Instalación de Gromacs, Avogadro, VMD y un graficador en Mac.

Autor: Dr. José Guillermo Méndez Bermúdez

1. Intalación de Gromacs.

Para la instalación de este paquete se necesita que la máquina tenga instalado **MacPorts**. Para saber que esta instalado solo uno tiene que teclear en una terminal

\$ port

si esta instalada, les sale una leyenda con la versión de **port** que tiene el equipo.

```
MacPorts 2.3.4
Entering interactive mode... ("help" for help, "quit" to quit)
[Users/porpe] >
```

Nota: Voy a dar el comando para desintalar **port**, esto es para que se vean desde cero como se instala **port**.

Para desintalar **port**, escriba lo siguiente:

\$ sudo port -fp uninstall installed

le damos enter, esto solo se hace cuando no se tenga **Port**, ya que puede desinstalar software que ya fue instalado en el equipo.

Ahora, para instalar port, tenemos que ir a la página de internet MacPorts



Entramos a la pagina principal: The MacPorts Project - Home

🗠 🕂 📲 https 🗟 www.macports.org		C Lector
: Apple iCloud Facebook Twitter Wikipedia Y: The MacPorts	hoo Volician [®] Populares ^v imprimir pagina en mac - Buscar con Google imprimir pagina en mac - Buscar con Google	
Mac Ports		Download
		Download
Getting Started	The MacPorts Project Official Homepage	
Installing MacPorts Available Ports Documentation Support & Development Contact Us News Shortcuts Available Downloads	The MacPorts Project is an open-source community initiative to design an easy-to-use system for and upgrading either command-line (X11 or Aqua based open-source software on the Mac.open end we provide the command-line driven MacPorts software package under a BSD 3-Clause Lite easy access to thousands of ports that greatly simplify the task of compling and installing open- your Mac. We provide a single software tree that attempts to track the latest release of every software title without splitting them into "stable" Vs. "unstable" branches, targeting mainly OS X Mavericks v10 mocOS Sierra v10.12). There are currently a <u>lot of ports</u> in our tree, distributed among many dif more are being added on a regular basis.	or compiling, installing, ating_system. To that gense, and through it source software on (port) we distribute, 0.9 and later (including ferent categories, and
MacPorts FAQ Report a Bug Bug reporting Guidelines	Getting started For information on installing MacPorts please see the <u>installation</u> section of this site and explore download options we provide and our base system requirements.	the myriad of
MacPorts Team Becoming a Member	If you run into any problems installing and/or using MacPorts we also have many options to help how you wish to get get in touch with us. Other important help resources are our online documer MacPorts Guude, and our Trav Wils server & bug tracker.	you, depending on ntation, A.K.A <u>The</u>
	Latest MacPorts release: 2.3.4	

Nos vamos a Installing MacPorts, parte superior izquierda



Uno tiene que seguir los pasos que indica en la página, instalar **xcode** y estar de acuerdo con la licencia, luego instalar la versión de **port**. Si uno no lo puede instalar, lo puede instalar después, cuando lo pida el sistema.

Para instalar la versión de **port**, busquemos la versión de nuestro sistema operativo denso le clic en icono de manzana y entrar en **acerca de este Mac**, nos despliega la siguiente pantalla

⊖ ○ Acerca de este Mac				
0				
OS X				
Versión 10.9.5				
Actualización de Software				
Procesador 3.1 GHz Intel Core i7				
Memoria 8 GB 1600 MHZ DDR3				
Más información				
TM y © 1983-2016 Apple Inc.				
Todos los derechos reservados. Contrato de licencia				

La versión de mi equipo es **10.9.5**, es decir **Mavericks**, esa versión de **port** descargamos e instalamos en nuestro equipo. Tardara unos minutos.

Le damos clic al paquete descargado y lo instalamos



Al terminar la instalación llegará este mensaje



Ahora si podemos instalar Gromacs

\$ sudo port install gromacs

al final salen estas leyendas

---> Installing gromacs @5.1.4_1+accelerate

- ---> Activating gromacs @5.1.4_1+accelerate
- ---> Cleaning gromacs
- ---> Updating database of binaries
- ---> Scanning binaries for linking errors
- ---> No broken files found.

La última línea nos dice que se instalo correctamente, líneas más atrás nos indica la versión de **gromacs** instalada, la **5.1.4**, para ver que esta instalada tecleamos

\$ gmx grompp

> Installing gromacs @5.1.4_1+accelerate	s_MACyLinux pa
> Activating gromacs @5.1.4_1+accelerate	
> Cleaning gromacs	
> Updating database of bindries	
> Scanning binaries for linking errors	
> No broken files found.	
1Mac-ae-MCFM∠:~ porpe\$ gmx grompp :-) GROMACS - gmx grompp, VERSION 5.1.4 (-:	
CROWACS is written by	
URUMALS IS WITCHEN Dy,	iollman
Emile Apol Rossen Apostolov Herman J.C. Berenasen Par B	Jetkmar nitech
Connit Croonbof Christoph Junghans Anga Hamunany Vincent Hin	drikson
Dimitrios Kankoulis Doton Kasson lini Knaus Canston K	utznon
Den Lansson Justin A Longell Magnus Lundhang Diston Maul	anhoff
Frik Marklund Toomu Muntola Stiland Doll Sandon D	ennori
Poland Schulz Alexey Shietsey Michael Shirts Alfana Si	ronk ibons
Rotand Schulz Alexey SivetSov Michael Shirts Alfons Si Batan Tialaman Taamu Vinalainan Christian Wannhana Maantan	Juers Wolf
recer receman reema virolathen christian weinberg maarten	NOLI
Und the project ledders.	
Mark Abraham, Berk Hess, Ertk Ethaant, and Davia van der Spoe	L
Copyright (c) 1991-2000. University of Groningen. The Netherlands.	
Copyright (c) 2001-2015. The GROMACS development team at	
Uppsala University, Stockholm University and	A Star Land
the Royal Institute of Technology, Sweden,	S. 18 3 3 3 4
check out http://www.aromacs.org for more information.	STON 6
GROMACS is free software: you can redistribute it and/or modify it	C. C. C. C. C.
under the terms of the GNU Lesser General Public License	C. S. C. C. S. S.
as published by the Free Software Foundation: either version 2.1	and the second
of the License, or (at your option) any later version.	
GROMACS: gmx grompp, VERSION 5.1.4	
Executable: /opt/local/bin/gmx	

Ya esta instalado **gromacs** en **Mac**.

2. VMD

Para instalar VMD uno tiene que entrar a la página oficial



Luego tenemos esta página

B O O / TOS VMD	- Visual Molecular Dyna ×		e		
C (0 ww	w.ks.uluc.edu/Research/vmd/		\$		
TA BIL plgina está e	esorita en (inglés 🔹 🗧 ¿Quieres traduci	na? No Traducir	Configuración		
NH CENTER FOR MACE	NONOLEGULAR MODELING & MONFORMATICE UNVER	TTY OF ALLINDS AT UNDAMA.CHAMMADH	pe Keywards SEARCH		
			2		
Home Resear	rch Publications Software Instr	uction News Galleries Facilities About Us			
tverview	VILLE O VALUE	5			
ublications esearch crivere VMD Relevator	VMD is a molecular visualization program for d X, Unix, or Windows, is distributed free of charg (more details)	splaying, an imaling, and analyzing large biomolecular systems using 3-D graphics and built-in scripting. VMD supports s, and includes source code.	omputers running MacOS		
AAM3 Notecular Dynamics Simulator BioCoVIII Collaboratory Environment	Spotlight Recent improvements to the data structures and algorithms used to digitally and analyze molecular structures in VMD have improved its utility in biorassetechnology, and				
ND Service Sale Structural Biology Software Database Computational Facility	materials science when large structures, various types of non-biological matter, and non-polymeric structural elements are often present.				
utreach	Overview	News and Announcements			
WD ailing ist	Molecular representations VMD plugin library Molecular file formata OPU-accelerated computing Interactive molecular dynamics	OPU-Accelerated Metricular Operancies Disatering Analysis with OperaACC, Providel Programming with OperaACC, 2019 Operation Disaterial Metricular Operancies Toolkit for Nexices and Expansis, Scientific Reports 2019 Metricular dynamics based model influences and validation for and Acceptations incorresponding. ALX 2019 Early Experimences Perting the NAND and VND Netocular Structures and Acatyvities Software to GPU-Accelerated OperaPORER Partnerson NUCKS 2019 Disater Structures and Structures and VIND Netocular Structures and Acatyvities Softwares to GPU-Accelerated OperaPORER Partnerson NUCKS 2019 Disater Structures and Acatyvities and Acatyvities Softwares to GPU-Accelerated OperaPORER Partnerson NUCKS 2019 Disater Structures and Structures and Structures and Acatyvities Softwares to GPU-Accelerated OperaPORER Partnerson NUCKS 2019 Disater Structures and Structures and Acatyvities Softwares to GPU-Accelerated OperaPORER Partnerson NUCKS 2019 Disater Structures and Structures and Acatyvities Softwares to GPU-Accelerated OperaPORER Partnerson NUCKS 2019 Disater Structures and Structures and Acatyvities Softwares to GPU-Accelerated OperaPORER Partnerson NUCKS 2019 Disater Structures and Structures and Acatyvities Softwares to GPU-Accelerated OperaPORER Partnerson NUCKS 2019 Disater Structures and Structures and Acatyvities Softwares to GPU-Accelerated OperaPORER Partnerson NUCKS 2019 Disater Structures and Structures and Acatyvities Softwares to GPU-Accelerated OperaPORER Partnerson NUCKS 2019 Disater Structures and Acatyvities and Acatyvities Softwares to GPU-Accelerated OperaPORER Partnerson NUCKS 2019 Disater Structures and Acatyvities and Acatyvities and Acatyvities Softwares to GPU-Accelerated OperaPORER Partnerson NUCKS 2019 Disater Structures and Acatyvities and Acatyvities Softwares to GPU-Accelerated OperaPORER Partnerson NUCKS 2019 Disater Structures and Acatyvities			
ND	Programs that use VMD VMD research publications Hew to oils VMD VMD cities VMD VMD cities (19,000 as of Dcf 16)	Immerzive Molecular Vauxitation with Omnidirectional Stereoccopic Ray Tracing and Remote Rendering. TopoGreenace: Automated Topology Conversion from CHARMIN to GROMACG within VBD, JCH 2016 High Performance Molecular Vauxitation: In-Situ and Parallel Rendering with EQL, HPDW/ 2016	HPDAV 2016 CD		
	Download	2016 Participante de la construcción de la construc			
inuals ID mmunity	Dewnload (all versions) Updated Gromace plugins for VMD 1.9.2 VMD 1.9.2 (MacOS X, Unix, Windows) VMD 1.9.1 (MacOS X, Unix, Windows)	Past anonemotion Gallery Farmede VBN VEND YearDe videos C			

Entramos a **Download VMD** en la parte izquierda y nos aparece lo siguiente:



Seleccionamos la versión de VMD para Mac disponible: <u>MacOS X OpenGL (32-bit</u> <u>Intel x86)</u> (Apple MacOS-X (10.4.7 or later) with hardware OpenGL (native bundle))



Para continuar tenemos que dar el **Username** (**TallerDM_2017**) y el **Password** (**TallerDM_2017**) y con eso es suficiente. Si uno quiere registrarse individualmente tienen uno que dar un **Username** y **Password** diferentes, luego pedirá datos del usuario



Una vez que llenamos todos los datos le damos clic en **Register**.



Finalmente aceptamos los términos de licencia:

I am José G. Méndez-Bermúdez and I agree to the terms of this License:

Y empezará a bajar el **VMD**, una vez completada la acción se verá esto en su equipo



Le damos clic para descomprimir y abrirá una pantalla, se verá en escritorio de esta forma:



Arrastramos el ícono de VMD 1.9.3 a Aplicaciones



Para comprobar que esta instalado abrimos **VMD** desde **Aplicaciones**, lo cual nos desplegará. Cerramos la notificación.



La forma de abrirlo bien es con **ctrl** botón derecho y le damos en abrir



Le damos abrir, luego nuevamente le damos doble clic a la aplicación y desplegará lo siguiente



Y estará listo para usar el VMD.

3. Avogadro

Vamos a la siguiente página



Entramos a Get Avogadro

000		Get Avogadro - Avogadro - Free cross-platform molecule editor	e	2
< > 🗠 🕂 🕂 a	ogadro.cc/wiki/Get_Avogadro		c	Lector 🙆 🔘
11 III Apple Kloud	Facebook Twitter Wikipedia Yahoo Noticias * Populares *			+
			Create account Log in de Log in / crea	the account with OpenID
	Page Discussion		Read View source View history Search	Q
	Get Avogadro			
Main page Recent changes Random page Help	The latest and greatest release of Avogadro is Avogadro to to different locations, and can be installed on the same sys Since we moved to GitHub/2 you can now download the s	1.1.1 ϕ as of 11 December 2013, a Changelog is evaluative. The Avog term without issues. Source code of development branch ϕ or stable 1.0.x branch ϕ to d	patro 2 code is a complete rewrite, and can be downloaded here d. Avog heck out the very latest developments in Avogadro.	adro 1 and 2 install
Tools What links here Related changes Special pages Printable version Permanent link Page information	Windows	Linux / UNIX	Mac	
	Windows Installer Avogadro 1.0.3 // (for older versions) Compile the latest Source Code Nightly Builds (Unstable)	Latest source release # Distribution Packages Compile the latest Source Code Nightly Builde #	Mac Application # (for Mac OS X 10.6 and later) Avogadro 1.0.3 # (for older versions) Compile the latest Source Code Nightly Builds #	
Share				
6-1	This page was last modified on 23 December 2013, at 12-41.			
	Content is available under GNU Prev Documentation License 1.2 unless oth	terwise noted.		
	Privacy policy About Avogadio - Free cross platform molecule editor. Dee	oaimos		รีอีพิม รองความสะเศศ

Le damos clic a la versión para Mac. Una vez que baja se verá lo siguiente



Lo abrimos y lo descomprimirá. Tendremos la siguiente pantalla desplegada (izquierda), arrastramos el ícono de **Avogadro** a **Aplicaciones**



Al abrir **Avogadro** en **Aplicaciones** desplegará una notificación, le damos aceptar.



La forma de abrirlo bien es con **ctrl** botón derecho y le damos en abrir



nuevamente le damos doble clic a la aplicación y desplegará lo siguiente



Ya esta listo para trabajar en Avogadro.

4. Graficador

Para el graficador puede teclear las siguientes opciones:

- 1. **\$ sudo sport install grace.**
- 2. Instalar datagraph pero este solo se puede adquirir en la tienda de MAC.
- 3. Bajar el archivo **qtgrace** de la red.