

Utiliser, modifier et réaliser des scripts avec « RASTOP »

Qu'est qu'un script ?

- Un script est un fichier texte brut comportant une série de commandes (une commande par ligne), comme celui-ci :

```
zap
load «molecule.pdb»
select all
wireframe 80
color blue
echo voici la molecule
echo
pause
hbonds on
hbonds 50
color hbonds green
echo voici les liaisons hydrogene
echo
exit
```
- Le texte d'un script peut être tapé dans un traitement de texte (word, wordPad ou même le bloc-notes ...) ou directement dans la fenêtre de commandes (menu Editer puis Commande) de «RASTOP»
- Le fichier texte du script porte l'extension **.scr** ou **.rsm**. Ainsi, après avoir tapé un script avec un traitement de texte type Word, il faut prendre garde de l'enregistrer en texte brut et avec l'une ou l'autre de ces extensions. Quand le texte a été directement tapé dans «RASTOP», il faut à la fin du script faire un copier / coller du texte dans un traitement de texte et l'enregistrer comme indiqué précédemment.
- Il est possible d'inclure des scripts dans un script (et donc de réaliser des scripts emboîtés). Ce super script s'écrivait ainsi :

```
zap
script rotation_1.scr
script translation_2.scr
exit
```

Ce super script met en œuvre 2 scripts nommés rotation_1.scr et translation_2.scr
- Les fichiers de molécules qui se trouvent dans le même zip que les scripts ont une extension **.pdb**. Notons qu'il est possible de les ouvrir avec un traitement de texte tel que Word. Les premières lignes de ce type de fichier sont très instructives car elles donnent non seulement des informations sur la molécule (le nom de la molécule et son code 4 caractères, l'espèce à laquelle elle appartient, les mutations éventuelles, les molécules... mais aussi l'identification des diverses chaînes.

Où placer un script ?

- Il faut d'abord veiller à ce que les molécules (elles portent l'extension **.pdb**) qui dépendent de ce script soient dans le même dossier que le script (en effet, les scripts ouvrent les molécules dans la fenêtre principale de «RASTOP»).
- S'il s'agit d'un script à extension **.scr**, on peut le placer en racine de «RASTOP» ou dans un sous-dossier de «RASTOP» que l'on appellera par exemple scripts_molécules. S'il s'agit d'un script à extension **.rsm**, on peut le placer n'importe où, par exemple dans « Mes documents ».

Exécuter un script

- Pour les scripts d'extension **.scr** : il faut commencer par ouvrir «RASTOP» ; puis cliquer sur « Fichier » / « Nouveau » pour faire apparaître l'écran noir. Il reste à aller chercher le script en cliquant sur « Fichier » / « Charger un script » ; une boîte de dialogue s'ouvre, il reste à chercher le script et de cliquer sur le bouton « Ouvrir » ; le script alors commence à s'exécuter.

- Pour les scripts d'extension **.rsm** : il suffit de double cliquer sur le fichier pour lancer l'exécution du script dans «RASTOP». En cas d'échec, réitérer l'opération.
- Lors du déroulement d'un script, on passe d'une scène à une autre en appuyant sur la barre d'espace (c'est la commande **pause** qui à l'intérieur du script bloque les diverses scènes).
- Pendant le déroulement d'un script, s'affiche en bas et à droite de l'écran un voyant de couleur orange. Ce voyant reste orange tant que le script n'est pas achevé.



- Voici ci-dessous la totalité du panneau de commande au cours de l'exécution d'un script. On y observera la fenêtre d'affichage des commentaires du script, en bas et à droite du panneau (ces divers commentaires, ici « coloration des nucléotides » sont affichés par la commande **echo**). A l'extrême droite et en haut, le voyant orange de contrôle du déroulement du script ; à l'extrême gauche, et en haut, le bouton « Univers », ici coché ; dans cette position du bouton, toutes les molécules affichées à l'écran sont solidaires.

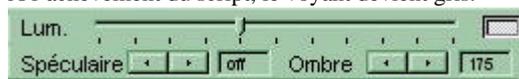


Pour désolidariser les molécules présentes à l'écran (quand le script présente plusieurs molécules à la fois), il faut décocher le bouton Univers



suffit de cliquer sur le bouton  de la barre des icônes, en haut de l'écran.

- A l'achèvement du script, le voyant devient gris.



Le panneau de commande indique alors dans la fenêtre d'affichage du script la fin de ce script : « Script executed! »



La ou les molécules sont alors totalement utilisables par l'opérateur.

Ecrire un script

- Le script doit être pensé comme une série de scènes. Chaque scène présentant un aspect particulier de la molécule. Mais avant tout, deux commandes doivent être utilisées : celle de l'effacement de l'écran (commande **zap**) puis celle du chargement de la molécule dans l'écran de «RASTOP» (commande **load**) .
- Pour chaque scène, le principe est simple : on sélectionne une partie de la molécule (commande **select**) et on lui affecte un affichage (exemple **ribbons**) et une couleur (exemple **color yellow**) ; ne pas oublier le « sous-tirage » (du panneau de commande) pour expliquer ce qui est affiché (commande **echo**) et pour bloquer la scène, la commande **pause**.
- Il arrive assez fréquemment que plusieurs parties de la molécules (par exemple plusieurs chaînes protéiques) soient traitées de la même façon. Le « copier / coller » de groupes de commandes (selection / affichage de l'aspect de la chaîne / couleur de la chaîne) est donc une méthode qui permet de gagner du temps.
- Quand dans une scène, un affichage a été réalisé (exemple ruban, commande **ribbons on**) et que l'on souhaite modifier le type d'affichage (exemple : sphères) dans la scène suivante, il faut commencer par désactiver l'affichage précédent (**ribbons off**) avant de l'affichage sphère (commande **spacefill on**) ; en effet, si l'opération de désactivation n'est pas effectuée les 2 modes d'affichages peuvent se superposer.
- En fin de script ne pas oublier la commande **exit** .
- Il reste enfin à enregistrer le script (en format texte brut) avec l'extension **.scr** ou **.rsm**

Principales commandes «RASTOP» utilisables dans des scripts

Chargement et sélection des molécules :

- **Commande de chargement de la molécule** => **load «molécule.pdb»** la molécule doit être dans le même dossier que le script ; ne pas oublier l'extension du nom de molécule .pdb .
- **Sélectionner une partie ou la totalité d'une molécule** => pour afficher dans un mode particulier, puis colorer la molécule entière ou une partie de molécule il faut commencer par la sélectionner ; c'est la commande **select** qui assure cette fonction ; voici quelques exemples de cette commande :
 - ⇒ **select all** ou **select *** : sélection de la totalité de la molécule,
 - ⇒ **select atomno=2536** : sélectionne l'atome 2536
 - ⇒ **select *A** : sélection de la chaîne ; cette chaîne peut être une séquence d'acides aminés (chaîne polypeptidique) ou un brin de molécule d'ADN (séquence de nucléotides) ou l'ARN (séquence de nucléotide). « RASTOP » donne des informations sur les molécules ouvertes : menu « Molécule » / « Séquence » ; on peut alors savoir à quoi correspondent les diverses chaînes,
 - ⇒ **select ser** («ser» est un acide aminé) : tous les acides aminés « ser » sont sélectionnés,
 - ⇒ **select val6** : sélection de la valine en position 6 dans la chaîne,
 - ⇒ **select a** ou **select t** ou **select c** ou **select g** ou **select u** : sélectionne les nucléotide A, T, C, G ou U de l'ADN ou de l'ARN,
 - ⇒ **select *s** ou **select nag** : sélectionne le substrat respectivement dans le cas de la carboxypeptidase ou dans le lysosyme,
 - ⇒ **select within (6.5,nag)** dans le cas du lysozyme : sélectionne les atomes dans un périmètre donné de rayon 6,5 Å autour du substrat (nag) : commande générale : **select within (distance en Å,objet)** [attention : respecter les espaces ou l'absence d'espaces entre les éléments de cette commande]
 - ⇒ **select (*L and (1-100))** : sélectionne dans la chaîne L les acides aminés compris entre 1 et 100 de cette chaîne.
 - ⇒ **select (*b and (7,12-17,21-32,39,41))** : [attention à la syntaxe !] sélectionne dans la chaîne b, l'acide aminé 7, puis les acides aminés compris entre 12 et 17, puis ceux compris entre 21 et 32, puis les acides aminés 39 et 41 ; cette commande sera utilisée pour mettre en évidence la partie hypervariable des molécules d'anticorps ou des récepteurs T.

Commandes d'affichage (respecter les blancs entre les commandes) :

- **Aspect de la molécule**
 - ⇒ en mode « ruban » : **ribbon on** (pour activer) ou **ribbon off** (pour désactiver),
 - ⇒ en mode « bâtonnets » : **wireframe on** (pour activer) ou **wireframe off** (pour désactiver),
 - ⇒ en mode « bande striée » : **strands on** (pour activer) ou **strands off** (pour désactiver),
 - ⇒ en mode « sphère » : **spacefill on** (pour activer) ou **spacefill off** (pour désactiver)
 - ⇒ en mode « fil de fer » : **backbone on** (pour activer) ou **backbone off** (pour désactiver)
- Pour toutes ces commandes, il est possible de jouer sur l'épaisseur : exemple : **wireframe 40**
- **Liaisons hydrogène** => pour activer la commande : **hbonds on** ; puis pour les visualiser, les épaissir : **hhainsbonds 90** et les colorer (en vert) : **color hbonds green** ; pour désactiver les liaisons Hydrogène : **hbonds off**
- **Ponts dissulfure** => pour activer la commande : **ssbonds on** ; puis pour les visualiser, les épaissir : **ssbonds 200** et les colorer (en orange) : **color hbonds redorange** ; pour désactiver les ponts dissulfure : **ssbonds off** . Remarque : quand on veut afficher toutes les liaisons hydrogène ou tous les ponts dissulfure, il est prudent de faire précéder **hbonds on** ou **ssbonds on** de la commande **select all** (commande qui sélectionne l'ensemble de la molécule) ; on peut aussi restreindre l'affichage à une partie de la molécule (exemple : la molécule comporte une protéine constituée d'une chaîne nommée A ; les commandes successives **select *A** puis **hbonds on** puis **hbonds 50** puis **color hbonds green** n'affichent les liaisons hydrogène que dans cette partie de la molécule ; pour l'ADN constitué de 2 brins donc de 2 chaînes, sélectionner avant ces chaînes avant d'appliquer la commande hbonds.
- **Coupe virtuelle** => pour activer la commande de coupe virtuelle : **slab on** ; pour désactiver cette commande : **slab off**
- **Réduction de l'affichage de la molécule** => **restrict within (6.5,nag)** n'affiche que les atomes situés dans un périmètre de rayon 6,5 Å autour du substrat (nag) ; **restrict *A** : ne conserve que la chaîne A dans la molécule.
- **Affichage d'étiquette** => permet d' « épingle » une étiquette à un atome pour le désigner ou désigner l'ensemble auquel il appartient ; l'affichage de l'étiquette se fait par la commande **label** (pour désactiver cette commande faire **label off**). Pour cet affichage, il faut préciser la localisation de l'étiquette par la commande **select atomno=5431** (la position de l'atome dans la molécule est connu en cliquant dans «RASTOP» sur la molécule, la position s'affiche alors dans la fenêtre du panneau de commande), il faut préciser la taille de la police par la commande **set fontsize 12**, puis la couleur d'affichage **color label white** et enfin la nature du message **label ADN**. Exemple :

```
select atomno=5431
set fontsize 12
color label white
label ADN
```
- Pour supprimer ponctuellement un affichage, récrire le même scénario en remplaçant la commande d'étiquette (dans l'exemple **label ADN**) par la commande **label off**.
- **Commandes de mouvement de la molécule** => **translate x +50** déplace la molécule, horizontalement, vers la droite de l'écran ; on peut alors afficher à gauche de l'écran une autre molécule (il faut alors la charger (commande **load**) puis indiquer un positionnement à gauche par la commande **translate x - 50**) ; un mouvement de la molécule peut se faire

verticalement, vers le haut => **translate y +10** ou vers le bas **translate y -10** ; il peut aussi se faire en avant ou en arrière => **translate z +20** (c'est un zoom).

- **Commande de grossissement (ou réduction) d'une molécule** => **zoom 50** (essayer plusieurs valeurs pour voir les effets !).

Couleurs

- **Commande** => **color red** (colore en rouge ce qui a été précédemment sélectionné)
- **Principales couleurs** => **cyan** (bleu cyan) , **blue** (bleu) , **greenblue** (bleu grisé) , **green** (vert) , **black** (noir : attention le fond de «RASTOP» est noir !, peut être utilisé pour effacer des molécules) , **white** (blanc) , **grey** (gris) , **red** (rouge) , **pink** (rose) , **redorange** (rouge orangé) , **orange** (orange) , **yellow** (jaune) , **purple** (pourpre) , **magenta** (rouge magenta) , **violet** (violet) ; on peut si on le souhaite augmenter considérablement le nombre de couleurs ,

Commande de déroulement du scénario

- **Commentaire** => **#ceci est un commentaire** (les commentaires ne sont pas nécessaires bien évidemment au fonctionnement d'un script ; par contre ils aident à la lisibilité du script (pour la compréhension de ce qui suit par exemple))
- **Ecran noir** => **zap** (pour le tout début et éventuellement l'extrême fin du scénario)
- **Commentaires affichés (dans la fenêtre des commandes «RASTOP»)** => **echo** (suivi après un blanc du commentaire à afficher dans la fenêtre). Exemple **echo est affichee la molecule d ADN** (remarquer que l'affichage dans la fenêtre du panneau de commande (= ancienne Command Line de «RASTOP») se fait sur 2 lignes et que cet affichage n'accepte ni les accents, ni les guillemets. Pour effacer ce qu'il y avait dans cette fenêtre le plus simple est de taper 2 fois echo.
- **Commande de pause** => **pause** ; cette commande attend que l'utilisateur appuie sur la barre d'espace du clavier pour poursuivre le programme, cela peut donner le temps de lire des commentaires ou de manipuler la molécule (attention, toutefois, pendant le déroulement d'un script, certaines fonctionnalités de «RASTOP» ne sont pas disponibles : mesures de la distance entre atomes, mesures d'angles, modifications d'affichage).
- **Commande de fin** => **exit** ; cette commande indique la fin d'un script ; dans la fenêtre d'affichage de «RASTOP» s'affiche alors : **Script executed !** Remarque : après exit la molécule devient disponible pour toutes les commandes de «RASTOP».

D'autres liens, pour aller plus loin (liste non exhaustive !) ...

- Librairie de molécules (site officiel incontournable) => <http://librairiedemolecules.education.fr/>
- Les scripts de «RASTOP» (site INRP) => <http://www.inrp.fr/Acces/biotic/rastop/html/scripts.htm>
- Quelques scripts pour « RASTOP » (site académique de Limoges) => http://www.ac-limoges.fr/svt/ecriture/articles.php3?id_article=223
- Dernière version de « RASTOP » => <http://www.geneinfinity.org/rastop/>
- Infographie moléculaire (site de Didier Pol, de très nombreuses molécules à télécharger) => <http://www.didier-pol.net/7infolist.htm>