

## Abrir um arquivo output (\*.out) do DICE

Para visualizar o gráfico de Entalpia conformacional por molécula ( $H_c/N$ ) versus os ciclos MC (NMOVE), como mostrado na Figura 1:

- No bloco "Line and Scatter options" selecionar o dado para o eixo-y  $H_c/N$ .
- No bloco "Graph options" clicar no **Show**.

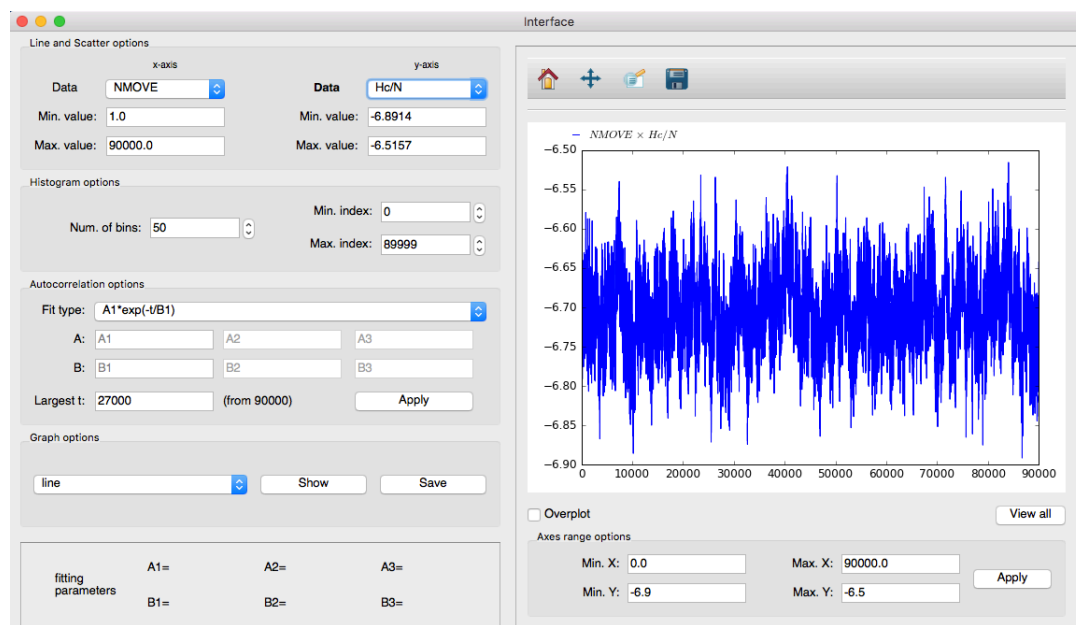


Figura 1: Gráfico da entalpia conformacional por molécula,  $H_c/N$ , versus o número de ciclos MC, NMOVE. Note que essa simulação tem 90mil ciclos no total.

Para gerar a histograma do  $H_c/N$ , como mostrado na Figura 2:

- No bloco "Graph options" selecionar **histogram** e clicar no **Show**.

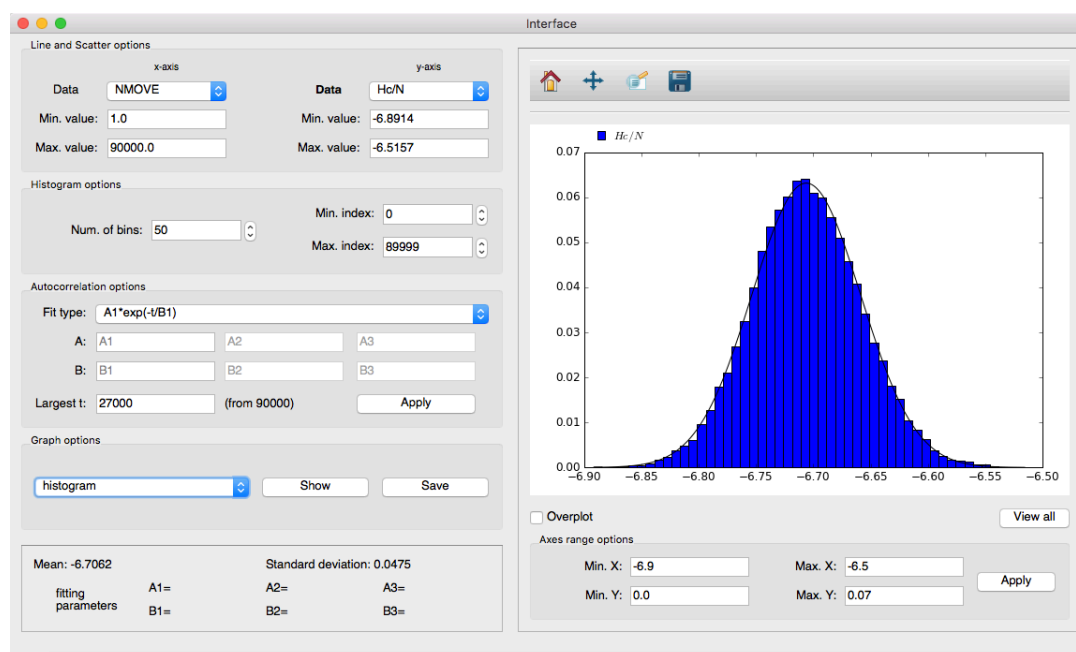


Figura 2: Gráfico do histograma de  $H_c/N$ . Essa simulação tem 90mil ciclos no total. Note no bloco inferior esquerdo o valor médio de -6.7062 kcal/mol e um desvio padrão de 0.0475 kcal/mol que foram usado no ajuste da função gaussiana mostrada no gráfico. Para salvar os dados numéricos deste gráfico clicar no **Save**.

Para gerar a função de autocorrelação do  $H_c/N$ , como mostrado na Figura 3:

- No bloco "Graph options" selecionar **autocorrelation** e clicar no **Show**.

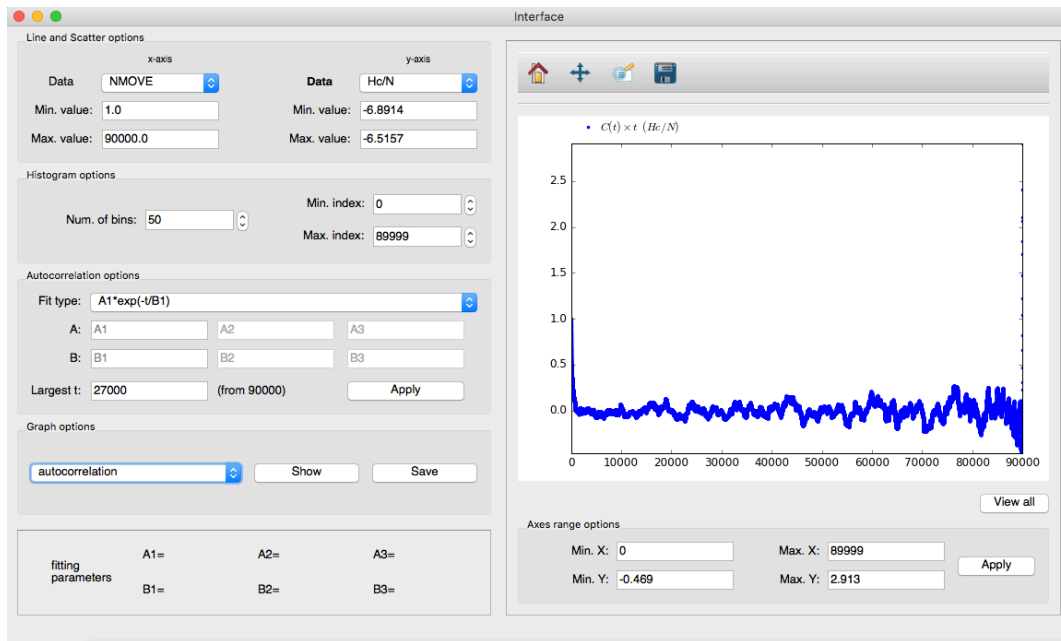


Figura 3: Gráfico da função de autocorrelação de  $H_c/N$ . Essa função foi calculada para os 90mil valores de  $H_c/N$ , porém apenas os primeiros 30% dos pontos apresentam boa representação estatística.

Para fazer o ajuste de funções exponenciais (dupla), como mostrado na Figura 4:

- No bloco "Autocorrelation options" selecionar a função exponencial dupla  $A1 \cdot \exp(-t/B1) + A2 \cdot \exp(-t/B2)$ ; preencher os valores iniciais para  $A1$ : 0.5,  $B1$ : 100,  $A2$ : 0.5 e  $B2$ : 1000; usar apenas 30% dos dados no campo **Largest t** e clicar no **Apply**.

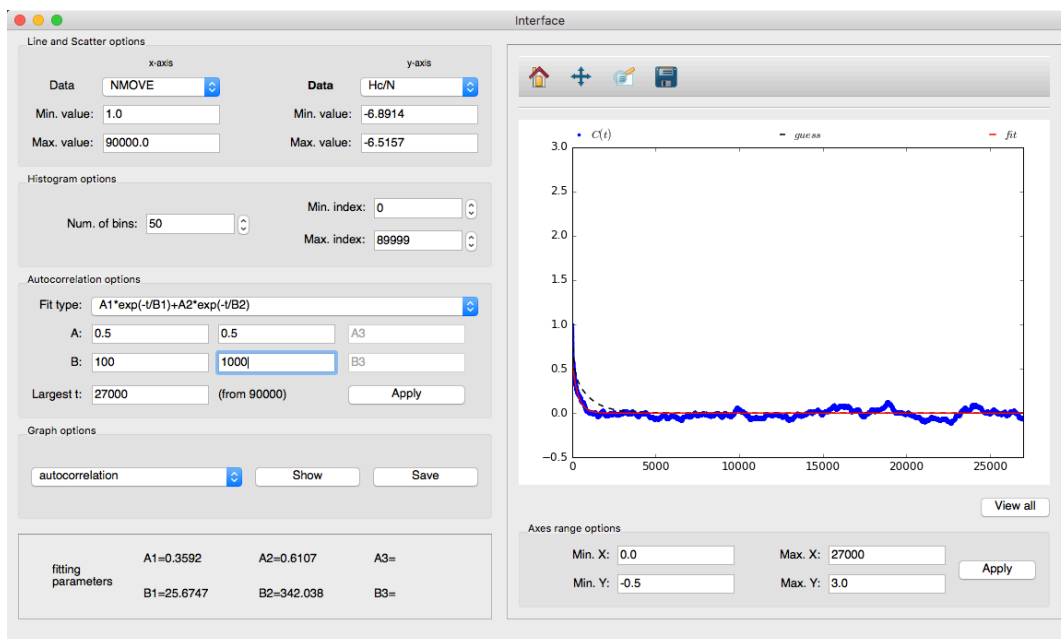


Figura 4: Gráfico da função de autocorrelação de  $H_c/N$  e a função de decaimento com exponencial dupla. A linha pontilhada é gerada com o seus valores iniciais de  $A1$ ,  $B1$ ,  $A2$  e  $B2$  e a linha sólida é a obtida do melhor ajuste. Note no bloco inferior esquerdo os valores obtidos do ajuste:  $A1=0.35$ ,  $B1=25$ ,  $A2=0.61$  e  $B2=342$ .

Para melhor visualização da função de autocorrelação e do ajuste exponencial, como mostrado na Figura 5:

- No bloco "Axes range options" arrumar os intervalos dos eixos X e Y para melhor visualização e clicar no Apply.

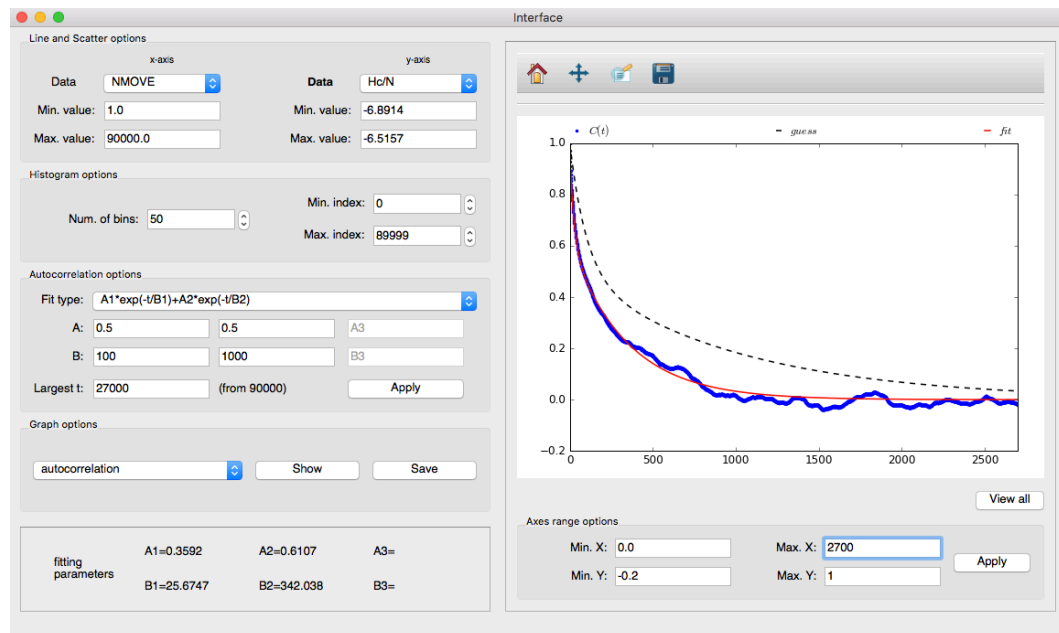


Figura 5: Gráfico da função de autocorrelação de Hc/N e a função de decaimento com exponencial dupla. A linha pontilhada é gerada com o seus valores iniciais e a linha sólida é a obtida do melhor ajuste de A1, B1, A2 e B2. Para salvar os dados numéricos deste gráfico clicar no Save.

## Abrir um arquivo com G(r) (\*.gr) do DICE

Para visualizar o gráfico da função radial de pares entre o centro de massa do soluto e os centro de massa das moléculas de solvente (cm0(1)-cm0(2)) ou entre dois átomos, como mostrado na Figura 6:

- No bloco "Line and Scatter options" selecionar o dado para o eixo-y G(r).
- No bloco "RDF options" selecionar o cm0(1)-cm0(2) e clicar no Show (gráfico da esquerda) e selecionar o N4(1)-N3(2) e clicar no Show (gráfico da direita).

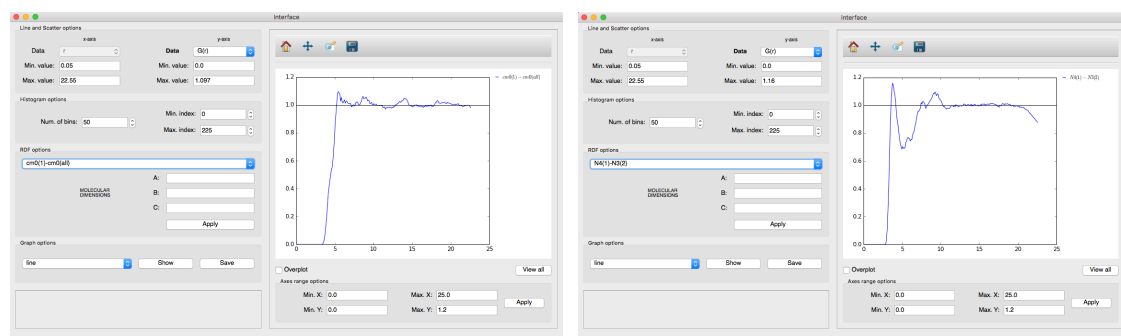


Figura 6: Gráfico da RDF entre: (esquerda) o centro de massa do soluto e os centro de massa das moléculas de solvente (cm0(1)-cm0(2)) e (direita) o átomo N4 do soluto e N3 do solvente (N4(1)-N3(2)). Para salvar os dados numéricos deste gráfico clicar no Save.

Para visualizar o gráfico da função de distribuição de mínima distância entre todos os átomos do soluto e o átomo mais próximo das demais moléculas (MDDF), como mostrado na Figura 7:

- No bloco "Line and Scatter options" selecionar o dado para o eixo-y **G(r)**.
- No bloco "RDF options" selecionar o **all0(1)-nearest(all)** e clicar no **Show**

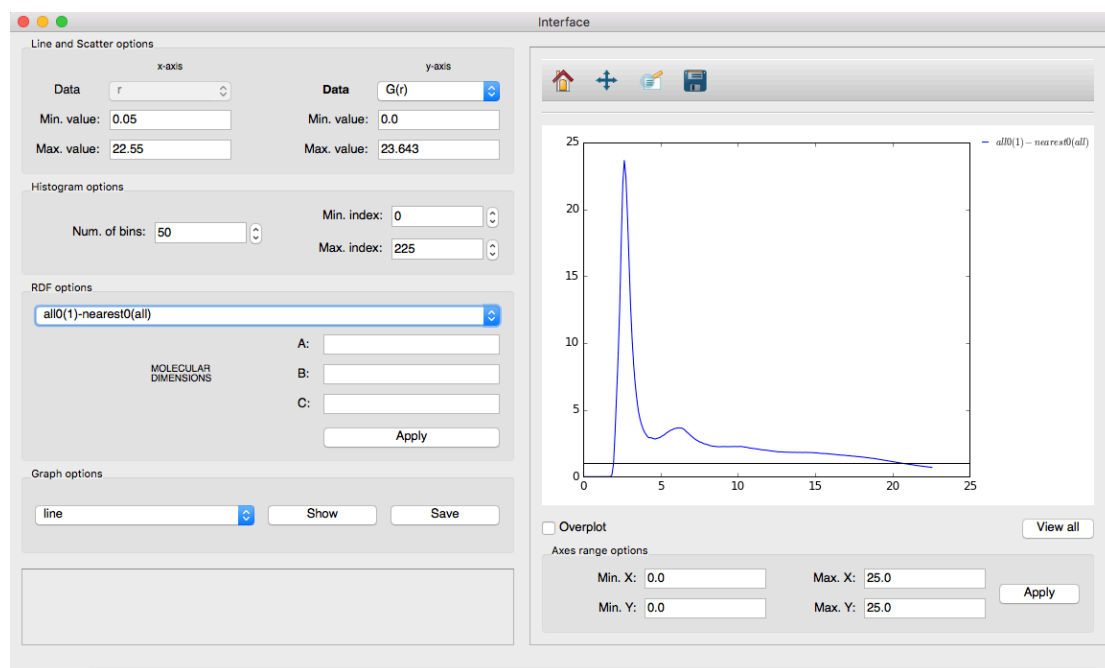


Figura 7: Gráfico da MDDF. Note que a normalização não está correta para moléculas com forma não esférica.

A renormalização da MDDF pode ser refeita usando uma forma de paralelepípedo para o soluto de dimensões A, B e C, como mostrado na Figura 8:

- No bloco "RDF options" preencher os valores para A, B e C e clicar no **Apply**. Essa MDDF com renormalização paralelogrâmica deve flutuar em torno de 1 para distâncias grandes. Por isso, as dimensões da molécula (os valores de A, B e C) podem ser pouco modificados para que a curva tenha esse comportamento.

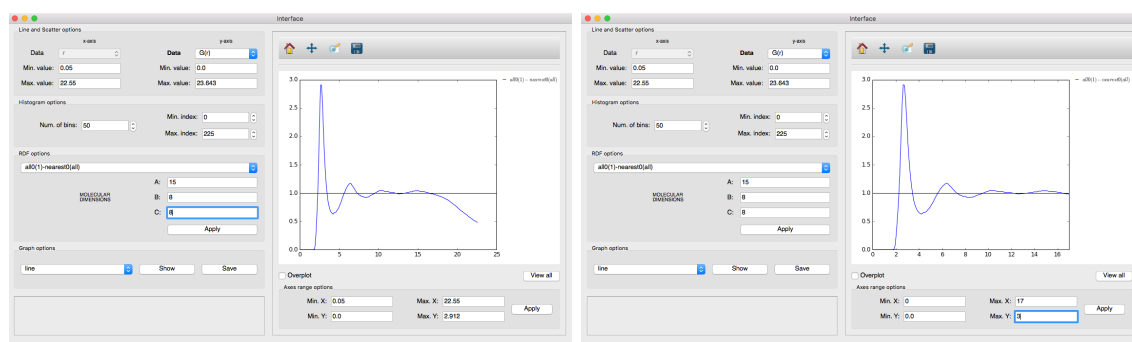


Figura 8: Gráfico da MDDF com a renormalização paralelogrâmica para uma molécula com dimensões 15x8x8Å. Note que como um eixo é maior que os demais, a caixa de simulação cúbica acabará no eixo X antes dos eixos Y e Z. Assim, pouco antes do final da caixa de simulação (neste caso cerca de 6 Å) a MDDF começa a reduzir devido a falta de contagem de moléculas no eixo X. Por isso, o gráfico deve ser redimensionado e apresentado como na direita. Para salvar os dados numéricos deste gráfico clicar no **Save**.