

Máster en Bioinformática
07MBIF- Proteómica y Bioinformática Estructural
2024/25

GUÍA DE ISNTALACIÓN DE SOFTWARE

Magdalena Nikolaeva Koleva

En el espacio personal de AWS, se recomienda crear un directorio software donde se instalarán la mayoría de los programas que usaremos en las actividades prácticas, y dentro de éste, crear un directorio install donde se descargarán los ficheros de instalación. Para facilitar el seguimiento de esta guía de instalación, se asumirá que dichos directorios se han creado en el directorio home.

Importante: Para poder ejecutar programas de 32-bit es necesario, antes de nada, instalar las librerías de 32-bit mediante el siguiente comando:

```
>sudo yum install zlib.i686
```

También hay que instalar csh:

```
>sudo yum install tcsh
```

CHIMERA (visualizador molecular)

Descargar Chimera (v.1.18 para Linux) del apartado de Recursos y Materiales>Materiales del profesor>Software>Chimera>chimera-1.18-linux_x86_64.bin

Instalación en AWS:

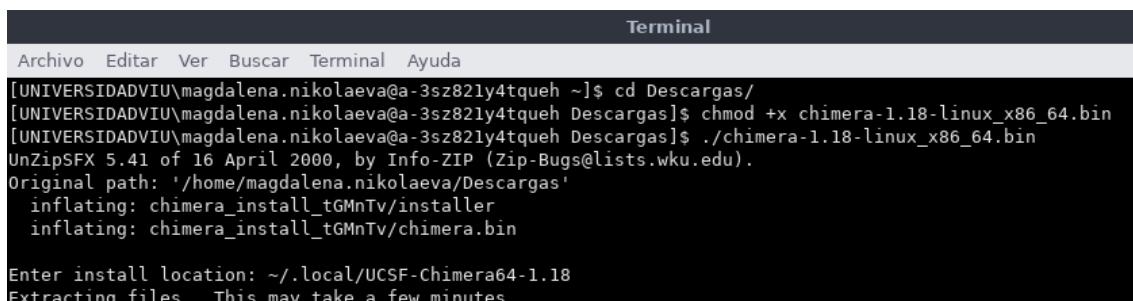
Abrir una terminal, entrar al directorio de “Descargas” donde se ha situado el programa. Modificar el archivo para transformarlo en ejecutable mediante el siguiente comando que deberá ejecutarse en la consola:

```
>chmod +x chimera-1.18-linux_x86_64.bin
```

Para instalar el programa, simplemente ejecutar el fichero:

```
>./chimera-1.18-linux_x86_64.bin
```

El programa se instalará en nuestro usuario, en la carpeta oculta .local y a continuación UCSF-Chimera64-1.18, en el ejemplo de la captura de pantalla que aparece a continuación, la ruta completa de instalación será:
home/magdalena.nikolaeva/.local/UCSF-Chimera64-1.18



The screenshot shows a terminal window titled "Terminal". The menu bar includes "Archivo", "Editar", "Ver", "Buscar", "Terminal", and "Ayuda". The terminal content is as follows:

```
[UNIVERSIDADVIU\magdalena.nikolaeva@a-3sz821y4tqueh ~]$ cd Descargas/
[UNIVERSIDADVIU\magdalena.nikolaeva@a-3sz821y4tqueh Descargas]$ chmod +x chimera-1.18-linux_x86_64.bin
[UNIVERSIDADVIU\magdalena.nikolaeva@a-3sz821y4tqueh Descargas]$ ./chimera-1.18-linux_x86_64.bin
UnZipSFX 5.41 of 16 April 2000, by Info-ZIP (Zip-Bugs@lists.wku.edu).
Original path: '/home/magdalena.nikolaeva/Descargas'
  inflating: chimera_install_tGMnTv/installer
  inflating: chimera_install_tGMnTv/chimera.bin

Enter install location: ~/.local/UCSF-Chimera64-1.18
Extracting files. This may take a few minutes.
```

Nota: al realizar la instalación se preguntará si deseamos instalar un enlace simbólico para lanzar el programa, por defecto aparece marcada la opción 0: *no link*, sin embargo es mejor tener un enlace simbólico (facilita el lanzamiento del programa con solo poner ‘chimera’ en consola) de modo que se puede elegir cualquiera de las siguientes opciones de rutas que normalmente están asociadas al PATH del sistema:

- /usr/local/bin
- /usr/bin
- /bin
- /sbin

```
-/usr/local/sbin  
-/usr/sbin
```

Si no se ha creado el enlace simbólico para lanzar Chimera con más facilidad es necesario añadir la carpeta de instalación a la variable PATH del sistema. Para ello simplemente basta con añadir al final del archivo `~/.bashrc` (se encuentra normalmente oculto en la carpeta personal `/home/USER`) la siguiente línea:

```
export PATH=$PATH:/home/USER/.local/UCSF-Chimera64  
-1.18/bin
```

Nota: es probable que haya que poner la contraseña del usuario al abrir el archivo `~/.bashrc` para poder modificarlo.

Luego se ejecuta en consola el comando ‘source’ para que se haga efectivo el cambio en dicho archivo:

```
>source .bashrc
```

En este momento Chimera se podrá lanzar desde la consola ejecutando:

```
>chimera
```

O yendo a la carpeta de instalación `/home/USER/.local/UCSF-Chimera64-1.18/bin/` y clicando sobre el archivo “chimera”.

ICM (visualizador molecular)

Descargar ICM-Browser (versión 3.9.-3a para Linux) de del apartado de Recursos y Materiales>Materiales del profesor>Software> icm-browser-3.9-3a—linux.sh

Instalación en AWS:

Desde el directorio donde se guardó el instalador de ICM-Browser para su instalación (ej. cd Programas/), hacer el archivo ejecutable mediante el siguiente comando:

```
>chmod +x icm-browser-3.9-3a-linux.sh
```

Para instalar el programa ejecutar el comando:

```
>./icm-browser-3.9-3a-linux.sh
```

Nota: dejar marcadas las opciones por defecto del asistente de instalación. El programa se instalará en el directorio */usr/icm-browser-pro-3.9-3a/*

Hay que definir la variable de entorno MOLBROWSERPROHOME al final del archivo *.bashrc* con una línea como la siguiente:

```
export MOLBROWSERPROHOME=/usr/icm-browser-pro-3.9-3a/
```

Luego ejecuta el comando ‘source’ para que se haga efectivo el cambio en dicho archivo:

```
>source .bashrc
```

Para lanzar ICM con más facilidad, podemos crear un enlace simbólico al ejecutable:

```
>sudo ln -s /usr/icm-browser-pro-3.9-3a/icmbrowserpro  
/usr/bin/icm
```

Nota: de esta forma el programa se podrá lanzar desde cualquier terminal mediante el comando:

```
>icm
```

ó para ejecutar el programa con interfaz gráfica:

```
>icm -g
```

STAMP (Alineamiento estructural de proteínas)

Descargar STAMP (versión 4.4.2) de:

<http://www.compbio.dundee.ac.uk/downloads/stamp/>

Nota: descargar el fichero stamp.4.4.2.tar.gz

Instalación en AWS:

Abrir una terminal, entrar al directorio donde finalmente se ha situado el programa para instalarlo (ej. cd Programas/), luego descomprimir el fichero de instalación:

```
>tar -zxvf stamp.4.4.2.tar.gz
```

Desde dentro del directorio recién descomprimido (cd stamp.4.4.2) hay que lanzar el siguiente comando:

```
>./BUILD Linux
```

Es necesario definir en el archivo *./bashrc* la variable STAMPDIR. Para ello añada al final del archivo la siguiente línea (hacer los cambios oportunos para definir la ruta donde ha realizado la instalación):

```
export STAMPDIR=/home/USER/.../stamp.4.4.2/defs/
```

Para lanzar los programas asociados a STAMP con más facilidad, podemos asociar en el archivo *~/.bashrc* la ruta de instalación del programa a la variable PATH del sistema (hacer los cambios oportunos para definir la ruta donde ha realizado la instalación):

```
export PATH=$PATH:/home/USER/.../stamp.4.4.2/bin/Linux
```

No olvides ejecutar el comando ‘source’ para que se haga efectivo el cambio en dicho archivo:

```
>source .bashrc
```

ZDOCK (Docking entre proteínas)

Descargar el instalador de ZDOCK desde el apartado de “Recursos y materiales -> Materiales del profesor -> Software” en la plataforma de CampusVIU.

Nota: Es posible también descargar ZDOCK (versión 2.1 para 64-bit Linux) desde el enlace siguiente utilizando un correo de una institución académica para registrarse: <https://zdock.umassmed.edu/software>

Instalación en AWS:

Abrir una terminal, entrar al directorio donde se va a instalar el programa, y descomprimir el fichero de instalación:

```
> tar -zxvf zdock2.1_linux_64bit.tar.gz
```

Nota: todos los ficheros necesarios se encuentran en el directorio recién descomprimido zdock2.1_linux_64bit

Hay que editar la primera línea en el fichero *zdock2.1_linux_64bit/create.pl* que se halla en el directorio recién descomprimido para que la ruta de perl apunte a /usr/bin/perl (en lugar de por defecto /usr/local/bin/perl).

Para lanzar ZDOCK con más facilidad, podemos asociar en el archivo *~/.bashrc* la ruta de instalación del programa a la variable PATH del sistema (hacer los cambios oportunos para definir la ruta donde ha realizado la instalación):

```
export PATH=$PATH:/home/USER/.../zdock2.1_linux_64bit
```

No olvides ejecutar el comando ‘source’ para que se haga efectivo el cambio en dicho archivo:

```
>source .bashrc
```

Nota: de esta forma el programa se podrá lanzar simplemente usando el comando siguiente (el resto de opciones para lanzar ZDOCK se verán en las actividades prácticas con casos puntuales):

```
>zdock
```

FTDOCK (Docking entre proteínas)

1) Antes de instalar FTDock, hay que instalar las librerías FFTW:

Descargar FFTW (versión 2.1.5) de:

<http://www.fftw.org/fftw-2.1.5.tar.gz>

Nota: en la web <http://www.fftw.org/download.html> hay otras versiones, instrucciones, e información sobre la licencia.

Instalación en AWS:

Desde una terminal, entrar al directorio donde se van a instalar las librerías (ej. cd Programas), y descomprimir el fichero de instalación:

>tar -zxvf fftw-2.1.5.tar.gz

Entrar al directorio recién descomprimido (cd fftw-2.1.5/), y compilar las librerías:

```
>./configure --enable-float  
>make
```

Nota: el directorio fftw-2.1.5 puede moverse a cualquier otro sitio, siempre que indiquemos su ruta en el fichero *Makefile* usado en la compilación de FTDock (ver siguiente sección).

2) Proceder ahora a instalar FTDock:

Descargar FTDock (versión 2.0) de:

http://www.sbg.bio.ic.ac.uk/docking/downloads/gnu_licensed_3D_Dock.tar.gz

Nota: en la página <http://www.sbg.bio.ic.ac.uk/docking/download.html> hay manuales de instrucciones, otros programas e información sobre la licencia.

Instalación en AWS:

Entrar al directorio donde se va a instalar el programa, y descomprimir el fichero de instalación:

>tar -zxvf gnu_licensed_3D_Dock.tar.gz

Ahora, abrir el fichero *./3D_Dock/progs/Makefile* con un editor de texto y modificar las siguientes líneas:

a) En la línea que comienza con FFTW_DIR, indicar la ruta completa del directorio con las librerías FFTW creado en la sección anterior, p. ej.:

FFTW_DIR = /home/USER/Programas/fftw-2.1.5
(sustituyendo USERNAME por su nombre de usuario correspondiente en AWS).

- b) En la línea que comienza por CC_FLAGS, borrar el argumento -malign-double
- c) En la misma línea CC_FLAGS, indicar -mcpu=k8 (en lugar de lo que aparece por defecto -mcpu=pentiumpro). Luego guarde los cambios y cierre el archivo.

Entrar en el directorio donde se encuentra el código del programa (cd 3D_Dock/progs/) y compilarlo:

>make

Nota: ignorar los mensajes de aviso. Una vez hecha la compilación, los ficheros ejecutables aparecerán en el directorio /progs.

Para lanzar ZDOCK con más facilidad, podemos asociar en el archivo *~/.bashrc* la ruta de instalación del programa a la variable PATH del sistema (hacer los cambios oportunos para definir la ruta donde se ha realizado la instalación):

export PATH=\$PATH:/home/USER/.../3D_Dock/progs

No olvides ejecutar el comando ‘source’ para que se haga efectivo el cambio en dicho archivo:

>source .bashrc

Nota: de esta forma el programa se podrá lanzar desde cualquier terminal mediante el comando (el resto de opciones para lanzar FTdock se verán en las actividades prácticas con casos puntuales):

>ftdock

PatchDock (Docking entre proteínas)

Descargar el instalador de PatchDock desde el apartado de “Recursos y materiales -> Materiales del profesor -> Software” en la plataforma de CampusVIU.

Nota: esta versión está disponible para las clases. Para cualquier otro uso, es necesario descargar el programa de la web oficial:

<http://bioinfo3d.cs.tau.ac.il/PatchDock/> ¡¡No disponible actualmente!!

Instalación en AWS:

Desde una terminal, entrar al directorio donde se va a instalar el programa, y descomprimir el fichero de instalación:

```
>unzip patch_dock_download.zip
```

Nota: el ejecutable del programa y el resto de ficheros necesarios se encuentran en el directorio recién descomprimido PatchDock.

Para lanzar los programas asociados a PatchDock con más facilidad, podemos asociar en el archivo `/.bashrc` la ruta de instalación a la variable PATH del sistema (hacer los cambios oportunos para definir la ruta donde se ha realizado la instalación):

```
export PATH=$PATH:/home/USER/.../PatchDock
```

No olvides ejecutar el comando ‘source’ para que se haga efectivo el cambio en dicho archivo:

```
>source .bashrc
```

Nota: de esta forma los programas se podrán lanzar desde cualquier terminal mediante comando directo con sus nombres, p. ej.:

```
>patch_dock.Linux
```

SCWRL (modelado de cadenas laterales)

Descargar SCWRL (versión 3.0) desde el apartado de “Recursos y materiales -> Materiales del profesor -> Software” en la plataforma de CampusVIU.

Nota: esta versión está disponible para las clases. Para cualquier otro uso, es necesario descargar el programa de la web oficial:

<http://dunbrack.fccc.edu/>

Instalación en AWS:

Desde una terminal, entrar al directorio donde se va a instalar el programa, y descomprimir el fichero de instalación:

>tar -zxvf scwrl3_lin.tar.gz

Nota: el ejecutable del programa y el resto de ficheros necesarios se encuentran en el directorio recién descomprimido *scwrl3_lin*. Este programa es necesario para el uso de pyDock (vea instalación siguiente).

Desde el nuevo directorio (`cd scwrl3_lin`) lanzaremos la instalación:

`./setup`

Una vez instalado el programa siguiente (pyDock) habrá que editar el fichero de configuración (*pyDock3/etc/pydock.conf*) para indicar la localización de SCWRL3.0:

`SCWRL=/home/USER/.../scwrl3_lin/scwrl3`

(sustituye USER por el nombre de usuario correspondiente en AWS).

pyDock (Docking entre proteínas y scoring)

Descargar pyDock (versión 3.0) desde el apartado de “Recursos y materiales -> Materiales del profesor -> Instalación Software” en la plataforma de CampusVIU.

Nota: esta versión está disponible para las clases. Para cualquier otro uso, es necesario descargar el programa de la web oficial:

<https://life.bsc.es/pid/pydock/>

Instalación en AWS:

Desde una terminal, entrar al directorio donde se va a instalar el programa, y descomprimir el fichero de instalación:

>tar -zxvf pyDock3.tgz

Nota: el ejecutable del programa y el resto de ficheros necesarios se encuentran en el directorio recién descomprimido pyDock3.

Desde el nuevo directorio (cd pyDock3) deberemos cambiar los permisos del directorio data:

>chmod go+rx data

Debemos editar el fichero de configuración (*pyDock3/etc/pydock.conf*) e indicar la localización de los programas externos:

FTDOCK=/home/USER/Programas/3D_Dock/progs/
ZDOCK=/home/USER/Programas/zdock2.1_linux_64bit/
SCWRL=/home/USER/Programas/scwrl3_lin/scwrl3
(sustituye USER por su nombre de usuario correspondiente en AWS).

Para lanzar pyDock con más facilidad, podemos asociar en el archivo *./bashrc* la ruta de instalación a la variable PATH del sistema (hacer los cambios oportunos para definir la ruta donde se ha realizado la instalación):
export PATH=\$PATH:/home/USER/.../pyDock3

No olvides ejecutar el comando ‘source’ para que se haga efectivo el cambio en dicho archivo:

>source .bashrc

Nota: de esta forma el programa también se podrá lanzar mediante el comando:

>pyDock3