Step 0, time 0 (ps) LINCS WARNING

relative constraint deviation after LINCS:

rms 0.000060, max 0.013229 (between atoms 60993 and 60995)

bonds that rotated more than 30 degrees:

atom 1 atom 2 angle previous, current, constraint length

18943 18945 38.1 0.1111 0.1109 0.1111

20464 20465 45.5 0.1111 0.1109 0.1111

22966 22968 36.9 0.1111 0.1112 0.1111

23689 23691 34.3 0.1111 0.1112 0.1111

24813 24814 35.5 0.1111 0.1113 0.1111

27764 27765 33.2 0.1111 0.1112 0.1111

28844 28846 32.2 0.1111 0.1112 0.1111

31442 31443 40.6 0.1111 0.1111 0.1111

34624 34626 30.8 0.1111 0.1113 0.1111

35265 35267 33.7 0.1111 0.1109 0.1111

36220 36221 38.9 0.1111 0.1110 0.1111

36273 36274 35.0 0.1111 0.1111 0.1111

38757 38758 43.6 0.1111 0.1109 0.1111

41178 41180 34.1 0.1111 0.1110 0.1111

43250 43252 30.1 0.1111 0.1110 0.1111

43372 43373 43.7 0.1111 0.1110 0.1111

43792 43794 31.2 0.1111 0.1112 0.1111

45985 45987 33.7 0.1111 0.1112 0.1111

47008 47009 49.0 0.1111 0.1114 0.1111

50835 50837 32.4 0.1111 0.1112 0.1111

54427 54428 30.8 0.1111 0.1111 0.1111

57520 57522 39.9 0.1111 0.1109 0.1111

58940 58942 30.4 0.1111 0.1112 0.1111

60993 60994 55.8 0.1111 0.1116 0.1111

60993 60995 36.7 0.1111 0.1126 0.1111

61334 61336 40.5 0.1111 0.1109 0.1111

63088 63089 31.1 0.1111 0.1111 0.1111

63615 63617 32.2 0.1111 0.1112 0.1111

64123 64124 44.0 0.1111 0.1113 0.1111

65036 65038 43.8 0.1111 0.1109 0.1111

65557 65558 30.9 0.1111 0.1112 0.1111

69642 69644 31.4 0.1111 0.1110 0.1111

71571 71573 34.5 0.1111 0.1113 0.1111

73195 73197 30.5 0.1111 0.1110 0.1111

73777 73779 36.3 0.1111 0.1110 0.1111

75616 75617 41.1 0.1111 0.1110 0.1111

75943 75945 32.5 0.1111 0.1112 0.1111

79343 79345 33.1 0.1111 0.1111 0.1111

79922 79923 36.9 0.1111 0.1110 0.1111

82322 82324 35.2 0.1111 0.1113 0.1111

85594 85595 38.7 0.1111 0.1111 0.1111

86230 86231 33.5 0.1111 0.1110 0.1111

88053 88054 32.0 0.1111 0.1110 0.1111

88495 88496 37.4 0.1111 0.1111 0.1111

90555 90557 38.5 0.1111 0.1111 0.1111

92235 92236 31.2 0.1111 0.1111 0.1111

92690 92691 34.4 0.1111 0.1114 0.1111

98679 98681 35.4 0.1111 0.1110 0.1111

101222 101224 35.7 0.1111 0.1113 0.1111

102282 102283 32.5 0.1111 0.1112 0.1111

104292 104294 37.1 0.1111 0.1111 0.1111

107349 107350 44.6 0.1111 0.1109 0.1111

107885 107886 36.4 0.1111 0.1111 0.1111

108184 108186 33.3 0.1111 0.1110 0.1111

110864 110865 37.2 0.1111 0.1109 0.1111

112070 112071 41.3 0.1111 0.1109 0.1111

112198 112200 30.8 0.1111 0.1110 0.1111

113017 113018 39.1 0.1111 0.1109 0.1111

119693 119695 33.9 0.1111 0.1110 0.1111

122556 122557 38.0 0.1111 0.1110 0.1111

123597 123599 47.9 0.1111 0.1114 0.1111

124378 124379 30.4 0.1111 0.1111 0.1111

125401 125402 35.9 0.1111 0.1110 0.1111

125514 125515 31.6 0.1111 0.1112 0.1111

126804 126806 33.0 0.1111 0.1111 0.1111

127667 127668 30.9 0.1111 0.1111 0.1111

128817 128819 30.2 0.1111 0.1112 0.1111

129037 129040 32.7 0.1111 0.1110 0.1111

131477 131478 40.3 0.1111 0.1111 0.1111

132589 132590 37.7 0.1100 0.1100 0.1100

133900 133902 36.6 0.1111 0.1111 0.1111

134157 134158 32.4 0.1111 0.1112 0.1111

135355 135356 36.3 0.1111 0.1111 0.1111

step 0

Step 1, time 0.001 (ps) LINCS WARNING

relative constraint deviation after LINCS:

rms 0.000047, max 0.002456 (between atoms 47008 and 47009)

bonds that rotated more than 30 degrees:

atom 1 atom 2 angle previous, current, constraint length

18943 18945 33.7 0.1117 0.1112 0.1111

20464 20465 39.1 0.1117 0.1111 0.1111

22966 22968 34.5 0.1120 0.1113 0.1111

23689 23691 31.9 0.1120 0.1112 0.1111

24813 24814 32.4 0.1120 0.1113 0.1111

31442 31443 35.4 0.1118 0.1111 0.1111

35265 35267 30.4 0.1117 0.1111 0.1111

36220 36221 34.1 0.1117 0.1112 0.1111

36273 36274 31.8 0.1118 0.1112 0.1111

38757 38758 38.6 0.1117 0.1112 0.1111

41178 41180 30.8 0.1118 0.1111 0.1111

43372 43373 38.3 0.1118 0.1113 0.1111

47008 47009 44.8 0.1121 0.1114 0.1111

57520 57522 33.7 0.1117 0.1111 0.1111

60993 60994 40.6 0.1123 0.1110 0.1111

60993 60995 32.6 0.1133 0.1109 0.1111

61334 61336 32.4 0.1117 0.1112 0.1111

63615 63617 30.3 0.1120 0.1112 0.1111

64123 64124 38.9 0.1120 0.1111 0.1111

65036 65038 38.2 0.1117 0.1112 0.1111

71571 71573 32.0 0.1120 0.1113 0.1111

73777 73779 31.9 0.1117 0.1111 0.1111

75616 75617 36.6 0.1117 0.1112 0.1111

75943 75945 30.6 0.1120 0.1112 0.1111

79343 79345 30.1 0.1119 0.1112 0.1111

79922 79923 32.1 0.1117 0.1111 0.1111

82322 82324 31.7 0.1120 0.1112 0.1111

85594 85595 33.1 0.1118 0.1112 0.1111

88495 88496 33.3 0.1118 0.1113 0.1111

90555 90557 33.9 0.1118 0.1112 0.1111

98679 98681 31.4 0.1117 0.1111 0.1111

101222 101224 33.0 0.1120 0.1112 0.1111

104292 104294 33.0 0.1119 0.1113 0.1111

107349 107350 40.0 0.1116 0.1113 0.1111

107885 107886 30.0 0.1119 0.1112 0.1111

108184 108186 30.2 0.1117 0.1110 0.1111

110864 110865 33.2 0.1117 0.1111 0.1111

112070 112071 35.8 0.1117 0.1111 0.1111

113017 113018 33.1 0.1117 0.1111 0.1111

119693 119695 30.9 0.1117 0.1111 0.1111

122556 122557 34.3 0.1118 0.1112 0.1111

123597 123599 43.4 0.1122 0.1112 0.1111

125401 125402 32.3 0.1118 0.1112 0.1111

131477 131478 36.5 0.1119 0.1113 0.1111

132589 132590 32.4 0.1108 0.1101 0.1100

133900 133902 33.2 0.1119 0.1113 0.1111

134157 134158 30.0 0.1120 0.1112 0.1111

135355 135356 32.9 0.1118 0.1112 0.1111

step 1: One or more water molecules can not be settled.

Check for bad contacts and/or reduce the timestep if appropriate.

Wrote pdb files with previous and current coordinates

Segmentation fault (core dumped)

root@UK-2016600318:/mnt/c/Aparna/HP2X4\_FINAL/10ps\_membraneproteinruns/charmm\_complete\_solvation/without\_em#