



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



Escola Tècnica Superior d'Enginyeria del Disseny

Grau en Enginyeria Electrònica
Industrial y Automàtica

SIMULACIÓ DE LA DINÀMICA MOLECULAR EN MATERIALS DIELÈCTRICS

Autor: Josep Ivan Balaguer Molins

Tutor: Jose Molina Mateo

Cotutora: Roser Sabater i Serra

Data: Setembre de 2018

ESTRUCTURA DE L'EDICIÓ:

1.MEMÒRIA

2.PLEC DE CONDICIONS

3.PRESSUPOST

1. MEMÒRIA

Índex

1.Objectiu	7
2.Justificació i Motivació	9
3.Antecedents	11
3.1 Introducció	11
3.2 La importància de les simulacions.....	11
3.3 Polímers i Àcid Polilàctic (PLA)	12
3.3.1 Transició Vítria en Polímers.....	14
3.3.2 Aplicacions del PLA.....	15
3.4 Programes de simulació de dinàmica molecular	17
3.5 Riscs del projecte.....	18
4.Marc Teòric	21
4.1 Camps de forces	21
4.1.1 Potencial dièdric o de torsió.....	22
4.1.2 Forces de van der Waals	23
4.1.3 Ponts d'hidrogen	24
4.1.4 Potencial de l'angle d'enllaç.....	25
4.2 Algoritmes de simulació	25
4.2.1 Monte Carlo (MC).....	25
4.2.3 Dinàmica Molecular (MD)	25
4.3 Nanoscale Molecular Dynamics (NAMD)	26
4.4 Polylactid acid force field 3 (PLAFF3)	27
5.Implementació del Projecte	29
5.1 Instal·lació de NAMD a Ubuntu.....	29
5.2 Instal·lació de VMD a Ubuntu	33
5.3 Comprovació del funcionament de NAMD per a tots els nuclis de l'ordinador.	35
5.4 Familiarització amb l'entorn	36
5.5 Fitxers de GROMACS	37
5.6 Carregar estructura a VMD	38
5.7 Scripts de conversió de fitxers	39
5.8 Noves idees i suport tècnic.	40
5.9 Eliminació dels #include	42
5.10 Control de temperatura i primer script de NAMD	43

5.11 Primer error.....	46
5.12 Nova informació rellevant.....	47
5.13 Generar fitxers .psf i .pdb a VMD.....	49
5.14 Codi font de NAMD: GromacsTopFile.C.....	52
5.15 Errors d'estabilitat.....	61
5.16 Script de minimització.....	71
5.17 Obtenció i visualització del arxiu .log.....	72
5.18 Modificar la corba de temperatura.....	74
5.19 Diagrames.....	87
6.Resultats.....	91
6.1 Procediment.....	91
6.2 Obrint fitxer .txt en Excel	92
6.3 Càlculs.....	96
6.4 Comparació dels resultats.....	97
7.Conclusions	99
8.Bibliografia	103
9.Annexos.....	105
9.1 Programes i scripts	105

TAULA DE FIGURES:

Figura 1. Experiment gota de brea. Font: Lidiacnlaquimica.wordpress.....	11
Figura 2. Karplus, Levitt i Warshell (Esquerra a dreta). Font: Calculated Chemistry	12
Figura 3. Representació de la molècula de polietilè, el polímer més senzill. Font: jccanalda	13
Figura 4. Distribució cristal·lina dins d'un polímer. Font: polymmerinnovationblog.....	13
Figura 5. Representació gràfica PLA. Font: ResearchGate	14
Figura 6. Esquema producció PLA. Font: ResearchGate	14
Figura 7. Gràfica transició vítria. Font: upv/materials	15
Figura 8. Impressió 3D amb PLA. Font: MakerShopBCN.....	16
Figura 9. Cargols de fixació de PLA. Font: tecnologiadelosplasticos.blog.....	16
Figura 10. PLA scaffolds, 3mm. Font: GlobalMedicalDiscovery	16
Figura 11. Bossa biodegradable de PLA. Font: placn	17
Figura 12. Gromacs, Lammmps, Amber, Namd, Charmm, Gromos, Yasara, MDYmaMx, Abalone. Font: Google.....	17
Figura 13. Exemple de VMD, PLA configuració 4. Font: pròpia	18
Figura 14. NAMD te suport per a fitxers de GROMACS. Font: manual de NAMD	19
Figura 15. Representació potencial entre els àtoms. Font:arxiv.org	21
Figura 16. Representació angle dièdric. Font: ResearchGate	22
Figura 17. Representació potencial dièdric cadena de 4 àtoms. Font: cbio.bmt.tue.nl	22
Figura 18. Gràfica del potencial Rickaert-Bellemans. Font: Manual GROMACS	23
Figura 19. Potencial Lennard-Jones. Font: ResearchGate.....	24
Figura 20. Representació ponts d'hidrogen. Font: Isbu.ac.uk.....	24
Figura 21. Potencial de l'angle d'enllaç. Font: cbio.bmt.tue.nl	25
Figura 22. Conjunt d'equacions de l'algoritme Verlet-Velocity. Font: Estudi de la dinàmica molecular en materials polimèrics mitjançant models de fluctuació d'enllaç. José Molina Mateo	27
Figura 23. Algoritme per la obtenció de PLAFF3. Font:Journal of Chemical Theory and Computation	28
Figura 24. Diferents alternatives d'instal·lació de NAMD. Font:ks.uiuc.edu	29
Figura 25. Petició d'inici de sessió NAMD. Font: ks.uiuc.edu.....	30
Figura 26. Descarrega de NAMD descomprimida. Font: Pròpia	30
Figura 27. Arribar a un directori de Linux usant cd i ls. Font: Pròpia	31
Figura 28. Exemple d'ús del comandament pwd. Font: Pròpia	31
Figura 29. Exemple d'ús del comandament nano .bashrc. Font: Pròpia.....	31
Figura 30. Bash de Linux. Font: Pròpia	32
Figura 31. Part final del bash de Linux. Font: Pròpia.....	32
Figura 32. NAMD instal·lat. Font: Pròpia.....	32
Figura 33. Alternatives instal·lació VMD. Font: ks.uiuc.edu.....	33
Figura 34. Descarrega descomprimida VMD. Font: Pròpia	33
Figura 35. Detall del comandament sudo make install. Font: Pròpia	34
Figura 36. VMD. Font: Pròpia	34
Figura 37. Execució de NAMD. Font: Pròpia	35
Figura 38. NAMD funcionant amb 8 nuclis. Font: Pròpia.....	36
Figura 39. Ubicació de la GUI de NAMD dins de VMD. Font: Pròpia	37
Figura 40. GUI de NAMD dins de VMD. Font: Pròpia.....	37
Figura 41. Scripts que conformen els paràmetres de la simulació de GROMACS. Font: Pròpia.	38

Figura 42. Consola amb els comandaments emprats a VMD i el resultat. Font: Pròpia.....	39
Figura 43. Exemple script conversió. Font: ks.uiuc.edu	40
Figura 44. Correu enviat al suport tècnic. Font: Pròpia	41
Figura 45. Resposta suport tècnic. Font: Pròpia	42
Figura 46. Detall del script .top amb els #include. Font: Pròpia	43
Figura 47. Exemple control de temperatura TCL. Font: Pròpia.....	44
Figura 48. Primer intent d'execució de NAMD amb un script de configuració. Font: Pròpia	45
Figura 49. Script .top modificat. Font: Pròpia	45
Figura 50. Detall del script de configuració de NAMD. Font: Pròpia	46
Figura 51. Error de NAMD. Font: Pròpia	46
Figura 52. Detall .pdb a configuració de NAMD. Font: Pròpia	46
Figura 53. Error de NAMD amb distint fitxer de configuració. Font: Pròpia.....	46
Figura 54. Vista general del Automatic PSF builder de VMD. Font: Pròpia	50
Figura 55. Pas 1 AutoPSF. Font: Pròpia	50
Figura 56. Pas 2 AutoPSF. Font: Pròpia	51
Figura 57. Pas 3 AutoPSF. Font: Pròpia	51
Figura 58. Pas 3 missatge Informació 1 AutoPSF. Font: Pròpia.....	51
Figura 59. Pas 3 missatge Informació 2 AutoPSF. Font: Pròpia.....	52
Figura 60. Codi font NAMD, Atomtypes. Font: Pròpia	53
Figura 61. Script original .top apartat [atomtypes]. Font: Pròpia	53
Figura 62. Script modificat .top apartat [atomtypes]. Font: Pròpia.....	53
Figura 63. Error dihedraltypes. Font: Pròpia	53
Figura 64. Codi font NAMD, Dihedraltypes. Font: Pròpia	54
Figura 65. Script original .top apartat [dihedraltypes]. Font: Pròpia	54
Figura 66. Pàgina 60 manual de GROMACS. Font: Manual de GROMACS.....	55
Figura 67. Extradoncs. Font: Manual de NAMD	55
Figura 68. Tipologia de GROMACS per als dièdrics. Font: Manual GROMACS.....	56
Figura 69. Codi font NAMD, atoms. Font: Pròpia.....	56
Figura 70. Script original .top apartat [atoms]. Font: Pròpia	57
Figura 71. Tipologia de GROMACS per als atoms. Font: Manual GROMACS	57
Figura 72 Font:PLAFF3 Potential&ParameterSet. cdn-pubs.acs.org.....	57
Figura 73. Instal·lació a Ubuntu de buil-essential. Font: Pròpia	58
Figura 74. Script modificat .top apartat [atoms]. Font: Pròpia	59
Figura 75. Programa en C per a modificar 450 línies de codi de forma automàtica. Font: Pròpia	59
Figura 76. Error dihedrals. Font: Pròpia	60
Figura 77. Script original .top apartat [dihedrals]. Font: Pròpia	60
Figura 78. Script original .top apartat [dihedrals]. Font: Pròpia	60
Figura 79. Error inestabilitat del sistema 1. Font: Pròpia.....	61
Figura 80. VMD NAMD Plot Energies. Font: Pròpia	61
Figura 81. Detall del script de configuració de NAMD. Font: Pròpia	62
Figura 82. Error en la temperatura. Font: Pròpia.....	62
Figura 83. Causa del error de temperatura. Font: Pròpia	63
Figura 84. Error inestabilitat del sistema 1. Font: Pròpia.....	63
Figura 85. Script de NAMD, apartat de minimització. Font: Pròpia.....	63
Figura 86. Error falta fitxer de velocitats o temperatura. Font: Pròpia	63
Figura 87. Error outputname. Font: Pròpia.....	64
Figura 88. Errors global count. Font: Pròpia.....	64

Figura 89. Part del fitxer de minimització NAMD. Font: Pròpia	65
Figura 90. Solucionats alguns global count warning. Però error en velocitats. Font: Pròpia	66
Figura 91. Detall de la part del script que s'ha de canviar. Font: Pròpia	66
Figura 92. Simulació en marxa. Amb detall del rendiment del processador. Font: Pròpia	67
Figura 93. Paràmetres pairlistdistance i cutoff representats gràficament Font: Manual de NAMD	68
Figura 94. Consola de Linux durant la minimització. Font: Pròpia	69
Figura 95. Fitxers d'eixida de NAMD, falta el .log. Font: Pròpia	69
Figura 96. Detall de fitxer generat nul. Font: Pròpia	69
Figura 97. Detall del fitxer .log Font: Pròpia	72
Figura 98. Minimització del sistema. Font: Pròpia	73
Figura 99. Minimització del sistema 200K. Font: Pròpia	73
Figura 100. Simulació Isotèrmica. Font: Pròpia	75
Figura 101. Detall del codi refredament 1. Font: Pròpia	76
Figura 102. Resultat refredament 1. Font: Pròpia	76
Figura 103. Detall del codi refredament 2. Font: Pròpia	77
Figura 104. Resultat refredament 2. Font: Pròpia	77
Figura 105. Detall del codi refredament 3. Font: Pròpia	78
Figura 106. Resultat refredament 3. Font: Pròpia	78
Figura 107. Detall del codi refredament 4. Font: Pròpia	79
Figura 108. Resultat refredament 4. Font: Pròpia	79
Figura 109. Codi Tcl i error. Font: Pròpia	80
Figura 110. Codi valors rescale 1. Font: Pròpia	80
Figura 111. Resultat rescale 1. Font: Pròpia	80
Figura 112. Codi valors rescale 2. Font: Pròpia	81
Figura 113. Resultat rescale 2. Font: Pròpia	81
Figura 114. Resultat rescale 3. Font: Pròpia	81
Figura 115. Script Tcl. Font: Pròpia	82
Figura 116. Error usant Tcl. Font: Pròpia	82
Figura 117. Resposta del servei tècnic. Font: Pròpia	82
Figura 118. Error constraint Failure. Font: Pròpia	83
Figura 119. Codi Tcl proporcionat per el servei tècnic. Font: Pròpia	83
Figura 120. Equilibri del sistema sense controls de pressió o temperatura. Font: Pròpia	83
Figura 121. 500000 passos d'integració del sistema lliure. Font: Pròpia	84
Figura 122. 1000000 passos d'integració del sistema lliure. Font: Pròpia	84
Figura 123. Script d'eixida equilibri de 1000000 passos d'integració. Font: Pròpia	85
Figura 124. Script Tcl amb 850 Kelvin. Font: Pròpia	85
Figura 125. Minimització del equilibri de 850 Kelvin. Font: Pròpia	86
Figura 126. Diagrama Implementació del projecte. Font: Pròpia	87
Figura 127. Diagrama Implementació del projecte simplificat. Font: Pròpia	89
Figura 128. Exemple comandament grep. Font: Pròpia	91
Figura 129. Detall del fitxer obtés amb grep que conté les dades per a la gràfica. Font: Pròpia	92
Figura 130. Configuració Excel. Font: Pròpia	92
Figura 131. Obrir fitxer. Font: Pròpia	93
Figura 132. Assistent Pas 1. Font: Pròpia	93
Figura 133. Assistent Pas 2. Font: Pròpia	94
Figura 134. Assistent Pas 3. Font: Pròpia	94

Figura 135. Refredament des de 800K a 35K. Al eix Y Energia en Kcal/mol i a l'eix X, K^{-1} . Font: Pròpia	95
Figura 136. Rectes Matlab. Font: Pròpia	96
Figura 137. Resultat del projecte. Font: Pròpia.....	96
Figura 138. Recuperat de l'article de referència nomenat als objectius. Font: Journal of Chemical Theory and Computation	97
Figura 140. Funció dels dièdrics de NAMD. Font: Pròpia, funció obtesa del Manual de NAMD i graficada a Matlab.....	100
Figura 141. Funció de Rickaert-Bellemans: Font: Manual de Gromacs	100

1.Objectiu

L'objectiu d'aquest projecte és la implantació d'una plataforma de simulació basada en dinàmica molecular per aconseguir fer simulacions avançades i ajustades als experiments físics realitzats amb el polímer termoplàstic biodegradable àcid polilàctic usant el programa de dinàmica molecular NAMD (Nanoscale Molecular Dynamics) i visualitzar els resultats a través del software VMD (Visual Molecular Dynamics) per a fer simulacions que permeten establir la temperatura de transició vítria de l'esmentat polímer sota diferents condicions.

Per a aconseguir i validar aquest objectiu, s'intenta reproduir la simulació portada a cap en GROMACS per H. McAliley i A. Bruce, Development of force field parameters for molecular simulation of Polylactide (*Journal of Chemical Theory and Computation*, 2011, pp 3767-3767) adaptant els valors que s'han obtingut per a configurar la simulació, sent aquesta la més acurada fins l'actualitat.

Els resultats d'aquesta simulació s'ajusten a les experiències reals sense apenes error tant per a determinar la temperatura de transició vítria del polímer, una de les seues propietats fonamentals, a partir de la variació en volum (volumetria). El polímer escollit, l'àcid polilàctic, és un material dielèctric amb una gran aplicació amb camps tant diversos com el tèxtil, l'empaquetat d'aliments i l'indústria biomèdica i farmacèutica.

2. Justificació i Motivació

Aquest projecte és part del programa d'estudis del grau d'enginyeria electrònica industrial y automàtica de la ETSID. A més és molt interessant i enriquidor perquè permet posar en pràctica i integrar bona part dels coneixements obtinguts als estudis de grau així com també algunes competències transversals: aplicació i pensament pràctic, anàlisi i resolució de problemes, coneixement dels problemes contemporanis i planificació i gestió del temps entre altres.

El Centre de Biomaterials i Enginyeria Tissular (CBET), centre propi d'investigació de la UPV, ha ofert el projecte per a ampliar les possibilitats en les simulacions del comportament de cadenes polimèriques (en particular l'àcid polilàctic). En el desenvolupament d'aquest projecte, s'implantarà una nova plataforma de simulació basada en dinàmica molecular que complementarà la plataforma de simulació que actualment s'està utilitzant al CBET, basada en simulacions Monte Carlo.


Els programes de simulació normalment estan orientats a simular molècules biològiques o materials (des d'un punt de vista físic), però per a algunes aplicacions cal veure com interactuen ambdós. Aleshores hi ha deficiències en un dels dos tipus de molècula a la simulació.

Des del punt de vista de l'autor, que presenta interès per la ciència bàsica i en concret la física, es posa en contacte amb el tutor i accepta la proposta.

3. Antecedents

3.1 Introducció

La dinàmica molecular permet entendre, analitzar i predir el moviment i comportament de molècules donades unes condicions de temperatura, velocitat o pressió. Les simulacions permeten tindre una visió analítica d'experiències que no es poden mesurar o portar a cap físicament per ser massa breus (algunes reaccions químiques) i no poder-se mesurar el temps, ser massa llargues, on l'experiment dura anys (com l'experiment de la gota de brea, Universitat de Queensland, Austràlia, 1927, Figura 1) o ser molt costoses.



Data	Event
1927-1930	Comença l'experiència
Desembre de 1938	Caiguda de la primera gota
Febrer de 1947	Caiguda de la segona gota
Abril de 1954	Caiguda de la tercera gota
Maig de 1962	Caiguda de la quarta gota
Agost de 1970	Caiguda de la cinquena gota
Abril de 1979	Caiguda de la sisena gota
Juny de 1988	Caiguda de la setena gota
Novembre de 2000	Caiguda de la vuitena gota
Abril de 2014	Caiguda de la novena gota

Figura 1. Experiment gota de brea. Font: Lidiaconlaquimica.wordpress

Els primers programes de simulació molecular van néixer a finals dels anys 50 i a principis dels 60, com a branca de la física de partícules.

3.2 La importància de les simulacions

Durant 1970 - 1980, els investigadors Martin Karplus, natural d'Àustria, el Israelità Arieh Warshel i Michael Levitt de Gran Bretanya, van establir les bases sobre les quals es sostenen els programes de química computacional que s'utilitzen actualment.

En l'actualitat la dinàmica molecular i la simulació molecular són temàtiques de gran importància en el món científic, sent l'any 2013 guardonats amb el premi Nobel de química per les seues contribucions a la química computacional i la creació d'un nou programa capaç de combinar la mecànica clàssica amb la quàntica en les simulacions, GTPASE (Figura 2).



Figura 2. Karplus, Levitt i Warshell (Esquerra a dreta). Font: Calculated Chemistry

El premi destaca que “els models computeritzats que són un espill de la vida real s’han tornat crucials per a la majoria dels avanços de la química en l’actualitat” assegura la Fundació Nobel a través d’un comunicat. Els coneixements resultants del programa podrien ajudar a desenvolupar nous medicaments, determinant com interactuen algunes substàncies amb les proteïnes del cos per a tractar patologies.

3.3 Polímers i Àcid Polilàctic (PLA)

Pel que fa al present treball, una volta posada en rellevància la importància de les simulacions en l’actualitat, cal parlar dels polímers i en concret de l’àcid polilàctic, objecte del nostre interès i el qual sotmetrem a simulació.

Es tracta d’un polímer amb una estructura química senzilla, és biodegradable i és molt utilitzat en aplicacions biomèdiques, així com en la indústria tèxtil i d’empaquetat. En el camp de la biomedicina, particularment des de el punt de vista de l’enginyeria tissular es tracta d’un biomaterial molt interessant per la seua utilització en la preparació de suports cel·lulars. A més s’obté de fonts renovables.

Abans de continuar cal advertir que el nom d’àcid polilàctic no està acceptat en la nomenclatura estàndard de la IUPAC. Per tant, s’ha de deixar clar que es tracta d’un polièster i no d’un poliàcid.

Els polímers són grans molècules (macromolècules) que estan formades per la unió de moltes unitats repetitives (monòmers). Generalment el carboni constitueix la columna vertebral de la cadena polimèrica (polímer) i els enllaços primaris son covalents (Figura 3).

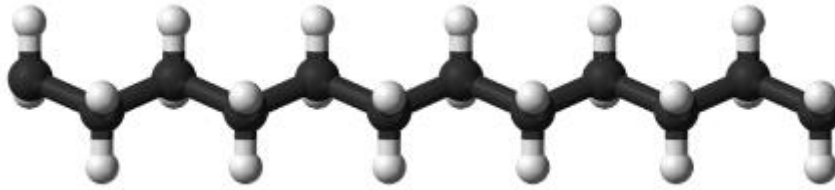


Figura 3. Representació de la molècula de polietilè, el polímer més senzill. Font: jccanalda

En estat sòlid, els polímers poden ser tant amorfs com cristal·lins (Rudin 1982). Els amorfs no presenten un ordre estructural i estan formats per molècules que no es poden situar de forma ordenada.

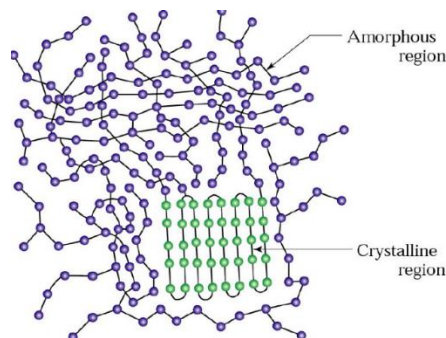


Figura 4. Distribució cristal·lina dins d'un polímer. Font: polymerinnovationblog

Quan es presenta un patró geomètric ordenat de les macromolècules, podem parlar de una figura cristal·lina (Figura 4). Aquest tipus d'estructura està afavorida per dos factors: la regularitat de la estructura molecular que fa possible que les molècules s'acomoden en una xarxa cristal·lina i que la polaritat de les molècules augmenta la atracció entre cadenes pròximes i les posa ordenadament en el cristall i les manté (De Rosa and Auriemma 2013).

Cal esmentar que els polímers cristal·lins tenen al voltant de un 40-70% de porció amorfa, per tant podem distingir entre amorfs i semi cristal·lins sent que mai els polímers seran cristal·lins en la seua totalitat.

L'àcid polilàctic (PLA) és el bioplàstic més usat al món (Figura 5). És un polímer biodegradable, termoplàstic, alifàtic derivat de recursos renovables i naturals com la panolla, el codony, les creïlles, el midó o la canya de sucre.

Antecedents

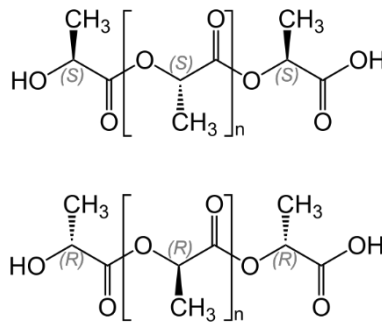


Figura 5. Representació gràfica PLA. Font: ResearchGate

Per a produir àcid polilàctic s'usen principalment dos monòmers, l'àcid làctic i el di-ester cíclic làctic (Figura 6).

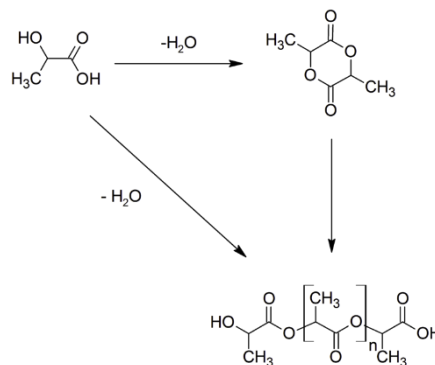


Figura 6. Esquema producció PLA. Font: ResearchGate

El PLA és plastificat per tal de canviar i adequar les propietats mecàniques d'aquest (Martí i Avérous, 2001, pp 6209-6219). L'eficiència d'aquests canvis s'avalua amb la transició vítria (T_g).

3.3.1 Transició Vítria en Polímers

La temperatura de transició vítria (T_g) és una transició de segon ordre, i es pot entendre com un punt entremig de temperatura entre el estat líquid i el estat sòlid. El estudi de la T_g en els polímers és més complex que en qualsevol altre material de molècules més xicotetes degut a que per damunt de la T_g , els enllaços secundaris de les molècules són molt més dèbils que el moviment de les mateixes, és per açò que el polímer es torna goma, adquirint una certa elasticitat i capacitat de deformació plàstica sense fracturar-se.

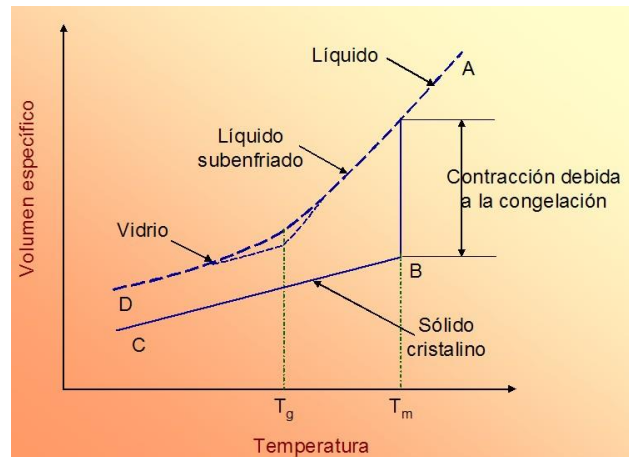


Figura 7. Gràfica transició vítria. Font: upv/materials

Els polímers, tant els que presenten una estructura amorfa com els semi cristal·lins, presenten una T_g característica del material (Figura 7). Els polímers amorfs només presenten una transició, la T_g ; mentre els semi cristal·lins, recordem que sempre tenen al voltant de un 40-70% de porció amorfa, presenten dues transicions, la T_g i la temperatura de fusió dels cristalls (T_m) que es una transició de primer ordre. Cal remarcar que la porció amorfa només experimentarà la transició vítria i la porció cristal·lina només la fusió.

Amb la T_g s'analitza la eficiència dels polímers, indica la temperatura de treball del polímer i si un determinat polímer pot ser usat per a una certa aplicació. És per açò que la T_g és d'extrema importància en la enginyeria de polímers.

Sent la temperatura de transició vítria tan important i sent impossible l'obtenció d'aquesta de forma teòrica per no existir cap fórmula física que relaciona els termes necessaris per a determinar la T_g als polímers, només es pot obtenir mitjançant experiments i simulacions.

3.3.2 Aplicacions del PLA

Dins de les aplicacions d'interès, és obligatori esmentar donada la natura del grau cursat que en la indústria electrònica els polímers són utilitzats tant per les seues propietats aïllants (materials dielèctrics) com per les propietats de semiconductors i magnètiques (Lokensgard 2008).

Antecedents

El PLA s'usa per a la impressió 3D (Figura 8) i s'ha usat en aplicacions biomèdiques per ser biodegradable i no tòxic. Exemples d'açò són: cargols que es degraden amb el temps com podem veure al article "PLA Screw Fixation of Lisfranc Injuries" de Thordarson, Hurtvitz i altres (2002) (Figura 9) i s'investiga el seu ús en la formació de teixits i estructures que propicien el creixement cel·lular 'scaffolds' (Figura 10), andamiatges, com per exemple podem trobar al article "Biodegradable HA-PLA 3D scaffolds porosos" de R.Kothapalli, T.Shaw i Wei (2005).



Figura 8. Impressió 3D amb PLA. Font: MakerShopBCN



Figura 9. Cargols de fixació de PLA. Font: tecnologiadelosplasticos.blog

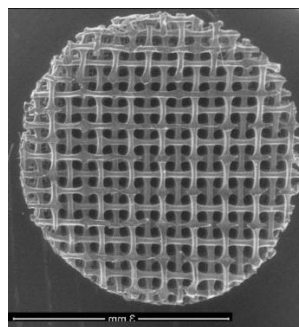


Figura 10. PLA scaffolds, 3mm. Font: GlobalMedicalDiscovery

El PLA és també un recurs sostenible per a substituir els derivats petroquímics que s'usen als envasos com bosses i recipients (Figura 11).



Figura 11. Bossa biodegradable de PLA. Font: placn

3.4 Programes de simulació de dinàmica molecular

A la Figura 12 es mostren distints programes de mecànica molecular que tenen funcions similars però varien en els mètodes i equacions que implementen al algoritme del programa.

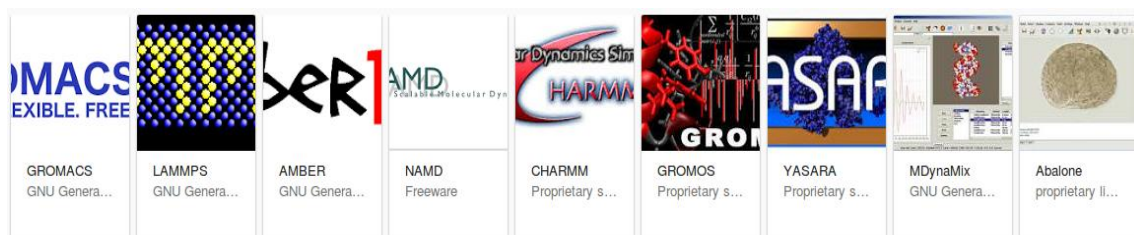


Figura 12. Gromacs, Lammeps, Amber, Namd, Charmm, Gromos, Yasara, MDynaMx, Abalone. Font: Google

Cal esmentar que GROMACS, LAMMPS, AMBER, CHARMM, GROMOS, YASARA, ABALONE i NAMD entre altres són exemples de software de dinàmica molecular.

La valoració del programa a utilitzar no forma part del projecte ja que per a aconseguir simular la transició vítria de l'àcid polilàctic, el Centre de Biomaterials de la UPV ha elegit usar NAMD, un programa de dinàmica molecular creat per la Universitat de Illinois en Urbana-Campaign l'any 1995 gratuït, multi plataforma i que forma part d'un projecte que es manté en constant desenvolupament junt a VMD. Ha rebut els premis Gordon Bell Award (2002) i el Sidney Fernbach Award (2012). El codi de NAMD està programat de forma paral·lela i pot operar amb més de 500.000 nuclis de processadors.

Antecedents

VMD (Figura 13) està dissenyat per a modelar, visualitzar i analitzar sistemes. També pot ser usat per a animar i analitzar la trajectòria de una simulació de dinàmica molecular. Pot actuar com a GUI (Interfície Gràfica d'Usuari, Graphic User Interface en anglès) per a un programa de simulació extern que funciona a un ordinador remot i te molts mètodes i possibilitats per renderitzar i acolorir molècules de forma que es puguin visualitzar els seus moviments.

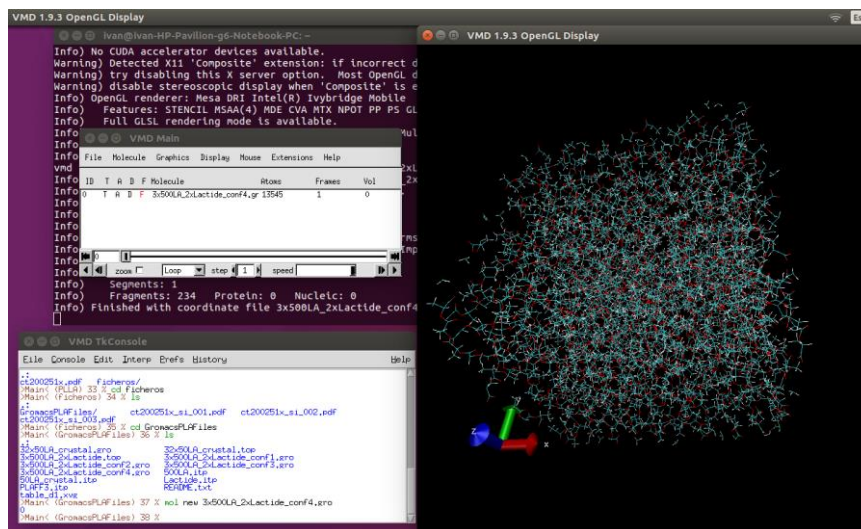


Figura 13. Exemple de VMD, PLA configuració 4. Font: pròpia

En quant a la màquina usada per a implementar la simulació, es portarà a cap en un ordinador portàtil amb Ubuntu 16.04 LTS de 64 bits, Processador Intel® Core™ i7-3632QM CPU @ 2.20GHz × 8 i s'usarà la targeta gràfica integrada d'Intel.

3.5 Riscs del projecte

Els riscos del projecte són indeterminats per ser una qüestió molt oberta i poc explorada abans, si bé és cert que les instruccions i fitxers per a fer la simulació en GROMACS ens son proporcionats i sabem que funcionen en eixa plataforma, no sabem si finalment podran funcionar en NAMD.

A pesar que al manual de NAMD teòricament s'accepten fitxers de GROMACS i altres programes de simulació, la realitat és que la informació al manual és incompleta i no és rellevant per al cas que ens ocupa i per a les extensions dels scripts que tenim.

GROMACS force field parameters

NAMD has the ability to load GROMACS ASCII topology (.top) and coordinate (.gro) files, which allows you to run most GROMACS simulations in NAMD. All simulation output will still be in the traditional NAMD formats.

- **gromacs** < use GROMACS format force field? >
Acceptable Values: on or off
Default Value: off
Description: If `gromacs` is set to `on`, then `grotopfile` must be defined, and `structure` and `parameters` should not be defined.
- **grotopfile** < GROMACS format topology/parameter file >
Acceptable Values: UNIX filename
Description: This file contains complete topology and parameter information of the system.
- **grocoorfile** < GROMACS format coordinate file >
Acceptable Values: UNIX filename
Description: This file contains the coordinates of all the atoms. Note that `coordinates` can also be used for PDB format coordinate file. When `gromacs` is set to `on`, either `grocoorfile` or `coordinates` must be defined, but not both.

Figura 14. NAMD te suport per a fitxers de GROMACS. Font: manual de NAMD

La Figura 14 mostra com s'ha d'escriure el fitxer de configuració. També diu que NAMD pot carregar scripts de GROMACS amb l'extensió .top i .gro que contenen la topologia de la molècula (àtoms i enllaços) i la estructura molecular respectivament.

D'entrada, al manual de NAMD es mostren clarament les següents limitacions:

-Àtoms falsos amb posicions generades basades en les posicions de àtoms reals, no tenen suport.

-La secció de parelles de GROMACS que es donada amb paràmetres explícits 1-4 entre parelles d'àtoms no es suportada a NAMD perquè calcula les interaccions 1-4 exclusivament per el tipus.

-Les exclusions no tenen suport. Els dièdrics de GROMACS RB impliquen exclusions, però NAMD no te suport per a açò.

-Constreyniments, restriccions i establiments no estan implementades a NAMD.

-En alguns casos NAMD no tolerarà formats de GROMACS correctes o fallarà en detectar errors en scripts amb un format deficient. NAMD generarà un error i parará en aquests casos.

-NAMD no te suport per a tots els tipus de potencials d'enllaç que existeixen en GROMACS, però els aproxima amb potencials harmònics o sinusoidals.

Antecedents

-NAMD no llig llargàries de vectors periòdics en el fitxer de coordenades. Deuen estar explícitament configurats en el fitxer de configuració de NAMD.

Aquests són alguns inconvenients que caldrà resoldre o evitar per tal de dur a terme el projecte.

4. Marc Teòric

L'ànim d'aquest apartat és entendre la teoria bàsica de funcionament dels programes de simulació i en concret de NAMD. També s'explicarà els potencials més importants i l'article sobre el que està elaborat el projecte amb l'objectiu de fer la comprensió de la memòria més senzilla.

4.1 Camps de forces

Les macromolècules són molècules amb un alt pes molecular, exemples típics poden ser proteïnes, ADN o els polímers. En general són estructures atòmiques formades per llargues cadenes d'àtoms unides per enllaços covalents que formen estructures amb una gran varietat de configuracions possibles.

Aquesta configuració de la molècula dependrà de les energies internes associades als seus àtoms. Aquest conjunt d'energies deu ser definit, són les condicions sobre les que es desenvoluparà la simulació. El moviment i comportament de les molècules dependrà del camp de forces.

Aquest camp de forces està definit pels potencials, energies internes associades als àtoms de la molècula. Podem representar les possibles configuracions dels enllaços covalents entre els àtoms de la cadena d'una forma senzilla (Figura 15), imaginem que els segments de la cadena estan units per molls de tal forma que obtenim una equació característica del potencial elàstic 1.1.

$$U(l) = U_0(l - l_0)^2 \quad (1.1)$$

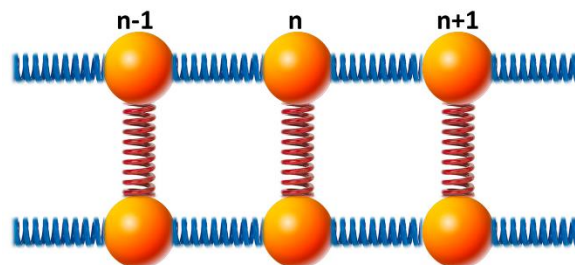


Figura 15. Representació potencial entre els àtoms. Font:arxiv.org

L'equació (1.1) té un mínim en l_0 i el paràmetre U_0 , que modula la intensitat.

4.1.1 Potencial dièdric o de torsió

En molts casos hi ha també una barrera d'energia interna associada a la rotació. Aquest potencial pot representar-se amb l'equació 1.2:

$$U(\alpha) = \frac{1}{2} U_s (1 - \cos(3\alpha)) \quad (1.2)$$

L'angle dièdric és l'angle entre la intersecció de dos plànols (Figura 16):

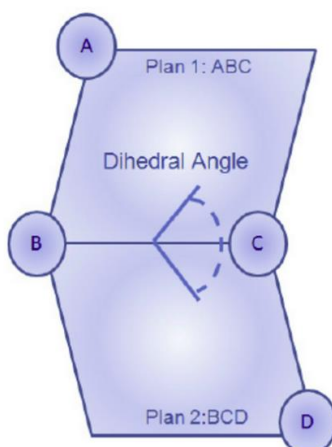


Figura 16. Representació angle dièdric. Font: ResearchGate

En química és l'angle entre dos plànols que travessen un conjunt de 4 àtoms (Figura 17):

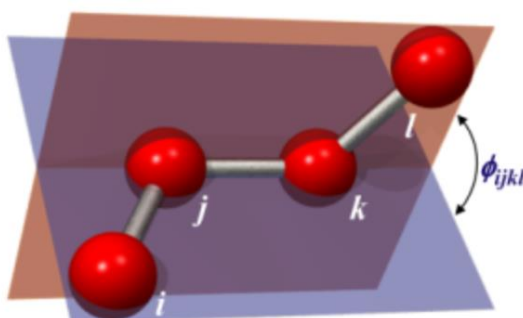


Figura 17. Representació potencial dièdric cadena de 4 àtoms. Font: cbio.bmt.tue.nl

Hi ha dos tipus de potencials dièdrics, els propis i els impropis. Els impropis mantenen els grups plans, plans (com per exemple els anells aromàtics) també eviten que les molècules giren sobre la seua pròpia imatge simètrica.

Els dièdrics propis, poden ser periòdics i es defineixen d'acord amb la convenció de la IUPAC/IUB, on ϕ és l'angle entre els plànols ijk i jkl (equació 1.3).

$$V_d(\phi_{ijkl}) = k (1 + \cos(n\phi - \phi_0)) \quad (1.3)$$

També es pot representar amb els 4 primers termes d'una sèrie de Fourier (Figura 18), amb la fórmula de Rickaert Bellemans (1.4):

$$V_{rb}(\phi_{ijkl}) = V_0 + \frac{1}{2}(V_1(1 + \cos(\phi)) + V_2(1 - \cos(2\phi)) + V_3(1 + \cos(3\phi))) \quad (1.4)$$

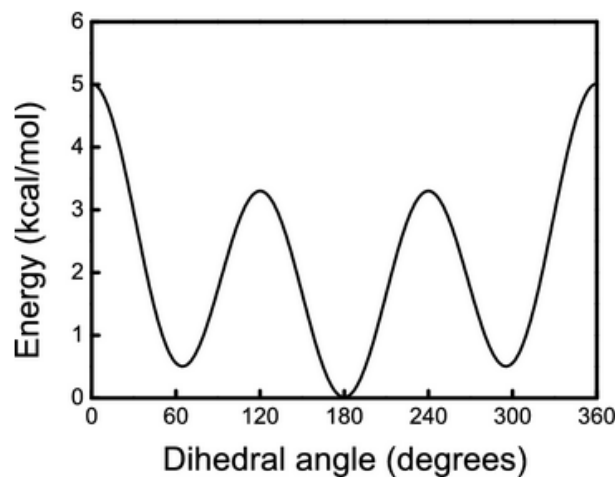


Figura 18. Gràfica del potencial Rickaert-Bellemans. Font: Manual GROMACS

4.1.2 Forces de van der Waals

Les forces de van der Waals poden representar-se mitjançant un potencial de Lennard-Jones (1.5):

$$U_{(i,j)} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (1.5)$$

L'energia està representada en funció de la distància r que és la distància dels àtoms que conformen el potencial, ϵ que indica la intensitat de la energia i σ que es la suma dels radis dels dos àtoms. Si observem la Figura 19, tenim una part positiva i una negativa, sent el límit entre ambdues, 0, que es dona si la distància r és igual que sigma. Per a distàncies menors a sigma, entra en joc el principi d'exclusió i apareix una força de repulsió molt alta, mentre que si la distància r es major que sigma, tenim la part

negativa d'atracció entre els àtoms. El mínim mostra la distància òptima on els àtoms seran més estables.

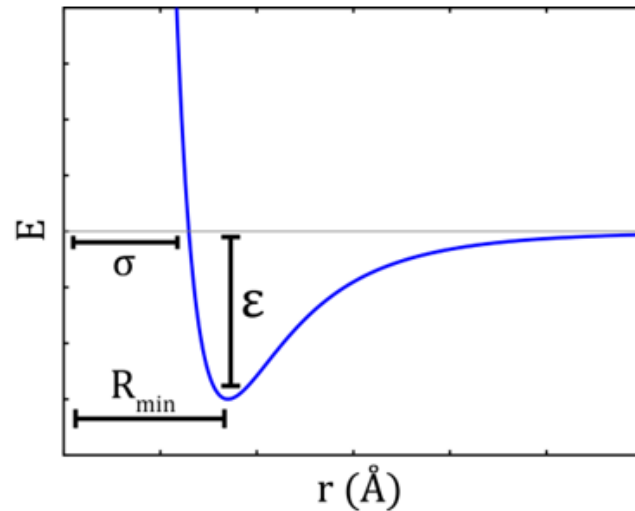


Figura 19. Potencial Lennard-Jones. Font: ResearchGate

4.1.3 Ponts d'hidrogen

Els ponts d'hidrogen (Figura 20) tenen una intensitat més dèbil que un enllaç covalent i més forta que les forces de van der Waals. La descripció detallada resulta complexa però pot realitzar-se una aproximació adequada amb un potencial de Lennard-Jones de potències 12 i 10. (1.6):

$$U_{(i,j)} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{10} \right] \quad (1.6)$$

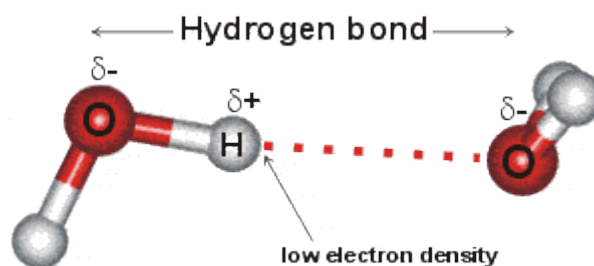


Figura 20. Representació ponts d'hidrogen. Font: Isbu.ac.uk

La principal diferència resideix en la potència dècima que generalment el fa més intens que les forces de van der Waals.

Els potencials de Lennard-Jones són computacionalment costosos de calcular, donat que a partir d'una certa distància el seu valor és xicotet, s'agafa una distància fixa per a truncar. Per tant, quan aquesta distància és major a la triada, el potencial serà 0.

4.1.4 Potencial de l'angle d'enllaç

Aquest potencial depèn de l'angle en una cadena de 3 àtoms (Figura 21) on V_0 modula la intensitat del potencial i θ_0 representa el desfasament si hi ha un angle de referència.

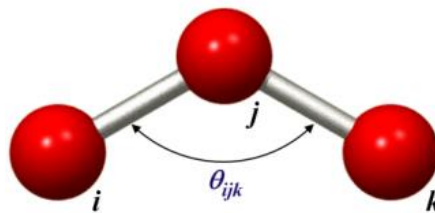


Figura 21. Potencial de l'angle d'enllaç. Font: cbio.bmt.tue.nl

$$V(\theta_{ijk}) = V_0 (\cos\theta - \cos\theta_0)^2 \quad (1.7)$$

4.2 Algoritmes de simulació

4.2.1 Monte Carlo (MC)

L'algoritme de Monte Carlo comença buscant una ubicació inicial aleatòria i s'equilibra el sistema perquè trobar una ubicació inicial d'acord amb la temperatura és computacionalment molt complex de calcular.

L'algoritme funciona escollint un grup molecular i una direcció del moviment al atzar i a partir d'ací comprovar les condicions de moviment.

És ideal per a models pseudoaleatoris, generalment presenta poc nivell de detall i permet simular temps llargs. És el model que actualment està desenvolupat al CBET.

4.2.3 Dinàmica Molecular (MD)

Es basa en la resolució d'un sistema de N equacions diferencials, sent N el nombre d'àtoms del sistema per a trobar la posició i la velocitat de cada àtom.

$$\vec{F}_i(r_1, r_2, \dots, r_n) = -\nabla V(r_1, r_2, \dots, r_n) = -\frac{\partial V(r_1, r_2, \dots, r_n)}{\partial r_1} \quad (2.1)$$

$$\vec{F}_i(r_1, r_2, \dots, r_n) = m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} \quad (2.2)$$

De les equacions 2.1 y 2.2 s'obté la igualtat 2.3

$$-\frac{\partial V(r_1, r_2, \dots, r_n)}{\partial r_1} = m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} \quad (2.3)$$

Les simulacions es poden dividir en 3 passos:

Iniciació: es posa cada àtom en un lloc determinat del espai amb una velocitat inicial al azar depenent de la temperatura del sistema. Es deixa evolucionar amb el temps re-normalitzant les velocitats per a que siguin coherents amb la temperatura.

Equilibrat: s'observa el sistema sense reequilibrar velocitats fins veure si s'ha assolit l'equilibri.

Obtenció dels resultats: es fa un anàlisi de les trajectòries per a poder determinar les propietats del sistema.

Aquest tipus de simulacions són ideals per a models deterministes, presenten un major nivell de detall que (MC) i permeten simular espais de temps curts.

4.3 Nanoscale Molecular Dynamics (NAMD)

El NAMD és un programa de MD. El seu funcionament es basa principalment en l'algoritme de la Velocitat de Verlet (Verlet-Velocity) (Figura 22): partint d'un instant (t) on coneixem la posició (r) i la velocitat (v) per a tots els àtoms del sistema, realitzarem càlculs per a l'instant $t + \Delta t$.

$$\vec{r}(t + \Delta t) = \vec{r}(t) + \vec{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t^2$$

$$\vec{v}(t + \Delta t/2) = \vec{v}(t) + \frac{1}{2}\vec{a}(t)\Delta t$$

$$\vec{a}(t + \Delta t) = -\frac{1}{m}\nabla V(\vec{r}(t + \Delta t))$$

$$\vec{v}(t + \Delta t) = \vec{v}(t + \Delta t/2) + \frac{1}{2}\vec{a}(t + \Delta t)\Delta t$$

Figura 22. Conjunt d'equacions de l'algoritme Verlet-Velocity. Font: Estudi de la dinàmica molecular en materials polimèrics mitjançant models de fluctuació d'enllaç. José Molina Mateo

4.4 Polylactid acid force field 3 (PLAFF3)

A l'article sobre el qual elaborem el projecte: Desenvolupament dels paràmetres del camp de forces a la simulació de l'àcid polilàctic, McAliley i Bruce (2011) s'ha aconseguit ajustar els valors creant un nou camp de forces ajustat a l'àcid polilàctic amb l'algoritme mostrat a la Figura 23 i que han anomenat PLAFF3.

PLAFF3 combina el camp de forces CHARMM (Chemistry Harvard Molecular Mechanics) (1983 i revisat al 2015) i OPLS (Optimized Potential for Liquid Simulations) creat pel professor William L. Jorgensen a la universitat de Purdue l'any 1988 i revisat de nou a 1998 a la universitat de Yale. PLAFF3 també ha ajustat els valors dels potencials de torsió (dièdrics) tal i com es pot comprovar a la Figura 23.

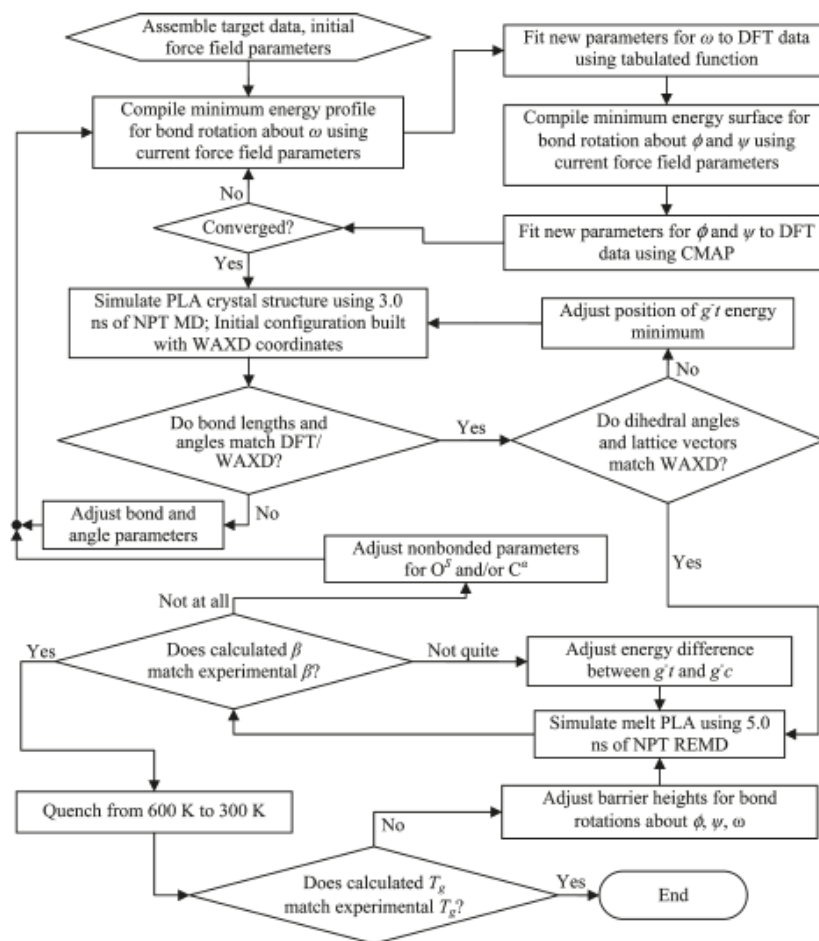


Figura 23. Algorisme per la obtenció de PLAFF3. Font:Journal of Chemical Theory and Computation

5. Implementació del Projecte

El propòsit d'aquest apartat és tenir un manual tècnic que permet reproduir el procés d'implementació per qualsevol altra persona, a l'últim punt del apartat es troben els diagrames resultants del procés.

5.1 Instal·lació de NAMD a Ubuntu

Per a instal·lar NAMD i VMD s'han de seguir els següents passos:

El primer que s'ha fet ha sigut instal·lar NAMD. Per a açò cal anar a la pàgina <http://www.ks.uiuc.edu> o posar simplement a google 'descarregar NAMD per a Ubuntu'.

The screenshot shows the 'Software Downloads' page for NAMD. The left sidebar contains navigation links: Home, Overview, Publications, Research, Software (selected), and Outreach. The 'Software' section is expanded to show sub-links for NAMD, VMD, GPU Computing, Lattice Microbes, Atomic Resolution Brownian Dynamics, MDFF, QwikMD, and Other. The main content area has a search bar at the top with the text 'Buscar con Google o introducir dirección'. Below the search bar, the heading 'Software Downloads' is followed by 'Download NAMD:'. A paragraph describes NAMD as a parallel, object-oriented molecular dynamics code. Below this, a note states: 'Selecting an archive below will lead to a user registration and login page. Your download will continue after you have registered.' Two sections list download options: 'Version Nightly Build (2018-07-14) Platforms:' and 'Version 2.12 (2016-12-22) Platforms:'. Each section contains a bulleted list of specific download packages for various Linux and Mac OS X architectures.

Figura 24. Diferents alternatives d'instal·lació de NAMD. Font:ks.uiuc.edu

Descarreguem la primera opció que es presenta (Figura 24): Linux-x86_64-multicore (64-bit Intel/AMD single node).

Implementació del Projecte

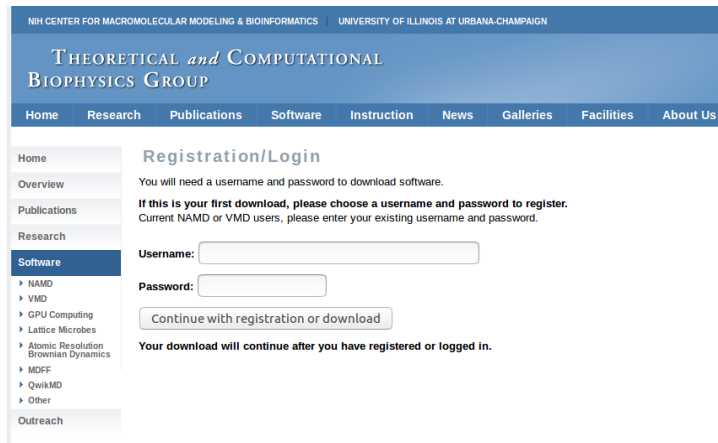


Figura 25. Petició d'inici de sessió NAMD. Font: ks.uiuc.edu

Registrem segons les instruccions que es mostren a la web (Figura 25), aquest procés no va a ser detallat al projecte. La descàrrega està guiada, simplement cal registrar-se, verificar el correu proporcionat, identificar-se i descarregar la opció que hem triat.

Una volta descarregat i descomprimint el paquet, s'obtenen els fitxers que es mostren a la Figura 26:

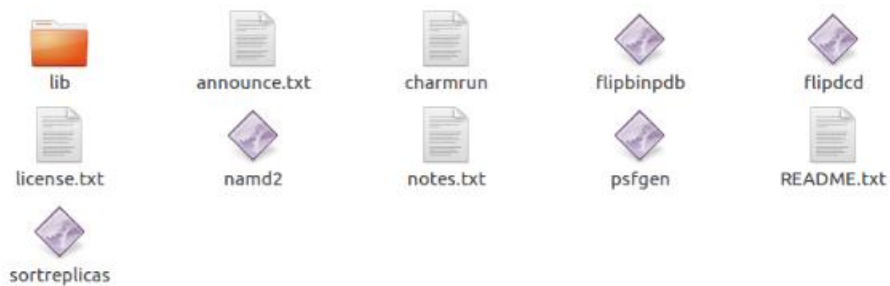


Figura 26. Descarrega de NAMD descomprimida. Font: Pròpia

El següent pas és obrir la terminal i accedir allí on es troben guardats aquests fitxers, amb els comandaments `cd` i `ls`.

```
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~$ ls
Descargas                               Minimization
Dihedral improper angles explicación.pdf Música
Documentos                              Plantillas
Escritorio                              Público
examples.desktop                       UsarTOPGromacsenNAMD.desktop
GROMACS toAMD.desktop                   Vídeos
Imágenes
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~$ cd Documentos
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~/Documentos$ ls
GROMACS force field parameters (NAMD Git-2018-06-29 User's Guide)_files
GROMACS force field parameters (NAMD Git-2018-06-29 User's Guide).html
NAMD_2.12_Linux-x86_64-multicore
namd-l: Converting Gromacs parameters to Charmm format.pdf
Test
TFG
Topology Files.pdf
topology-tutorial.pdf
vmd-1.9.3
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~/Documentos$ cd NAMD_2.12_Linux-x86_64-multicore
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~/Documentos/NAMD_2.12_Linux-x86_64-multicore$ ls
announce.txt  flipbinpdb  lib          namd2       psfgen      sortreplicas
charmrun      flipdcd     license.txt  notes.txt   README.txt
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~/Documentos/NAMD_2.12_Linux-x86_64-multicore$
```

Figura 27. Arribar a un directori de Linux usant `cd` i `ls`. Font: Pròpia

Els arxius que apareixen en verd son executables (Figura 27). En cas que els arxius no apareixen en verd caldria usar el comandament:

```
chmod +x *
```

per tal de que aparegueren com a executables.

Ara cal saber la ruta completa d'on es troben els arxius, per açò usarem el comandament `pwd` (Figura 28):

```
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~/Documentos/NAMD_2.12_Linux-x86_64-multicore$ pwd
/home/ivan/Documentos/NAMD_2.12_Linux-x86_64-multicore
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~/Documentos/NAMD_2.12_Linux-x86_64-multicore$
```

Figura 28. Exemple d'ús del comandament `pwd`. Font: Pròpia

Copiem la ruta al porta papers. I obrim una altra consola amb el comandament:

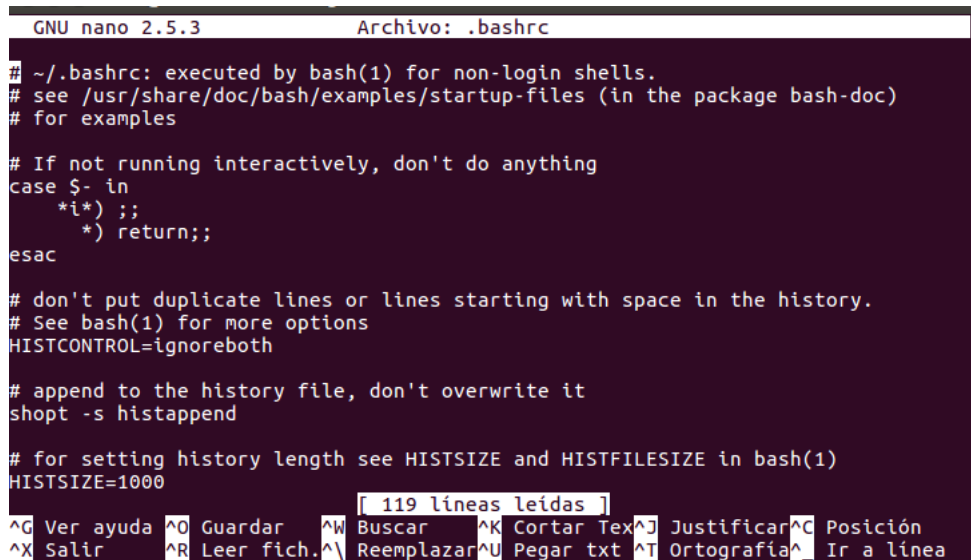
```
nano .bashrc (Figura 29)
```

```
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~$ nano .bashrc
```

Figura 29. Exemple d'ús del comandament `nano .bashrc`. Font: Pròpia

Accedirem al bash (Figura 30):

Implementació del Projecte



```
GNU nano 2.5.3 Archivo: .bashrc
# ~/.bashrc: executed by bash(1) for non-login shells.
# see /usr/share/doc/bash/examples/startup-files (in the package bash-doc)
# for examples

# If not running interactively, don't do anything
case $- in
  *i*) ;;
  *) return;;
esac

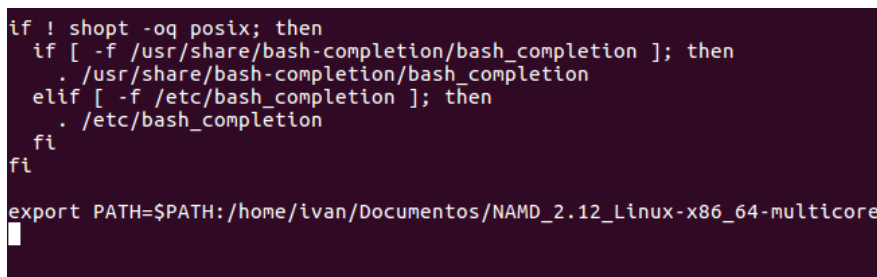
# don't put duplicate lines or lines starting with space in the history.
# See bash(1) for more options
HISTCONTROL=ignoreboth

# append to the history file, don't overwrite it
shopt -s histappend

# for setting history length see HISTSIZE and HISTFILESIZE in bash(1)
HISTSIZE=1000
119 líneas leídas
^G Ver ayuda ^O Guardar ^W Buscar ^K Cortar Tex ^J Justificar ^C Posición
^X Salir ^R Leer fich. ^\ Reemplazar ^U Pegar txt ^T Ortografía ^_ Ir a línea
```

Figura 30. Bash de Linux. Font: Pròpia

Al final d'aquest, escriurem la següent línia, amb la ubicació que hem copiat abans (Figura 31):



```
if ! shopt -oq posix; then
  if [ -f /usr/share/bash-completion/bash_completion ]; then
    . /usr/share/bash-completion/bash_completion
  elif [ -f /etc/bash_completion ]; then
    . /etc/bash_completion
  fi
fi

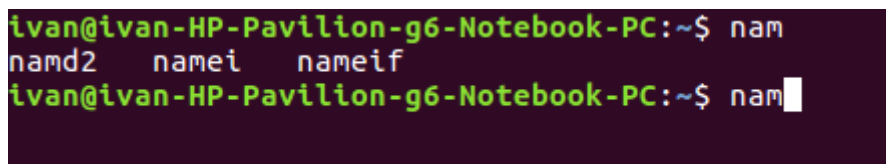
export PATH=$PATH:/home/ivan/Documentos/NAMD_2.12_Linux-x86_64-multicore
```

Figura 31. Part final del bash de Linux. Font: Pròpia

Cal **GUARDAR** els canvis realitzats al bash.

Amb el comandament 'exit' tanquem les dues terminals.

Obrim una nova terminal i escriurem 'nam' seguidament polsarem dues voltes el tabulador i obtindrem el que es mostra a la Figura 32:



```
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~$ nam
namd2  namei  nameif
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~$ nam
```

Figura 32. NAMD instal·lat. Font: Pròpia

Açò indica que la instal·lació està completada i que podem usar NAMD per a les simulacions.

5.2 Instal·lació de VMD a Ubuntu

VMD el trobarem a la mateixa adreça web d'on hem descarregat NAMD (Figura 33).

Software Downloads

Download VMD:

VMD is a molecular visualization program for displaying, animating, and analyzing large biomolecular systems using 3-D graphics and built-in scripting. Visit the [VMD website](#) for documentation.

Selecting an archive below will lead to a user registration and login page. Your download will continue after you have registered or logged in.

Version 1.9.4 LATEST ALPHA (2017-12-21) Platforms:

Latest pre-release ALPHA test version

- **LINUX_64 OpenGL, CUDA, OptiX, OSPRay** (Linux (RHEL 6.7 and later) 64-bit Intel/AMD x86_64 SSE, with CUDA 9.x, OptiX, OSPRay)
- **MacOS X OpenGL (32-bit Intel x86)** (Apple MacOS-X (10.10.x or later) with hardware OpenGL (native bundle))

Version 1.9.3 (2016-11-30) Platforms:

We recommend that all users upgrade to VMD 1.9.3

- **Source Code**
- **LINUX_64 OpenGL, CUDA, OptiX, OSPRay** (Linux (RHEL 6.7 and later) 64-bit Intel/AMD x86_64 SSE, with CUDA 8.x, OptiX, OSPRay)
- **LINUX_64 Text-mode w/ EGL** (Linux (RHEL 6.7 and later) 64-bit Intel/AMD x86_64 w/ SSE, Text-mode w/ EGL)
- **LINUX_64 Text-mode** (Linux (RHEL 6.7 and later) 64-bit Intel/AMD x86_64 w/ SSE, Text-mode)
- **LINUX MIC-AVX512 Text-mode** (Linux (RHEL 6.7 and later) 64-bit Intel Xeon Phi MIC w/ AVX-512, Text-mode, OSPRay)
- **LINUX MIC-AVX512, OpenGL, CUDA, OptiX, OSPRay** (Linux (RHEL 6.7 and later) 64-bit Intel Xeon Phi MIC w/ AVX-512, OpenGL, CUDA7.5, OptiX, OSPRay)
- **LINUX OpenPOWER Text-mode** (Linux 64-bit IBM OpenPOWER w/ VSX, Text-mode)
- **MacOS X OpenGL (32-bit Intel x86)** (Apple MacOS-X (10.4.7 or later) with hardware OpenGL (native bundle))
- **Windows OpenGL, CUDA** (Windows XP/Vista/7/8/10 (32-bit) with OpenGL and CUDA)
- **Windows OpenGL** (Microsoft Windows XP/Vista/7/8/10 (32-bit) using OpenGL)
- **NCSA Blue Waters (Cray XK7 w/ OpenGL)** (NCSA Blue Waters (Cray XK7) MPI, CUDA, OpenGL Pbuffers, TachyonL-OptiX)
- **ORNL Titan (Cray XK7)** (ORNL Titan (Cray XK7) MPI, CUDA, TachyonL-OptiX)
- **CSCS Piz Daint (Cray XC50 w/ EGL)** (CSCS Piz Daint (Cray XC50) MPI, CUDA, EGL Pbuffers, TachyonL-OptiX)

Version 1.9.2 (2014-12-29) Platforms:

Figura 33. Alternatives instal·lació VMD. Font: ks.uiuc.edu

En aquest cas instal·larem la versió 1.9.3, que és la última versió més estable, seguim el procés que ens indica, molt paregut al de descàrrega de NAMD. Una volta descarregat i descomprimit, aquests són els fitxers que obtenim (Figura 34):

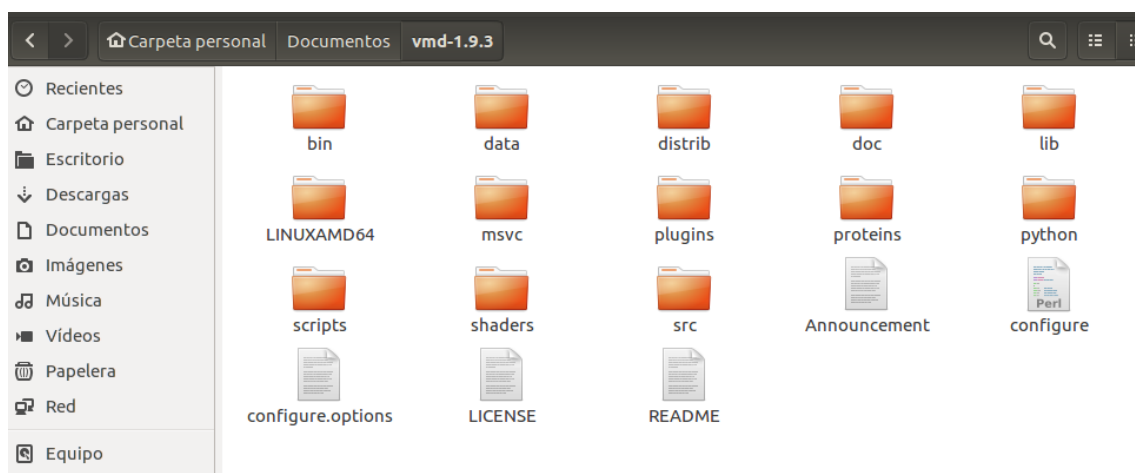


Figura 34. Descarrega descomprimida VMD. Font: Pròpia

Cal fixar-se bé en que estiga el fitxer “configure”.

Implementació del Projecte

Accedim al directori usant els comandaments `cd` i `ls` com hem fet abans i usarem el comandament:

```
./configure
```

Aquest comandament executarà el fitxer i dirà al sistema operatiu com instal·lar VMD. Seguidament, entrarem a la carpeta `src`, comprovem que estiga el arxiu `Makefile` i usem el comandament:

```
sudo make install
```

Atorguem permisos i ja tenim la instal·lació de VMD feta (Figura 35).

```
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~/Documentos/vmd-1.9.3$ cd src
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~/Documentos/vmd-1.9.3/src$ ls
config.h  Makedata.depend  Makefile
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~/Documentos/vmd-1.9.3/src$ sudo make install
[sudo] password for ivan:

Info: /bin/csh shell not found, installing Bourne shell startup script instead
Make sure /usr/local/bin/vmd is in your path.
VMD installation complete. Enjoy!
```

Figura 35. Detall del comandament `sudo make install`. Font: Pròpia

Per a comprovar que s'ha instal·lat el programa, escriurem a la terminal `vmd` i s'obrirà el programa (Figura 36).

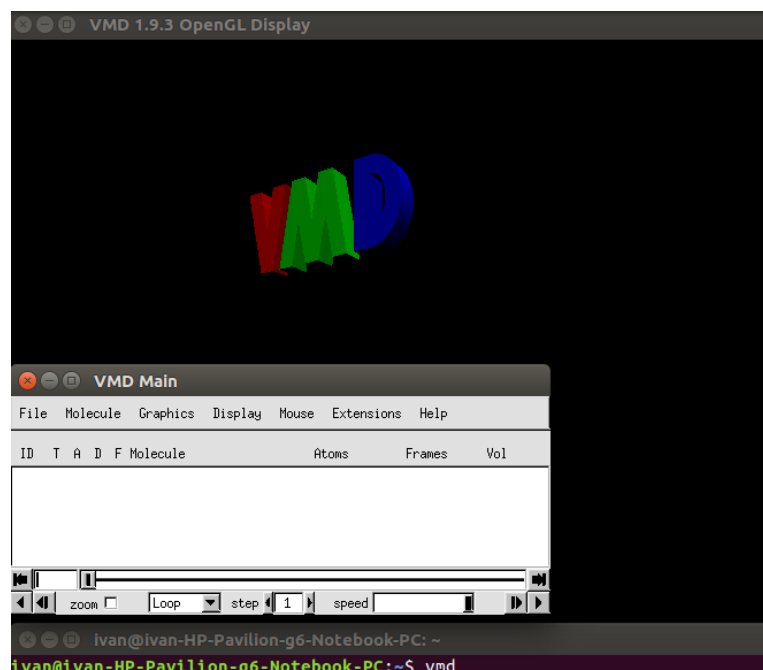


Figura 36. VMD. Font: Pròpia

5.3 Comprovació del funcionament de NAMD per a tots els nuclis de l'ordinador.

Per a comprovar que NAMD funciona, a una terminal executarem el comandament:

namd2 (Figura37).

```
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~$ namd2
Charm++: standalone mode (not using charmrun)
Charm++> Running in Multicore mode: 1 threads
Charm++> Using recursive bisection (scheme 3) for topology aware partitions
Converse/Charm++ Commit ID: v6.7.1-0-gbdf6a1b-namd-charm-6.7.1-build-2016-Nov-07-136676
Warning> Randomization of stack pointer is turned on in kernel, thread migration may not work! Run 'echo 0 > /proc/sys/kernel/randomize_va_space' as root to disable it, or try run with '+isomalloc_sync'.
CharmLB> Load balancer assumes all CPUs are same.
Charm++> Running on 1 unique compute nodes (8-way SMP).
Charm++> cpu topology info is gathered in 0.000 seconds.
Info: NAMD 2.12 for Linux-x86_64-multicore
Info:
Info: Please visit http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/
Info: for updates, documentation, and support information.
Info:
Info: Please cite Phillips et al., J. Comp. Chem. 26:1781-1802 (2005)
Info: in all publications reporting results obtained with NAMD.
Info:
Info: Based on Charm++/Converse 60701 for multicore-linux64-iccstatic
Info: Build: Wed Dec 31 11:26:52 CST 2016 by jin on basara.ks.uiuc.edu
```

Figura 37. Execució de NAMD. Font: Pròpia

Si no s'ha especificat cap fitxer de configuració no es portarà a cap ninguna simulació. Però NAMD s'executarà i ens advertirà d'açò.

Per a evitar futurs problemes o encontrar errors en el futur, amb aquests passos queda constatat que NAMD i VMD estan instal·lats correctament a la màquina i que s'executen sense cap problema

El processador de l'ordinador emprat al present projecte disposa de 8 nuclis de càlcul. Per tal que les simulacions es porten a cap a la major velocitat possible, cal usar els 8 nuclis disponibles. La execució del comandament *namd2* indica que per defecte usarà 2 nuclis per a fer els càlculs.

Segons el manual, per a executar un script i aprofitar tota la potencia de càlcul, tindrem que usar el comandament:

namd2 +px

Sent x la quantitat de nuclis de càlcul que volem emprar per a fer la nostra simulació:

```
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~$ namd2 +p8 original.namd
Charm++: standalone mode (not using charmrun)
Charm++> Running in Multicore mode: 8 threads
```

Figura 38. NAMD funcionant amb 8 nuclis. Font: Pròpia

Tal i com ens diu a la consola de Linux (Figura 38), namd2 correrà en 8 fils de càlcul.

Queda comprovat que tot funciona i no tindrem errors relacionats amb la instal·lació o en la execució dels programes en el futur.

5.4 Familiarització amb l'entorn

NAMD no té interfície gràfica, és per a açò s'han explorat les opcions que ofereix VMD (segons la descripció del programa que fan els propis creadors) com a interfície gràfica de NAMD (Figures 39 i 40).

VMD segons el manual, permet visualitzar simulacions de GROMACS, per tant els ha de poder carregar al programa. Tenint en compte que pot generar els fitxers de configuració per a NAMD, es carreguen els fitxers de GROMACS a VMD i després s'intenten generar els fitxers de NAMD a través de VMD.

Per a usar NAMD, són necessaris un fitxer .psf i un fitxer .pdb a part del camp de forces sobre el que està construït NAMD.

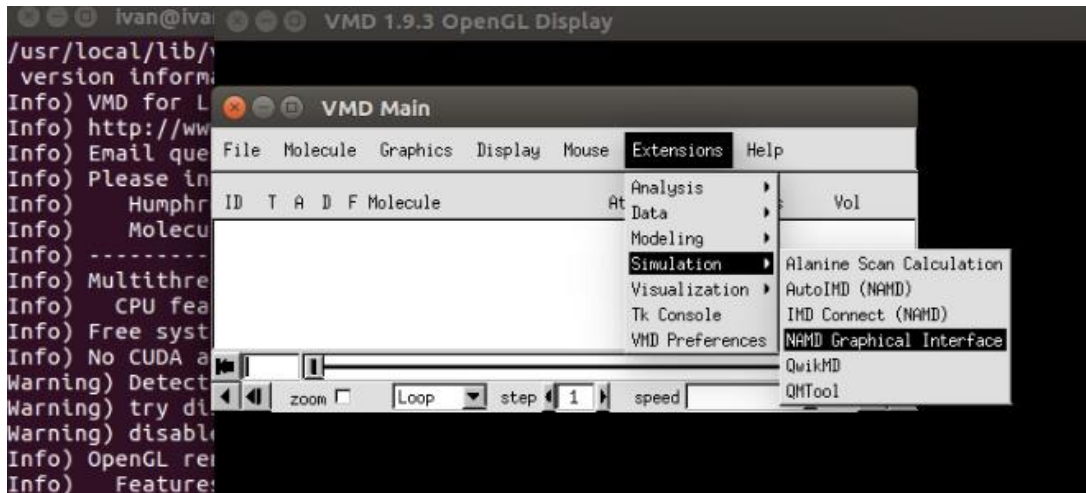


Figura 39. Ubicació de la GUI de NAMD dins de VMD. Font: Pròpia

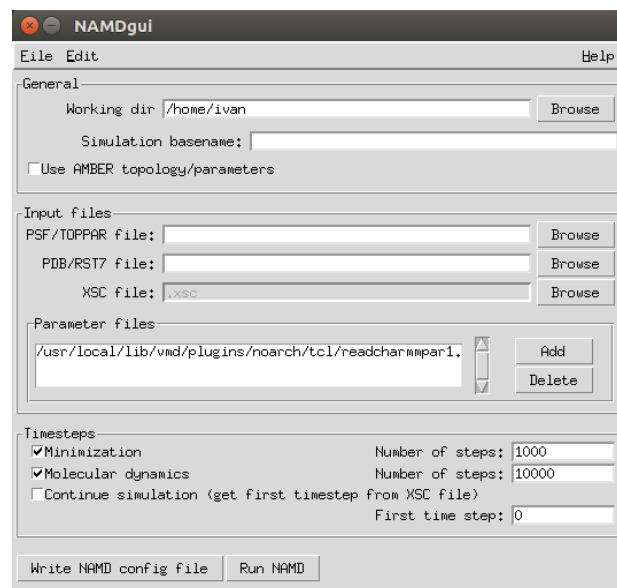


Figura 40. GUI de NAMD dins de VMD. Font: Pròpia

5.5 Fitxers de GROMACS

A la Figura 40 al punt 5.4 es pot comprovar que les extensions compatibles són PSF/TOPPAR, PDB/RST7, XSC.

Els fitxers dels que es disposa (Figura 41), obtinguts al article “Desenvolupament dels paràmetres del camp de forces per a la simulació de l'àcid polilàctic” H .McAliley i A. Bruce (2011).

Cap d'aquests fitxers es correspon amb l'extensió que accepta la interfície gràfica de VMD. Per tant carregar la informació a través de la GUI de NAMD queda descartat.

Implementació del Projecte

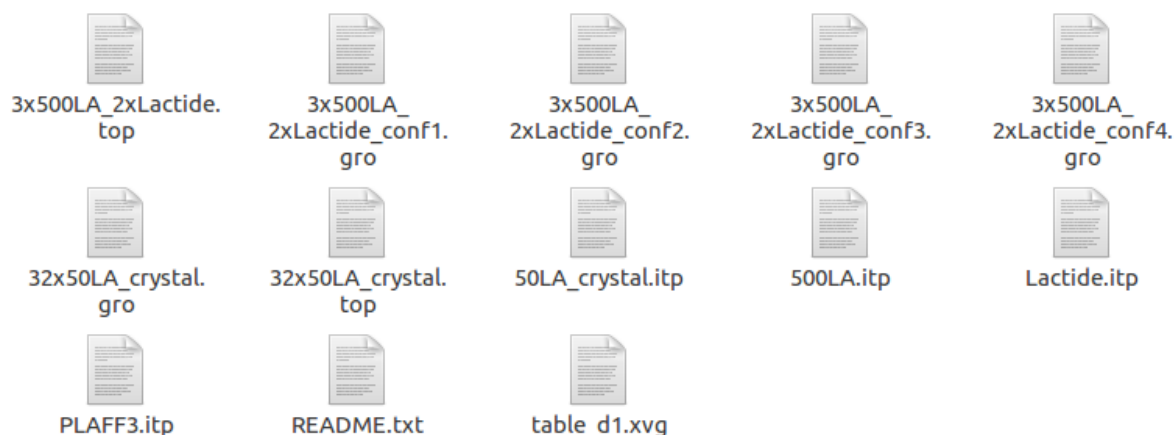


Figura 41. Scripts que conformen els paràmetres de la simulació de GROMACS. Font: Pròpia

És convenient en aquest punt explicar que conté cada arxiu:

Els arxius .gro contenen les coordenades de la estructura molecular inicial per a les distintes configuracions que es lligen al nom dels arxius, els arxius .top inclouen la topologia de la molècula, els arxius .itp inclouen la informació referent a la molècula, com els potencials interatòmics. El arxiu .xvg conté una taula amb valors tabulats per al potencial dièdric omega segons el angle.

5.6 Carregar estructura a VMD

Després d'explorar tots els menús i configuracions que accepta VMD, veiem que sí que podem carregar els arxius .gro per a visualitzar la estructura de la molècula. El problema que tenim es que VMD no pot accedir als fitxers .itp que donen valors a les molècules. Per tant quan creem un arxiu .pdb i .psf des de VMD per a NAMD, però no obtenim valor per a 1600 variables perquè dins del fitxer .top no hi ha suficient informació. Recalquem que VMD no llig els fitxer .itp que sí que contenen aquesta informació.

Per a carregar el fitxer .gro a VMD obrim la consola de VMD. Aquesta es troba a:

```
EXTENSIONS>Tk console
```

Una volta dins de la consola cal trobar el directori usant els comandaments cd i ls com s'ha explicat en el punt 5.1 per a la instal·lació de NAMD i VMD.

Dins del directori, usar el comandament 'mol new' seguit del nom del script en format .gro com es mostra a la Figura 42. Una volta carregat el fitxer .gro es mostrarà la macromolècula, recordem, és una representació gràfica sense potencials interatòmics.

```

VMD TkConsole
File Console Edit Interp Erefs History Help
>Main< (ficheros) 42 % ls
.:
GromacsPLAfiles/      ct200251x_si_001.pdf  ct200251x_si_002.pdf
ct200251x_si_003.pdf
>Main< (ficheros) 43 % cd GROMACSPLAfiles
couldn't change working directory to "GROMACSPLAfiles": no such file or director
y
>Main< (ficheros) 44 % cd GromacsPLAfiles/
>Main< (GromacsPLAfiles) 45 % ls
.:
32x50LA_crystal.gro      32x50LA_crystal.top
3x500LA_2xLactide.top    3x500LA_2xLactide_conf1.gro
3x500LA_2xLactide_conf2.gro  3x500LA_2xLactide_conf3.gro
3x500LA_2xLactide_conf4.gro  500LA.itp
50LA_crystal.itp          Lactide.itp
PLAFF3.itp                README.txt
table_d1.xvg
>Main< (GromacsPLAfiles) 46 % mol new 32x50LA_crystal.gro
0
>Main< (GromacsPLAfiles) 47 % |
  
```

The screenshot shows a VMD TkConsole window with a menu bar (File, Console, Edit, Interp, Erefs, History, Help) and a terminal area. The terminal displays a series of commands and their outputs, including directory listings and a successful 'mol new' command. Below the console, a 3D molecular model is visible, showing a long, thin, rectangular structure composed of many small, colored spheres (atoms) connected by lines (bonds). The model is rendered in a stick representation with a semi-transparent surface, showing a complex, repeating pattern of atoms.

Figura 42. Consola amb els comandaments emprats a VMD i el resultat. Font: Pròpia

5.7 Scripts de conversió de fitxers

No sent possible carregar els fitxers a VMD, es busca algun tipus de programa convertidor. Existeixen programes ja fets per a transformar extensions de GROMACS a NAMD (Figura 43), però no per als nostres fitxers.

```
#!/usr/bin/perl

# Adapted from Graham Smith's script gmx2mmc
# modified by Marc Baaden (080901)

# this script makes a Charmm/Xplor psf file from a GROMACS .top file
# it uses atom types, charges, masses and bond information !

$psf_res_offset=0;

%arghash=@ARGV;
$topfile=$arghash{"-p"};
$pdbfile=$arghash{"-P"};
$psffile=$arghash{"-o"};

$usage_message="
NAME
    Perl script c_top2psf.pl MB080901a

SYNOPSIS
    c_top2psf.pl -p <topfile> -o <psffile>
    c_top2psf.pl -P <pdbfile> -o <psffile>

This is a perl script to convert a GROMACS topology file
(.TOP/.ITP) or alternatively a PDB file with Connect
records in a Charmm/Xplor psf file using the infor-
mation about atom types, charges, masses and bonds. Then
one can use VMD to visualize pdb+psf and verify whether
the bonding topology is ok.

OPTIONS
-p <topfile>
    <topfile> is a gromacs topology file as produced
    by pdb2gmx (or it could be an itp), containing atom type
    and charge information (no #include'd files please!)
-P <pdbfile>
    <pdbfile> is a file in PDB format with connect
    records. The expected format looks like
```

Figura 43. Exemple script conversió. Font: ks.uiuc.edu

No ens val perquè revisant el codi no hi ha adaptació per als angles i els dièdrics.

5.8 Noves idees i suport tècnic.

No hi ha cap possibilitat de transformar els fitxers de forma automàtica, es procedeix a llegir els scripts presentats al punt 5.5 per a convertir-los de forma manual.

Es descarta crear un camp de forces nou per a NAMD perquè no s'ha trobat cap forma de sintaxis o exemple de camp de forces CHARMM per a NAMD ni al manual ni a internet. A més, la taula amb potencials tabulats no es pot posar dins de NAMD.

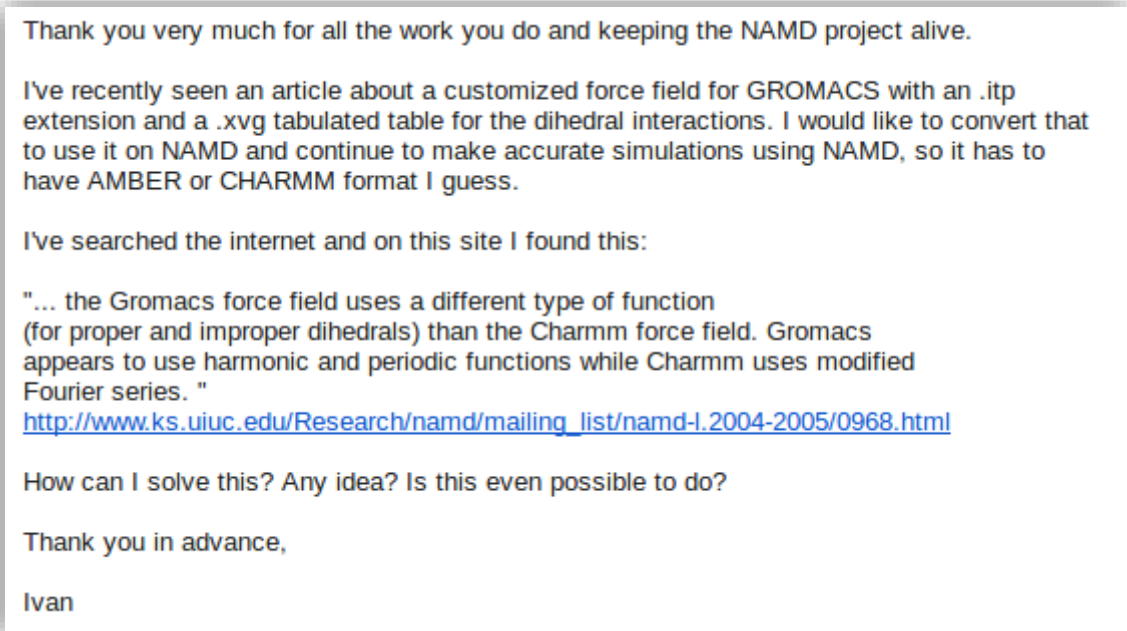
Arribats a aquest punt, es contacta el suport de tècnic de NAMD, format pels seus programadors, per a açò cal registrar-se en un llistat de correus. El procediment està explicat a la pàgina oficial de NAMD i no va a ser detallat ací.

En ser registrat al llistat de correus arriben tots els correus que s'envien al suport tècnic per part d'altres persones així com les respostes d'aquests, de forma que es recava molta informació del programa, de com funciona i del que està fent la comunitat a NAMD.

A més la majoria d'aquests correus es fan públics de forma que es pot accedir a la informació a través d'un buscador com google.

Donat que no hi ha fòrums on preguntar dubtes, la única font d'informació disponible per a treballar de forma autònoma, són aquests correus i els manuals tant de NAMD com de GROMACS.

El primer correu que s'envia és aquest (Figura 44):



Thank you very much for all the work you do and keeping the NAMD project alive.

I've recently seen an article about a customized force field for GROMACS with an .itp extension and a .xvg tabulated table for the dihedral interactions. I would like to convert that to use it on NAMD and continue to make accurate simulations using NAMD, so it has to have AMBER or CHARMM format I guess.

I've searched the internet and on this site I found this:

"... the Gromacs force field uses a different type of function (for proper and improper dihedrals) than the Charmm force field. Gromacs appears to use harmonic and periodic functions while Charmm uses modified Fourier series. "

http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/mailling_list/namd-l.2004-2005/0968.html

How can I solve this? Any idea? Is this even possible to do?

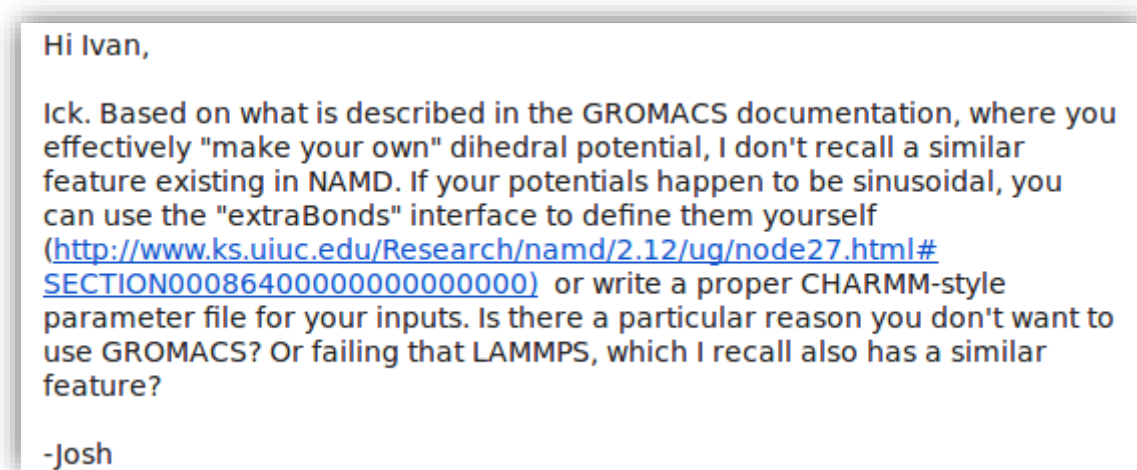
Thank you in advance,

Ivan

Figura 44. Correu enviat al suport tècnic. Font: Pròpia

Havent trobat referències al llistat del correu i als manuals sobre distints mètodes matemàtics usats per GROMACS i NAMD per a calcular els potencials. És possible fer la conversió? A més, la taula tabulada no es pot situar enlloc dins de NAMD.

Després d'intercanviar alguns e-mails responent preguntes sobre la configuració del fitxer .xvg que segons el arxiu README s'inclou en el mdrun de GROMACS, rep aquesta resposta:



Hi Ivan,

Ick. Based on what is described in the GROMACS documentation, where you effectively "make your own" dihedral potential, I don't recall a similar feature existing in NAMD. If your potentials happen to be sinusoidal, you can use the "extraBonds" interface to define them yourself (<http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/2.12/ug/node27.html#SECTION00086400000000000000>) or write a proper CHARMM-style parameter file for your inputs. Is there a particular reason you don't want to use GROMACS? Or failing that LAMMPS, which I recall also has a similar feature?

-Josh

Figura 45. Resposta suport tècnic. Font: Pròpia

No existeix cap funció a NAMD on poder definir el teu propi potencial dièdric (Figura 45). Caldria escriure el teu propi camp de forces en format CHARMM i açò ja ha quedat descartat.

Després de debatre amb el tutor la resposta, s'arriba a la conclusió de que convertir aquests potencials matemàticament no és quelcom trivial i que mentre CHARMM usa series de Fourier modificades i NAMD aproximacions sinusoidals, seria molt complicat trobar valors equivalents.

Es descarta per el moment i es busquen altres opcions perquè els valors que es donen al camp de forces, sobretot dels angles dièdrics, modifiquen la estructura de la molècula en la seua totalitat al ser dependents uns d'altres i ser processats de forma distinta per GROMACS i NAMD, lo que implicarà un canvi que afecta a tota la molècula, a més, queda confirmat que NAMD no ofereix l'opció d'utilitzar cap taula tabulada a diferencia de GROMACS.

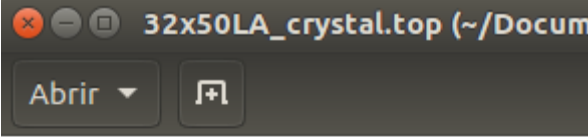
S'haurà de prescindir de la taula perquè no podrà usar-se a NAMD, veurem com afecta al resultat final de la simulació la falta d'aquests potencials tabulats.

5.9 Eliminació dels #include

El pròxim pas que s'ha seguit, hipòtesis pròpia basada en la programació modular, és la següent: Els fitxers .top obtenen la seua informació de les capçaleres #include que funcionen com una biblioteca. Aleshores retira el #include dels .top i es posa en aquell lloc la informació provinent del .itp de forma que el fitxer .top que pareix que és compatible amb NAMD segons el manual, continga tota la informació de la molècula.

Per tant, on posa `#include "PLAFF3.itp"`, es copia i pega tot el script `PLAFF3.itp` i es repeteix per al `"50LA_crystal.itp"` (veure Figura 46).

Procedim a realitzar el script de NAMD.



```
32x50LA_crystal.top (~/Docum
Abrir ▾
; Include forcefield parameters
#include "PLAFF3.itp"

; Include chain topologies
#include "50LA_crystal.itp"

[ system ]
; Name
32 PLA 50mers Crystal

[ molecules ]
; Compound      #mols
50LA_crystal    32|
```

Figura 46. Detall del script `.top` amb els `#include`. Font: Pròpia

5.10 Control de temperatura i primer script de NAMD

Per a la simulació ens cal controlar la temperatura ja que obtindrem el resultat de la temperatura de la transició vítria quan refredem el polímer des de 800K fins 300K, podem usar un script genèric, però cal esbrinar com configurar el control de temperatura de la simulació.

Segons el manual cal usar el llenguatge de programació Tcl (Figura 47) i el termòstat i baròmetre inclòs a NAMD: Langevin.

```
# Constant Temperature Control
if {0} {
  langevin          on      ;# do langevin dynamics
  langevinDamping  1       ;# damping coefficient (gamma) of 1/ps

  for{set temperature 800}{$temperature>100}{incr temperature -10}{
    langevinTemp    $temperature
  }
  run 1000
}
```

Figura 47. Exemple control de temperatura TCL. Font: Pròpia

Podem controlar la velocitat a la que escalfem o refredem el sistema tenint en compte que el temps virtual de cada integració a NAMD es de 1 femto segon. Tenint en compte que definim la temperatura d'entrada i la d'eixida, la quantitat de temperatura que incrementem o reduïm en cada conjunt de passos d'integració, es modificarà la corba de la velocitat de refredament. En la Figura 47, cada 1000 passos d'integració.

Amb uns exemples que provenen de tutorials de la Universitat de Illinois aconseguim un script de NAMD amb el que el programa arranca.

L'arxiu de configuració funciona tal i com es mostra en la Figura 48. Es verifica que substituir els fitxers .itp per els #include al .top funciona.

```

ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~/Documentos/Test$ namd2 +p8 original.namd
Charm++: standalone mode (not using charmrun)
Charm++> Running in Multicore mode: 8 threads
Charm++> Using recursive bisection (scheme 3) for topology aware partitions
Converse/Charm++ Commit ID: v6.7.1-0-gbdf6a1b-namd-charm-6.7.1-build-2016-Nov-07-136676
Warning> Randomization of stack pointer is turned on in kernel, thread migration
may not work! Run 'echo 0 > /proc/sys/kernel/randomize_va_space' as root to dis
able it, or try run with '+isomalloc_sync'.
CharmLB> Load balancer assumes all CPUs are same.
Charm++> Running on 1 unique compute nodes (8-way SMP).
Charm++> cpu topology info is gathered in 0.000 seconds.
Info: NAMD 2.12 for Linux-x86_64-multicore
Info:
Info: Please visit http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/
Info: for updates, documentation, and support information.
Info:
Info: Please cite Phillips et al., J. Comp. Chem. 26:1781-1802 (2005)
Info: in all publications reporting results obtained with NAMD.
Info:
Info: Based on Charm++/Converse 60701 for multicore-linux64-iccstatic
Info: Built Wed Dec 21 11:36:52 CST 2016 by jim on harare.ks.uiuc.edu
Info: 1 NAMD 2.12 Linux-x86_64-multicore 8 ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC
ivan
Info: Running on 8 processors, 1 nodes, 1 physical nodes.
Info: CPU topology information available.
Info: Charm++/Converse parallel runtime startup completed at 0.012917 s
CkLoopLib is used in SMP with a simple dynamic scheduling (converse-level notifi
cation) but not using node-level queue
Info: 551.246 MB of memory in use based on /proc/self/stat
Info: Configuration file is original.namd
Info: Working in the current directory /home/ivan/Documentos/Test
TCL: Suspending until startup complete.
Warning: The following variables were set in the
Warning: configuration file but will be ignored:
Warning: paraTypeCharmm (parameters)
Info: SIMULATION PARAMETERS:
Info: TIMESTEP 2

```

Figura 48. Primer intent d'execució de NAMD amb un script de configuració. Font: Pròpia

Cal tenir en compte que per arribar fins aquí, s'han modificat algunes coses:

En el apartat [defaults] que prové del PLAFF3.itp que ha sigut copiat i pegat al .top, s'ha de canviar el valor de *comb-rule* (Figura 49), originalment amb valor 3. Però cal posar a 1 o es generarà un error del que NAMD avisarà a la consola.

```

[ defaults ]
; nbfunc comb-rule gen-pairs fudgeLJ fudgeQQ
          1          1          yes          0.5          0.5

```

Figura 49. Script .top modificat. Font: Pròpia

Per a fer la simulació amb els fitxers de GROMACS, segons el manual cal usar la següent sintaxis:

```
gromacs on
grotopfile 32x50LA_crystal.top
grocoorfile 32x50LA_crystal.gro
```

Figura 50. Detall del script de configuració de NAMD. Font: Pròpia

És a dir, la topologia i la estructura de la molècula serà proporcionada a NAMD per fitxers de GROMACS. La topologia natural de NAMD seria .psf per al fitxer que conté els paràmetres de la molècula i .pdb per al fitxer que conté la estructura de la molècula.

5.11 Primer error

Abans de començar la simulació, avorta i ens mostra el error de la Figura 51:

```
Info: Using GROMACS format force field!
Info: GROMACS TOPO FILE      50LA_crystal.top
Info: GROMACS COOR FILE     32x50LA_crystal.gro
Info: USING GEOMETRIC MEAN TO COMBINE L-J SIGMA PARAMETERS
Syntax error in ATOMTYPES:  opls_135      CT 6 12.01100 -0.180      A  3.5000
0e-01 2.76144e-01

----- Processor 0 Exiting: Called CmiAbort -----
Reason: unexpected call to exit by user program. Must use CkExit, not exit!
```

Figura 51. Error de NAMD. Font: Pròpia

Generem un fitxer .pdb en VMD a partir del .gro per a provar si funciona amb una altra extensió per a la estructura de coordenades (Figura 52), (més avant s'explica com es genera aquest fitxer amb VMD):

```
gromacs on
grotopfile 32x50LA_crystal.top
|coordinates 32x50LA_crystal_autopsf_formatted.pdb
```

Figura 52. Detall .pdb a configuració de NAMD. Font: Pròpia

```
Info: GROMACS TOPO FILE      50LA_crystal.top
Info: GROMACS COOR FILE     32x50LA_crystal_autopsf-temp.pdb
Info: USING GEOMETRIC MEAN TO COMBINE L-J SIGMA PARAMETERS
Syntax error in ATOMTYPES:  opls_135      CT 6 12.01100 -0.180      A  3.5000
0e-01 2.76144e-01

----- Processor 0 Exiting: Called CmiAbort -----
Reason: unexpected call to exit by user program. Must use CkExit, not exit!
```

Figura 53. Error de NAMD amb distint fitxer de configuració. Font: Pròpia

Aquest tipus d'error (Figura 53) no queda resolt als e-mails que s'han trobat publicats pel servici tècnic. Ni tampoc no ens responen als e-mails que enviem.

5.12 Nova informació rellevant.

El servici tècnic no ens ajuda i el error no queda solucionat al llistat d'e-mails. Aquesta conversa entre un usuari de NAMD i el suport tècnic a l'any 2016 és clau per a continuar el projecte.

(http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/mailling_list/namd-l.2015-2016/2534.html)

> Dear Michael Makowski,
>
> I am trying to run gromacs simulation
> in namd and getting the error "USING ARITHMETIC MEAN TO COMBINE L-J SIGMA
> PARAMETERS Molecule DMPC undefined" I have seen your post in the mailing
> list "[http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/mailling_list/
> namd-l.2014-2015/1129.html](http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/mailling_list/namd-l.2014-2015/1129.html)". Could you let me know that how did you
> overcome this problem to run gromacs simulation in namd.
>
> Thanks,
>
> Subbarao Kanchi.

> Well, the exact error is just:
>
> Molecule DMPC undefined
>
> This is because namd doesn't follow linked *.itp files from your topology
> file. Please just copy the content of all required *.itp files into your
> *.top file and try again.
>
> Best of luck
>
> Norman Geist

Aquest pas justament ja l'hem fet. Ens val per a confirmar que el procediment emprat és correcte i està bé.

> Hi Norman Geist,
>
> I have copied the *.itp into the topologies file
> (.top) and end up with another error "Syntax error in ATOMS" as reported in
> mailing list [http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/mailling_list/
> namd-l.2003-2004/1102.html](http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/mailling_list/namd-l.2003-2004/1102.html). I do not find any solution to overcome the
> error.
>
> Subbarao Kanchi

Implementació del Projecte

Just troba el mateix problema que tenim nosaltres.

```
> Have you tried sending your topology through one of the gromacs tools to
> check it is correct? Otherwise, since gromacs support in namd is rather
> rudimentary, you could also try to convert your gromacs files to amber
> format using the Parmed tool, either directly downloaded from github or
> shipped with the Ambergtools 16, as:
>
> parmed
>
> parmed> gromber your.top your.gro
>
> parmed> outparm your.prmtop your.rst7
>
> It might also output errors your topology has issues. Later in namd you do;
> amber on
> parmfile your.prmtop
> ambercoor your.rst7
>
> Best wishes
>
> Norman Geist
```

Açò mostra que podem provar a usar AMBER per a fer la conversió i es automàtica. També confirma que el suport de GROMACS a NAMD és rudimentari.

```
> Hi Norman Geist,
>
> Thank you for the suggestions and I have modified
> the gromacs topology file by looking at the namd source code
> "GromacsTopFile.C". It is working.
>
> Thanks,
>
> Subbarao Kanchi.
```

```
> Can you explain in short what changed you had to made, just to have this
> here for users having these issues in the future.
>
>
>
> Norman Geist
```

I have removed the additional columns those are present under definition of [ATOMS] from the topology (example atomic number column) which are not require for NAMD. One can see the "sanf c" formate in "GromacsTopFile.C" and can modify accordingly.
Subbarao Kanchi.

El resum és que des de el suport de NAMD, recomanen directament canviar a AMBER i després córrer el fitxer a NAMD ja que el suport de GROMACS a NAMD és i cite textualment: rudimentari.

A pesar d'això, Subbaro Kanchi amb el codi font de NAMD ha trobat una solució.

Per altra banda, es repeteix de nou el procés d'aconseguir a través de VMD els .psf i .pdb tenint en compte que s'ha modificat el arxiu .top i que els fitxers generats automàticament per VMD seran correctes ja que els fitxers .top contenen informació.

La possibilitat de fer la conversió mitjançant AMBER s'explora, però es descarta perquè la llicència del programa val 500\$ per a entitats governamentals sense ànim de lucre o universitats i la llicència comercial 20000\$ i s'excediria el pressupost del projecte. No existeix tampoc la possibilitat de provar-lo durant un temps limitat.

Primerament es provarà a generar els fitxers amb VMD que pareix automàtica i si no funciona, mirarem el codi font de NAMD al que fa referència Subbaro Kanchi.

5.13 Generar fitxers .psf i .pdb a VMD

Per a generar els fitxers .psf i .pdb automàticament des de VMD a partir de .top i .gro:
Carreguem la molècula a VMD com s'ha mostrat abans al punt 5.6 i seguidament:
Extensions>Modeling>Automatic PSF builder

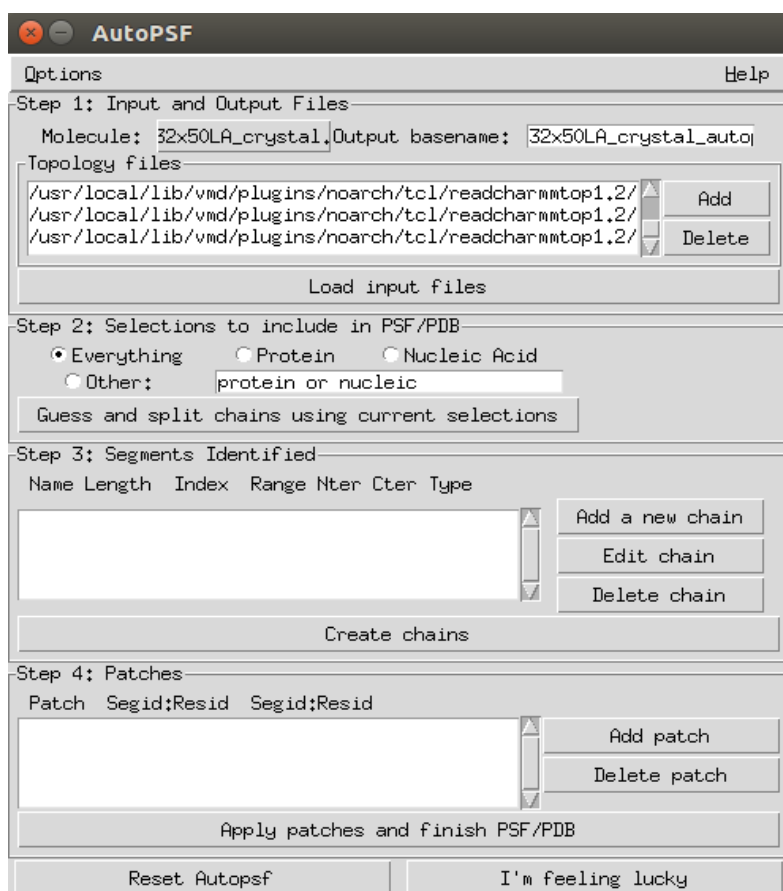


Figura 54. Vista general del Automàtic PSF builder de VMD. Font: Pròpia

Com podem veure a la Figura 54 hi ha 4 passos:

Pas 1 (Step 1): ADD. Seleccionem el fitxer .top que havem preparat prèviament (Figura 55).

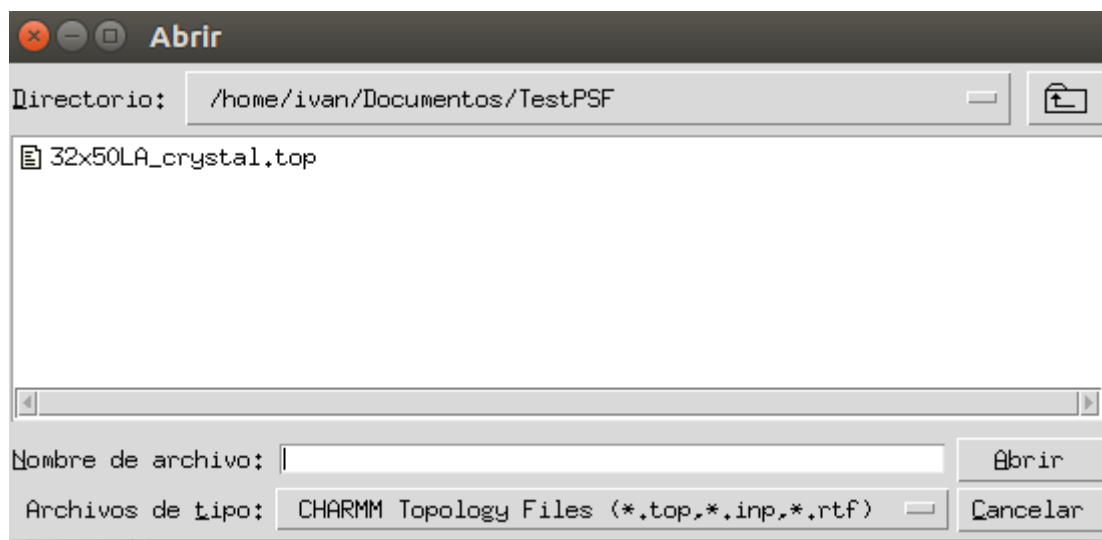


Figura 55. Pas 1 AutoPSF. Font: Pròpia

Polsem “Load input files” i passem al pas 2 (Figura 56).

Pas 2 (Step 2): Cliquem Nucleic Àcid, Proteïna o Tot, per al cas, tant se val.

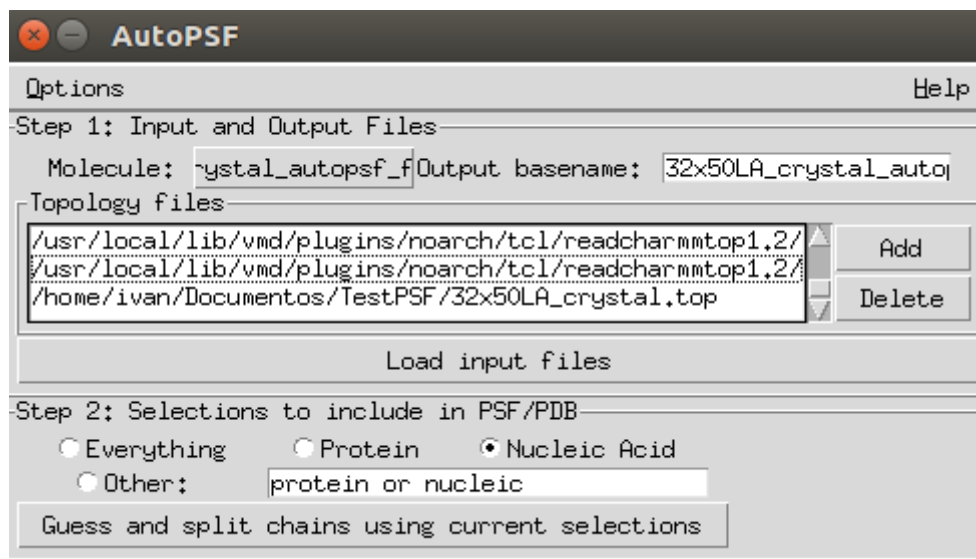


Figura 56. Pas 2 AutoPSF. Font: Pròpia

Pas 3 (Step 3): Polsem directament “Crear cadenes” (Figura 57)

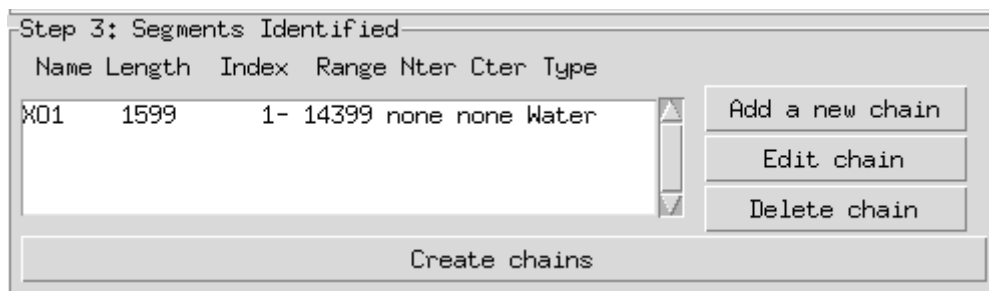


Figura 57. Pas 3 AutoPSF. Font: Pròpia

Apareixerà el missatge de la Figura 58:

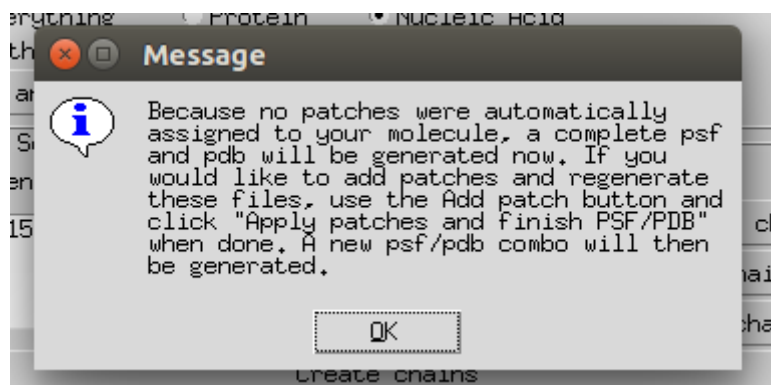


Figura 58. Pas 3 missatge Informació 1 AutoPSF. Font: Pròpia

S'accepta el punt d'informació i ens trobem la Figura 59.

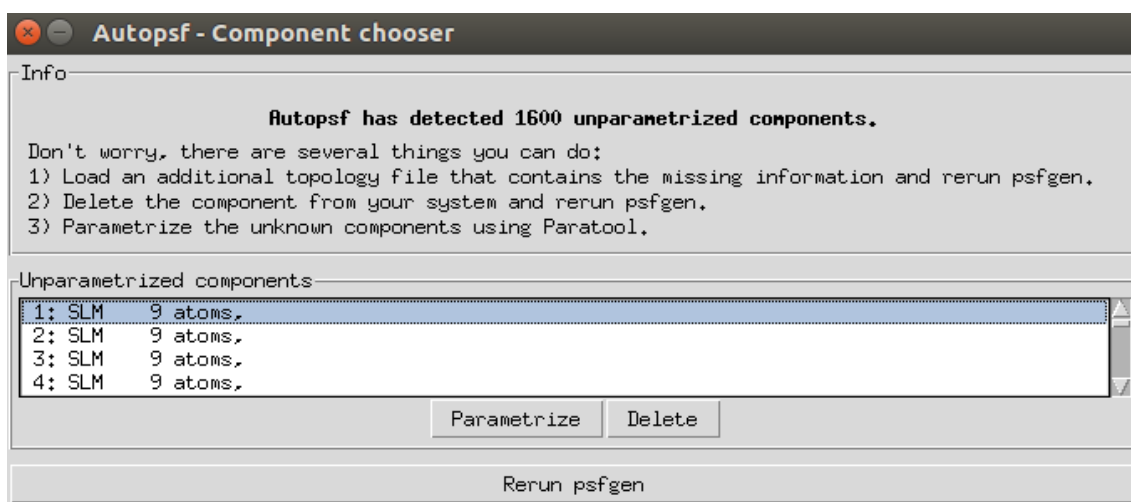


Figura 59. Pas 3 missatge Informació 2 AutoPSF. Font: Pròpia

Tanquem.

S'han generat els fitxers però hi ha 1600 paràmetres sense definir. Aquesta idea no ha funcionat. Ha passat exactament el mateix que quan posem un fitxer .top que no te cap paràmetre. Al pas 4 no arribem perquè no tenim cap pegat per a la nostra molècula.

Caldrà buscar al codi font de NAMD com es proposava al apartat anterior si açò no funcionava.

5.14 Codi font de NAMD: GromacsTopFile.C

Mirem el codi de NAMD per a veure com actua quan li passem un arxiu .top de GROMACS. NAMD es un programa open source (codi obert) (Figura 60), aleshores el codi de NAMD és públic:

Al següent enllaç es pot trobar:

http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/doxygen/GromacsTopFile_8C-source.html

```

00457     case ATOMTYPES:
00458         if(6 != sscanf(buf, "%5s %f %f %5s %f %f", type,&mass,&charge,
00459             particletype,&c6,&c12)) {
00460             fprintf(stderr,"Syntax error in ATOMTYPES: %s\n",buf);
00461             exit(1);
00462         }
00463         /* conversions:
00464            c6 - kJ/mol nm6 -> kcal/mol A6
00465            c12 - kJ/mol nm12 -> kcal/mol A12 */
00466         atomTable.addType(type,mass,charge,
00467             c6/(JOULES_PER_CALORIE)*1E6,
00468             c12/(JOULES_PER_CALORIE)*1E12);
00469         break;

```

Figura 60. Codi font NAMD, Atomtypes. Font: Pròpia

A la Figura 51 i 53 es pot veure que teníem un error de sintaxis al apartat *atomtypes*.

Podem veure a la Figura 60 que la funció *scanf* agafa només 6 valors, en tenim 8 al script com es pot comprovar a la Figura 61.

Modifiquem el script (Figura 61) i obtenim un format del script adequat, veure Figura 62.

S'ha eliminat el nombre enter que hi ha entre el *bond_type* i la massa perquè no hi ha a la funció *cap %d* que fa referència als nombres enters en C++, també s'elimina el nom perquè conté 8 lletres i el programa només agafa 5. A més és més descriptiu el tipus d'enllaç.

```

[ atomtypes ]
; full atom descriptions are available in ffoplsaa.atp
;   name bond_type      mass charge ptype      sigma      epsilon
opls_135      CT  6 12.01100 -0.180  A    3.50000e-01 2.76144e-01
opls_140      HC  1  1.00800  0.060  A    2.50000e-01 1.25520e-01

```

Figura 61. Script original .top apartat [atomtypes]. Font: Pròpia

```

[ atomtypes ]
; full atom descriptions are available in ffoplsaa.atp
;   name bond_type      mass charge ptype      sigma      epsilon
      CT  12.01100 -0.180  A    3.50000e-01 2.76144e-01
      HC   1.00800  0.060  A    2.50000e-01 1.25520e-01
      OH  15.99940 -0.683  A    3.12000e-01 7.11280e-01

```

Figura 62. Script modificat .top apartat [atomtypes]. Font: Pròpia

El error relacionat amb [atomtypes] queda solucionat. Ara ix un altre error (Figura 63):

```

Syntax error in DIHEDRALTYPES:  C_2 CT CT HC  3 -0.15899 -0.47698  0.00
000  0.63596  0.00000  0.00000 ; aldehyde & ketone
----- Processor 0 Exiting: Called CmiAbort -----
Reason: unexpected call to exit by user program. Must use CkExit, not exit!

```

Figura 63. Error dihedraltypes. Font: Pròpia

Implementació del Projecte

Anem a la part del codi de NAMD on estan escrits els valors que pren del apartat dihedraltypes (Figura 64):

```
00404     case DIHEDRALTYPES:
00405         i = sscanf(buf, " %5s %5s %d %f %f %f %f %f %f",
00406                     typea, typeb, &funct, &c[0], &c[1], &c[2], &c[3], &c[4], &c[5]);
00407         if (funct == 1 || funct == 2) {
00408             if (i != 5 + (funct == 1)) { /* 6 for f=2, 5 for f=1 */
00409                 fprintf(stderr, "Syntax error in DIHEDRALTYPES: %s\n", buf);
00410                 exit(1);
00411             }
00412             c[0] = c[0]; /* both in deg */
00413             c[1] = c[1]/JOULES_PER_CALORIE; /* convert kJ to kcal and still use E=kx2*/
00414             /* for funct==1 these are both divided by rad^2 */
00415             if (funct == 1) {
00416                 mult = (int)(c[2]+0.5); /* round to nearest integer :p */
00417             }
00418         }
00419         else if (funct == 3) {
00420             if (i != 9) {
00421                 fprintf(stderr, "Syntax error in DIHEDRALTYPES\n");
00422                 exit(1);

```

Figura 64. Codi font NAMD, Dihedraltypes. Font: Pròpia

El programa accepta els 6 valors numèrics del script (veure Figura 64 i 65) i els posarà al vector `c[6]`. Pel que fa a “`&funct`” entenc que fa referència al número 3 que tenim al script. “`typea`” i “`typeb`” fan referència al nom dels àtoms. Igual que en el cas anterior “`type`”. Però només accepta 2 i nosaltres en tenim 4 (veure Figura 65).

```
[ dihedraltypes ]
; i j k l func coefficients
; OPLS Fourier dihedraltypes translated to Gromacs Ryckaert-Bellemans form
; according to the formula in the Gromacs manual.
C_2 CT CT HC 3 -0.15899 -0.47698 0.00000 0.63596 0.00000 0.00000 ; aldehyde & ketone
C_2 OS CT CT 3 -2.19660 5.20071 0.52719 -3.53130 0.00000 0.00000 ; esters
C_2 OS CT HC 3 0.41421 1.24265 0.00000 -1.65686 0.00000 0.00000 ; esters
CT CT OS CT 3 1.71544 2.84512 1.04600 -5.60656 0.00000 0.00000 ; ethers AA
CT CT C_2 OS 3 -1.15688 -3.47063 0.00000 4.62750 0.00000 0.00000 ; esters
CT CT C_2 O_2 3 3.10662 -3.77606 -5.13795 5.80739 0.00000 0.00000 ; aldehyde & ketone
CT C_2 OS CT 3 31.20637 -9.76754 -21.43881 0.00000 0.00000 0.00000 ; esters
HC CT CT HC 3 0.62760 1.88280 0.00000 -2.51040 0.00000 0.00000 ; hydrocarbon *new* 1

```

Figura 65. Script original .top apartat [dihedraltypes]. Font: Pròpia

Es pregunta al tutor si es possible esborrar dos àtoms. Als dièdrics hi ha els 4 àtoms implicats en una cadena, però podria ser que amb només dos, els altres es puguin identificar dins de la cadena. La conclusió és que cal entendre quins 4 àtoms representen el dièdric en un cas i quins 2 en l'altre. Per açò recorrem al manual de GROMACS, NAMD i la configuració de la molècula.

Una altra possibilitat seria aconseguir els valors de `k`, `n` i `ref` (veure Figura 66 i 67) que demana el manual de NAMD per a definir un potencial dièdric en una cadena de 4 àtoms. Matemàticament açò no és trivial. Amb l'ànim de avançar amb la simulació s'opta per

esborrar les columnes i j (veure Figura 68) que segons el manual de Gromacs són els àtoms representatius. Paral·lelament, per a afinar la simulació ja que aquests valors són importants, s'està tractant de resoldre matemàticament. Açò es recollirà en un altre apartat més avant.

(**Note:** The use of this potential implies exclusions of LJ-interactions between the first and the last atom of the dihedral, and ψ is defined according to the 'polymer convention' ($\psi_{trans} = 0$).

The RB dihedral function can also be used to include the OPLS dihedral potential [50]. The OPLS potential function is given as the first four terms of a Fourier series:

$$V_{rb}(\phi_{ijkl}) = V_0 + \frac{1}{2}(V_1(1 + \cos(\psi)) + V_2(1 - \cos(2\psi)) + V_3(1 + \cos(3\psi))), \quad (4.54)$$

with $\psi = \phi$ (protein convention). Because of the equalities $\cos(2\phi) = 2(\cos(\phi))^2 - 1$ and $\cos(3\phi) = 4(\cos(\phi))^3 - 3\cos(\phi)$, one can translate the OPLS parameters to Ryckaert-Bellemans parameters as follows:

$$\begin{aligned} C_0 &= V_0 + V_2 + \frac{1}{2}(V_1 + V_3) \\ C_1 &= \frac{1}{2}(3V_3 - V_1) \\ C_2 &= -V_2 \\ C_3 &= -2V_3 \\ C_4 &= 0 \\ C_5 &= 0 \end{aligned} \quad (4.55)$$

with OPLS parameters in protein convention and RB parameters in polymer convention.

Note: Mind the conversion from $kcal\ mol^{-1}$ for OPLS and RB parameters in literature to $kJ\ mol^{-1}$ in GROMACS.

Figura 66. Pàgina 60 manual de GROMACS. Font: Manual de GROMACS

Extra bonded terms are enabled via the following options:

- **extraBonds** < enable extra bonded terms? >

Acceptable Values: on OR off

Default Value: off

Description: Specifies whether or not extra bonded terms are present.

- **extraBondsFile** < file containing extra bonded terms >

Acceptable Values: file

Description: File containing extra bonded terms. May be repeated for multiple files.

The extra bonds file(s) should contain lines of the following formats:

- bond <atom> <atom> <k> <ref>
- angle <atom> <atom> <atom> <k> <ref>
- dihedral <atom> <atom> <atom> <atom> <k> <ref>
- dihedral <atom> <atom> <atom> <atom> <k> <n> <ref>
- improper <atom> <atom> <atom> <atom> <k> <ref>
- improper <atom> <atom> <atom> <atom> <k> <n> <ref>
- # <comment ...>

In all cases <atom> is a **zero-based** atom index (the first atom has index 0), <ref> is a reference distance in Å (bond) or angle in degrees (others), and <k> is a spring constant in the potential energy function $U(x) = k(x - x_{ref})^2$ or, for dihedrals and impropers with periodicity <n> specified

and not 0, $U(x) = k(1 + \cos(nx - x_{ref}))$. Note that x_{ref} is only a minimum for the harmonic potential; the sinusoidal potential has minima at $(x_{ref} + 180)/n + i \times 360/n$.

Figura 67. Extrabonds. Font: Manual de NAMD

```
[ dihedraltypes ]
;
; Ryckaert-Bellemans Dihedrals
;
; aj      ak      funct
CP2      CP2      3      9.2789  12.156  -13.120 -3.0597 26.240  -31.495
```

Also in this file are the Ryckaert-Bellemans [60] parameters for the CP2-CP2 dihedrals in alkanes or alkane tails with the following constants:

$$\begin{array}{rcl}
 & & \text{(kJ/mol)} \\
 C_0 & = & 9.28 \quad C_2 = -13.12 \quad C_4 = 26.24 \\
 C_1 & = & 12.16 \quad C_3 = -3.06 \quad C_5 = -31.5
 \end{array}$$

(Note: The use of this potential implies exclusions of LJ-interactions between the first and the last atom of the dihedral, and ψ is defined according to the 'polymer convention' ($\psi_{trans} = 0$)).

So there are three types of dihedrals in the GROMACS force field:

- proper dihedral : funct = 1, with mult = multiplicity, so the number of possible angles
- improper dihedral : funct = 2
- Ryckaert-Bellemans dihedral : funct = 3

Figura 68. Tipologia de GROMACS per als dièdrics. Font: Manual GROMACS

Esborrant les columnes i, j del script desapareix el error. El següent error que apareix està en l'apartat [atoms] (Figura 69).

```
case ATOMS:
  i = sscanf(buf, " %d %5s %d %5s %5s %d %f %f",
             &num, type, &resnum, restype,
             atomname, &chargep, &charge, &mass);
  if(i==7) { /* XXX temporary - I should be able to get more
             params */
    typenum = atomTable.getParams(type, &mass, &junkf, &junkf, &junkf);
    i=8;
  }
  else {
    if(i!=8) {
      fprintf(stderr, "Syntax error in ATOMS\n");
      exit(1);
    }
    // just get the type number
    typenum = atomTable.getParams(type, &junkf, &junkf, &junkf, &junkf);
  }
  genericMols[genericMols.size()-1]->addAtom(type, typenum, resnum,
                                              restype, atomname, charge, mass);
  break;
```

Figura 69. Codi font NAMD, atoms. Font: Pròpia


```
[ atoms ]
; nr      type  resnr residue  atom  cgnr  charge  mass  typeB  chargeB  massB
  1  opls_467a  1    SLM   01     01    1    -0.34  15.9994 ; qtot -0.34
  2  opls_465  1    SLM   02     02    1     0.52  12.011  ; qtot 0.18
  3  opls_491a  1    SLM   03     03    1     0.22  12.011  ; qtot 0.40
  4  opls_466  1    SLM   04     04    1    -0.43  15.9994 ; qtot -0.03
  5  opls_282  1    SLM   05     05    1     0.03  1.008   ; qtot 0
  6  opls_135  1    SLM   06     06    2    -0.18  12.011  ; qtot -0.18
  7  opls_140  1    SLM   07     07    2     0.06  1.008   ; qtot -0.12
  8  opls_140  1    SLM   08     08    2     0.06  1.008   ; qtot -0.06
  9  opls_140  1    SLM   09     09    2     0.06  1.008   ; qtot 0
```

Figura 70. Script original .top apartat [atoms]. Font: Pròpia

```
[ atoms ]
; nr      type  resnr  residu  atom  cgnr  charge
  1         C      1    UREA    C1     1    0.683
  2         O      1    UREA    O2     1   -0.683
  3        NT      1    UREA    N3     2   -0.622
```

Figura 71. Tipologia de GROMACS per als atoms. Font: Manual GROMACS

La diferència entre el fitxer .top i la tipologia de GROMACS és molt distinta (Figures 70 i 71 respectivament) en primer lloc observem que el tipus està escrit amb termes d'OPLS. Es busca aleshores una taula per convertir aquests termes (Figura 72).

assigned an atom type i , and its bond type is determined as a function of i . The following type definitions are used to construct PLA molecules.

Atom Type, I	Bond Type, Π	Mass, m (a.u.)
opls_135	CT	12.011
opls_140	HC	1.008
opls_154	OH	15.9994
opls_155	HO	1.008
opls_180	OS	15.9994
opls_181	CT	12.011
opls_185	HC	1.008
opls_267	C	12.011
opls_268	OH	15.9994
opls_269	O_3	15.9994
opls_270	HO	1.008
opls_282	HC	1.008
opls_465	C_2	12.011
opls_466	O_2	15.9994
opls_467	OS	15.9994
opls_467a	OS	15.9994
opls_468	CT	12.011
opls_469	HC	1.008
opls_491	CT	12.011
opls_491a	CT	12.011

Figura 72 Font:PLAFF3 Potential&ParameterSet. cdn-pubs.acs.org

Amb aquesta taula (Figura 72) podem canviar el apartat 'type' a un format correcte. La resta de la informació té un format correcte com es pot veure si comparem la Figura 69 amb la 70. El problema ara és que cal canviar 450 línies de codi. El script es repeteix periòdicament cada 9 atòms. Per tant s'opta per fer un programa en C senzill per a automatitzar el procés. El resultat del programa es mostrarà a la consola i copiarem i pegarem substituït el codi anterior que és incorrecte.

Per a fer un programa a C a Ubuntu cal descarregar el paquet build-essential, encara que generalment està a totes les distribucions de Linux per defecte (Figura 73).

```
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~$ sudo apt-get install build-essential
[sudo] password for ivan:
Leyendo lista de paquetes... Hecho
Creando árbol de dependencias
Leyendo la información de estado... Hecho
build-essential ya está en su versión más reciente (12.1ubuntu2).
Los paquetes indicados a continuación se instalaron de forma automática y ya no
son necesarios.
 libllvm4.0 libllvm5.0
Utilice «sudo apt autoremove» para eliminarlos.
0 actualizados, 0 nuevos se instalarán, 0 para eliminar y 6 no actualizados.
ivan@ivan-HP-Pavilion-g6-Notebook-PC:~$
```

Figura 73. Instal·lació a Ubuntu de buil-essential. Font: Pròpia

En aquest cas com es pot comprovar a la Figura 73 ja estava instal·lat. Per a crear un programa de C obrim un document buit fent clic dret a algun directori, escrivim el codi en C i nomenem el fitxer amb extensió '.c'

Per a executar el programa, cal, amb la consola, anar al directori del fitxer i compilar el programa usant el comandament:

```
gcc programa.c
```

Seguidament, per a executar el fitxer usem el comandament:

```
./programa.c
```

El resultat es mostrarà a la consola. Copiem i peguem per a obtenir aquest format al apartat [atòms] del script .top sobre el que estem treballant. Finalment el resultat es pot observar a la Figura 74.

```
[ atoms ]
; nr type resnr residue atom cgnr charge mass typeB chargeB
  1 OS 1 SLM O1 1 -0.34 15.9994 ; qtot -0.34
  2 C_2 1 SLM C2 1 0.52 12.011 ; qtot 0.18
  3 CT 1 SLM C3 1 0.22 12.011 ; qtot 0.40
  4 O_2 1 SLM O4 1 -0.43 15.9994 ; qtot -0.03
  5 HC 1 SLM H5 1 0.03 1.008 ; qtot 0
  6 CT 1 SLM C6 2 -0.18 12.011 ; qtot -0.18
  7 HC 1 SLM H7 2 0.06 1.008 ; qtot -0.12
  8 HC 1 SLM H8 2 0.06 1.008 ; qtot -0.06
  9 HC 1 SLM H9 2 0.06 1.008 ; qtot 0
 10 OS 1 SLM O1 3 -0.34 15.9994 ; qtot -0.34
 11 C_2 1 SLM C2 3 0.52 12.011 ; qtot 0.18
 12 CT 1 SLM C3 3 0.22 12.011 ; qtot 0.40
 13 O_2 1 SLM O4 3 -0.43 15.9994 ; qtot -0.03
 14 HC 1 SLM H5 3 0.03 1.008 ; qtot 0
 15 CT 1 SLM C6 4 -0.18 12.011 ; qtot -0.18
 16 HC 1 SLM H7 4 0.06 1.008 ; qtot -0.12
 17 HC 1 SLM H8 4 0.06 1.008 ; qtot -0.06
 18 HC 1 SLM H9 4 0.06 1.008 ; qtot 0
 19 OS 1 SLM O1 5 -0.34 15.9994 ; qtot -0.34
```

Figura 74. Script modificat .top apartat [atoms]. Font: Pròpia

El programa implementat en C es pot observar a la Figura 75.

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>

int main()
{
  int i, a1, a2, a3, a4, a5, a6, a7, a8, a9, j, b1, b2, y=1;
  for (i=0; i<446; i++)
  {
    a1=(i+1);
    a2=(i+2);
    a3=(i+3);
    a4=(i+4);
    a5=(i+5);
    a6=(i+6);
    a7=(i+7);
    a8=(i+8);
    a9=(i+9);

    b1=(y);
    b2=(y+1);
    y=b2;
    y++;

    printf(" %d OS 1 SLM O1 %d -0.34 15.9994 ; qtot -0.34 \n", a1, b1); //1
    printf(" %d C_2 1 SLM C2 %d 0.52 12.011 ; qtot 0.18 \n", a2, b1); //2
    printf(" %d CT 1 SLM C3 %d 0.22 12.011 ; qtot 0.40 \n", a3, b1); //3
    printf(" %d O_2 1 SLM O4 %d -0.43 15.9994 ; qtot -0.03 \n", a4, b1); //4
    printf(" %d HC 1 SLM H5 %d 0.03 1.008 ; qtot 0 \n", a5, b1); //5
    printf(" %d CT 1 SLM C6 %d -0.18 12.011 ; qtot -0.18 \n", a6, b2); //6
    printf(" %d HC 1 SLM H7 %d 0.06 1.008 ; qtot -0.12 \n", a7, b2); //7
    printf(" %d HC 1 SLM H8 %d 0.06 1.008 ; qtot -0.06 \n", a8, b2); //8
    printf(" %d HC 1 SLM H9 %d 0.06 1.008 ; qtot 0 \n", a9, b2); //9

    i=a8;
  }
  return 0;
}
```

Figura 75. Programa en C per a modificar 450 línies de codi de forma automàtica. Font: Pròpia

El error queda solucionat i al executar de nou, trobem el que següent error (Figura 76) el dona als [dihedrals], és a dir als potencials de torsió. La topologia de la que disposem es pot veure a la Figura 77 que es repeteix periòdicament.

```
Warning: unknown mode cmaptypes
I don't know what funct=8 means in DIHEDRALS
```

Figura 76. Error dihedrals. Font: Pròpia

```
[ dihedrals ]
; ai aj ak al funct c0 c1 c2 c3
c4
 1 2 3 10 3
 1 2 3 5 3
 1 2 3 6 3
 4 2 3 5 3
 4 2 3 6 3
 4 2 3 10 3
 2 3 6 7 3
 2 3 6 8 3
 2 3 6 9 3
 5 3 6 7 3
 5 3 6 8 3
 5 3 6 9 3
10 3 6 7 3
10 3 6 8 3
10 3 6 9 3
 2 3 10 11 3
 5 3 10 11 3
 6 3 10 11 3
 3 10 11 12 8 1 1 ; Tabulated potential, from table_d1.xvg
~ ~ ~ ~ ~
```

Figura 77. Script original .top apartat [dihedrals]. Font: Pròpia

Segons el codi font de NAMD no hi hauria d'haver cap problema excepte per als potencials tabulats. Per tal d'avançar amb el projecte es decideix canviar el 8 per un 3 per a que funcionen com un potencial normal en comptes de tabulat i es soluciona aquest error. Paral·lelament s'està explorant la possibilitat d'obtenir la funció matemàtica per a definir aquest potencials i afinar la simulació amb diversos mètodes matemàtics.

El següent error el dona als potencials impropis per als que el fitxer de conversió no te suport (Figura 78).

```
[ dihedrals ]
; ai aj ak al funct c0 c1 c2 c3
 1 3 2 4 1 improper_0_C_X_Y
10 12 11 13 1 improper_0_C_X_Y
19 21 20 22 1 improper_0_C_X_Y
28 30 29 31 1 improper_0_C_X_Y
37 39 38 40 1 improper_0_C_X_Y
46 48 47 49 1 improper_0_C_X_Y
55 57 56 58 1 improper_0_C_X_Y
64 66 65 67 1 improper_0_C_X_Y
73 75 74 76 1 improper_0_C_X_Y
82 84 83 85 1 improper_0_C_X_Y
~ ~ ~ ~ ~
```

Figura 78. Script original .top apartat [dihedrals]. Font: Pròpia

NAMD no te suport per a aquests tipus de potencials. De moment els esborrem per complet i veurem com afecten a la simulació.

Aquest és l'últim error de sintaxis que hem trobat.

5.15 Errors d'estabilitat

Una volta solucionats els errors de sintaxis executem la simulació i trobem el error que es veu a la Figura 79:

```

ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 1032!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 987!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Exiting prematurely; see error messages above.
=====
WallClock: 0.172016  CPUTime: 0.134204  Memory: 583.492188 MB
[Partition 0][Node 0] End of program

```

Figura 79. Error inestabilitat del sistema 1. Font: Pròpia

Els àtoms ixen fora del espai de la simulació i fan que el sistema siga inestable. Cal veure si la energia convergís, si no ho fa, cal minimitzar el sistema. Açò es fa amb VMD dins del menú Extensions, anàlisis, NAMD Plot (Figura 80). Ens demana un fitxer .log que no tenim.

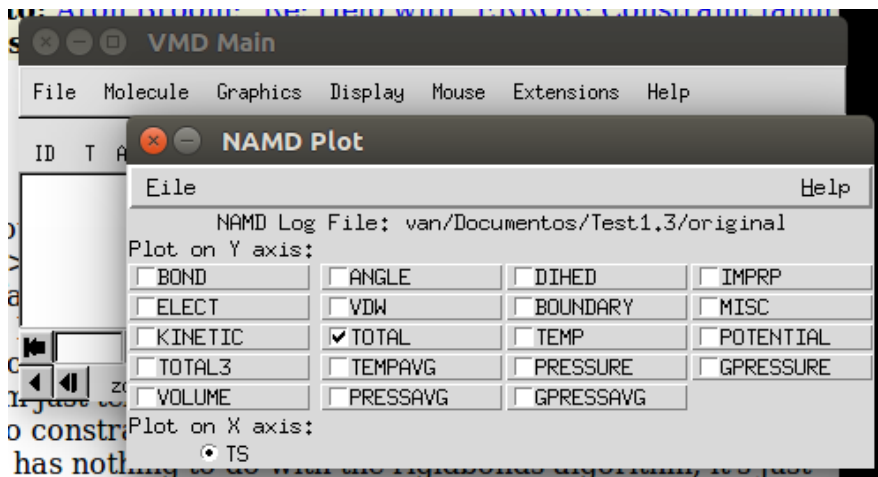


Figura 80. VMD NAMD Plot Energies. Font: Pròpia

El fitxer .log és un dels fitxer d'eixida després d'executar una simulació amb NAMD. Per tant intentem millor el script de configuració.

```
langevinHydrogen    on    ;# don't couple langevin bath to hydrogens  
}
```

Figura 81. Detall del script de configuració de NAMD. Font: Pròpia

Posem el mostrat a la Figura 81 a off per a fer menys complexa la simulació i aconseguim que els àtoms que eren inestables canvien, però continuem tenint àtoms inestables i la simulació s'atura.

Usem el comandament al script de NAMD segons el manual:

```
temperature $temperature
```

que inicialitza les velocitats dels àtoms segons la temperatura que establím.

Obtenim aquest error (Figura 82):

```
error working in the current directory /home/evan/documents/relax13  
TCL: Suspending until startup complete.  
ERROR: Could not translate from units 'A' to 'K' for option 'temperature'  
Warning: The following variables were set in the  
Warning: configuration file but will be ignored:  
Warning:    paraTypeCharmm (parameters)  
FATAL ERROR: ERROR(S) IN THE CONFIGURATION FILE  
----- Processor 0 Exiting: Called CmiAbort -----  
Reason: FATAL ERROR: ERROR(S) IN THE CONFIGURATION FILE
```

Figura 82. Error en la temperatura. Font: Pròpia

A la Figura 83 podem veure que per algun cas hi ha una 'a' darrera de la temperatura, que s'ha establert a 200K en comptes de 800K per a veure si amb menys velocitat els àtoms no són tan inestables. Esborrem la a i per defecte, ens agafa el valor en graus Kelvin.

```
#####
## ADJUSTABLE PARAMETERS ##
#####
gromacs on

grotopfile 32x50LA_crystal.top

grocoorfile 32x50LA_crystal.gro

set temperature 200a|
set outputname final_heat
```

Figura 83. Causa del error de temperatura. Font: Pròpia

Després de tornar a executar la simulació es troba el error de la Figura 84:

```
REASSIGNING VELOCITIES AT STEP 0 TO 200 KELVIN.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 1329!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 3129!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 6729!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
```

Figura 84. Error inestabilitat del sistema 1. Font: Pròpia

Afegim aleshores una part del codi (Figura 85) per a que treballi més temps durant la minimització.

```
minimize          1000000      ;# lower potential energy for 1000 steps
reinitvels        $temperature ;# since minimization zeros velocities
run 5000000
```

Figura 85. Script de NAMD, apartat de minimització. Font: Pròpia

Genera un nou error que no s'entén perquè la temperatura sí que queda definida, veure Figura 86.

```
FATAL ERROR: Must have either an initial temperature or a velocity file
----- Processor 0 Exiting: Called CmiAbort -----
```

Figura 86. Error falta fitxer de velocitats o temperatura. Font: Pròpia

Com no s'entén el error ens dirigim al servici tècnic. La solució que ens donen es canviar de lloc, al script de configuració, la temperatura. Es prova i seguim obtenint errors (Figura 87).

```
FATAL ERROR: can't read "outputname": no such variable
  while executing
  "outputName      $outputname"
  (file "original13.namd" line 114)
----- Processor 0 Exiting: Called CmiAbort -----
Reason: FATAL ERROR: can't read "outputname": no such variable
  while executing
  "outputName      $outputname"
  (file "original13.namd" line 114)
```

Figura 87. Error outputname. Font: Pròpia

Aquest error es soluciona esborrant del script outputname. Aleshores executem la simulació i obtenim la eixida per la consola (Figura 88).

```
LINE MINIMIZER BRACKET: DX 2.51886e-06 2.51886e-06 DU -8960.79 494.736 DUDX -6.6
5468e+09 -1.66768e+09 2.13448e+09
Warning: Bad global bond count! (14391 vs 14400)
Warning: Bad global angle count! (25560 vs 25600)
Warning: Bad global dihedral count! (31888 vs 32000)
Warning: Low global exclusion count! (71334 vs 72000)
Warning: This warning is not unusual during minimization.
Warning: Increasing pairlistdist or cutoff may avoid this.
PRESSURE: 10000 3.53751e+08 806173 -257543 806173 3.45188e+08 -241365 -257543 -2
41365 3.56532e+08
GPRESSURE: 10000 3.53779e+08 792335 -259480 799930 3.45225e+08 -244422 -289323 -
249337 3.56542e+08
TIMING: 10000 CPU: 314.506, 0.0301848/step Wall: 343.122, 0.0333831/step, 0 ho
urs remaining, 587.402344 MB of memory in use.
ETITLE:      TS          BOND          ANGLE          DIHED          IMPRP
            ELECT      VDW          BOUNDARY      MISC          KINETIC
            TOTAL      TEMP          POTENTIAL      TOTAL3        TEMPAVG
            PRESSURE    GPRESSURE     VOLUME        PRESSAVG      GPRESSAVG
ENERGY:  10000  38279448.5010  1396659.7697  -8088.8392  0.0000
          -5763.2162 351998494.7384  0.0000  0.0000  0.0000
          391660750.9537  0.0000 391660750.9537 391660750.9537  0.0000
          351823485.0086 351848573.8666  273431.5520 351823485.0086 351848573.8666

WRITING COORDINATES TO DCD FILE test.dcd AT STEP 10000
REINITIALIZING VELOCITIES AT STEP 10000 TO 300 KELVIN.
TCL: Running for 50000 steps
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 798!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 8232!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 1905!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 5487!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 375!
```

Figura 88. Errors global count. Font: Pròpia

Continuem amb el problema de inestabilitat. A pesar que diu que durant la minimització aquests errors de còmput globals són freqüents, intentem solucionar-los per a veure si tenen relació amb la inestabilitat del sistema.

Preguntem al suport tècnic de NAMD i ens porta a la secció de preguntes i respostes freqüents sobre perquè no funcionen les simulacions. Per recomanació del manual canviem els paràmetres de pairlistdist i cutoff (Figura 89) que tenen relació amb els àngstroms de distància que permet moure's l'àtom.

```

switching          on
switchdist        20 # at 8Å we start to smooth electrostatic to 0
cutoff            24.0
pairlistdist      26.0
margin            10

# Integrator Parameters
timestep          1.0 ;# 1fs/step
rigidBonds        all ;# needed for 2fs steps
nonbondedFreq     1
vdwGeometricSigma yes
fullElectFrequency 2
stepspercycle     20
pairlistsperCycle 2

outputEnergies    100
outputPressure    100
binaryoutput      yes|
outputname        test
dcdfreq          200

temperature       $temperature

wrapAll           on

langevin          on ;# do langevin dynamics
langevinDamping   2 ;# damping coefficient (gamma) of 1/ps
langevinTemp      $temperature
langevinHydrogen  no ;# don't couple langevin bath to hydrogens

```

Figura 89. Part del fitxer de minimització NAMD. Font: Pròpia

Finalment, millorem respecte als errors anteriors:

Només apareix un avís “Low global exclusion count !” com es pot veure a la Figura 90. Però continuem tenint problemes amb els àtoms, que fan la simulació inestable. Segons el error que dona, no pot designar velocitats als àtoms.

Implementació del Projecte

```
Warning: Low global exclusion count! (71520 vs 72000)
Warning: This warning is not unusual during minimization.
Warning: Increasing pairlistdist or cutoff may avoid this.
PRESSURE: 10000 3.54834e+08 1.16393e+06 211796 1.16393e+06 3.42177e+08 -62378.5
211796 -62378.5 3.52535e+08
GPRESSURE: 10000 3.54947e+08 1.10714e+06 230518 1.13902e+06 3.4221e+08 -61101.8
222620 -71338.8 3.52522e+08
TIMING: 10000 CPU: 1794.98, 0.153553/step Wall: 1892.42, 0.160566/step, 0 hour
s remaining, 603.410156 MB of memory in use.
ETITLE: TS BOND ANGLE DIHED IMPRP
ELECT VDW BOUNDARY MISC KINETIC
TOTAL TEMP POTENTIAL TOTAL3 TEMPAVG
PRESSURE GPRESSURE VOLUME PRESSAVG GPRESSAVG
ENERGY: 10000 43935056.8720 1397113.9695 -7969.4054 0.0000
-8639.0083 350985047.8934 0.0000 0.0000 0.0000
396300610.3213 0.0000 396300610.3213 396300610.3213 0.0000
349848756.3675 349893011.0905 273431.5520 349848756.3675 349893011.0905

WRITING COORDINATES TO DCD FILE test.dcd AT STEP 10000
REINITIALIZING VELOCITIES AT STEP 10000 TO 300 KELVIN.
TCL: Running for 50000 steps
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 375!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 3939!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 3768!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 159!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Exiting prematurely; see error messages above.
=====
```

Figura 90. Solucionats alguns global count warning. Però error en velocitats. Font: Pròpia

Incrementem els temps per si de cas li cal més temps de càlcul a la macromolècula (Figura 91).

```
minimize          50000
reinitvels       $temperature
run 100000
```

Figura 91. Detall de la part del script que s'ha de canviar. Font: Pròpia

Canviem de 10000 a 50000 i de 50000 a 100000 però el error persisteix. Finalment esborrem la línia de codi 'reinitvels \$temperature' del script de configuració que pareix que està donant molts problemes i la simulació es posa en marxa per primera volta (Figura 92). A més a la Figura 92 es pot veure com els 8 nuclis del processador s'han posat en marxa per a portar a cap la tasca.

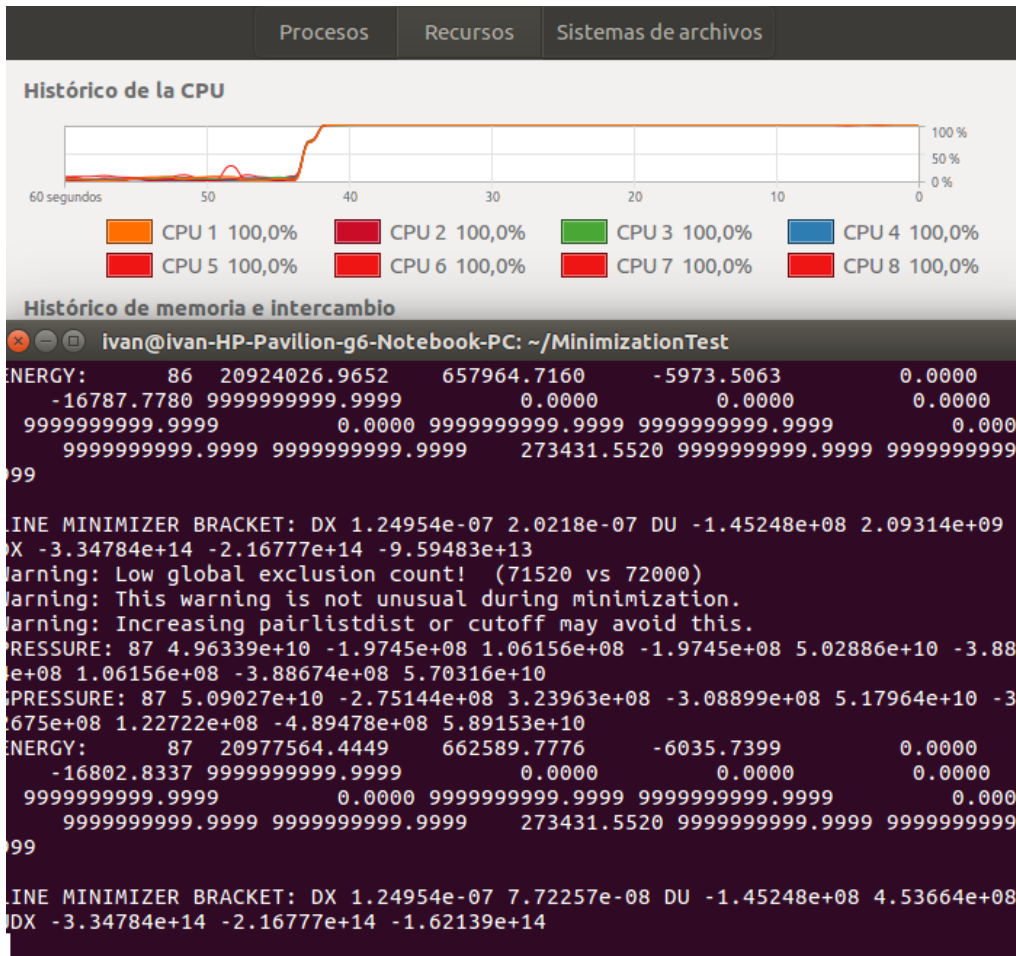


Figura 92. Simulació en marxa. Amb detall del rendiment del processador. Font: Pròpia

El resultat és que és inestable, per tant, es pensa que el script que hem obtingut al tutorial està malament o no serveix per al nostre cas. Encara que ha sigut útil per a solucionar els errors sintàctics que hem resolt anteriorment. Fem un nou script de minimització.

Recorrem a un tutorial de ARCHER.AC.UK que és un servei de supercomputació situat a UK i disposa de tutorials per a NAMD. Primerament, amb el tutorial no s'obtenen bons resultats perquè està pensat per a proteïnes dissoltes en aigua, però ens dona nova informació com per exemple que finalitzada la minimització, NAMD haurà generat 5 fitxers `.log` que conté la informació de les energies i temperatures del sistema per a cada instant de temps i que és necessari per a representar els resultats a VMD com hem vist anteriorment per a veure si convergien les energies i determinar si la minimització està completada o no, el fitxer `.xsc` que conté l'espai de la molècula el fitxer `.vel` amb les velocitats i el fitxer `.coor` amb les posicions dels àtoms en cada instant de temps i el fitxer `.dcd` que està escrit en binari i la informació que conté no és rellevant per a visualitzar resultats.

Finalment amb l'ajuda del tutor que ha recomanat incrementar la diferència entre els paràmetres *pairlistdist* i *cutoff* (Figura 93) i reassignar els valors dels àtoms cada poc temps per a evitar col·lisions d'una energia desmesurada. També ha recomanat canviar el valor del paràmetre de *switchdist* que donada una distància comença a tindre un cost computacional realment elevat. A més s'ha incrementat el valor de *cellbasisvector* per recomanació del manual, el rang en el que es fa la simulació i els àtoms es desplacen serà ara més gran que anteriorment. L'òptim seria calcular la grandària de la molècula així com trobar el centre per a canviar *CellOrigin* de moment aquests últims paràmetres queden pendents per a afinar la simulació si no obtenim un resultat adequat. Per un altre costat s'ha llevat *reinitvels* i *reassignFreq*.

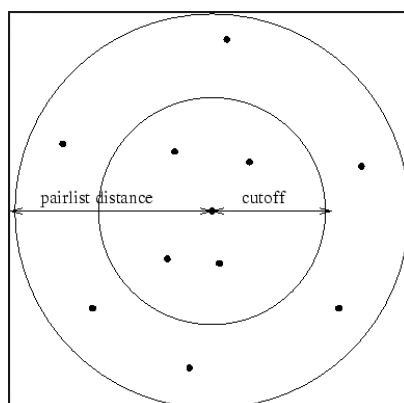


Figura 93. Paràmetres *pairlistdistance* i *cutoff* representats gràficament Font: Manual de NAMD

Amb els canvis detallats s'ha aconseguit que la minimització no pare (Figura 94) i que NAMD creí els fitxers d'eixida (Figura 95). La temperatura que s'ha usat es 600K.

```

WRITING COORDINATES TO DCD FILE test.dcd AT STEP 50960
PRESSURE: 51000 -nan -nan -nan -nan -nan -nan -nan -nan -nan
GPRESSURE: 51000 -nan -nan -nan -nan -nan -nan -nan -nan -nan
PRESSAVG: 51000 -nan -nan -nan -nan -nan -nan -nan -nan -nan
GPRESSAVG: 51000 -nan -nan -nan -nan -nan -nan -nan -nan -nan
TIMING: 51000 CPU: 415.839, 0.00928974/step Wall: 430.592, 0.0095906/step, 0 h
ours remaining, 598.589844 MB of memory in use.
ETITLE:      TS      BOND      ANGLE      DIHED      IMPRP
            ELECT    VDW      BOUNDARY   MISC      KINETIC
            TOTAL    TEMP     POTENTIAL  TOTAL3    TEMPAVG
            PRESSURE  GPRESSURE  VOLUME    PRESSAVG  GPRESSAVG

ENERGY:      51000      -nan      -nan      nan      0.0000
            0.0000      0.0000      0.0000      0.0000      -nan
            -nan      -nan      -nan      nan      -nan
            -nan      -nan      -nan      -nan      -nan

WRITING EXTENDED SYSTEM TO OUTPUT FILE AT STEP 51000
WRITING COORDINATES TO OUTPUT FILE AT STEP 51000
CLOSING COORDINATE DCD FILE test.dcd
WRITING VELOCITIES TO OUTPUT FILE AT STEP 51000
The last velocity output (seq=-2) takes 0.002 seconds, 598.590 MB of memory in use
=====

```

Figura 94. Consola de Linux durant la minimització. Font: Pròpia

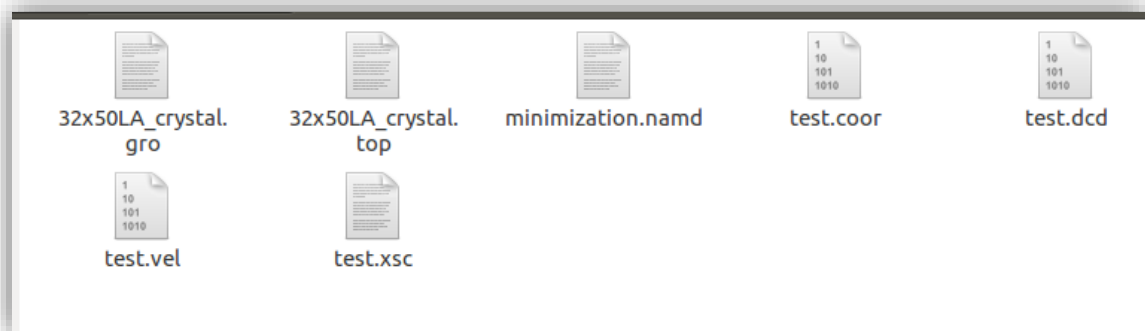


Figura 95. Fitxers d'eixida de NAMD, falta el .log. Font: Pròpia

No ens ha eixit el fitxer .log que es l'output on estan totes les energies. Afegim la línia de codi: `outputtiming` segons el manual serveix per a determinar el període segons els passos d'integració que s'escriu la informació de la eixida al fitxer .log

Tornem a simular i no es soluciona. Continuem sense obtenir el fitxer .log a més quan apareix '-nan' vol dir que no s'estan escrivint valors per a eixes configuracions i els fitxers que hem obtés son nuls (Figura 96). Cal solucionar-ho.

```

# NAMD extended system configuration output file
#$LABELS step a_x a_y a_z b_x b_y b_z c_x c_y c_z o_x o_y o_z s_x s_y s_z
s_u s_v s_w
51000 -nan -nan -nan -nan -nan -nan -nan -nan -nan 25 25 47 -nan -nan -nan
-nan -nan -nan|

```

Figura 96. Detall de fitxer generat nul. Font: Pròpia

Implementació del Projecte

Després de moltes proves i errors donat que els tutorials son incomplets, incorrectes o no funcionen per al nostre cas, amb el manual de NAMD i les preguntes resoltes de la llista de correu, hem arribat al script de minimització que soluciona tots els problemes trobats fins ara i que ens permet obtenir per primera volta el equilibri del sistema a 600K.

Al següent apartat queda comentat i exposat el script de configuració usat. No s'ha mostrat cap script de configuració abans perquè com hem vist eren incorrectes.

5.16 Script de minimització

```
#####
## Minimització SCRIPT , Josep Ivan Balaguer ##
#####

gromacs on #usar camp de forces de gromacs
grotopfile 32x50LA_crystal.top
grocoorfile 32x50LA_crystal.gro

paraTypeCharmm on #es redundant, però no genera cap error. El deixem per
exclude scaled1-4 #si de cas, però no estem usant CHARMM.
1-4scaling 0.5

switching on #calcula potencial electroestàtic. Trunca el potencial
switchdist 8 #electroestàtic a una distància de 8 per a baixar el cost
#computacional

cutoff 12.0
pairlistdist 26.0
margin 4

# Paràmetres d'integració
timestep 1.0 # 1fs/step
rigidBonds all # needed for 2fs steps
nonbondedFreq 1
vdwGeometricSigma yes
fullElectFrequency 2
stepspercycle 20
pairlistsperCycle 2

outputEnergies 100 #cada quants passos d'integració de temps avalua
outputtiming 100 #la energia. Cada quant de temps s'escriu al fitxer.
outputPressure 100
binaryoutput yes
outputname testD1 #Nom dels fitxers d'eixida.
dcdfreq 100 #freqüència a la que s'escriu el arxiu .dcd

temperature 0 #temperatura inicial a la qual es distribueixen aleatòriament
#velocitats als àtoms

reassignFreq 1000 #Cada quant de temps s'incrementa la temperatura
dreassignIncr 10 # en passos d'integració. Increment de temperatura.
reassignHold 600 #Temperatura final 600K.

wrapAll on
langevin on # do langevin dynamics
langevinDamping 2 # damping coefficient (gamma) of 1/ps
langevinTemp 600 #temperatura final
langevinHydrogen no # don't couple langevin bath to hydrogens

useGroupPressure yes #necessari per enllaços rígids
```

Implementació del Projecte

```
useFlexibleCell    no
useConstantArea   no

langevinPiston    on
langevinPistonTarget 1.01325 # in bar -> 1 atm
langevinPistonPeriod 200
langevinPistonDecay 100
langevinPistonTemp 600      #temperatura final
```

#Espai dins el qual es mou la molècula convindria tindre clar la grandària i el centre:

```
cellBasisVector1  100  0.0  0.0
cellBasisVector2  0.0  100  0.0
cellBasisVector3  0.0   0  150.90
cellOrigin        25.0  25.0  47.0
```

```
minimize 10000      # potencial d'energia més baix per a 10000 pasos
                    #d'integració
run       50000     # nombre total de passos d'integració
```

5.17 Obtenció i visualització del arxiu .log

Amb aquest script aconseguim obtenir els 4 fitxers que s'han mostrat a la Figura 95 plens d'informació vàlida però seguim sense tenir el fitxer .log. Ens posem en contacte amb el suport i ens expliquen que el fitxer .log es el que ix per la consola durant la simulació i que cal redireccionar manualment aquesta eixida a un fitxer de text (Figura 97) usant el següent comandament quan executem NAMD a la consola:

```
namd2 +p8 configfile.namd > logfile.log
```

```
WRITING COORDINATES TO DCD FILE testD1.dcd AT STEP 59900
REASSIGNING VELOCITIES AT STEP 60000 TO 600 KELVIN.
PRESSURE: 60000 46.0904 5.68351 -18.4116 5.68351 97.7168 96.9964 -18.4116
96.9964 -302.28
GPRESSURE: 60000 56.3034 26.1439 -17.1154 -31.6277 62.166 62.6063 -24.4193
103.04 -270.025
PRESSAVG: 60000 22.8252 7.11149 15.4207 7.11149 47.1102 -0.7211 15.4207
-0.7211 -88.467
GPRESSAVG: 60000 21.9636 7.84237 15.5875 6.17144 47.4558 -1.16046 14.5449
-0.166289 -88.0763
TIMING: 60000 CPU: 816.363, 0.00983002/step Wall: 901.831, 0.00994032/
step, 0 hours remaining, 591.687500 MB of memory in use.
ETITLE:      TS      BOND      ANGLE      DIHED
IMPRP
MISC      KINETIC      ELECT      VDW      BOUNDARY
POTENTIAL      TOTAL3      TEMPAVG      TEMP
GPRESSURE      VOLUME      PRESSAVG      GPRESSAVG
ENERGY:  60000  3860446.7257  381392.7234  -9507.4775
0.0000  -889.0885  1523570.3530  0.0000
0.0000  22205.6194  5777218.8555  607.3030  5755013.2361
5777684.7475  595.2467  -52.8242  -50.5185
4999684.4617  -6.1772  -6.2190

WRITING COORDINATES TO DCD FILE testD1.dcd AT STEP 60000
WRITING EXTENDED SYSTEM TO OUTPUT FILE AT STEP 60000
WRITING COORDINATES TO OUTPUT FILE AT STEP 60000
CLOSING COORDINATE DCD FILE testD1.dcd
WRITING VELOCITIES TO OUTPUT FILE AT STEP 60000
The last velocity output (seq=-2) takes 0.002 seconds, 591.688 MB of
memory in use
=====
WallClock: 902.146545 CPUTime: 816.456421 Memory: 591.687500 MB
[Partition 0][Node 0] End of program
```

Figura 97. Detall del fitxer .log Font: Pròpia

A Linux amb el operador > estem redirigint i escrivint l'eixida que abans apareixia a la consola a un fitxer.

Amb el fitxer .log, ja podem visualitzar el resultat de la minimització a VMD (Figura 98) seguint el procediment que s'explica l'inici del apartat 5.15.

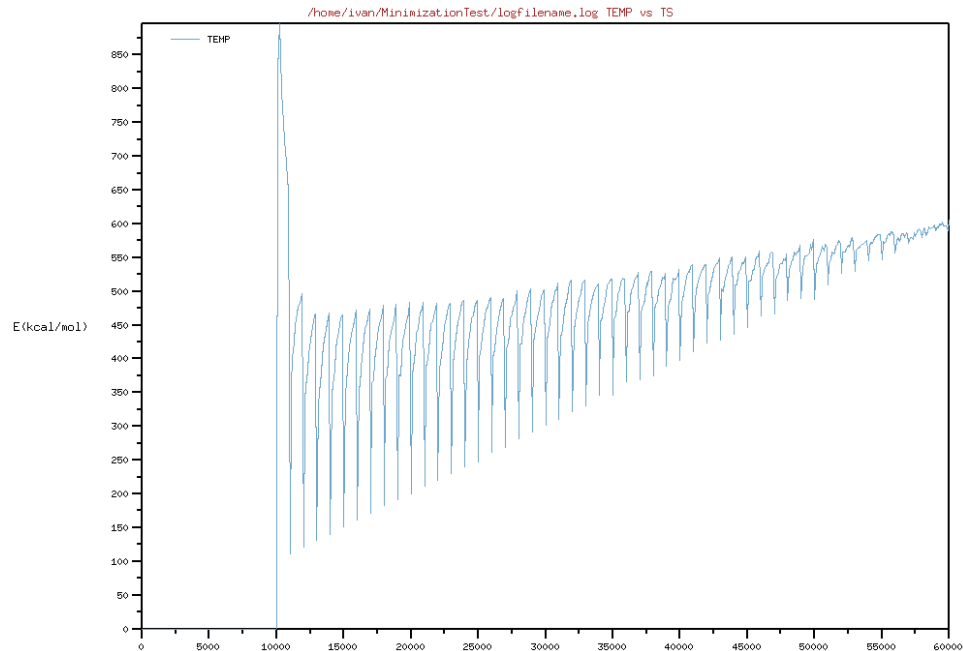


Figura 98. Minimització del sistema. Font: Pròpia

La temperatura inicial que havíem posat era de 0 graus Kelvin. Provem amb una temperatura inicial de 200 Kelvin i obtenim el resultat observat a la Figura 99.

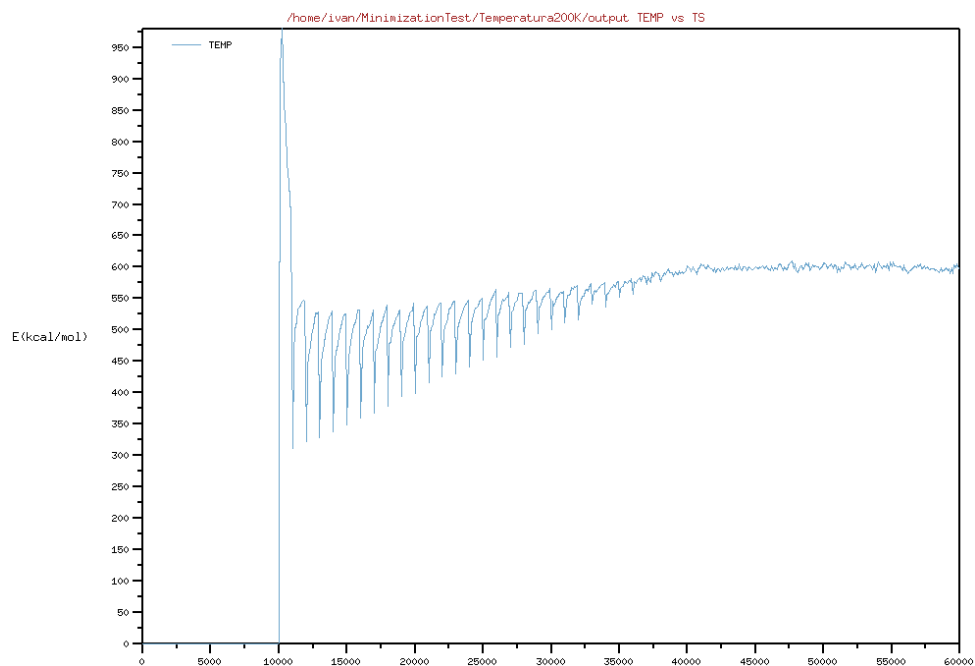


Figura 99. Minimització del sistema 200K. Font: Pròpia

5.18 Modificar la corba de temperatura

El model on la temperatura passa de 200 a 600 K arriba als 600 Kelvin abans i es manté estable a 600K més temps (Figura 99), per tant triem aquesta eixida per a continuar la simulació.

En el pròxim script de configuració, tractarem d'aconseguir una simulació isotèrmica per veure si el sistema es manté estable. Per a açò usarem les posicions i velocitats que ha generat NAMD a la minimització i que indiquen la posició dels àtoms de la macromolècula a la configuració final de la minimització.

```
#####
## ADJUSTABLE PARAMETERS                                ##
#####
gromacs on
grotopfile 32x50LA_crystal.top
grocoorfile 32x50LA_crystal.gro
bincoordinates testD1.coor      #coordinades de la anterior simulació

paraTypeCharmm on
exclude      scaled1-4
1-4scaling   0.5

switching    on
switchdist   8
cutoff       12.0
pairlistdist 26.0
margin       4

# Integrator Parameters

rigidBonds   all
nonbondedFreq 1
vdwGeometricSigma yes
fullElectFrequency 2
stepspercycle 20
pairlistperCycle 2
wrapAll      on
timestep     1.0

outputEnergies 100
outputtiming    100
outputPressure 100
binaryoutput   yes
outputname     testD2
dcdfreq        200
```

```

restartfreq 1000
restartname rest_TestD2

binvelocities testD1.vel          #velocitats de la anterior simulació

# Constant Temperature Control

langevin on ;# do langevin dynamics
langevinDamping 2 ;# damping coefficient (gamma) of 1/ps
langevinTemp 600
langevinHydrogen no # don't couple langevin bath to hydrogens

useGroupPressure yes # needed for rigidBonds
useFlexibleCell no
useConstantArea no

langevinPiston on
langevinPistonTarget 1.01325 ;# in bar -> 1 atm
langevinPistonPeriod 200
langevinPistonDecay 100
langevinPistonTemp 600

extendedSystem testD1.xsc

run 400000

```

Com es pot observar a la Figura 100, el sistema es manté estable a 600K a pesar d'aparèixer molt de soroll.

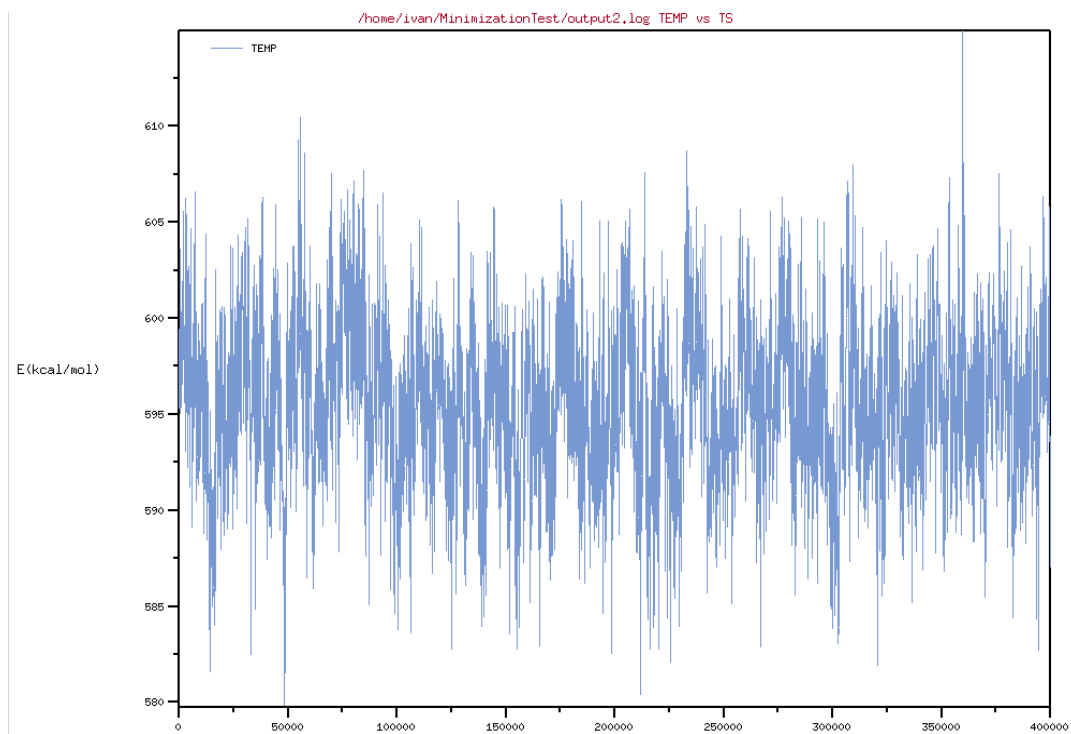


Figura 100. Simulació Isotèrmica. Font: Pròpia

Implementació del Projecte

Per a portar a cap el projecte cal baixar la temperatura del sistema a 300 Kelvin. Primerament, modifiquem la temperatura de langevinTemp (Figura 101):

```
langevinTemp      300|
langevinHydrogen  no   ;# don't couple langevin
useGroupPressure  yes ;# needed for rigidBonds
useFlexibleCell   no
useConstantArea   no

langevinPiston    on
langevinPistonTarget 1.01325 ;# in bar -> 1 atm
langevinPistonPeriod 200
langevinPistonDecay 100
langevinPistonTemp 300
```

Figura 101. Detall del codi refredament 1. Font: Pròpia

El resultat que obtenim es mostra a la Figura 102.

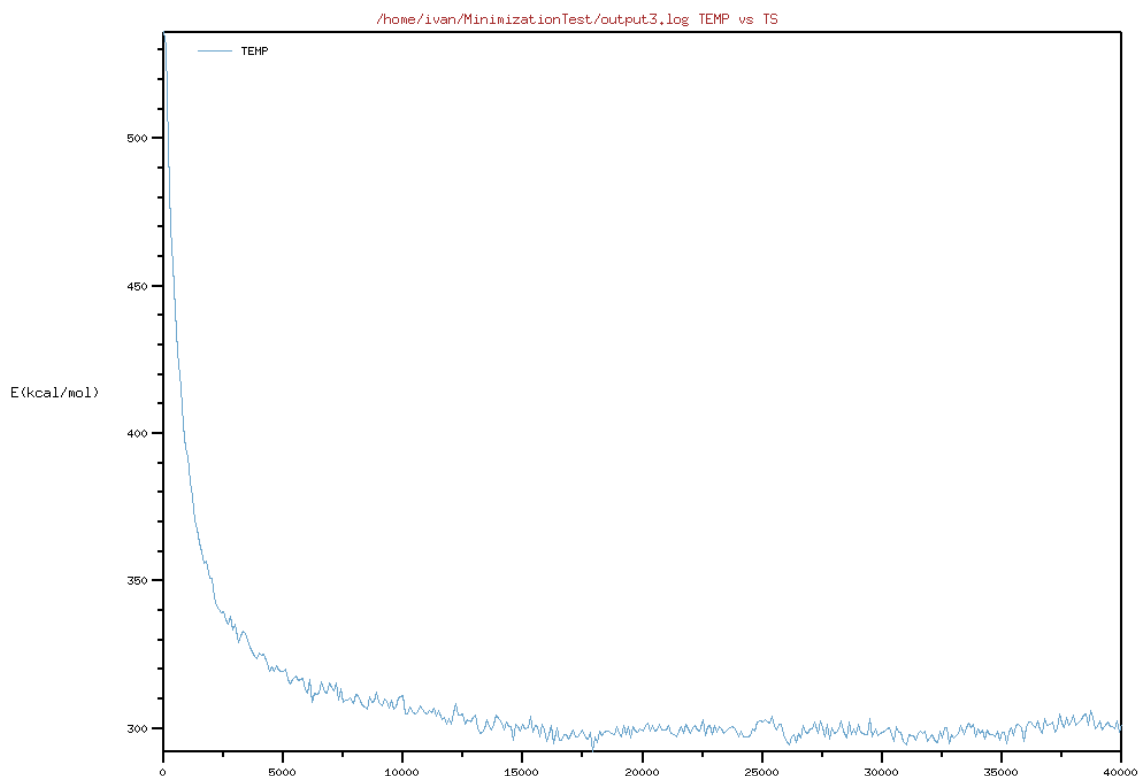


Figura 102. Resultat refredament 1. Font: Pròpia

Aquest resultat el problema que mostra és que la baixada de temperatura es produeix molt ràpidament. Al eix horitzontal es mostren els passos d'integració. Un pas d'integració equival a un femto segon de la experiència real. Com es pot veure a la Figura 102, la temperatura baixa 300 Kelvin en 15000 femto segons, tenint en compte que un femto segon son 10^{-15} segons, el resultat no seria relacionable a un experiment real. Cal trobar la forma de modificar la velocitat de refredament, es prova a canviar el període del pistó de Langevin a 5000 (Figura 103):

```

langevinTemp      300

langevinHydrogen  no    ;# don't couple langevin bath to hydrogens

useGroupPressure  yes ;# needed for rigidBonds
useFlexibleCell   no
useConstantArea   no

langevinPiston    on
langevinPistonTarget 1.01325 ;# in bar -> 1 atm
langevinPistonPeriod 5000|
langevinPistonDecay 100
langevinPistonTemp 300

extendedSystem testD2.xsc

```

Figura 103. Detall del codi refredament 2. Font: Pròpia

El resultat obtés es similar al resultat anterior (Figura 104):

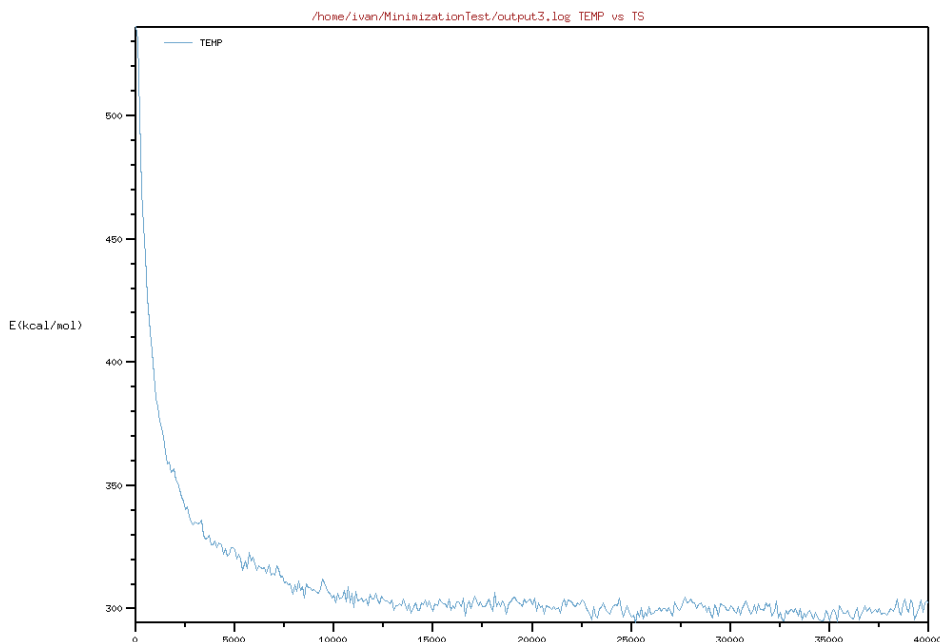


Figura 104. Resultat refredament 2. Font: Pròpia

Tractem aleshores de canviar el paràmetre *langevinPistonDecay* (Figura 105):

Implementació del Projecte

```
langevinTemp          300
langevinHydrogen      no    ;# don't couple langevin bath to hydrogens
useGroupPressure      yes ;# needed for rigidBonds
useFlexibleCell       no
useConstantArea       no

langevinPiston        on
langevinPistonTarget  1.01325 ;# in bar -> 1 atm
langevinPistonPeriod  200
langevinPistonDecay   1000
langevinPistonTemp    300
|
extendedSystem testD2.xsc
```

Figura 105. Detall del codi refredament 3. Font: Pròpia

El resultat es pot veure a la Figura 106, tampoc és satisfactori.

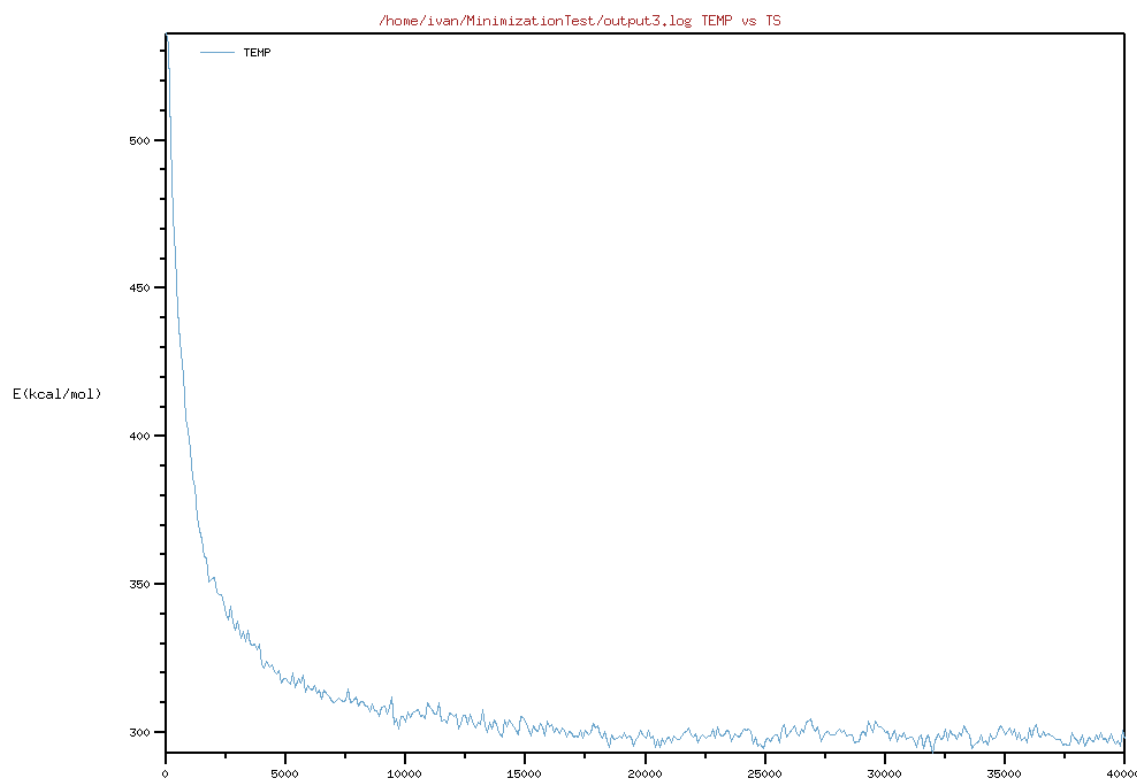


Figura 106. Resultat refredament 3. Font: Pròpia

Vist que aquest canvis no han fet que varie la velocitat de refredament, es modifiquen els dos valors tant del *period* com del *decay*. (Figura 107):

```

langevinPiston      on
langevinPistonTarget 1.01325 ;# in bar -> 1 atm
langevinPistonPeriod 20000
langevinPistonDecay 15000
langevinPistonTemp 300

```

Figura 107. Detall del codi refredament 4. Font: Pròpia

Amb aquest canvi obtenim menys soroll i la corba es suavitza, però la velocitat de refredament es modifica molt poc (Figura 108).

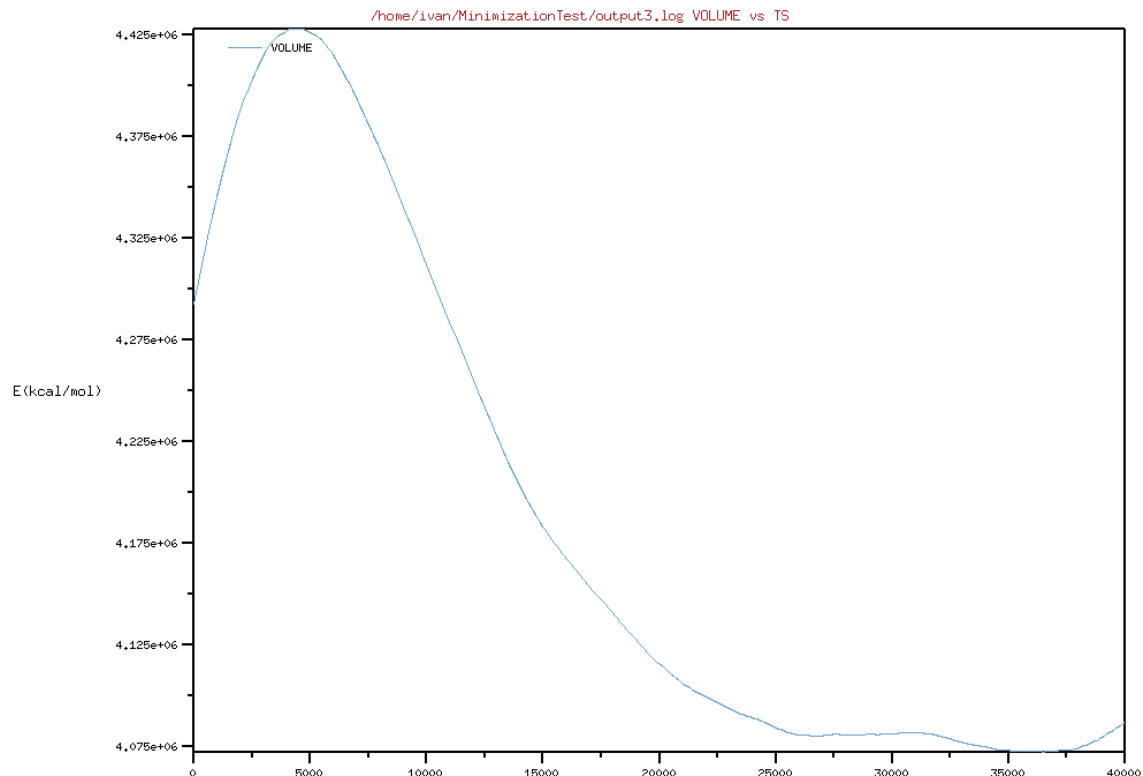


Figura 108. Resultat refredament 4. Font: Pròpia

A aquest punt, s'entén que només amb Langevin no es pot modificar la velocitat a la que es refreda el sistema, per tant, per recomanació del manual usarem algunes línies de codi Tcl per a tractar de baixar la temperatura de forma controlada. A la Figura 109 es mostren les línies de codi que s'han afegit. Es lleva també el control de temperatura de Langevin ja que el anem a fer nosaltres de forma manual. A la Figura 109 es pot comprovar que el codi ens crea un error d'inestabilitat.

Implementació del Projecte

```

ivan@ivan-HP-Pavillon-g6-Notebook-PC: ~/MinimizationTest
PRESSURE: 0 0 0 0 0 0 0 0
GPRESSURE: 0 0 0 0 0 0 0 0
ETITLE:      TS      BOND      ANGLE      DIHED
            ELECT  VDW      BOUNDARY  MISC
            TOTAL  TEMP     POTENTIAL  TOTAL3
ENERGY:      0 460657906.6919  381547.1869  -10186.7044
            -912.7383  1510557.1056  0.0000  0.0000
            -nan      -nan  462538911.5418  nan
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 1347!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 9897!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 12147!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 8997!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Exiting prematurely; see error messages above.
=====
Wallclock: 0.171745 CPUtime: 0.171874 Memory: 118.812500 MB
[Partition 0][Node 0] End of program
ivan@ivan-HP-Pavillon-g6-Notebook-PC:~/MinimizationTest$

# Constant Temperature Control
langevin          off      ;# do langevin dynamics
#langevinDamping  2        ;# damping coefficient (gamma) of 1/ps
#langevinTemp     300
#langevinHydrogen no      ;# don't couple langevin bath to hydrogens
#langevinPiston   on
#langevinPistonTarget 1.01325 ;# in bar -> 1 atm
#langevinPistonPeriod 10000
#langevinPistonDecay 15000
#langevinPistonTemp 300

binvelocities testD2.vel

run 300000

for { set TEMP 600 } { $TEMP >= 300 } { incr TEMP -10 } {
  reassignTemp $TEMP
  run 10
}
reassignFreq 40

```

Figura 109. Codi Tcl i error. Font: Pròpia

Es busquen alternatives i ens trobem amb els comandaments *rescaleFreq* i *rescaleTemp*. Per als valors de la Figura 110, tenim la eixida de la Figura 111. I per als de la Figura 112, la eixida de la Figura 113.

```

rescaleFreq 10
rescaleTemp 300

```

Figura 110. Codi valors rescale 1. Font: Pròpia

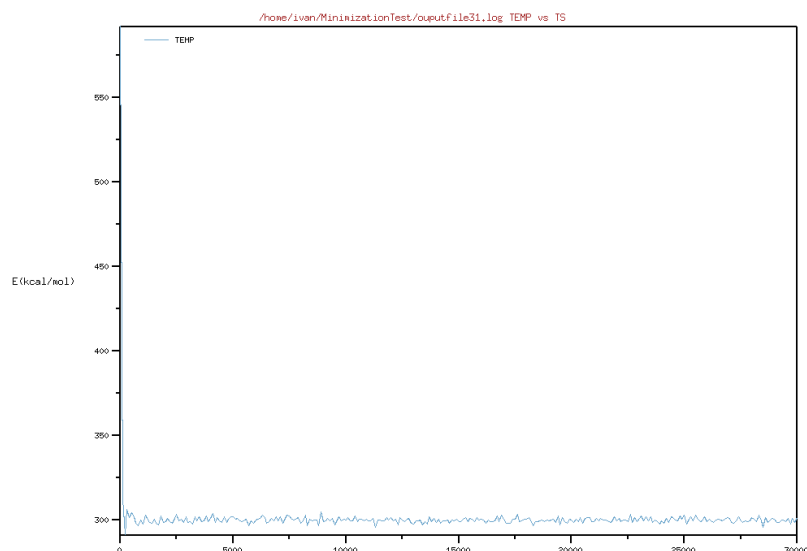


Figura 111. Resultat rescale 1. Font: Pròpia


```
rescaleFreq 10000|
rescaleTemp 300
```

Figura 112. Codi valors rescale 2. Font: Pròpia

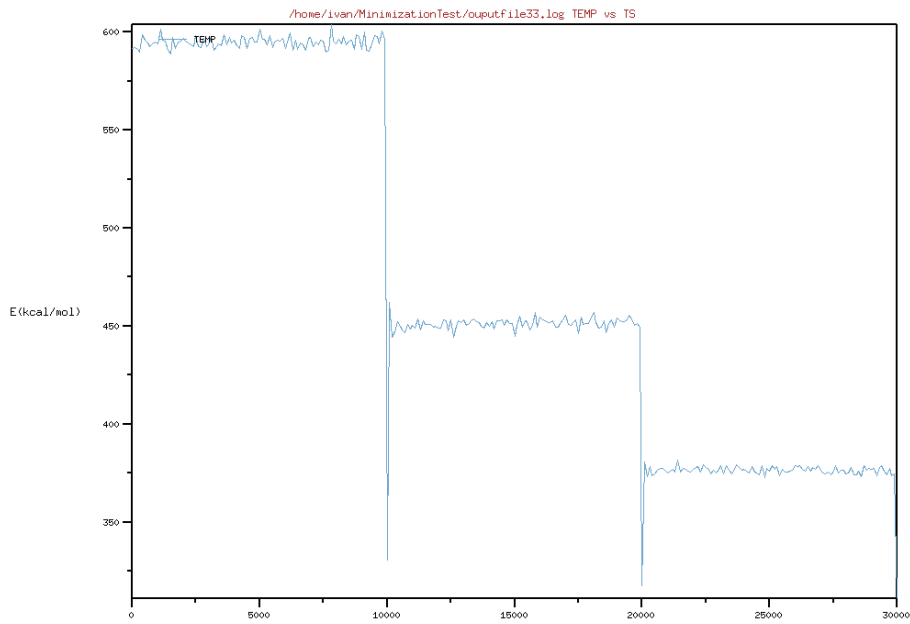


Figura 113. Resultat rescale 2. Font: Pròpia

Finalment, per a un valor de 25000, obtenim el resultat de la Figura 114:

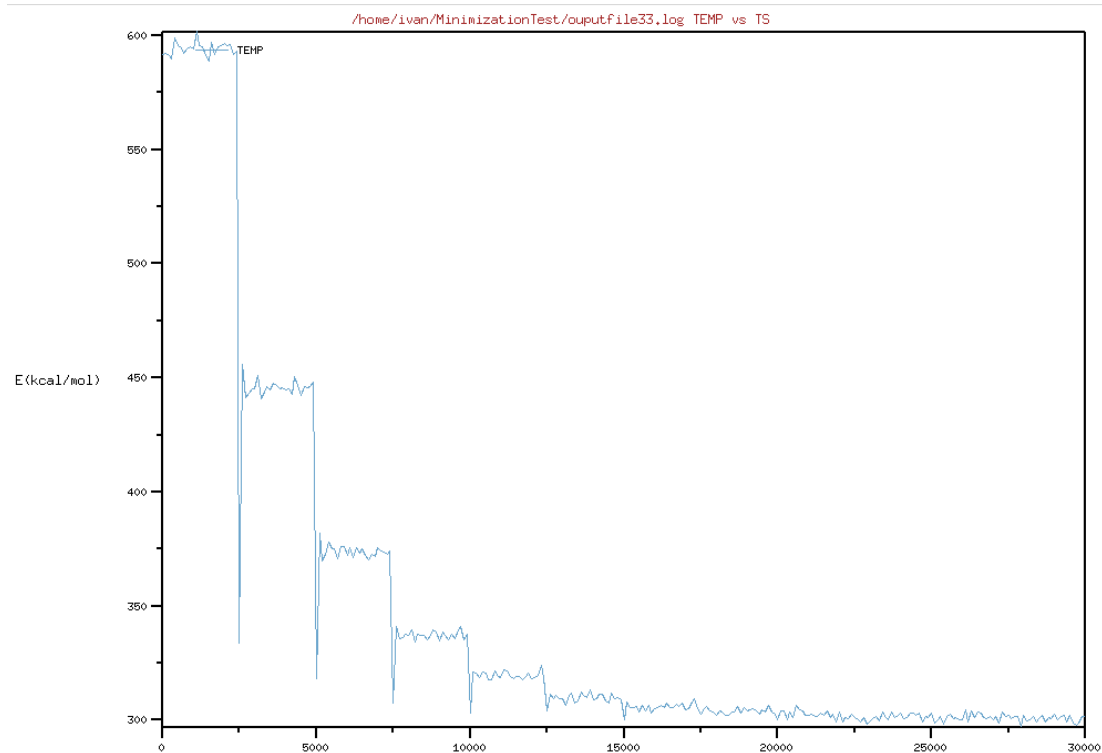


Figura 114. Resultat rescale 3. Font: Pròpia

Implementació del Projecte

Amb aquests resultats, tampoc s'està modificant la corba de refredament. El cas ideal seria trobar la forma de poder refredar el sistema d'una forma similar a una recta del tipus $y = -m * x + n$ per tal de poder controlar la velocitat a la que es refreda. Per tant, es decideix contactar de nou al servici tècnic i la resposta es que la forma correcta de fer-ho es usant el llenguatge Tcl, Figura 115, però obtenim el error de la Figura 116. A la Figura 117 es mostra la resposta del servici tècnic.

```
run 80
for { set TEMP 600 } { $TEMP >= 300 } { incr TEMP -10 } {
  reassignTemp $TEMP
  run 1
}
reassignFreq 100

# Constant Temperature Control

langevin          on      ;# do langevin dynamics
langevinDamping   1      ;# damping coefficient (gamma) of 1/ps
langevinTemp      $TEMP
langevinHydrogen  no     ;# don't couple langevin bath to hydrogens
langevinPiston    on
langevinPistonTarget 1.01325 ;# in bar -> 1 atm
langevinPistonPeriod 400
langevinPistonDecay 200
langevinPistonTemp $TEMP
```

Figura 115. Script Tcl. Font: Pròpia

```
FATAL ERROR: Bad global bond count! (14398 vs 14400)
FATAL ERROR: See http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/bugreport.html
----- Processor 0 Exiting: Called CmiAbort -----
Reason: FATAL ERROR: Bad global bond count! (14398 vs 14400)
FATAL ERROR: See http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/bugreport.html
```

Figura 116. Error usant Tcl. Font: Pròpia

I'm actually not sure why you would get a low global bond count (I might have expected a low global exclusion count). My guess is the system is cooling too quickly and thus pressure control is causing issues. In retrospect, the pressure control is probably not a good idea in this case, since your temperature change is very large.

Figura 117. Resposta del servici tècnic. Font: Pròpia

Precisament amb el control de pressió la temperatura canvia notablement i molt ràpidament sense cap error. Llevant el control de pressió, com recomana el suport, apareix el error de la Figura 118.

```

ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 1347!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 9897!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 12147!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Constraint failure in RATTLE algorithm for atom 8997!
ERROR: Constraint failure; simulation has become unstable.
ERROR: Exiting prematurely; see error messages above.
=====

```

Figura 118. Error constraint Failure. Font: Pròpia

El servei tècnic ens escriu el codi que ens recomana usar (Figura 119), el problema que trobem és que amb aquest codi el problema anterior persisteix:

```

set rampInterval 20000
set T1 600
set TN 300
set dT -0.1

reinitvels $T1
set oldTemp $T1
for {set temp $T1} {$temp >= $TN} {incr temp $dT} {

    langevinTemp $temp
    rescalevels [expr {sqrt($temp/$oldTemp)}] ;# this effectively "pre-heats"
                                                #the system so that you don't
                                                #get sudden changes in kinetic energy|

    run $rampInterval
    set oldTemp $temp
}

```

Figura 119. Codi Tcl proporcionat per el servei tècnic. Font: Pròpia

Arribats a aquest punt, llevem el control de Langevin en el script de la simulació isoterma per a veure si també tenim aquest error. Però no. No tenim cap error i a més pareix que el sistema va a convergir en un punt (Figura 120). La hipòtesis és que si en el equilibri entra en joc Langevin i després en el control de temperatura manual s'ha de desactivar, potser crea conflictes.

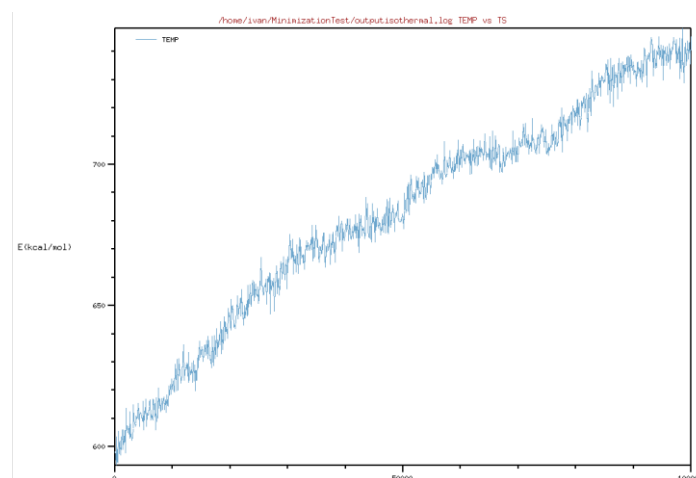


Figura 120. Equilibri del sistema sense controls de pressió o temperatura. Font: Pròpia

Implementació del Projecte

Veient que el sistema va a convergir en un punt, s'amplia el temps de simulació a 500000 passos d'integració (Figura 121) i 1000000 (Figura 122).

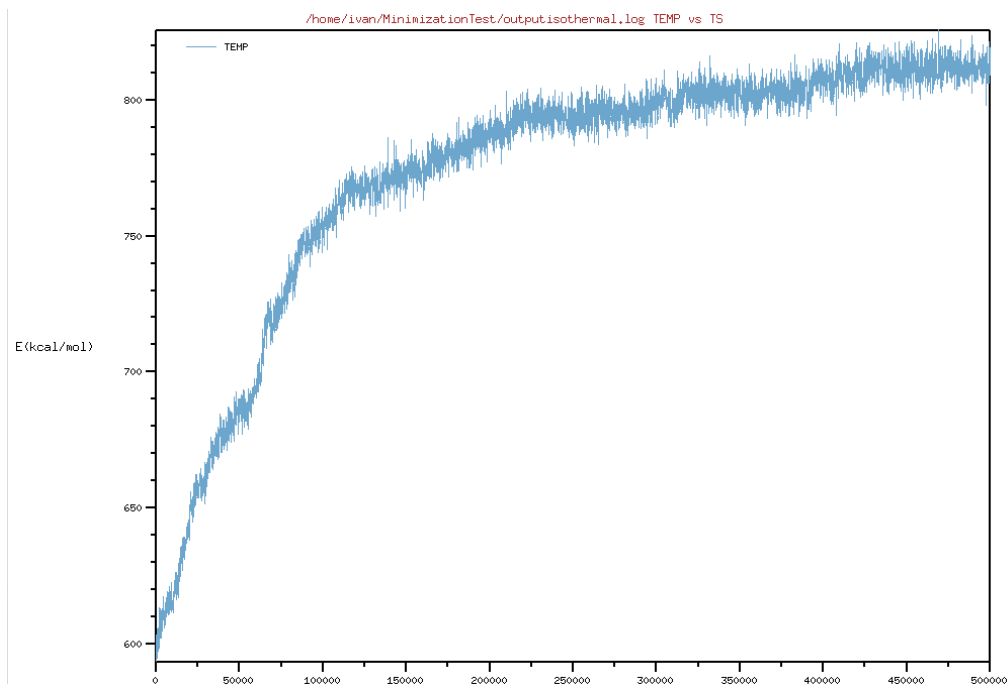


Figura 121. 500000 passos d'integració del sistema lliure. Font: Pròpia

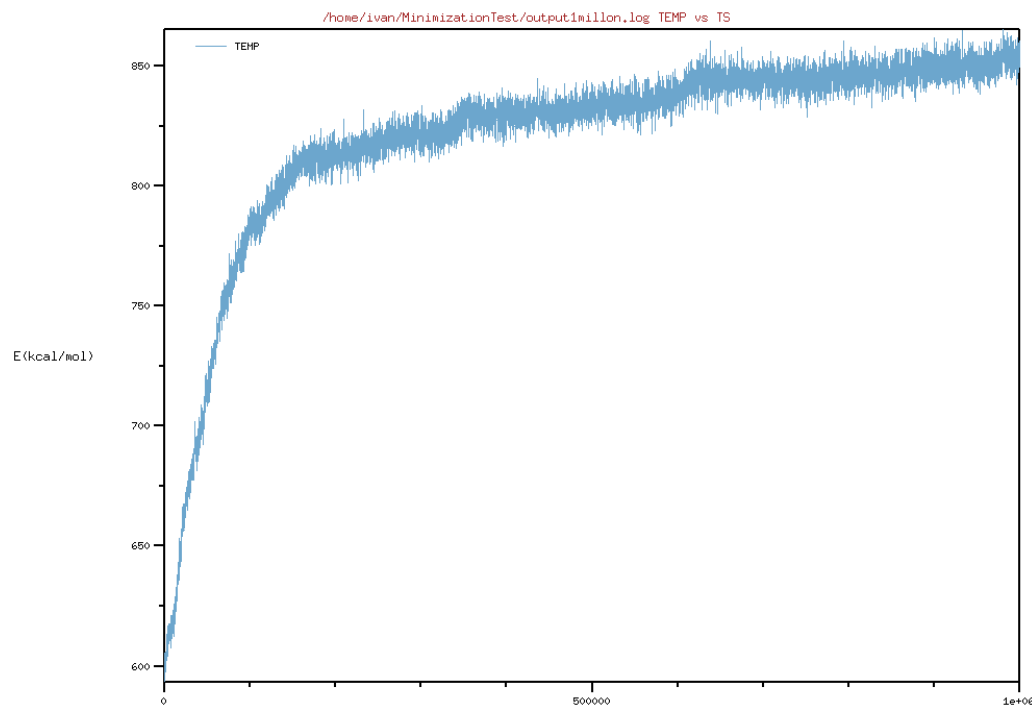


Figura 122. 1000000 passos d'integració del sistema lliure. Font: Pròpia

Veient el script d'eixida .log, Figura 123, la temperatura arriba a 850,2800 Kelvin, es posa aquest valor en el codi proporcionat per el servici tècnic, Figura 124, per a veure si amb el sistema ben equilibrat no dona error l'ús del script de Tcl sense èxit. Dona el error anterior.

```

ETITLE:      TS          BOND          ANGLE          DIHED
IMPRP        ELECT      VDW          BOUNDARY      MISC
KINETIC      TOTAL      TEMP         POTENTIAL     TOTAL3
TEMPAVG      PRESSURE  GPRESSURE   POTENTIAL     PRESSAVG    GPRESSAVG

ENERGY: 1000000 3858626.8311 376018.3752 -11117.5685 0.0000
-998.8408 1520692.5190 0.0000 0.0000 31087.3699
5774308.6859 850.2800 5743221.3160 5774668.2071 851.3667
-118.3971 -118.9726 4766717.8916 -0.5769 -0.5629

WRITING EXTENDED SYSTEM TO RESTART FILE AT STEP 1000000
WRITING COORDINATES TO DCD FILE testD2.dcd AT STEP 1000000
WRITING COORDINATES TO RESTART FILE AT STEP 1000000
FINISHED WRITING RESTART COORDINATES
WRITING VELOCITIES TO RESTART FILE AT STEP 1000000
FINISHED WRITING RESTART VELOCITIES
WRITING EXTENDED SYSTEM TO OUTPUT FILE AT STEP 1000000
WRITING COORDINATES TO OUTPUT FILE AT STEP 1000000
CLOSING COORDINATE DCD FILE testD2.dcd
WRITING VELOCITIES TO OUTPUT FILE AT STEP 1000000

```

Figura 123. Script d'eixida equilibri de 1000000 passos d'integració. Font: Pròpia

```

run 80
for { set TEMP 850 } { $TEMP >= 300 } { incr TEMP -500 } {
reassignTemp $TEMP
run 1
}

reassignFreq 100

```

Figura 124. Script Tcl amb 850 Kelvin. Font: Pròpia

Es minimitza el equilibri per tal de baixar la energia al mínim i veure si així el script de Tcl no dona el error dels àtoms de la Figura 118. El resultat de la nova minimització es pot veure a la Figura 125.

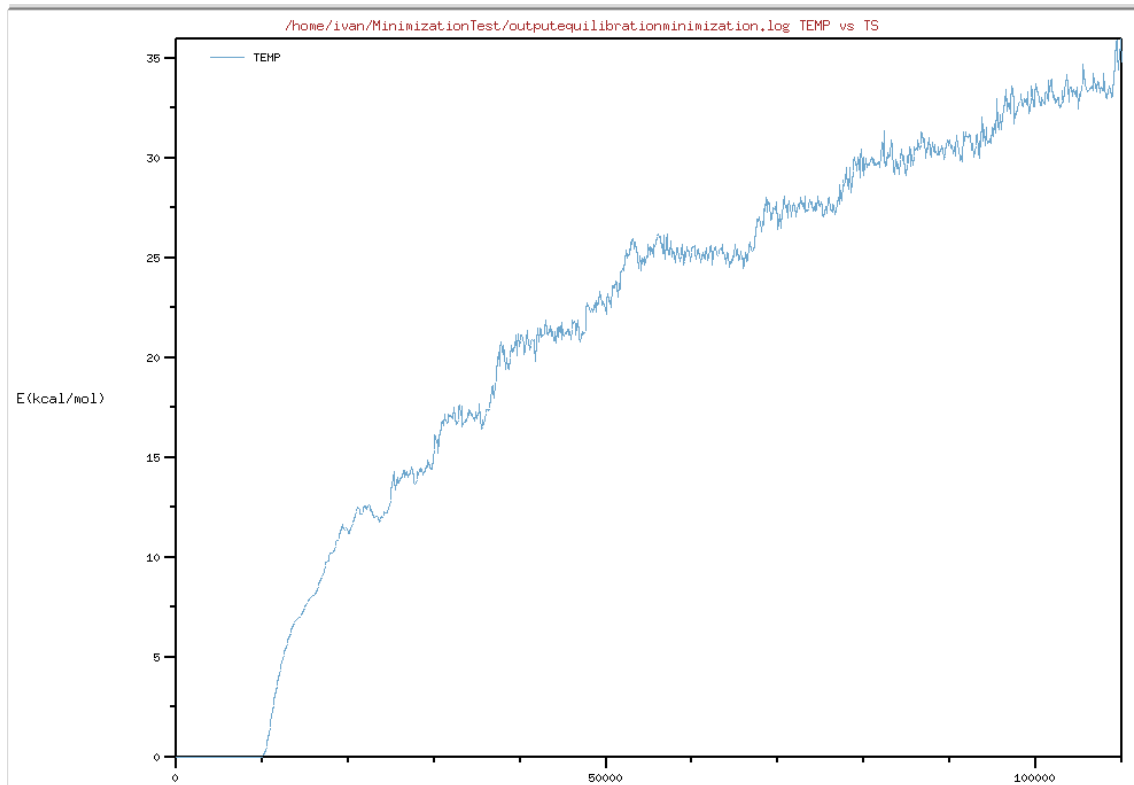


Figura 125. Minimització del equilibri de 850 Kelvin. Font: Pròpia

Açò tampoc no dona el resultat esperat i continuem tenint el mateix error. Després de valorar opcions amb el servei tècnic sense trobar cap solució. Es decideix parar ací i analitzar els resultats obtinguts encara que no s'ha aconseguit controlar la temperatura de refredament.

La gràfica de la transició vítria no depèn del temps encara que la velocitat de refredament sí que determina el valor de dita temperatura, per tant, si apareix el canvi d'estat, veurem la transició encara que no tinguem control sobre la temperatura de refredament.

5.19 Diagrames

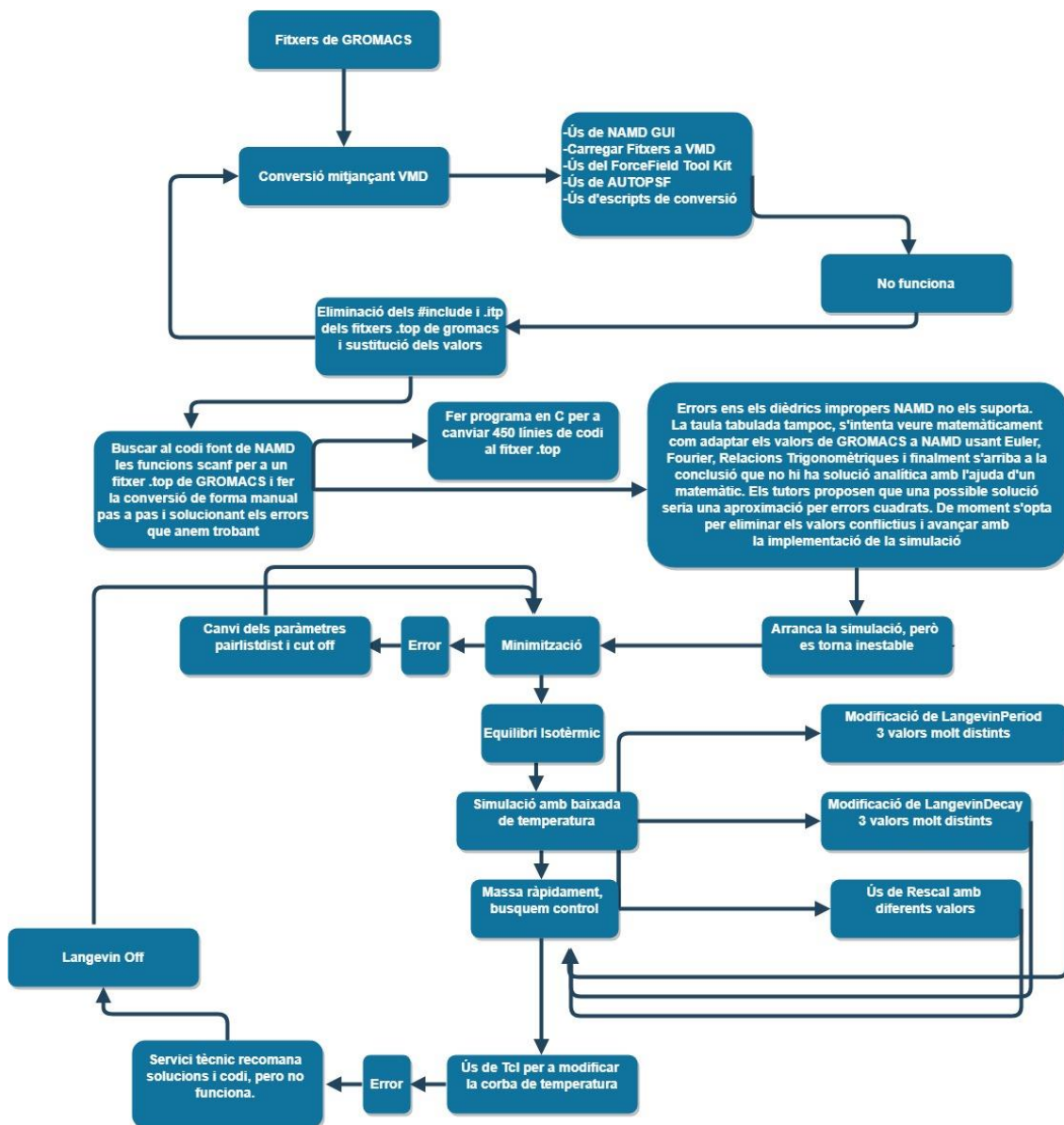


Figura 126. Diagrama Implementació del projecte. Font: Pròpia

A la Figura 126 trobem el diagrama dels principals passos que s'han portat a cap per a solucionar el objectiu del projecte, tant els passos que han funcionat com els que no, per tal de donar a conèixer quines coses no són idònies per a tal propòsit.

Primerament, amb els fitxers de GROMACS que contenen la informació amb les dades del camp de forces PLAFF3 s'ha tractat de fer la conversió automàtica amb VMD usant la GUI de NAMD, carregant els fitxers a VMD i descarregant, usant el Force Field Tool Kit, usant AUTOPSF i s'han usat alguns scripts de conversió trobats a la xarxa, no ha

funcionat, per tant s'ha procedit a llegir els fitxers i s'ha passat de una programació modular i tenir tota la informació dels fitxers .itp als fitxers .top.

S'ha repetit tot el procés anterior amb l'ànim d'obtenir una conversió automàtica, sense èxit. Per tant, amb el codi font de NAMD, s'han vist les funcions de les que fa ús el programa quan usem el comandament gromacs on al script de configuració i s'han anat modificant els fitxers .top per a que fossin acceptats. Durant aquesta conversió s'han trobat errors en els dièdrics impropis, que NAMD no suporta i tampoc no hem pogut fer ús de la taula tabulada, s'ha tractat d'adaptar les distintes funcions matemàtiques usades per GROMACS i NAMD per a definir els dièdrics.

S'ha usat un senzill programa en C per a modificar 450 línies de codi de forma automàtica.

Finalment, la simulació s'ha posat en marxa, hem trobat errors d'instabilitat que hem solucionat minimitzant el sistema i canviant els paràmetres de pairlistdist i cutoff.

Seguidament hem fet una simulació d'equilibri isotèrmic i hem concatenat el resultat a una simulació amb baixada de temperatura amb èxit. S'ha tractat de controlar la velocitat de refredament modificant els valors de LangevinPeriod, LangevinDecay i Rescal de forma separada amb 3 valors molt distints a cadascuna per veure si hi havia cap efecte en el canvi de temperatura sense èxit.

S'ha escrit un xicotet codi en llenguatge Tcl, acceptat per NAMD però ens ha donat error. S'ha contactat el servici tècnic i ens han recomanat llevar el control de Langevin. Hem repetit tot el procés des de la minimització, però ha seguit donant error. Aleshores el servici tècnic ens ha proporcionat un codi Tcl, però tampoc no ha funcionat.

Finalment, s'han usat els resultats de la simulació sense el control de velocitat en la baixada de temperatura per a veure la temperatura de transició vítria.

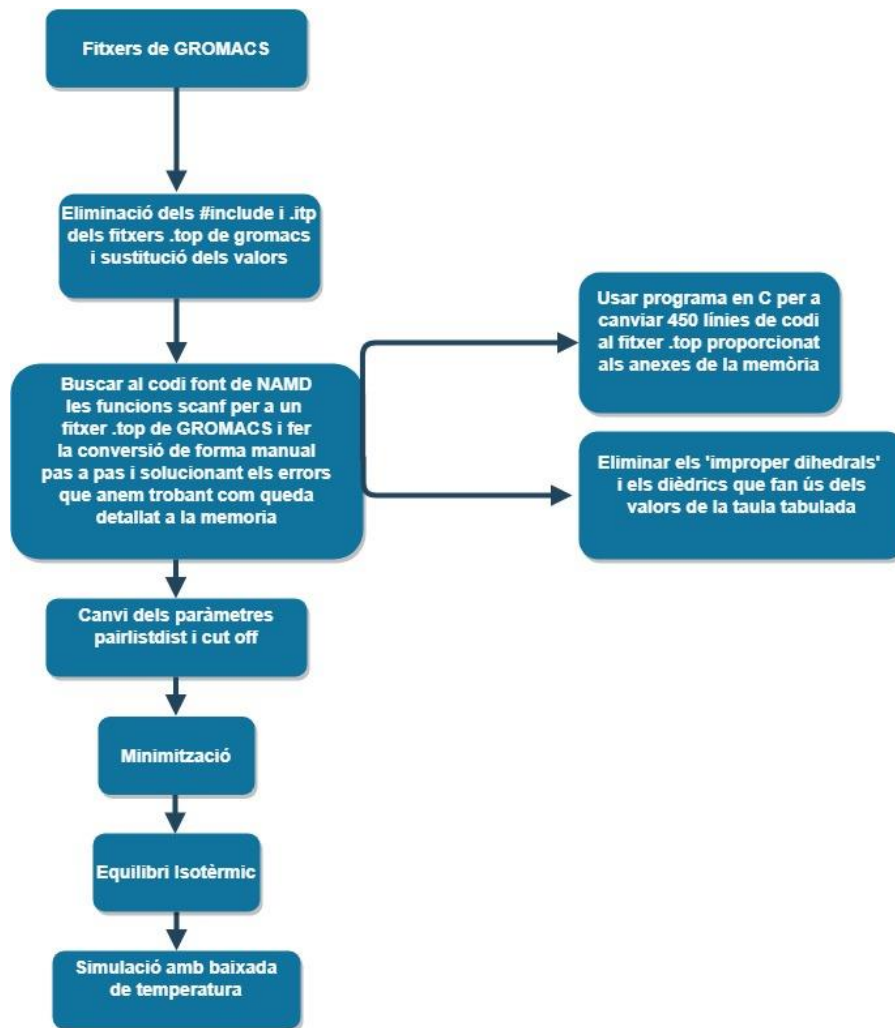


Figura 127. Diagrama Implementació del projecte simplificat. Font: Pròpia

A la Figura 127 trobem el principal producte d'aquest treball: el diagrama simplificat per a convertir els fitxers de GROMACS a NAMD. Aquest diagrama mostra els passos exactes que cal portar a terme per a dur a cap la simulació.

Primerament cal eliminar els `#include` dels arxius `.top` i substituir la informació dels `.itp` als que fan referència. Seguidament, usant el apartat de implementació d'aquesta memòria, s'ha de canviar les variables conflictives amb el codi font de NAMD. S'han d'eliminar els dièdrics impropis i els de la taula tabulada `.xvg`. Per al apartat d'àtoms, es pot usar el programa en C proporcionat al annex, per a fer una conversió automàtica de les 450 línies de codi. Canviem els paràmetres de `pairlistdist` i `cutoff` i concatenem la minimització amb l'equilibri isotèrmic i la simulació on refredem el sistema.

6.Resultats

Els principals resultats d'aquest projecte són els diagrames proporcionats al punt anterior que solucionen la problemàtica plantejada al objectiu del projecte. La tècnica emprada ha permès realitzar el canvi del camp de forces del programa GROMACS (usat per a aplicacions físiques) al programa NAMD (usat per a aplicacions biològiques).

Per a validar la tècnica i corroborar que és correcta, amb els resultats de la simulació portada a cap, veurem si la temperatura de transició vítria obtinguda es correspon amb la proporcionada al article de H. McAliley i A. Bruce.

En resum: validarem el producte tècnic amb un resultat amb valor científic, com és l'obtenció de la T_g .

6.1 Procediment

Per a poder observar la funció de la transició vítria cal aïllar els valors de la temperatura i de la energia del fitxer `.log` que és el fitxer d'eixida de NAMD on es troba tota la informació de la simulació i després fer una gràfica a Excel amb els resultats. La funció tindrà dues tendències una a la dreta i una altra a l'esquerra, cal fer dos rectes seguint les tendències i en la intersecció, trobarem la T_g .

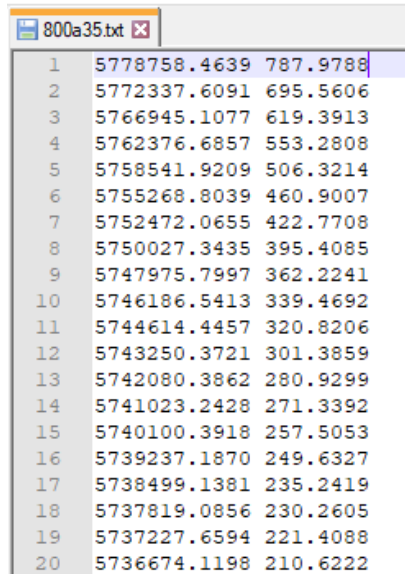
Cal tenir en compte que per a veure la gràfica d'aquesta forma cal posar a l'eix de les x la inversa de la temperatura, es a dir K^{-1} i a l'eix de les y, la energia total del sistema.

Des de la consola de Linux, usem el comandament `grep` (Figura 128) per a agafar les columnes que ens interessin a partir de la paraula `energy` de dins del fitxer `.log`, les columnes 12 i 13 en aquest cas, que indiquen energia total en kcal/mol i la temperatura en graus Kelvin. A la Figura 129 es pot observar que el text ix net i només caldrà obrir-lo en Excel i inserir una dispersió amb les dades per a veure la gràfica.

```
ivan@ivan-HP-Pavllion-g6-Notebook-PC:~$ grep ^"ENERGY:" OutR32.log | awk '{print $12, $13}'>templot.dat
```

Figura 128. Exemple comandament `grep`. Font: Pròpia

Resultats



1	5778758.4639	787.9788
2	5772337.6091	695.5606
3	5766945.1077	619.3913
4	5762376.6857	553.2808
5	5758541.9209	506.3214
6	5755268.8039	460.9007
7	5752472.0655	422.7708
8	5750027.3435	395.4085
9	5747975.7997	362.2241
10	5746186.5413	339.4692
11	5744614.4457	320.8206
12	5743250.3721	301.3859
13	5742080.3862	280.9299
14	5741023.2428	271.3392
15	5740100.3918	257.5053
16	5739237.1870	249.6327
17	5738499.1381	235.2419
18	5737819.0856	230.2605
19	5737227.6594	221.4088
20	5736674.1198	210.6222

Figura 129. Detall del fitxer obtés amb grep que conté les dades per a la gràfica. Font: Pròpia

6.2 Obrint fitxer .txt en Excel

Per a visualitzar les dades a Excel, cal canviar la configuració en primer lloc. Separador decimal ha de ser un punt i no ha d'haver separador de milers com es pot veure a la Figura 130.

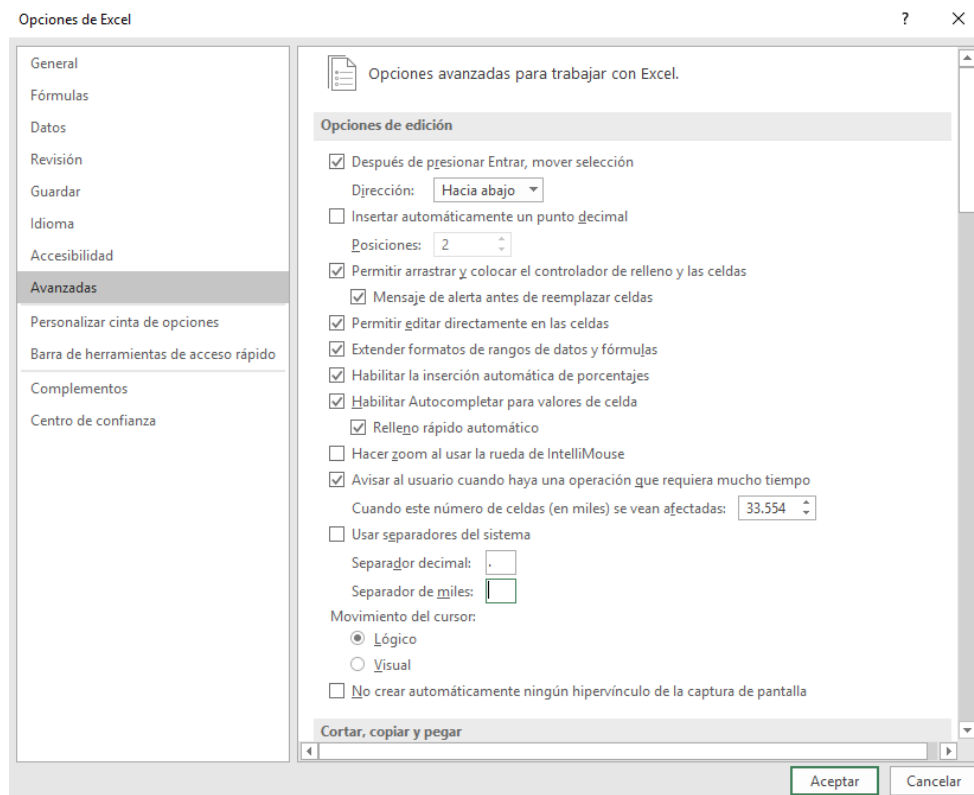


Figura 130. Configuració Excel. Font: Pròpia

Una volta acceptada la configuració obrim el fitxer, cal elegir la opció d'arxius de text com es veu a la Figura 131. Seguidament se'ns obrirà automàticament el assistent que s'observa a la Figura 132 i cal elegir les opcions que es mostren a la Figura 132, 133 i 134. D'aquesta manera les dades es mostraran en dues columnes a Excel.

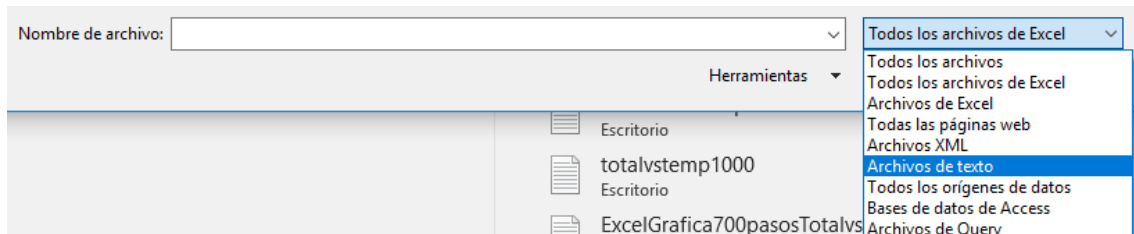


Figura 131. Obrir fitxer. Font: Pròpia

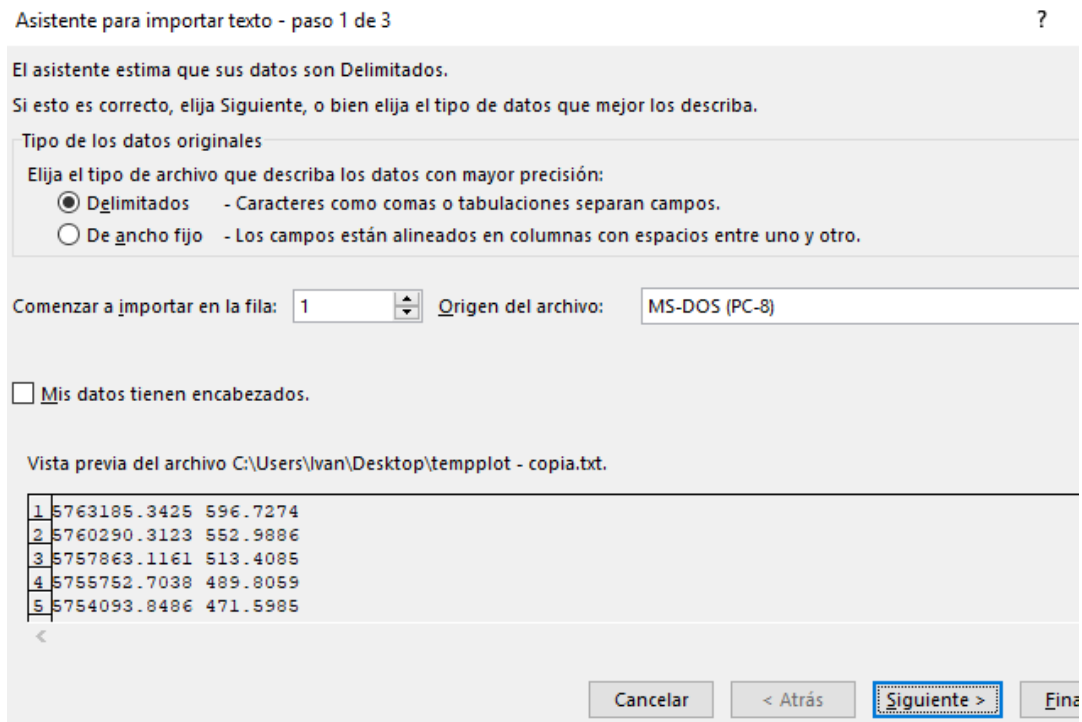


Figura 132. Asistent Pas 1. Font: Pròpia

Resultats

Asistente para importar texto - paso 2 de 3

Esta pantalla le permite establecer los separadores contenidos en los datos. Se puede ver cómo cambia el texto en l

Separadores

- Tabulación
- Punto y coma
- Coma
- Espacio
- Otro:

Considerar separadores consecutivos como uno solo

Calificador de texto: ▼

Vista previa de los datos

5763185.3425	596.7274
5760290.3123	552.9886
5757863.1161	513.4085
5755752.7038	489.8059
5754093.8486	471.5985

<

Cancelar < Atrás **Siguiente >**

Figura 133. Asistent Pas 2. Font: Pròpia

Esta pantalla permite seleccionar cada columna y establecer el formato de los datos.

Formato de los datos en columnas

- General
- Texto
- Fecha: ▼
- No importar columna (saltar)

'General' convierte los valores numéricos en números, los valores de fechas en fechas y todos los demás valores en texto.

Avanzadas...

Vista previa de los datos

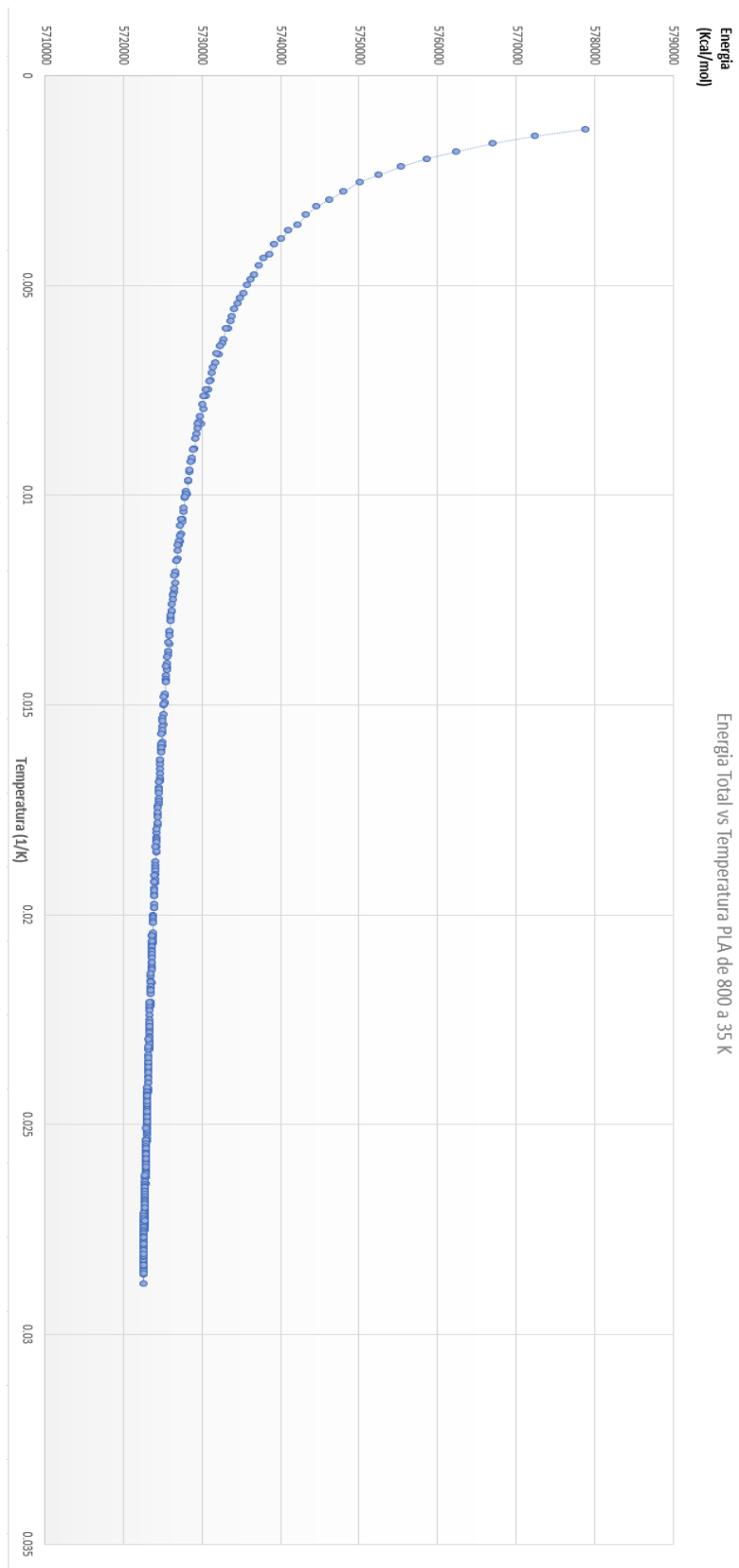
General	General
5763185.3425	596.7274
5760290.3123	552.9886
5757863.1161	513.4085
5755752.7038	489.8059
5754093.8486	471.5985

< >

Cancelar < Atrás Siguiente > Finalizar

Figura 134. Asistent Pas 3. Font: Pròpia

Les dades apareixeran en dues columnes, només cal afegir una columna per a fer la inversa de la temperatura, seleccionar les dades i inserir el gràfic. La gràfica resultant es mostra a la Figura 135.



6.3 Càlculs

Com s'ha explicat, cal fer dos rectes amb les diferents tendències (Figura 136). S'ha usat matlab per a solucionar-ho gràficament, però es pot solucionar agafant dos punts de cada tendència, i fer les rectes analíticament amb el mateix resultat. Com es pot comprovar a la Figura 137, el punt on es creuen es el 0.00307 per a l'eix de les x. Per a recuperar els graus en Kelvin, cal fer la inversa, $0.00307^{-1}K = 325.5 K$.

Per tant, el resultat d'aquest model es que la temperatura de transició vítria es de 325.5 Kelvin.

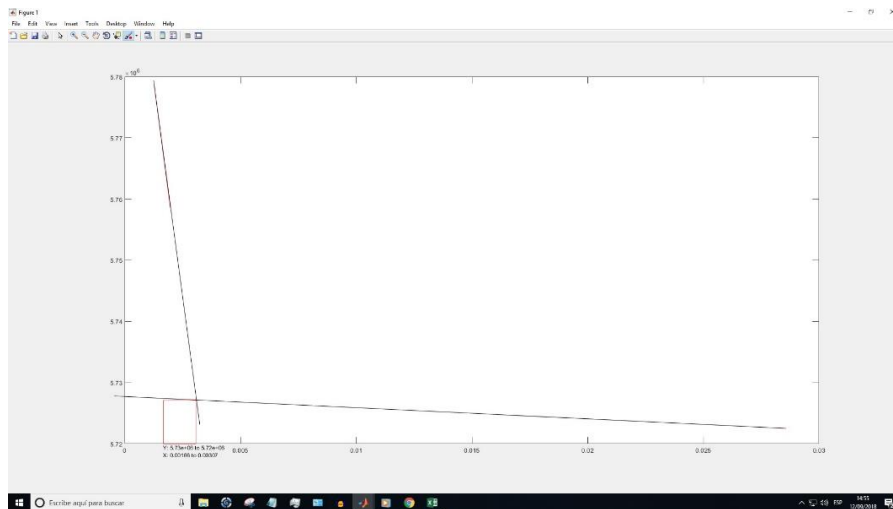


Figura 136. Rectes Matlab. Font: Pròpia

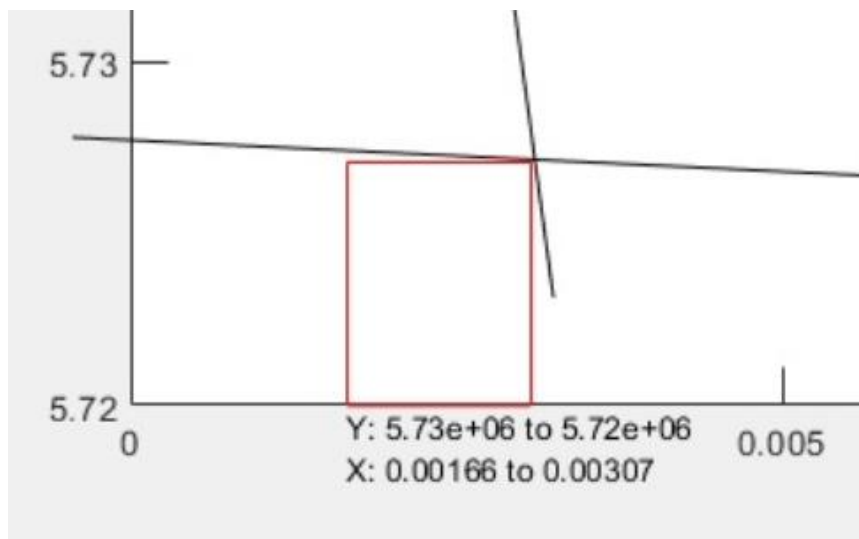


Figura 137. Resultat del projecte. Font: Pròpia

6.4 Comparació dels resultats

Com es pot observar a la Figura 138, la temperatura de transició del nostre model (325,5K) coincideix amb els resultats experimentals efectuats al laboratori per Dorgan i Kanchanasopa i amb els resultats obtinguts a la simulació del article de McAliley i A.Bruce.

Table 5. Glass Transition Temperatures Calculated from the Various Models Explored in This Work^a

method/model	T_g (K)
simulation data	
OPLS	388 ± 14
CHARMM	367 ± 15
OPLS ⁹	403 ± 12
PLAFF ⁴⁴	408 ^b
PLAFF2 ⁶	386 ± 11
PLAFF3	327 ± 12
Experimental Data	
Dorgan ²⁶	331.6
Kanchanasopa ²⁸	327

^a Simulation results from previous studies using PLAFF⁴⁴ and PLAFF2⁶ are included for reference, as well as selected experimental results^{25,28} for PLA. ^b Extrapolated to infinite molecular weight limit, not corrected for quench rate dependence.

Figura 138. Recuperat de l'article de referència nomenat als objectius. Font: *Journal of Chemical Theory and Computation*

7. Conclusions

És possible passar del programa GROMACS al programa NAMD un model de simulació molecular. Encara que s'ha perdut alguna informació en la conversió relativa als potencials dièdrics.

El producte d'aquest treball, el valor tècnic que representen els diagrames d'implementació i el procés per a fer possible aquesta integració del camp de forces de GROMACS a NAMD, queda validat pel resultat científic obtés.

Com hem vist, el resultat del model que hem implementat usant el camp de forces PLAFF3 a NAMD dona una temperatura de transició vítria de 325.5 K. Tenint en compte que a l'article que s'ha emprat de referència, la T_g és de 327 K amb un error de 12 Kelvin, podem afirmar que el resultat és més que satisfactori. Ja que s'ha aconseguit reproduir el resultat en la nova plataforma.

En conclusió, el model realitzat a NAMD és adequat i s'ajusta als experiments realitzats amb el material, i les decisions preses a l'hora d'esborrar o d'adaptar dades han sigut rellevants i correctes. També cal remarcar que les dades esborrades no són molt rellevants a l'hora d'obtindre la T_g . Encara que sí que han influït en la estabilització del sistema, que mentre que a l'article s'ha obtés fent un canvi de temperatura de 800K a 300K, nosaltres l'hem tingut que fer de 800K a 35K per tal de veure la part més plana de la corba (Figura 135).

El model doncs es podria millorar afegint a NAMD els dièdrics esborrats, per portar açò a cap caldria fer una adaptació matemàtica de la funció que es mostra a la Figura 139 per tal d'aconseguir una funció semblant a la que es pot observar a la Figura 140. Aquest procés matemàtic és molt complex i excedia el propi TFG. També s'hauria de millorar la possibilitat de controlar la velocitat de refredament, però s'ha intentat per tots els mitjans amb el equip del suport tècnic de NAMD, que són els programadors del software, i no ha sigut possible.

Conclusions

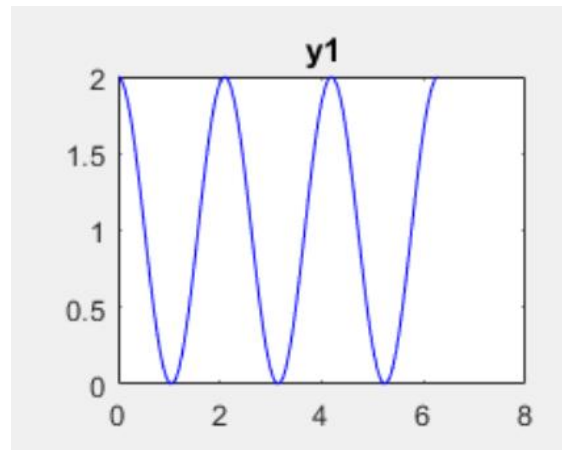


Figura 139. Funció dels dièdrics de NAMD. Font: Pròpia, funció obtesa del Manual de NAMD i graficada a Matlab

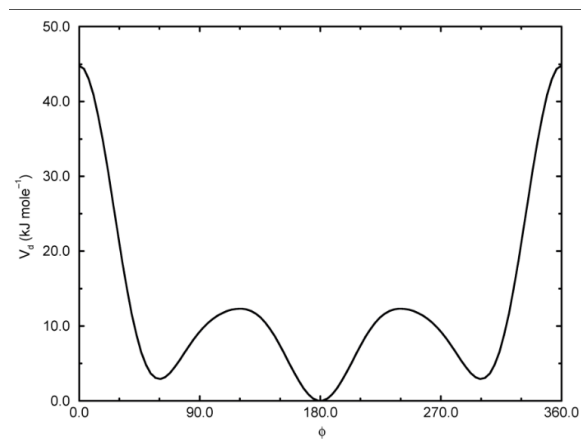


Figura 140. Funció de Ricker-Bellmans: Font: Manual de Gromacs

Finalment, podem resumir les conclusions en les següents afirmacions:

- És possible passar un model de GROMACS a NAMD, però de forma manual, no automàtica.
- No hi ha una manera de fer una equivalència entre alguns dièdrics de GROMACS i NAMD.
- La falta dels angles dièdrics no modifica la T_g obtinguda al model que s'ha implementat a NAMD.
- La falta dels angles dièdrics sí que modifica la temperatura a la que s'estabilitza el sistema en estat sòlid.
- La T_g obtesa al model implementat a NAMD coincideix amb els resultats empírics i per tant, valida el model que s'ha implementat.

8. Bibliografia

Molina Mateo, J. (2003). *Estudio de la dinámica molecular en materiales poliméricos mediante modelos de fluctuación de enlace* (Tesis doctoral). Universitat politècnica de valència, Espanya.

Molina Mateo, J. (2017). *Assignatura de Biofísica*. Apunts acadèmics del grau de biomedicina.

James C. Phillips, Rosemary Braun, Wei Wang, James Gumbart, Emad Tajkhorshid, Elizabeth Villa, Christophe Chipot, Robert D. Skeel, Laxmikant Kale, and Klaus Schulten. Scalable molecular dynamics with NAMD. *Journal of Computational Chemistry*, 26:1781-1802, 2005.

Lokensgard, E. (2008). *Industrial Plastics: Theory and Applications*. (5e). Kindle Edition.

Martin, O. i Avérous, L. (2001). *Poly(lactic acid): plasticization and properties of biodegradable multiphase Systems*. França: Materials and Packaging Research Centre (ESIEC)

Rivera, A. (2013, octubre 9). Nobel para la química computacional que simula incluso procesos biológicos. *El País*. Recuperado 25 julio 2018 de https://elpais.com/sociedad/2013/10/09/actualidad/1381313884_234389.html

Harrison, F. (2013, octubre 9). Premio Nobel de Química por llevar la experimentación al ciberespacio. *BBC*. Recuperado 25 julio 2018 de https://www.bbc.com/mundo/ultimas_noticias/2013/10/131009_ultnot_premio_nobel_quimica

Modelamiento Molecular. (2015, noviembre 30). *Instalación VMD* [Video]. Recuperat de <https://www.youtube.com/watch?v=KGBW00EweDg>

Bibliografía

Modelamiento Molecular. (2015, noviembre 30). *Instalación NAMD para UBUNTU* [Vídeo]. Recuperat de <https://www.youtube.com/watch?v=SzKalBuvhBc>

Mariano. (2011, agost 8). *Poliácido láctico (PLA)* [Entrada blog]. Recuperat de <http://tecnologiadelosplasticos.blogspot.com/2011/08/poliacido-lactico-pla.html>

Carmichael, P. (2013, Noviembre 8). *Calculated Chemistry: Nobel Prize 2013*. [Entrada blog]. Recuperat de <http://blogs.ucl.ac.uk/chemdeptblog/2013/11/08/calculated-chemistry-nobel-prize-2013/>

2016, Juliol 19. *El experimento de la gota de brea* [Entrada wordpress]. Recuperat de <https://lidiakonlaquimica.wordpress.com/2016/07/19/el-experimento-de-la-gota-de-brea/>

Kubiak – Ossowska, K. *Molecular Dynamics Calculations using NAMD*. Regne Unit: Archie-West, High Performance Computing Support Team Department of Physics. Recuperat de https://www.archer.ac.uk/training/course-material/2015/06/MoIDy_Strath/ARCHER_NAMD_tutorial.pdf

1997, *La Transición Vítreo*, Recuperat de <http://www.pslc.ws/spanish/tg.htm>. Departament de Ciència de polímers, Universitat del Sur de Mississipi.

Estructuras cerámicas no cristal·linas. Vidrios. UPV, España. Recuperat de https://www.upv.es/materiales/Fcm/Fcm14/pfcm14_3_2.html

9. Annexos

9.1 Programes i scripts

Script de minimització (NAMD)

```
#####
## ADJUSTABLE PARAMETERS          ##
#####

gromacs on

grotopfile 32x50LA_crystal.top
grocoorfile 32x50LA_crystal.gro

paraTypeCharmm      on

exclude      scaled1-4

1-4scaling      0.5

switching      on

switchdist      8 # at 8Å we start to smooth electrostatic to 0

cutoff      12.0

pairlistdist      26.0

margin      4

# Integrator Parameters

timestep      1.0 ;# 1fs/step

rigidBonds      all ;# needed for 2fs steps

nonbondedFreq      1

vdwGeometricSigma      yes

fullElectFrequency      2

stepspercycle      20

pairlistsperCycle      2

outputEnergies      100

outputtiming      100

outputPressure      100
```

Annexos

```
binaryoutput    yes
outputname      R1
dcdfreq         100
temperature     200
#reassignFreq   1000
#reassignIncr   10
#reassignHold   800
wrapAll         on
langevin        on ;# do langevin dynamics
langevinDamping 2 ;# damping coefficient (gamma) of 1/ps
langevinTemp    600
langevinHydrogen no ;# don't couple langevin bath to hydrogens
useGroupPressure yes ;# needed for rigidBonds
useFlexibleCell no
useConstantArea no
langevinPiston  on
langevinPistonTarget 1.01325 ;# in bar -> 1 atm
langevinPistonPeriod 200
langevinPistonDecay 100
langevinPistonTemp 600

cellBasisVector1 100 0.0 0.0
cellBasisVector2 0.0 100 0.0
cellBasisVector3 0.0 0 150.90
cellOrigin       25.0 25.0 47.0
minimize         10000 ;# lower potential energy for 1000 steps
run 100000
```

Script d'equilibri (NAMD)

```
#####
## ADJUSTABLE PARAMETERS          ##
#####

gromacs on
grotopfile 32x50LA_crystal.top
grocoorfile 32x50LA_crystal.gro
bincoordinates R1.coor
paraTypeCharmm      on
exclude      scaled1-4
1-4scaling    0.5
switching     on
switchdist    8 # at 8Å we start to smooth electrostatic to 0
cutoff        12.0
pairlistdist  26.0
margin        4

# Integrator Parameters
rigidBonds    all ;# needed for 2fs steps
nonbondedFreq 1
vdwGeometricSigma yes
fullElectFrequency 2
stepspcycle   20
pairlistspcycle 2
wrapAll       on
timestep      1.0 ;# 2fs/step 2 en simulaci3n, 1 minimizaci3n
outputEnergies 100
outputtiming   100
outputPressure 100
binaryoutput  yes
outputname    R2
dcdfreq       200
```

Annexos

```
restartfreq 1000
restartname rest_R2
binvelocities R1.vel
# Constant Temperature Control
langevin on ;# do langevin dynamics
langevinDamping 2 ;# damping coefficient (gamma) of 1/ps
langevinTemp 800
langevinHydrogen no ;# don't couple langevin bath to hydrogens
useGroupPressure yes ;# needed for rigidBonds
useFlexibleCell no
useConstantArea no
langevinPiston on
langevinPistonTarget 1.01325 ;# in bar -> 1 atm
langevinPistonPeriod 200
langevinPistonDecay 100
langevinPistonTemp 800
extendedSystem R1.xsc
run 300000
```

Script de simulació (NAMD)

```
#####
## ADJUSTABLE PARAMETERS          ##
#####

gromacs on
grotopfile 32x50LA_crystal.top
grocoorfile 32x50LA_crystal.gro
bincoordinates R2.coor
paraTypeCharmm      on
exclude      scaled1-4
1-4scaling    0.5
switching     on
switchdist    8 # at 8Å we start to smooth electrostatic to 0
cutoff        12.0
pairlistdist  26.0
margin        4

# Integrator Parameters
rigidBonds    all ;# needed for 2fs steps
nonbondedFreq 1
vdwGeometricSigma yes
fullElectFrequency 2
stepspcycle   20
pairlistspcycle 2
wrapAll       on
timestep      1.0 ;# 2fs/step 2 en simulació, 1 minimizacion
outputEnergies 100
outputtiming   100
outputPressure 100
binaryoutput  yes
outputname    R3
dcdfreq       200
```

Annexos

```
restartfreq 1000
restartname R3
binvelocities R2.vel
# Constant Temperature Control
langevin on ;# do langevin dynamics
langevinDamping 2 ;# damping coefficient (gamma) of 1/ps
langevinTemp 35
langevinHydrogen no ;# don't couple langevin bath to hydrogens
useGroupPressure yes ;# needed for rigidBonds
useFlexibleCell no
useConstantArea no
langevinPiston on
langevinPistonTarget 1.01325 ;# in bar -> 1 atm
langevinPistonPeriod 200
langevinPistonDecay 100
langevinPistonTemp 35
extendedSystem R2.xsc
run 70000
```

Programa en C per al fitxer .top

```

#include <stdio.h>
#include <math.h>

int main()
{
int i,a1,a2,a3,a4,a5,a6,a7,a8,a9,j,b1,b2,y=1;
for (i=0;i<446;i++)
{
    a1=(i+1);
    a2=(i+2);
    a3=(i+3);
    a4=(i+4);
    a5=(i+5);
    a6=(i+6);
    a7=(i+7);
    a8=(i+8);
    a9=(i+9);

    b1=(y);
    b2=(y+1);
    y=b2;
    y++;

printf("    %d    OS    1    SLM    O1    %d    -0.34
15.9994 ; qtot -0.34 \n",a1,b1); //1
printf("    %d    C_2    1    SLM    C2    %d    0.52
12.011 ; qtot 0.18 \n",a2,b1); //2
printf("    %d    CT    1    SLM    C3    %d    0.22
12.011 ; qtot 0.40 \n",a3,b1); //3
printf("    %d    O_2    1    SLM    O4    %d    -0.43
15.9994 ; qtot -0.03 \n",a4,b1); //4
printf("    %d    HC    1    SLM    H5    %d    0.03
1.008 ; qtot 0 \n",a5,b1); //5
printf("    %d    CT    1    SLM    C6    %d    -0.18
12.011 ; qtot -0.18 \n",a6,b2); //6
printf("    %d    HC    1    SLM    H7    %d    0.06
1.008 ; qtot -0.12 \n",a7,b2); //7
printf("    %d    HC    1    SLM    H8    %d    0.06
1.008 ; qtot -0.06 \n",a8,b2); //8
printf("    %d    HC    1    SLM    H9    %d    0.06
1.008 ; qtot 0 \n",a9,b2); //9

i=a8;
}
return 0;
}

```


2. PLEC DE CONDICIONS

Les recomanacions i els requisits de software per a seguir els passos plantejats al projecte són un ordinador (1) amb Windows i Microsoft Excel i un altre ordinador (2) amb el sistema operatiu Ubuntu 16.04 (Linux) on cal instal·lar VMD i NAMD.

Els requisits del hardware de l'ordinador (1) són:

-Memòria: 1 GB RAM

-Processador: 1 Ghz

-Espai al disc dur: 3GB

*Els requisits del hardware de l'ordinador (2) són:

-Memòria: 512 MB RAM

-Processador: Pentium 4 2.4 Ghz CPU (o similar)

-Targeta Gràfica: nVidia Geforce Ti4600, (o similar)

-Espai al disc dur: 10 GB

*Cal tenir en compte que aquests requeriments són mínims i bàsics. Es recomana millors prestacions per a un funcionament fluït.

3. PRESSUPOST

Per a calcular el pressupost del següent projecte cal tenir el compte totes les eines emprades:

	Quantitat	Cost Unitari	Total
Compra de l'ordinador 1 (HP Pavilion, Intel® Core™ i7-3632QM CPU @ 2.20GHz x 8)	1	800€	800€
Compra de l'ordinador 2 (Inclou llicència de Windows 10)	1	600€	600€
Compra de llicència d'Excel	1	70€	70€
Sistema Operatiu Ubuntu 16.04 (software lliure)	1	0€	0€
NAMD (software lliure)	1	0€	0€
VMD (software lliure)	1	0€	0€
			1470€

	Quantitat	Cost Unitari	Total
Salari de l'enginyer, segons les hores emprades	384 h	8,65€ *	3324.02€
			3324.02€

COST TOTAL DEL PROJECTE..... 4794,00 €

*Es pren com a referencia el salari mínim d'un diplomad i titulat 1er cicle universitari. Nivell 2. segons el BOE número 15 sec. III. Pàgina 4373. 17544,24€ anuals.

