desea trabajar.
  - **ForceField:** Permite la selección del campos de fuerza con el que usted desea trabajar.
  - **Ion concentration:** Permite elegir la concentración de iones del solvente. Por defecto es de 0.15
  - **Grid Spacing:** Permite la elegir el espaciado de la cuadrícula. Más pequeño es mucho mejor, pero es más lento el calculo.
  - **Minimum Potential:** Permite elegir el potencial mínimo desde el cual inician las líneas del campo de fuerza en valor absoluto.
  - **n EP Lines:** Representa la concentración de las líneas.
  - **Particle Density:** Representa la densidad de las partículas.
3. Click en **Show EP** para calcular el potencial.
4. Una vez calculado el EP, las líneas mostradas en la escena presentan animación. Automáticamente la animación se reproduce una vez terminado de calcular e importar las líneas. Para poder observar su trayectoria tiene que seleccionar en la Vista de Sombreado (Viewport Shading), la opción "Procesado" (Rendered), para mostrar la sombra de los objetos en el espacio 3D. Esto se debe a que las curvas generadas del cálculo del EP son objetos, los cuales tienen un material creado en el Editor de Sombreado (Shading Editor), para simular partículas que realizan su trayectoria por ellas.

5. Todas las curvas se encuentran en Empty, llamado "Empty\_Lines", para evitar una lista de objetos extensa.

**Nota:** Si usted desea eliminar las líneas del potencial de la escena puede dar click en **Clear EP**, la cual eliminará todas las líneas no solo de la escena, sino de la lista de elementos también.

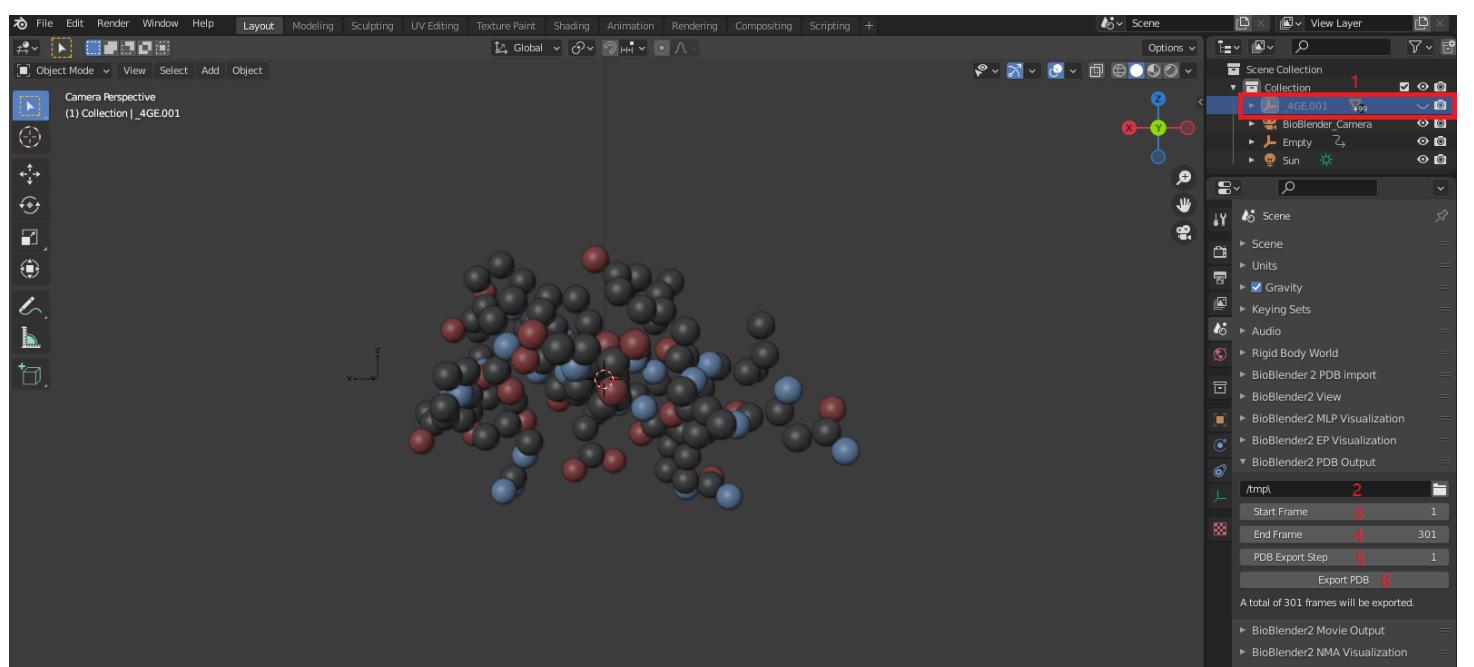


## **Exportar archivo PDB**

BioBlender da la posibilidad al usuario de exportar un archivo PDB acorde a la ubicación de la molécula en la escena, es decir que al exportar el archivo PDB este va a ir tomando la posición de todos los átomos por cada fotograma de la animación, por tanto hay que tener presente que si tiene como fotograma final 1000, el archivo PDB que genera el BioBlender va a contener 1000 modelos, ya que por cada fotograma se crea un modelo.

### **Pasos para exportar un nuevo archivo PDB:**

1. Seleccionar el modelo de la lista de objetos con los que se desea trabajar.
2. Buscar en el almacenamiento local la dirección donde desea guardar el archivo PDB.
3. Seleccionar el fotograma inicial desde el cual quiere comenzar a obtener la posición de los átomos para generar su archivo PDB.
4. Seleccionar el fotograma final donde desea parar de obtener la posición de los átomos para generar su archivo PDB.
5. Seleccionar los saltos entre los fotogramas, por defecto es 1. Esto quiere decir que aumentará en 1 los fotogramas hasta llegar al final de los fotogramas seleccionados.
6. Click en **Export PDB**



## Exportar Película

Bioblender da la posibilidad de exportar un película a través de la función "Movie Output". Básicamente esta exporta imágenes renderizadas, donde cada imagen se representa con los valores MLP y EP adecuados. La función permite obtener una secuencia del movimiento de la proteína, donde por cada fotograma se exporta una imagen, de forma tal que al unir esta secuencia de imágenes se crea una película, un segundo equivale, según el estándar seleccionado, 24-30 fotogramas. Las moléculas en la escena se pueden renderizar con distintas representaciones, átomos, superficie o MLP en superficie. Cuando se genera una película en donde se calculan el EP y el MLP de las moléculas, se necesita tiempo, ya que para lograr su representación es indispensable la ejecución de varios programas para generar los archivos necesarios, además de los cálculos de las líneas de campo, creación de las imágenes de texturas y su asignación a cada malla.

### Pasos para exportar la película:

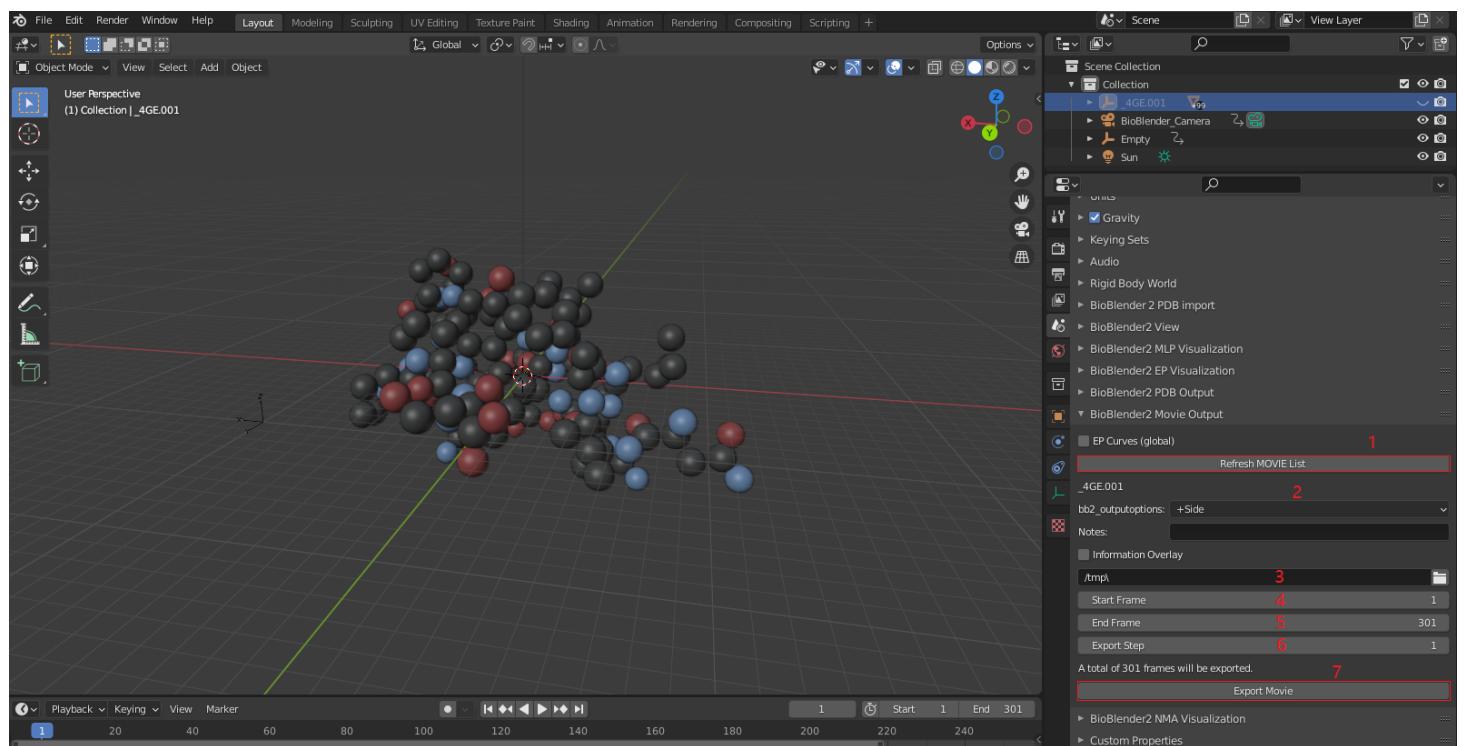
1. Click en Refresh MOVIE List

2. Configurar las diversas opciones que brinda:

- **EP Curves (global)**: Al ser seleccionado, se calcula por cada fotograma el EP de las moléculas en la escena, mostrándolo en la imagen a renderizar.
- **bb2\_outputoptions**: Permite la selección de la representación de la molécula que se desea mostrar en la imagen, ya sea cadena principal de los átomos, con cadenas laterales o la superficie.
- **Notes**: Permite agregar texto personalizado a la imagen como una nota.
- **Information Overlay**: Brinda la información detallada de cada fotograma en la imagen.
- **Ambient Light**: Agrega luz proveniente del ambiente.

3. Seleccionar en el almacenamiento local la dirección donde desea guardar la secuencia de imágenes.

4. Seleccionar el fotograma inicial desde el cual quiere comenzar a generar la película.
5. Seleccionar el fotograma final hasta donde quiere generar la película.
6. Seleccionar los saltos entre los fotogramas, por defecto es 1. Esto quiere decir que aumentará en 1 los fotogramas hasta llegar al final de los fotogramas seleccionados. En caso de modificar este valor, y querer calcular el EP, este automáticamente pasará a ser 1.
7. Click en **Export Movie**



## Calcular el NMA

BioBlender cuenta con la posibilidad de calcular la trayectoria del **Normal Mode Analysis** para esto es necesaria la utilización de la librería **Prody**, la cuál permite realizar el análisis. El NMA solo se calcula para el primer modelo en el archivo PDB que se importó al inicio, por tanto si usted solo desea calcular el NMA al trabajar con BioBlender no va a ser necesaria la importación de todos los demás modelos del PDB. Para calcular el NMA no es necesaria la selección de los átomos con los que se desea trabajar.

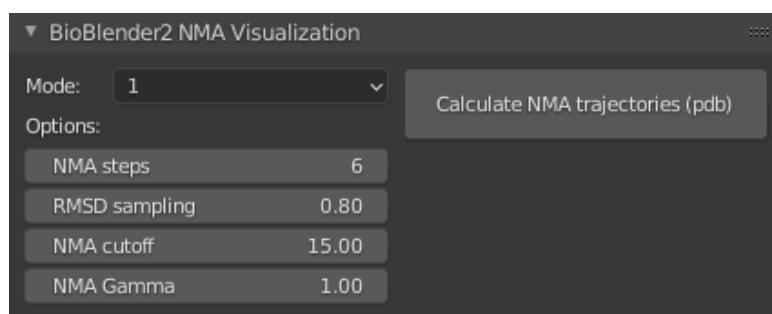
### Opciones que brinda el cálculo del NMA:

- **modo:** Permite la selección del modo normal de análisis para calcular.
- **NMA Steps:** Representa el número de conformaciones que van a ser calculados en cada dirección.
- **RMSD sampling:** RMSD entre el lado y la conformación más lejana.
- **NMA cutoff:** Distancia ( $A$ ) de truncamiento NMA para interacciones pairwise.
- **NMA Gamma:** Representa la constante de elasticidad NMA

**Nota:** Al calcular el NMA es exportado un archivo PDB en la carpeta

C:\Users\ Nombre de usuario\AppData\Roaming\Blender Foundation\Blender\No. de versión de Blender\scripts\addons\BioBlender-master\fetched

Este archivo contiene la trayectoria calculada y, la dirección donde se ubica es incorporada automáticamente en la función "Import PDB", listo para su importación.



## **Apuntes importante para su conocimiento**

La gran mayoría de los procesos en BioBlender exportan consigo archivos de vital importancia para su funcionamiento, los cuales pueden servir de mucho para su uso personal a parte del BioBlender. Estos archivos son ubicados en la carpeta:

C:\Users\ **Nombre de usuario**\AppData\Roaming\Blender Foundation\Blender\No. de versión de Blender\scripts\addons\BioBlender-master\tmp\ **Id del modelo**

**Funciones que generan archivos en esta carpeta:**

- **BioBlender2 View:** Al calcular la **Superficie**:
  - original.pdb
  - surface.pml
  - tmp.pdb
  - tmp.wrl
- **BioBlender2 MLP Visualization:** Al calcular el MLP en la Superficie:
  - original.pdb
  - surface.pml
  - tmp.pdb
  - tmp.wrl
  - tmp.dx
- **BioBlender2 MLP Visualization:** Al calcular la textura del MLP en la Superficie genera las imágenes necesarias para realizar la textura:
  - 0001.png
  - MLPBaked.png
  - noise.png

- composite.blend Este archivo es propio de Blender, el cual guarda consigo la composición de la textura.
- **BioBlender2 EP Visualization:** Al calcular el EP la carpeta origen varía:

C:\Users\ **Nombre de usuario**\AppData\Roaming\Blender Foundation\Blender\No. de versión de Blender\scripts\addons\BioBlender-master\tmp

- scenewide.obj
- scenewide.in
- scenewide.pqr
- scenewide.wrl
- scenewide.pdb
- scenewide-input.p
- surface.pml
- io.mc
- tmp.txt
- pot.dx
- apbs.exe