

Tutorial Protein-ligand Docking with Smina

Antes de realizar el tutorial es necesario instalar tanto el programa en sí como los requerimientos para poder trabajarlo. Aquí se mostrarán dos alternativas para poder operar con el tutorial, el cual se encuentra en un cuaderno de Jupyter, programado con Python.

La primera opción es utilizar el servidor denominado "Chernobyl", cuya IP es: 152.74.100.143, mediante una sesión de invitado. Mientras que la segunda es instalar las dependencias localmente.

I) Para acceder al servidor y al tutorial se deben seguir los siguientes pasos (los símbolos \$ representan escritura sobre la terminal):

- 1) Lo primero es acceder al servidor mediante la cuenta de invitado, para esto tienes que abrir tu terminal y utilizar el comando ssh con la cuenta invitado1. La contraseña es **ramirezlab22**.

```
$ ssh invitado1@152.74.100.143
```

- 2) Lo siguiente es crear una carpeta personal, dentro de la carpeta "Smina" ya sea con nuestro nombre, apellido o algún identificador personal. En este ejemplo utilizaremos la palabra "nombre" para definir la carpeta personal.

```
$ cd Smina
```

```
$ mkdir nombre
```

- 3) Luego, se debe copiar el cuaderno de jupyter y la carpeta "run", que se encuentran dentro de la carpeta "Smina", en nuestra carpeta personal. Para esto utilizaremos el comando "cp" que posee la siguiente sintaxis:

```
cp Archivo Carpeta de destino
```

```
cp -r Carpeta Carpeta de destino
```

por lo tanto:

```
$ cp Basic_Protein-ligand_Docking_with_Smina_(Re-Docking).ipynb  
./nombre
```

```
$ cp -r run ./nombre
```

- 4) Ahora se debe acceder a la carpeta personal y activar el ambiente de conda en donde están instaladas todas las dependencias necesarias para hacer funcionar el tutorial.

```
$ cd nombre
```

```
$ conda activate smina
```

- 5) Para poder abrir el cuaderno de jupyter, sin interferencia de otros usuarios que estén utilizando la cuenta de invitado simultáneamente, vamos a crear un túnel para abrir el cuaderno en nuestro navegador local. Para esto debemos definir el puerto, que serán 4 dígitos (#). Estos números deben diferir con los de otros usuarios, para no causar interferencia.

```
$ jupyter notebook --no-browser --port=####
```

- 6) Para continuar con la tunelización se debe abrir otra terminal en la cual accederemos nuevamente al servidor "Chernobyl", pero especificando el puerto seleccionado.

```
$ ssh -L ####:localhost:#### invitado1@152.74.100.143
```

- 7) Lo siguiente es abrir cualquier navegador dentro del computador personal, especificando el puerto. Con esto abriremos la interfaz de jupyter mediante la tunelización.

En el navegador → localhost:####

- 8) Finalmente, la interfaz de jupyter nos pedirá un código de acceso llamado "token", el cual se encuentra en la primera terminal, donde activamos jupyter.

Ejemplo:

```
Jupyter Notebook 6.4.11 is running at:
[|          17:51:58.257          NotebookApp]
http://localhost:7777/?token=0d47af2913ba0a8d65b8aa64933de2118299af2b918fc256
```

El token en este caso sería:
0d47af2913ba0a8d65b8aa64933de2118299af2b918fc256

- II) Para realizar el tutorial localmente necesitamos descargar la carpeta con los archivos desde el servidor "Chernobyl" hacia nuestro computador personal e instalar Smina y las dependencias. Para esto es necesario que tengas instalado previamente Anaconda o Miniconda.

- 1) Descargar o copiar la carpeta "Smina" en nuestro computador. Para esto tenemos que estar en la carpeta de destino o especificar la ruta de la carpeta de destino. Si estamos en la carpeta de destino escribiremos en la terminal lo siguiente

```
$ scp -r invitado1@152.74.100.143:/home/invitado1/Smina ./
```

Ahora nos pedirá la contraseña, la cual es: **ramirezlab22**

- 2) Para instalar Smina y los requerimientos debemos utilizar el archivo "Smina.yml" que se encuentra dentro de la carpeta Smina. Esto creará un ambiente de conda llamado smina.

```
$ cd Smina
```

```
$ conda env create -f smina.yml
```

- 3) Finalmente, tenemos que activar el ambiente creado y ejecutar jupyter.

```
$ conda activate smina
```

```
$ jupyter notebook
```