



MÉTODOS QUÂNTICOS SEMIEMPÍRICOS: TEORIA E PRÁTICA
Modelando Sistemas Biológicos com Métodos de Química Quântica

Tutorial para instalação dos programas usados no minicurso

www.quantum-chem.pro.br

M.Sc. Luiz Eduardo Gomes da Cruz

luiz_eduardo_gc@hotmail.com

Dr. Igor Barden Grillo

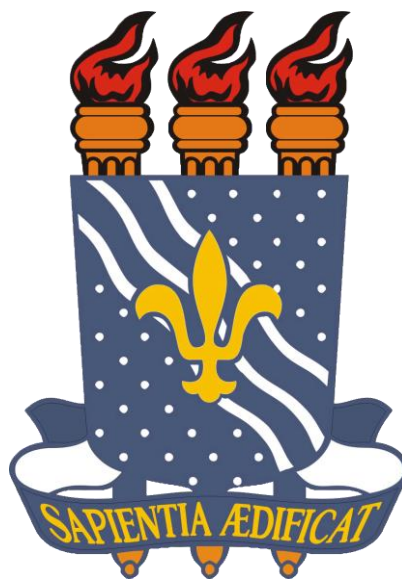
barden.igor@gmail.com

Prof. Gerd Bruno Rocha

gbr@academico.ufpb.br

gbr@quimica.ufpb.br

https://github.com/RochaGerd/Chemistry_with_Python



Grupo de Química Computacional mais Oriental das Américas
L.Q.Q.C. - UFPB - João Pessoa - PB

Novembro 2024, Pirenópolis GO – Brasil

Apresentação dos programas e plataformas utilizados no curso e tutorial de instalação

1. Google Colab (<https://colab.research.google.com/>)
2. MOPAC2016 (<http://openmopac.net> e <https://github.com/openmopac/mopac>)
3. PyMol (<https://pymol.org/2/>)
4. PRIMoRDiA (<https://github.com/igorChem/PRIMoRDiA1.0v>)
5. R package (<https://cran.r-project.org/>)
6. pDynamo (<https://www.pdynamo.org/> e <https://github.com/pdynamo/pDynamo3>)
7. NCILOT(<https://www.lct.jussieu.fr/pagesperso/contrera/nciplot.html>)
8. VMD (<https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>)

Esse tutorial servirá para instalação dos programas em computadores com Linux por preferência, no entanto, todos existem versões para Windows 10/11.

A ideia é de se anteciparem e deixarem preparado o ambiente para termos efetividade nas poucas horas da parte prática, dado o grande número de inscritos.

GOOGLE COLABORATORY

O requisito é ter conta no Google. A plataforma é acessada através do link: <https://colab.research.google.com/>.

MOPAC

O MOPAC é um programa de cálculos quânticos semiempíricos^{1,2}. Ele pode ser conseguido livremente a partir do portal (<http://openmopac.net>) ou do Github (<https://github.com/openmopac/>). Sua instalação, para Linux, Mac e Windows é realizada em duas etapas. No momento é bem mais fácil instalá-lo a partir do repositório Github. Os passos são:

```
$ wget https://github.com/openmopac/mopac/releases/download/v22.0.6/mopac-22.0.6-linux.tar.gz
```

```
$ tar -xvzf mopac-22.0.6-linux.tar.gz
```

O arquivo executável pode ser encontrado no diretório “~/mopac-22.0.6-linux/bin/mopac”. Se desejar incluir esse diretório no seu “path”, você deve editar o arquivo “.bashrc” no diretório “/home/”.

Para rodar o MOPAC, após ter colocado o diretório no “path”, basta usar o comando:

```
$ nohup mopac filename &
```

onde filename é o nome do arquivo .mop.

PYMOL

O programa PyMol é um visualizador e editor de estruturas de biomoléculas. A versão mais recente é paga, mas existe uma versão mais limitada que é de código aberto. Ela pode ser conseguida a partir do endereço (<https://pymolwiki.org/index.php/TOPTOC>) e clicando no link mostrado na figura 1.

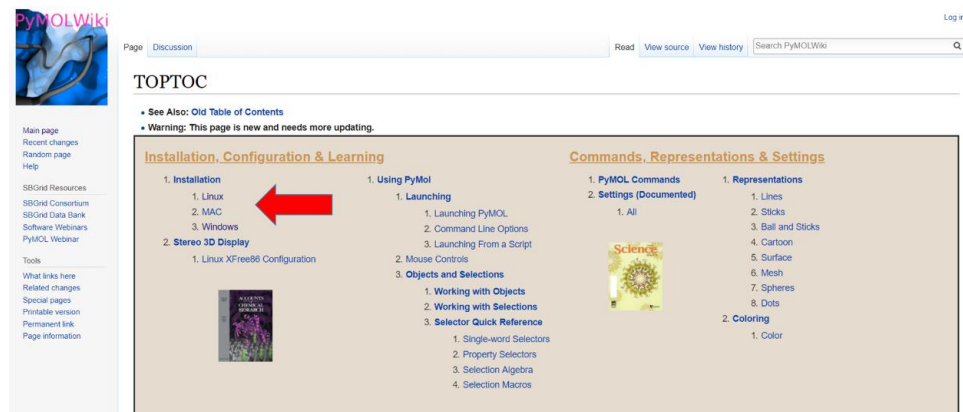


Figura 1. Tela para download da versão *OpenSource* do programa PyMol.

Os links apontados direcionarão o usuário a diferentes procedimentos para instalação do PyMol.

No caso do Linux, a versão *OpenSource* do programa PyMol se encontra no repositório da maioria das distribuições Linux, tornando esse procedimento bem fácil de ser instalado.

Para Windows você deve seguir os links apropriados e mostrado na tela da figura 2.

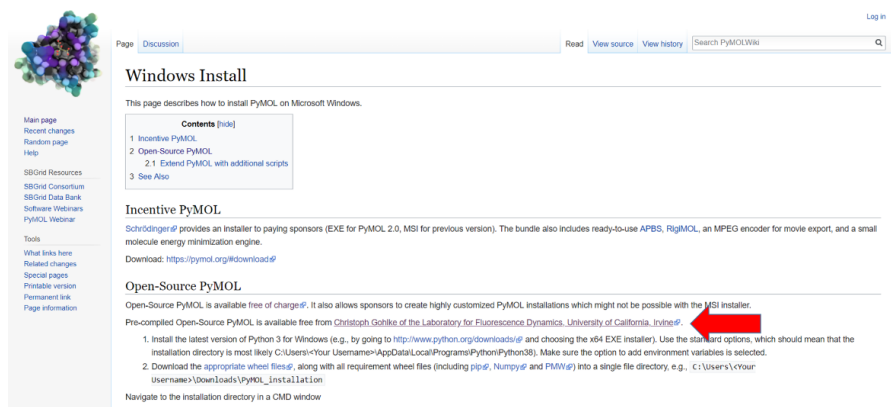


Figura 2. Tela para download da versão *OpenSource* do programa PyMol para Windows.

Você ainda pode obter uma licença educacional do PyMol através do link (<https://pymol.org/edu/>).

PRIMoRDiA

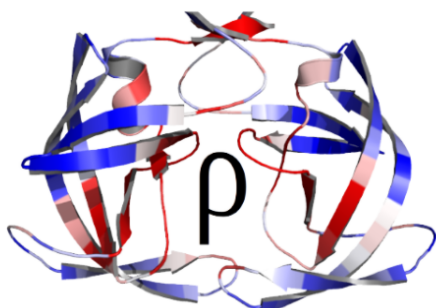
O programa PRIMoRDiA (*PRIMoRDiA Macromolecular Reactivity Descriptors Access*)³ foi desenvolvido para calcular descritores moleculares de química quântica e em especial os descritores de reatividade definidos pela abordagem CDFT (*Conceptual Density Functional Theory*). O foco do desenvolvimento do PRIMoRDiA foi para ser usado com biomoléculas e emprega um tratamento eficiente dos *outputs* produzidos por pacotes de química quântica (ORCA, MOPAC, GAMESS, Gaussian, Terachem, etc.).

Instruções de instalação e tutoriais estão em wiki (<https://github.com/igorChem/PRIMoRDiA1.0v>). Todos os fundamentos teóricos e tutoriais sobre o PRIMoRDiA estão em arquivo pdf do guia do usuário que pode ser encontrado neste repositório.

Home

Igor Barden Grillo edited this page on 15 Oct · 23 revisions

Welcome to the PRIMoRDiA1.0v wiki!



PRIMoRDiA v1.0
PRIMoRDiA Macromolecular Reactivity Descriptor Access

This is the release of the first stable version of PRIMoRDiA software.

In the wiki pages, we will concentrate on usage examples and more complex tutorials. For theory and complete description of the software usage and requirements, see the [userguide](#).

PRIMoRDiA (PRIMoRDiA Macromolecular Reactivity Descriptors Access) is a shared memory parallel software written in C++ for post electronic structure calculations, that efficiently reads output files from most used quantum mechanics packages, storing molecular information and processing it to generate several descriptors to evaluate the global and local reactivity of molecular systems. PRIMoRDiA supports the main reactivity descriptors of the Conceptual Density Functional Theory, the most famous and used reactivity theory, which works from response variables of the electronic structure of the molecules, as also other electrostatics properties.

Download and installation

This present repository can be cloned or downloaded as a zip file. The executable should work in all LINUX machines with the x86_64 architectures. Thus there is no installation process needed as you can execute the application given the full path or using

▼ Pages 6
Find a Page...
Home
Dealing with errors and examining the log file
Tutorial 1: Calculating Frozen Orbital Reactivity Descriptors
Tutorial 2: Calculating Finite Differences Reactivity Descriptors
Tutorial 3: Calculating Reactivity Descriptors for Macromolecules
Tutorial 4: Electron Density and Molecular Orbitals Generation

Clone this wiki locally

<https://github.com/igorChem/PRIMoRDiA1.0v>

Figura 3. Tela para download e instalação do programa PRIMoRDiA.

A instalação no Linux pode ser conseguida seguindo o procedimento nessa mesma página e apresentado na tela a seguir.

Download and installation

This present repository can be cloned or downloaded as a zip file. The executable should work in all LINUX machines with the x86_64 architectures. Thus there is no installation process needed as you can execute the application given the full path or using an alias defined on your .bashrc file. This can be done with the following line command in your terminal emulator.

```
echo "alias primordia='/home/user/path/to/executable/PRIMoRDiA1.0v/PRIMoRDiA_1.0v_LINUX64 '" >> ~/.bashrc
```

Some problems may occur in the application execution if you do not have missing shared libraries. The execution error must point to the missing library, as the openMP for instance, and you can fix the problem installing the libraries. Other errors we asked to be reported in the [issues](#) page of the present repository.

Compilation with CMAKE

You can compile and built PRIMoRDiA source code very easily using CMake. Besides the compilers and Cmake installation, PRIMoRDiA requires Eigen 3 headers and openMP shared libraries. In Linux ubuntu/debian system, you can use the following commands

```
sudo apt install libeigen3-dev
cd ~/PRIMoRDiA1.0v
cmake .
make
```

Figura 4. Tela para instalação do programa PRIMoRDiA no Linux.

Caso não possua computador Linux, você pode baixar o executável para Windows 10 64bits para executar direto na sua máquina. Esse executável está no site do programa.

Mesmo que você não queira instalar nada nesse momento, ou tiver tido dificuldades de instalar, ou ainda de rodar o executável do Windows 10 64bits, você pode usar os exercícios resolvidos no site do PRIMoRDiA (ou na pasta compartilhada do minicurso) e seguir as aulas sem prejuízo de aprendizado.

PROJETO CRAN R

Site para baixar <https://cran.r-project.org/>

O R é facilmente instalado pelo repositório do Linux, usando

```
$ sudo apt install r-base
```

no entanto, para instalar os *packages* necessários é preciso instalar a versão mais atualizada.

As instruções estão lá no *website* para atualizar o repositório e habilitar as chaves de segurança. Também é possível baixar o arquivo tar.gz com o código fonte e compilar seguindo as instruções que vem na pasta, alguns comandos somente.

O *package* necessário é o ggpubt, um pacote feito para produção de gráficos com qualidade de publicação. Para instalar basta entrar no interpretador do R e executar o comando

```
> install.packages("ggpubr")
```

É bom instalar também alguns pacotes: blas, lapacke, gfortran, curl, e outras bibliotecas que o R requerer na hora da sua compilação ou instalação do pacote citado.

Para instalar para Windows 10/11 é só baixar a versão para esse sistema operacional e executar o instalador.

BIBLIOTECA PDYNAMO

O pDynamo⁴ pode ser encontrado no site <https://github.com/pdynamo/pDynamo3>.

Você pode baixar o código através do comando:

```
$ git clone https://github.com/pdynamo/pdynamo3.git
```

Uma vez clonado o repositório, você pode ir até a pasta `instalation` e rodar o script de instalação.

```
$ python3 Install.py -f
```


NCIPLOT

O NCIPLOT é facilmente instalado através do uso do GIT. Veja o *link* a seguir:

<https://github.com/juliacontrerasgarcia/NCIPLOT-4.2>

No entanto, existem algumas dependências que precisam serem instaladas caso não tenham no seu ambiente Linux. Essa instalação foi preparada para funcionar no ambiente do WSL, todavia também é operacional em sistemas Linux.

Instalando as dependências do NCIPLOT:

```
$ sudo apt-get install gfortran
$ sudo apt install make
```

Clonando o NCIPLOT e instalando:

```
$ git config --global core.compression 0
$ git clone --depth 1 https://github.com/juliacontrerasgarcia/NCIPLOT-4.2.git
$ cd NCIPLOT-4.2/src_ncipLOT_4.2
$ make mrproper
$ make
```

Criando um atalho para o NCIPLOT no ambiente do bash:

```
$ echo 'alias nciplot="/home/XXXXXX/NCIPLOT-4.2/src_ncipLOT_4.2/ncipLOT"' >>
~/.bashrc
```

onde **XXXXXX** é o nome do seu usuário.

```
$ source ~/.bashrc
```

Instalando utilitários para o NCIPLOT:

```
$ sudo apt install okular
```

```
$ sudo apt install gnuplot-nox
```

VMD

O programa VMD é distribuído de forma gratuita, mas é preciso se cadastrar no portal de distribuição do programa.

<https://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=VMD>

Acesse o site fornecido e baixe a versão: [LINUX_64 \(RHEL 7+\) OpenGL, CUDA, OptiX RTX, OSPRay](#) no diretório /home/user/

Instalando o VMD:

```
$ tar -xvzf vmd-1.9.4a57.bin.LINUXAMD64-CUDA102-OptiX650-  
OSPRay185.opengl.tar.gz vmd-1.9.4a57
```

```
$ cd vmd-1.9.4a57/
```

Use o comando abaixo caso seja no Linux:

```
$ ./configure LINUXAMD64
```

```
$ cd src/
```

```
$ sudo make install
```

Use o comando abaixo caso seja no WSL:

```
$ ./configure WIN64
```

REFERÊNCIAS

- (1) Stewart, J. J. P. MOPAC web site openmopac.net (accessed Mar 30, 2022).
- (2) Maia, J. D. C.; Urquiza Carvalho, G. A.; Mangueira, C. P.; Santana, S. R.; Cabral, L. A. F.; Rocha, G. B. GPU Linear Algebra Libraries and GPGPU Programming for Accelerating MOPAC Semiempirical Quantum Chemistry Calculations. *J. Chem. Theory Comput.* **2012**, 8 (9), 3072–3081.
- (3) Grillo, I. B.; Urquiza-Carvalho, G. A.; Rocha, G. B. PRIMoRDiA: A Software to Explore Reactivity and Electronic Structure in Large Biomolecules. *J. Chem. Inf. Model.* **2020**, 60 (12), 5885–5890.
- (4) Field, M. J. The PDynamo Program for Molecular Simulations Using Hybrid Quantum Chemical and Molecular Mechanical Potentials. *J. Chem. Theory Comput.* **2008**, 4 (7), 1151–1161.