

10ª ESCOLA DE MODELAGEM MOLECULAR EM SISTEMAS BIOLÓGICOS



24 A 28 DE MAIO DE 2021

MÉTODOS QUÂNTICOS SEMIEMPÍRICOS: TEORIA E PRÁTICA

Modelando sistemas moleculares e biológicos com métodos de química quântica

Tutorial para instalação dos programas usados no minicurso

www.quantum-chem.pro.br

M. Sc. Igor Barden Grillo

barden.igor@gmail.com

Prof. Gerd Bruno Rocha

gbr@academico.ufpb.br

gbr@quimica.ufpb.br



Maio 2021, Plataformas Digitais – Brasil

Apresentação dos programas utilizados no curso e tutorial de instalação

1. MOPAC2016 (<http://openmopac.net>)
2. PyMol (<https://pymol.org/2/>)
3. PRIMoRDiA (<https://github.com/igorChem/PRIMoRDiA1.0v>)
4. R package (<https://cran.r-project.org/>)

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

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.

MOPAC

O MOPAC é um programa de cálculos quânticos semiempíricos^{1,2}. Ele pode ser conseguido livremente a partir do portal (<http://openmopac.net>). Sua instalação, para Linux, Mac e Windows é realizada em duas etapas. A primeira é requisitar a licença acadêmica para seu uso e a segunda é a ativação dessa licença com o executável do programa.

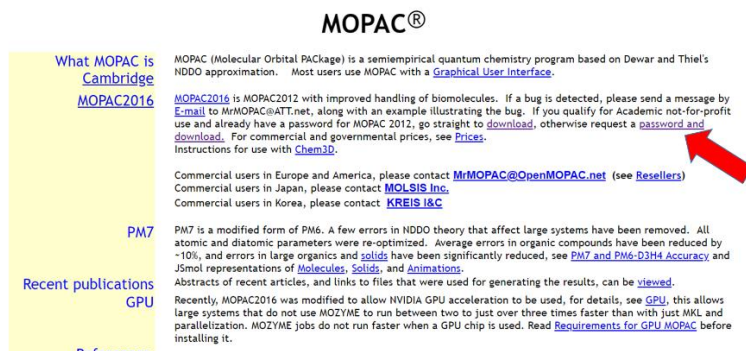


Figura 1. Portal do MOPAC com indicação do link para requisitar a licença acadêmica para seu uso.

Request for an Academic license for MOPAC 2016

The screenshot shows the 'Academic downloads' page for MOPAC 2016. On the left is a red sidebar with navigation links: Home, Details, Background, Downloads, GUIs, Support, Developers, and Contact us. The main content area has a green background and contains a form for requesting an academic license. The form includes fields for 'Your full name:', 'Name of Institution:', 'City:', 'State:', 'Country:', and 'E-mail address for license key:'. There is also a 'Comments:' text area. At the bottom of the form are 'Submit' and 'Reset' buttons. Above the form, a note states: 'MOPAC2016 is available free for academic, not-for-profit use. Please complete the following form to request a license key. An email address from a bona-fide academic institution is required. If you already have a license for MOPAC2016, please download a [new executable](#). Do NOT fill out this form.'

Figura 2. Tela para requisição da licença do programa MOPAC.

Uma vez solicitada a licença para seu uso, o próximo passo é fazer o download do programa, que nesse caso vai depender do seu sistema operacional.

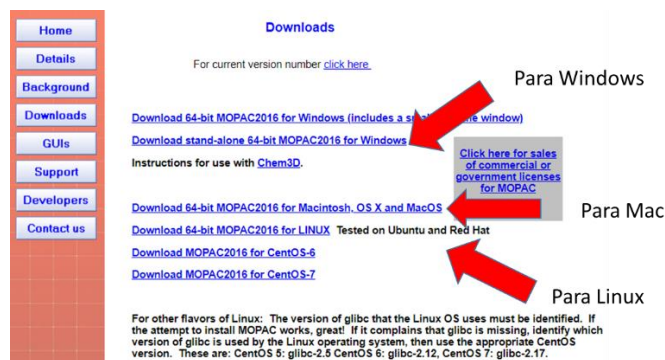


Figura 3. Tela para download do executável do MOPAC dependendo do seu sistema operacional.

Uma vez recebida a licença acadêmica (vem por e-mail) e de posse do executável do MOPAC, a ativação se dá seguindo as instruções que estão inseridas no arquivo *“Installation instructions.txt”*.

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 5.

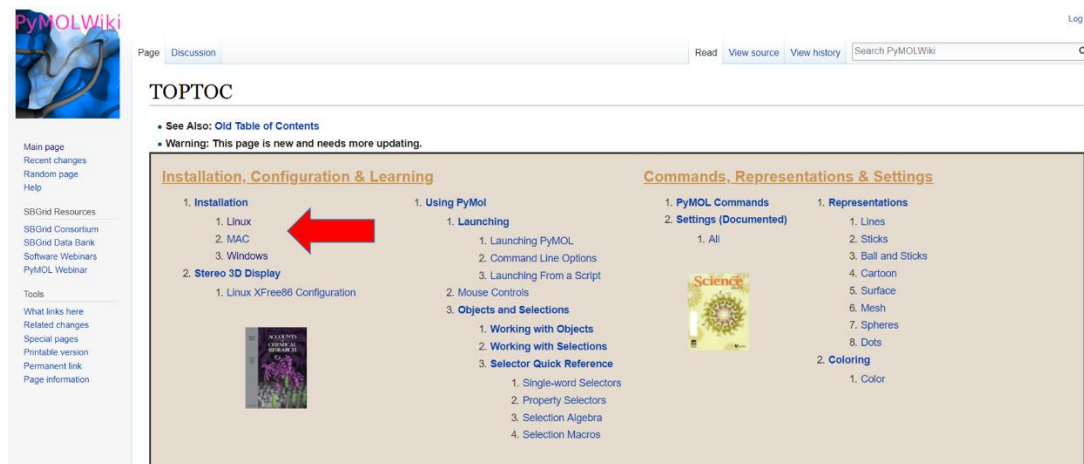


Figura 5. Tela para download da versão *OpenSource* do programa PyMol.

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 6.

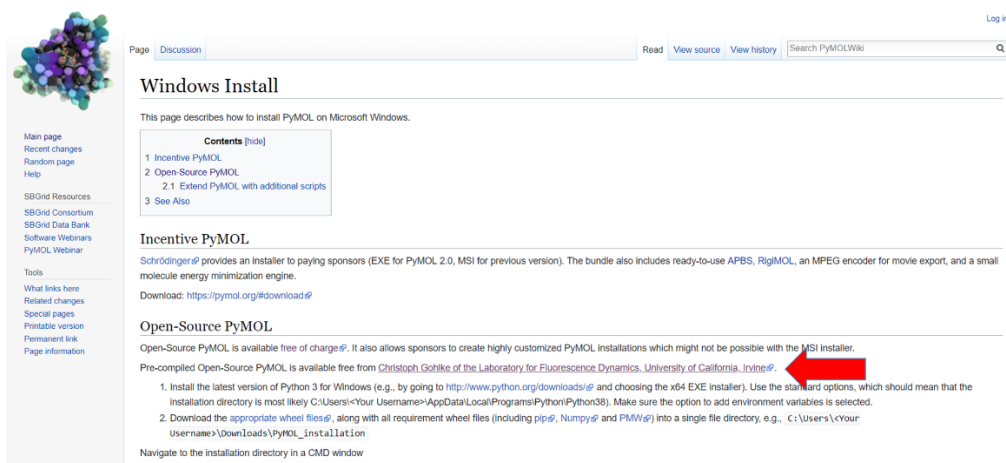


Figura 6. Tela para download da versão *OpenSource* do programa PyMol para Windows.

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.

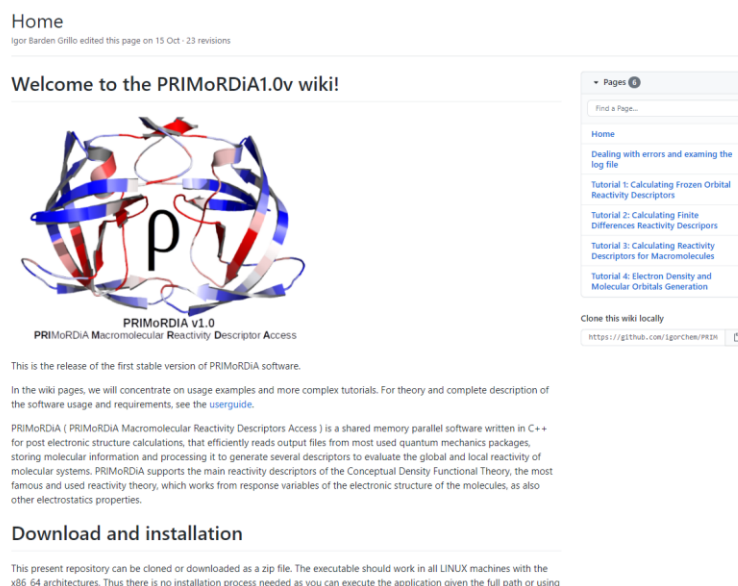


Figura 7. Tela para download e instalação do programa PRIMoRDiA.

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 8. Tela para instalação do programa PRIMoRDiA no Linux.

Caso não possa computador Linux você pode baixar o executável para Windows 10 64bits para executar direto na sua máquina. Esse executável está na pasta de divulgação do minicurso e também 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/>

Tem para windows e linux

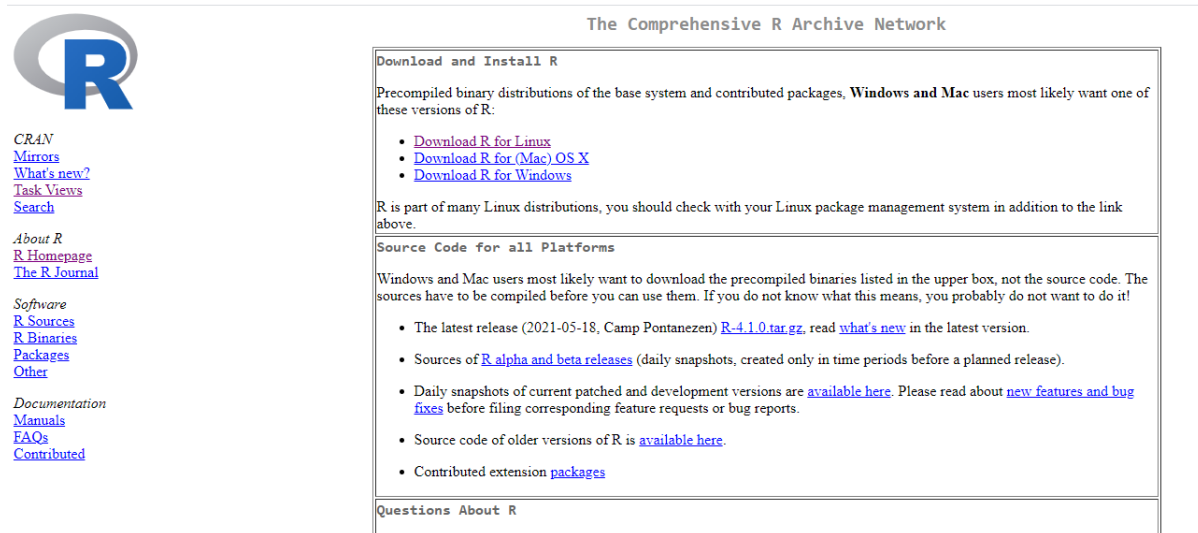


Figura 9. Tela para instalação do programa CRAM R.

No Linux o R é facilmente instalado pelo repositório usando

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

no entanto, para instalar os packages necessários é preciso instalar a versão 4.0 ou mais atualizada.

As instruções estão lá no site 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 é só baixar a versão para esse sistema operacional e executar o instalador.

Referências bibliográficas

- (1) Stewart, J. J. P. MOPAC web site openmopac.net (accessed Apr 26, 2014).
- (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**, acs.jcim.0c00655.