ΠΡΑΚΤΙΚΗ ΑΣΚΗΣΗ

ΘΕΜΑ: Έλεγχος και Εφαρμογές Υπολογιστικών Αλγορίθμων των Προγραμμάτων Μοριακής Δυναμικής TINKER σε Λειτουργικό Περιβάλλον WINDOWS

Βασίλειος Πιτσιδιανάκης, 720

***Υπεύθυνος Καθηγητής*: Σταύρος Φαράντος**

Πανεπιστήμιο Κρήτης
Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών
Ινστιτούτο Ηλεκτρονικής Δομής και Λέιζερ, Ίδρυμα Τεχνολογίας και Έρευνας

Ηράκλειο, 15 Ιουνίου – 15 Αυγούστου 2015

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

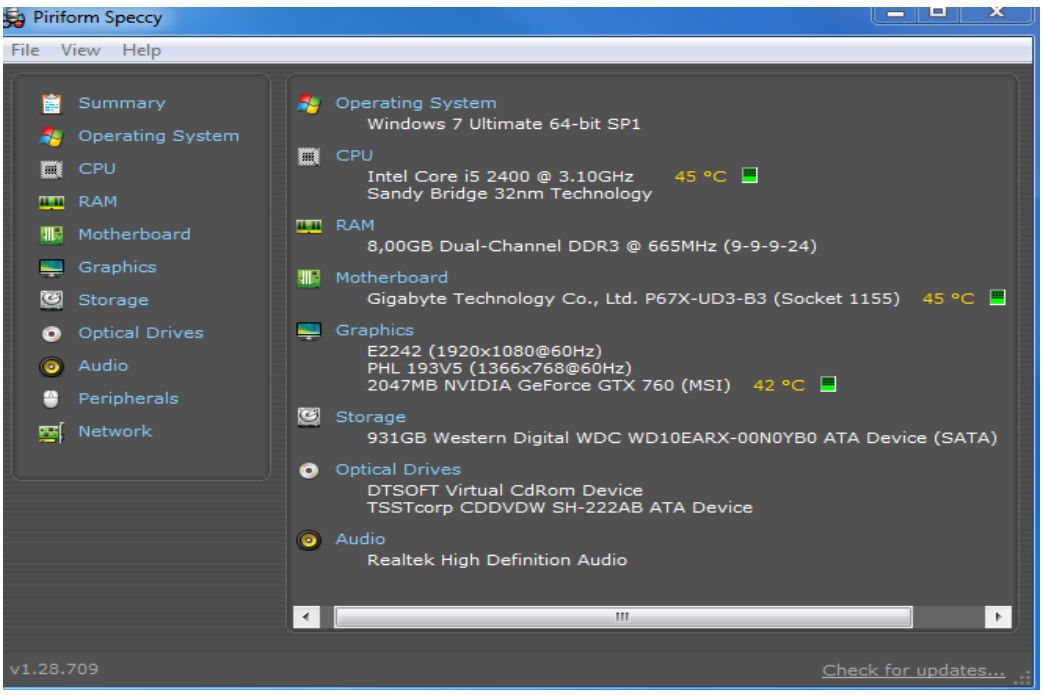
Τίτλος	**Σελίδα**
Ι) Εισαγωγή	3
ΙΙ) Περιγραφή των αρχείων Εισόδου και Εξόδου	4
ΙΙΙ) Δοκιμή και σύγκριση των εφαρμογών στο φάκελο TEST του πακέτου TINKER	7
IV) Επιπλέον προγράμματα του TINKER	
• Προγράμματα Δυναμικής Ενέργειας	34
• Άλλα Βοηθητικά Προγράμματα	37

Ι) ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Σκοπός του project είναι η εξοικείωση του φοιτητή με το υπολογιστικό πακέτο TINKER. Το TINKER έχει σχεδιαστεί να είναι ένα εύκολα διαχειρίσιμο και ευέλικτο σύστημα προγραμμάτων και ρουτινών μοριακής μηχανικής και δυναμικής, καθώς και άλλων ενεργειακών υπολογισμών και υπολογισμών επεξεργασίας δομών. Είναι αρκετά δομοστοιχειωτό για να επιτρέπει την ανάπτυξη νέων υπολογιστικών μεθόδων, αλλά και αρκετά αποτελεσματικό ώστε να καλύπτει τις περισσότερες ανάγκες για παραγωγικούς υπολογισμούς. Το TINKER παρέχει ένα σύνολο από σχετικά μικρά προγράμματα, τα οποία διαλειτουργούν για την εκτέλεση πολύπλοκων υπολογισμών. Τα κύρια προγράμματα του πακέτου περιλαμβάνουν τις εξής βασικές λειτουργίες:

- ✔ Κατασκευή πρωτεϊνικών μοντέλων και μοντέλων νουκλεϊκών οξέων από μια αλληλουχία αμινοξέων και βάσεων,
- ✔ Ελαχιστοποίηση ενέργειας και βελτιστοποίηση δομής,
- ✔ Ανάλυση της κατανομής της ενέργειας μέσα σε μια δομή,
- ✔ Μοριακή δυναμική και στοχαστική δυναμική,
- ✔ Προσομοιωμένη ανόπτηση με την επιλογή χρονοδιαγράμματος ψύξης,
- ✔ Κανονικοί τρόποι και συχνότητες δόνησης,
- ✔ Έρευνα διαμορφώσεων και ολική βελτιστοποίηση,
- ✔ Θέση μεταβατικής κατάστασης και μονοπάτια αντίδρασης,
- ✔ Προσαρμογή των ενεργειακών παραμέτρων στα κρυσταλλικά δεδομένα,
- ✔ Γεωμετρία αποστάσεων με μετρικούς χώρους,
- ✔ Μοριακοί όγκοι και εμβαδά επιφάνειας,
- ✔ Αλλαγές της ελεύθερης ενέργειας για δομικές μεταλλάξεις,
- ✔ Εξειδικευμένοι αλγόριθμοι που βασίζονται στην ομαλοποίηση του δυναμικού.

Για την κατανόηση των βασικών λειτουργιών του πακέτου TINKER, πραγματοποιήθηκε εφαρμογή των προγραμμάτων που αναφέρονται στα batch files στο φάκελο *TEST* του πακέτου διανομής και στη συνέχεια, σύγκριση των αποτελεσμάτων με τα ήδη υπάρχοντα δεδομένα στα log files. Το σύστημα όπου εκτελέστηκαν όλα τα προγράμματα αποτελείται από τα εξής:



Στην παρούσα εργασία περιγράφονται αναλυτικά όλα τα αρχεία και τα προγράμματα που

χρησιμοποιήθηκαν σε κάθε εφαρμογή, οι πόροι που καταναλώθηκαν από το σύστημα και μετά γίνεται ανάλυση των διαφορών που υπάρχουν στα αρχεία καταγραφής.

ΙΙ) ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΤΩΝ ΑΡΧΕΙΩΝ ΕΙΣΟΔΟΥ (INPUT) ΚΑΙ ΕΞΟΔΟΥ (OUTPUT)

Ας υποθέσουμε ότι το όνομα ενός μορίου, το οποίο θα χρησιμοποιηθεί για υπολογισμούς από τα προγράμματα του TINKER, έχει το όνομα **sample**. Τότε όλα τα αρχεία TINKER που υπάρχουν στον υπολογιστή θα έχουν το όνομα **sample.xxx**, όπου **.xxx** μία από τις διάφορες επεκτάσεις που περιγράφονται παρακάτω.

1. SAMPLE.XYZ

Το αρχείο .xyz είναι ο βασικός τύπος αρχείου TINKER καρτεσιανών συντεταγμένων. Περιέχει μία γραμμή τίτλου που ακολουθείται από μία γραμμή για κάθε άτομο στη δομή. Κάθε γραμμή περιέχει: τον αύξοντα αριθμό μέσα στη δομή, ένα ατομικό σύμβολο ή όνομα, X-,Y-, και Z-συντεταγμένες, τον αριθμό του τύπου του πεδίου δυνάμεων του ατόμου, και μία λίστα από τα άτομα που είναι συνδεδεμένα με το συγκεκριμένο άτομο. Εκτός από τα προγράμματα των οποίων η βασική λειτουργία είναι στον στρεπτικό χώρο, όλοι οι υπολογισμοί του TINKER γίνονται από κάποια εκδοχή της μορφής .xyz.

2. SAMPLE.INT

Το .int αρχείο περιέχει μία αναπαράσταση των εσωτερικών συντεταγμένων της μοριακής δομής. Αποτελείται από μια γραμμή τίτλου ακολοθούμενη από μία γραμμή για κάθε άτομο στη δομή. Κάθε γραμμή περιέχει: τον αύξοντα αριθμό μέσα στη δομή, ένα ατομικό σύμβολο ή όνομα, τον αριθμό του τύπου του πεδίου δυνάμεων του ατόμου, και τις εσωτερικές συντεταγμένες στη συνήθη μορφή Z-πίνακα. Για κάθε άτομο οι εσωτερικές συντεταγμένες αποτελούνται από μία απόσταση από κάποιο άτομο που έχει προηγουμένως οριστεί, και είτε 2 γωνίες δεσμού είτε μία γωνία δεσμού και μία δίεδρη γωνία με τα προηγούμενα άτομα. Οι ορισμοί των μηκών, γωνιών και διέδρων δεν οφείλουν να αντιπροσωπεύουν αλλελεπιδράσεις πραγματικών δεσμών. Μετά από τον τελευταίο ατομικό ορισμό βρίσκονται δύο σύνολα από ζεύγη ατομικών αριθμών διαχωρισμένα με κενή γραμμή. Η πρώτη λίστα περιέχει ζεύγη ατόμων που είναι ομοιοπολικά συνδεδεμένα, αλλά των οποίων το μήκος δεσμού δεν χρησιμοποιήθηκε ως μέρος των ατομικών ορισμών. Αυτά τα ζεύγη συνήθως χρησιμοποιούνται για να κλείσουν δακτυλικές δομές. Η δεύτερη λίστα περιέχει δεσμούς που είναι για να σπάσουν, δηλαδή ζεύγη ατόμων που δεν είναι ομοιοπολικά συνδεδεμένα, αλλά τα οποία χρησιμοποιήθηκαν για να καθορίσουν μία απόσταση στους ατομικούς ορισμούς.

3. SAMPLE.KEY

Το "λέξη-κλειδί" αρχείο παραμέτρων έχει πάντα την κατάληξη .key και είναι προαιρετικά παρόν κατά τη διάρκεια υπολογισμών του TINKER. Περιέχει τιμές για οποιαδήποτε από μία ευρεία ποικιλία από μετατροπείς και παραμέτρους που χρησιμοποιούνται για να αλλάξουν την πορεία των υπολογισμών από την προεπιλεγμένη. Τα λεπτομερή περιεχόμενα αυτού του αρχείου περιγράφονται σε άλλο τμήμα της αναφοράς. Εάν δεν υπάρχει το αρχείο sample.key, τότε το πρόγραμμα του TINKER θα ψάξει στον ίδιο κατάλογο για ένα γενικό αρχείο με το όνομα **tinker.key**.

4. SAMPLE.DYN

Το αρχείο .dyn περιέχει τις τιμές που απαιτούνται για να επανεκκινηθεί ο υπολογισμός μοριακής ή στοχαστικής δυναμικής. Αποθηκεύει την τρέχουσα θέση, την τρέχουσα ταχύτητα και τις τρέχουσες και προηγούμενες επιταχύνσεις για κάθε άτομο, καθώς επίσης και το μέγεθος και το σχήμα οποιουδήποτε περιοδικού κουτιού ή κρυσταλλικής μοναδιαίας κυψελίδας. Αυτή η πληροφορία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να ξεκινήσει ένας νέος γύρος δυναμικής από την τελική κατάσταση του προηγούμενου γύρου. Κατά την εκκίνηση, τα προγράμματα δυναμικής ελέγχουν πάντα για την παρουσία ενός αρχείου .dyn και να κάνουν χρήση του όποτε χρειάζεται. Το αρχείο .dyn ενημερώνεται ταυτόχρονα με την αποθήκευση ενός νέου στιγμιότυπου δυναμικής τροχιάς.

5. SAMPLE.END

Ο τύπος αρχείου .end παρέχει ένα μηχανισμό για να σταματήσει έναν υπολογισμό που τρέχει από το TINKER. Σε κατάλληλα σημεία ελέγχου κατά τη διάρκεια ενός υπολογισμού, το TINKER θα ψάξει για την παρουσία ενός αρχείου sample.end και αν βρεθεί, θα σταματήσει τον υπολογισμό, αφού ενημερώσει την έξοδο. Το αρχείο .end μπορεί να δημιουργηθεί ανά πάσα στιγμή κατά τη διάρκεια ενός υπολογισμού και θα ανιχνεύεται όταν φτάσει το επόμενο σημείο ελέγχου. Το αρχείο μπορεί να έχει μηδενικό μέγεθος, χωρίς περιεχόμενο. Στην παρούσα έκδοση του TINKER, ο μηχανισμός .end είναι διαθέσιμος μόνο μέσα στο πλαίσιο προγραμμάτων δυναμικής.

6. SAMPLE.001, SAMPLE.002, …

Διάφοροι τύποι των υπολογισμών παράγουν αρχεία που περιέχουν επέκταση τριών ή περισσοτέρων ψηφίων (.001, .002, .137, .5678, κλπ.). Αυτά αναφέρονται ως "*cycle files*" (*κυκλικά αρχεία*) και χρησιμοποιούνται για την αποθήκευση διαφόρων τύπων από δομές εξόδου. Τα *κυκλικά αρχεία* από έναν δεδομένο υπολογισμό είναι πανομοιότυπα σε εσωτερική δομή είτε με αρχεία .xyz είτε .int που περιγράφονται παραπάνω. Για παράδειγμα, το πρόγραμμα ανάλυσης δονήσεων μπορεί να αποθηκεύσει το δέκατο κανονικό τρόπο δόνησης στο *sample.010*. Ένα πρόγραμμα μοριακής δυναμικής θα μπορούσε να σώσει το δέκατο καρέ των 0.1 picosecond (ή ένας ελαχιστοποιητής ενέργειας το δέκατο μερικώς ελαχιστοποιημένο ενδιάμεσο) σε ένα αρχείο με το ίδιο όνομα.

7. SAMPLE.LOG

Ο "Force Field Explorer" (*Εξερευνητής Πεδίου Δυνάμεων*) του TINKER σώζει τα αποτελέσματα από όλους τους υπολογισμούς που ξεκινάνε από το GUI σε ένα αρχείο καταγραφής με την επέκταση .log. Οποιαδήποτε έξοδος που θα έπρεπε κανονικά να δρομολογηθεί στην οθόνη μετά από την εκκίνηση ενός προγράμματος από τη γραμμή εντολών επισυνάπτεται σε αυτό το αρχείο καταγραφής από το "Force Field Explorer'.

8. SAMPLE.ARC

Ένα αρχείο αρχειοθέτησης TINKER είναι απλά μια σειρά από αρχεία .xyz Καρτεσιανών συντεταγμένων που επισυνάπτονται μαζί το ένα μετά το άλλο. Αυτό το αρχείο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να συμπυκνώσει τα αποτελέσματα από τα ενδιάμεσα στάδια μιας βελτιστοποίησης, καρέ από μια μοριακή δυναμική τροχιά, ή ένα σύνολο από κανονικούς τρόπους δόνησης σε ένα ενιαίο αρχείο για αποθήκευση. Τα αρχεία αρχειοθέτησης TINKER μπορούν να εμφανίζονται ως "movies" από το πρόγραμμα μοντελοποίησης του "Force Field Explorer".

9. SAMPLE.PDB

Αυτός ο τύπος αρχείου περιέχει πληροφορίες συντεταγμένων στη μορφή PDB που αναπτύχθηκε από την Protein Data Bank για την αποθήκευση μοντέλων δομών βασισμένων σε μακρομοριακή περίθλαση ακτίνων-Χ και σε δεδομένα από NMR. Παρόλο που το ίδιο το TINKER δεν χρησιμοποιεί αρχεία .pdb απευθείας για είσοδο/έξοδο, παρέχονται με το σύστημα βοηθητικά προγράμματα για την μετατροπή των αρχείων .pdb στη μορφή .xyz που περιγράφεται παραπάνω.

10. SAMPLE.SEQ

Αυτός ο τύπος αρχείου περιέχει την κύρια αλληλουχία ενός βιοπολυμερούς στο πρότυπο "one-letter" κώδικα (ενός γράμματος) με 50 υπόλοιπα ανά γραμμή. Το αρχείο .seq για ένα βιοπολυμερές δημιουργείται αυτόματα όταν ένα αρχείο PDB μετατρέπεται στη μορφή του TINKER .xyz ή όταν χρησιμοποιούνται τα προγράμματα *PROTEIN* και *NUCLEIC* για να κτιστεί η δομή από μια αλληλουχία. Επίσης, χρησιμοποιείται για την αντίστροφη μετατροπή ενός αρχείου TINKER πίσω στη μορφή PDB.

11. SAMPLE.FRAQ

Οι κλασματικές συντεταγμένες που αντιστοιχούν στην ασύμμετρη μονάδα μιας κρυσταλλικής μοναδιαίας κυψελίδας αποθηκεύονται στο αρχείο .fraq. Η εσωτερική μορφή αυτού του αρχείου είναι παρόμοια με το αρχείο .xyz, μόνο που οι συντεταγμένες είναι κλασματικές αντί σε μονάδες Angstrom.

12. SAMPLE.XMOL

Το πρόγραμμα ARCHIVE έχει τη δυνατότητα να μετατρέπει μία σειρά από .xyz cycle files σε ένα αρχείο *Xmakemol XYZ*. Αυτά τα αρχεία μπορούν να εμφανιστούν σαν ταινία χρησιμοποιώντας το πρόγραμμα *Xmakemol.* Να σημειωθει ότι η μορφή αρχείου .xmol δεν περιέχει πληροφορίες για τύπο ατόμου του TINKER, έτσι δεν είναι δυνατό να μετατραπεί ένα αρχείο .xmol πίσω σε αρχείο TINKER .xyz.

13. SAMPLE.CAR

Το πρόγραμμα ARCHIVE έχει τη δυνατότητα να μετατρέπει μία σειρά από .xyz cycle files σε ένα αρχείο αρχειοθέτησης συντεταγμένων *Accelerys InsightII*. Αυτά τα αρχεία μπορούν να εμφανιστούν σαν ταινία χρησιμοποιώντας το πρόγραμμα προβολής *InsightII.* Να σημειωθεί ότι η μορφή αρχείου .car δεν περιέχει πληροφορίες για τύπο ατόμου του TINKER, έτσι δεν είναι δυνατό να μετατραπεί ένα αρχείο .car πίσω σε αρχείο TINKER .xyz.

14. PARAMETER FILES

Τα αρχεία παραμέτρων δυναμικής ενέργειας που διανέμονται με το πακέτο του TINKER όλα καταλήγουν με επέκταση .prm, αν και αυτό δεν απαιτείται από τα ίδια τα προγράμματα. Κάθε ένα από αυτά τα αρχεία περιέχει έναν ορισμό για της λειτουργικές μορφές της δυναμικής ενέργειας για το συγκεκριμένο πεδίο δυνάμεων καθώς και τις τιμές για τις επιμέρους παραμέτρους ενέργειας. Για παράδειγμα, το αρχείο mm3pro.prm περιέχει τις παραμέτρους ενέργειας και τους ορισμούς που απαιτούνται για μία ειδικά για πρωτεΐνες έκδοση του πεδίου δυνάμεων MM3.

ΙΙΙ) ΔΟΚΙΜΗ ΚΑΙ ΣΥΓΚΡΙΣΗ ΤΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ ΣΤΟ

ΦΑΚΕΛΟ TEST ΤΟΥ ΠΑΚΕΤΟΥ TINKER

1) Τίτλος Εφαρμογής: *anion*

- **<u>Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:</u>** *Dynamic*, *Alchemy*
- **<u>Περιγραφή των προγραμμάτων:</u>**

Dynamic

Με το *Dynamic* γίνεται η ολοκλήρωση των εξισώσεων της Μοριακής Δυναμικής (MD) στο χρόνο. Υπολογίζει μοριακές δυναμικές τροχιές σε οποιοδήποτε από τα διάφορα στατιστικά μηχανικά σύνολα με κατ' επιλογήν περιοδικά όρια, θερμοκρασία και πίεση. Μπορεί να ξεκινήσει είτε από μια δομή που εισάγεται (αρχείο .xyz) είτε από μια δυναμική τροχιά που έχει προηγουμένως αποθηκευτεί (επανεκκίνηση από αρχείο .dyn). Χρησιμοποιεί ολοκληρωτές, όπως Beeman και velocity Verlet. Επιπλέον μπορεί να εκτελέσει υπολογισμούς για Στοχαστική Δυναμική (SD). Τα σύνολα των συντεταγμένων κατά την τροχιά μπορούν να αποθηκευτούν ως διαδοχικά αριθμημένα κυκλικά αρχεία ή σε αρχείο αρχειοθέτησης .arc. Την ίδια στιγμή που αποθηκεύεται ένα σημείο της τροχιάς, ενημερώνονται οι πλήρεις πληροφορίες που χρειάζονται για να επανεκκινηθεί η τροχιά από εκείνο το σημείο και αποθηκεύονται στο αρχείο .dyn.

Παρακάτω φαίνεται το Input:

```
      ###############################################################################
    ###################################################################################
  ###                                                                               ###
###            TINKER  ---  Software Tools for Molecular Design                     ###
##                                                                                     ##
##                          Version 7.1  February 2015                                 ##
##                                                                                     ##
##                Copyright (c)  Jay William Ponder  1990-2015                         ##
###                          All Rights Reserved                                      ###
  ###                                                                               ###
    ###################################################################################
      ###############################################################################

 Enter Cartesian Coordinate File Name :  anion

 Additional Atom Type Parameters :

     Type  Class  Symbol  Description              Atomic    Mass    Valence

       1      1     O     O Water (SPC)               8     15.999     2
       2      2     H     H Water (SPC)               1      1.008     1
       3      3     Cl-   Chloride Ion               17     35.453     0
       4      4     X-    Mystery Anion              26     57.678     0
       5      5     Br-   Bromide Ion                35     79.904     0

 Additional Bond Stretching Parameters :

     Atom Classes          K(S)       Length

        1   2          527.200       1.0000

 Additional Angle Bending Parameters :

     Atom Classes          K(B)        Angle

       2   1   2        37.950      109.470

 Additional Urey-Bradley Parameters :

     Atom Classes         K(UB)      Distance

       2   1   2        39.900       1.6330

 Additional van der Waals Parameters :

     Atom Class           Size       Epsilon     Reduction

         1              3.1656       0.1554       0.000
         2              0.0000       0.0000       0.000
         3              4.4463       0.1070       0.000
         4              4.5350       0.0985       0.000
         5              4.6237       0.0900       0.000

 Additional Atomic Partial Charge Parameters :

     Atom Type           Charge

         1             -0.8200
         2              0.4100
         3             -1.0000
         4             -1.0000
         5             -1.0000

 Free Energy Perturbation :          1.000 Lambda for van der Waals
 Free Energy Perturbation :          1.000 Lambda for Electrostatics

 Enter the Number of Dynamics Steps to be Taken :  1000

 Enter the Time Step Length in Femtoseconds [1.0] :  2.0

 Enter Time between Dumps in Picoseconds [0.1] :  0.1

 Available Statistical Mechanical Ensembles :

    (1) Microcanonical (NVE)
    (2) Canonical (NVT)
    (3) Isoenthalpic-Isobaric (NPH)
    (4) Isothermal-Isobaric (NPT)

 Enter the Number of the Desired Choice [1] :  2

 Enter the Desired Temperature in Degrees K [298] :  300
```

Ως Output έχουμε διάφορα αρχεία *anion.001*, *anion.002 ... anion.020*, τα οποία περιλαμβάνουν στιγμιότυπα της τροχιάς κατά την ολοκλήρωση και τέλος τις τελικές θέσεις, ταχύτητες και δυνάμεις του συστήματος, τα οποία εμπεριέχονται στο αρχείο *anion.dyn*.

Όπως φαίνεται στο log file *anion.log* στη συγκεκριμένη εφαρμογή χρησιμοποιεί ως ολοκληρωτή τον αλγόριθμο *Velocity Verlet.*

- **<u>Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:</u>**

  <u>CPU load</u>: ~80-90%

  <u>RAM</u>: 4%

  <u>Χρόνος εκτέλεσης</u>: 14 sec

Alchemy

Το Alchemy υπολογίζει τη μεταβολή της ελεύθερης ενέργειας μέσω της Θεωρίας των Διαταραχών στη στατιστική μηχανική.

Παρακάτω φαίνεται το Input:

```
    ###############################################################
  ###################################################################
 ###                                                               ###
###           TINKER  ---  Software Tools for Molecular Design      ###
##                                                                   ##
##                        Version 7.1  February 2015                 ##
##                                                                   ##
##              Copyright (c)  Jay William Ponder  1990-2015         ##
###                        All Rights Reserved                      ###
 ###                                                               ###
  ###################################################################
    ###############################################################


Enter Cartesian Coordinate File Name :  anion

Additional Atom Type Parameters :

    Type  Class  Symbol  Description              Atomic    Mass   Valence

      1      1     O     O Water (SPC)               8     15.999     2
      2      2     H     H Water (SPC)               1      1.008     1
      3      3     Cl-   Chloride Ion               17     35.453     0
      4      4     X-    Mystery Anion              26     57.678     0
      5      5     Br-   Bromide Ion                35     79.904     0

Additional Bond Stretching Parameters :

    Atom Classes         K(S)      Length

       1   2         527.200      1.0000

Additional Angle Bending Parameters :

    Atom Classes         K(B)       Angle

      2   1   2        37.950     109.470

Additional Urey-Bradley Parameters :

    Atom Classes        K(UB)     Distance

      2   1   2        39.900      1.6330

Additional van der Waals Parameters :

    Atom Class          Size      Epsilon     Reduction

       1              3.1656      0.1554       0.000
       2              0.0000      0.0000       0.000
       3              4.4463      0.1070       0.000
       4              4.5350      0.0985       0.000
       5              4.6237      0.0900       0.000

Additional Atomic Partial Charge Parameters :

    Atom Type          Charge

       1             -0.8200
       2              0.4100
       3             -1.0000
       4             -1.0000
       5             -1.0000

Free Energy Perturbation :          1.000 Lambda for van der Waals
Free Energy Perturbation :          1.000 Lambda for Electrostatics

Numbers of First and Last File to Analyze :  1 20

Enter the Lambda Increment for FEP :  0.5

Enter the System Temperature [300 K] :  300.0

Enter Number of Blocks for Sub-Averages [1] :  4

Consider only Intermolecular Perturbation Energy [N] :  y
```

Επισήμανση: Η γραμμή που ζητάει τους αριθμούς του πρώτου και τελευταίου αρχείου για ανάλυση αναφέρεται στα αρχεία *anion.001, anion.002* κλπ. που έχουν δημιουργηθεί κατά την εκτέλεση του προγράμματος ***Dynamic*** προηγουμένως.

Τα αποτελέσματα που μας δίνει το πρόγραμμα είναι οι εξής ενέργειες:

```
Running Averages over   20 Steps with Std Error from   4 Blocks :

Free Energy :

DA(+) =      1.3232 with Std Error    0.0332
DA(-) =     -1.3620 with Std Error    0.0298

Potential Energy :

DE(+) =      1.3653 with Fluct    0.2168 and Std Error    0.0299
DE(-) =     -1.3263 with Fluct    0.2147 and Std Error    0.0293

Component Energies :

VDW   +/- :      1.3653          -1.3263
CHG   +/- :     -0.0000           0.0000
```

Δηλαδή, η μεταβολή της ελεύθερης ενέργειας είναι: **ΔDA = DA(+) - DA(-) = 2.6852 kcal/mol**

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**
  CPU load: ~30%
  RAM: <1%
  Χρόνος εκτέλεσης: <1 sec

- **Σύγκριση με αρχείο log:**
  Δεν υπήρχαν καθόλου διαφορές. Και τα 2 προγράμματα έβγαλαν τα ίδια αποτελέσματα

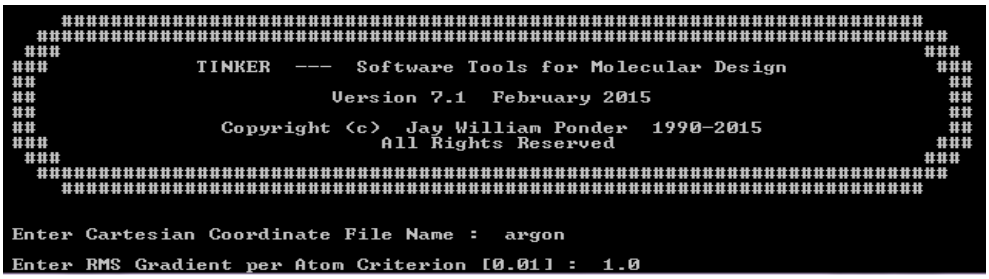
2) Τίτλος Εφαρμογής: *argon*

- **Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:** *Minimize, Dynamic*
- **Περιγραφή των προγραμμάτων:**

Minimize

Το Minimize επιτυγχάνει μία περιορισμένης μνήμης L-BFGS ελαχιστοποίηση μιας δεδομένης δομής σε καρτεσιανές συντεταγμένες χρησιμοποιώντας μία τροποποιημένη έκδοση του αλγορίθμου του Jorge Nocedal. Η μέθοδος απαιτεί μόνο τη δυναμική ενέργεια και την κλίση σε κάθε βήμα κατά μήκος του μονοπατιού ελαχιστοποίησης. Απαιτεί χώρο αποθήκευσης ανάλογο με τον αριθμό των ατόμων στη δομή. Συνίσταται να χρησιμοποιείται το πρόγραμμα αυτό για προκαταρκτική ελαχιστοποίηση δοκιμαστικών δομών με κλίση RMS από 1.0 έως 0.1 kcal/mol/Å. Έχει έναν σχετικά γρήγορο χρόνο κύκλου και είναι ανεκτικό σε φτωχές αρχικές δομές, αλλά συγκλίνει αργά και γραμμικά κοντά στο ελάχιστο.

Ως Input ο χρήστης βάζει το αρχείο συντεταγμένων .xyz και την τιμή της κλίσης RMS, στην οποία η ελαχιστοποίηση θα σταματήσει.



Ως Output το πρόγραμμα δημιουργεί ένα νέο αρχείο συντεταγμένων .xyz_* (*argon.xyz_2)* με τις νέες συντεταγμένες που προκύπτουν από τα στατιστικά στοιχεία της ελαχιστοποίησης, τα οποία εμφανίζονται στην οθόνη ή αν έχουν ανακατευθυνθεί σε αρχείο μαζί με τις τελικές τιμές παρακάτω:

```
Final Function Value :         -163.8302
Final RMS Gradient :              0.9715
Final Gradient Norm :            11.8982
```

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**
  CPU load: ~15%
  RAM: 1%
  Χρόνος εκτέλεσης: <1 sec

Dynamic

Περιγράφεται στη σελίδα 6 στην εφαρμογή *anion.* Παρακάτω φαίνεται το Input:

```
     ###############################################################################
   ###############################################################################
  ###                                                                         ###
 ###            TINKER  ---  Software Tools for Molecular Design               ###
 ##                                                                           ##
 ##                        Version 7.1  February 2015                         ##
 ##                                                                           ##
 ##                Copyright (c)  Jay William Ponder  1990-2015               ##
 ###                           All Rights Reserved                           ###
  ###                                                                       ###
   ###############################################################################
     ###############################################################################

Enter Cartesian Coordinate File Name :  argon

Enter the Number of Dynamics Steps to be Taken :  3000

Enter the Time Step Length in Femtoseconds [1.0] :  2.0

Enter Time between Dumps in Picoseconds [0.1] :  1.0

Available Statistical Mechanical Ensembles :

   (1) Microcanonical (NVE)
   (2) Canonical (NVT)
   (3) Isoenthalpic-Isobaric (NPH)
   (4) Isothermal-Isobaric (NPT)

Enter the Number of the Desired Choice [1] :  4

Enter the Desired Temperature in Degrees K [298] :  150.87

Enter the Desired Pressure in Atm [1.0] :  49_
```

Ως Output έχουμε τα αρχεία *argon.001*, *argon.002 ... argon.006*, τα οποία περιλαμβάνουν στιγμιότυπα της τροχιάς κατά την ολοκλήρωση και τέλος τις τελικές θέσεις, ταχύτητες και δυνάμεις του συστήματος, τα οποία εμπεριέχονται στο αρχείο *argon.dyn*.

Όπως φαίνεται στο log file *anion.log* στη συγκεκριμένη εφαρμογή χρησιμοποιεί ως ολοκληρωτή τον αλγόριθμο *Beeman.*

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**
  CPU load: ~40%
  RAM: 4%
  Χρόνος εκτέλεσης: 3 sec

- **Σύγκριση με αρχείο log:**

Δεν υπήρχαν καθόλου διαφορές. Και τα 2 προγράμματα έβγαλαν τα ίδια αποτελέσματα

3) Τίτλος Εφαρμογής: *cluster*

- **<u>Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:</u>** *GDA*
- **<u>Περιγραφή των προγραμμάτων:</u>**

GDA

Το πρόγραμμα GDA (Gaussian Density Annealing) βασίζεται στον αλγόριθμο του Straub και εφαρμόζεται σε μία σειρά από ομαλές-αναλυτικές Δυναμικές Ενεργειακές Επιφάνειες (ΔΕΕ). Η μέθοδος αυτή μπορεί να θεωρηθεί ως παραλλαγή της στοχαστικής μεθόδου του Scheraga et al., Εξίσωση Διάχυσης, και μοιράζεται αρκετά κοινά χαρακτηριστικά με τα προγράμματα του TINKER για ``Ομαλοποίηση των Δυναμικών και Έρευνα" (Potential Smoothing and Search – PSS). Η παρούσα εφαρμογή του GDA είναι όμοια με τη μέθοδο του Straub αλλά δεν ταυτίζεται με τη δημοσιευμένη μορφή της και εφαρμόζεται σε συσσωματώματα αργού και γενικότερα σε ατομικά/μοριακά συστήματα που αλληλεπιδρούν με δυνάμεις van der Waals. Επεκτάσεις της μεθόδου ερευνώνται από την ομάδα του Ponder. Όπως και στα άλλα προγράμματα του TINKER που περιλαμβάνουν ομαλοποίηση των δυναμικών αλληλεπίδρασης, το GDA απαιτεί την χρήση των παραμέτρων του πεδίου δυνάμεων (*smooth.prm*) που παρέχονται από το πρόγραμμα.

```
     ###############################################################################
   ###############################################################################
 ###                                                                           ###
###            TINKER  ---  Software Tools for Molecular Design               ###
##                                                                             ##
##                          Version 7.1  February 2015                         ##
##                                                                             ##
##                Copyright (c)  Jay William Ponder  1990-2015                 ##
###                           All Rights Reserved                             ###
 ###                                                                           ###
  ###############################################################################
    ###########################################################################

Enter Cartesian Coordinate File Name :  cluster.xyz
Enter the Initial Mean Squared Gaussian Width [200.0] :  200.0
Additional Atom Type Parameters :
    Type  Class  Symbol  Description              Atomic    Mass   Valence
    175    175     Ar    Argon Atom                 18     39.948     0
Additional van der Waals Parameters :
    Atom Class          Size      Epsilon     Reduction
      175             3.3610      0.2824       0.000
Additional Atomic Partial Charge Parameters :
    Atom Type          Charge
      175              0.0000
Enter Number of Annealing Trials [1] :  10
Enter Initial and Final Beta [0.01, 10**10] :  0.01 1000000000000.0
```

- **<u>Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:</u>**
  <u>CPU load</u>: ~40%
  <u>RAM</u>: 5%
  <u>Χρόνος εκτέλεσης</u>: 3 sec

- **<u>Σύγκριση με αρχείο log:</u>**
  Δεν υπήρχαν καθόλου διαφορές.

4) Τίτλος Εφαρμογής: *crambin*

- **<u>Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:</u>** *pdbxyz, analyze, spacefill*
- **<u>Περιγραφή των προγραμμάτων:</u>**

Pdbxyz

Είναι ένα πρόγραμμα το οποίο μετατρέπει ένα αρχείο Brookhaven Protein Data Bank (*PDB file)* σε αρχείο .xyz καρτεσιανών συντεταγμένων. Εάν το αρχείο PDB περιέχει μόνο υπόλοιπα πρωτεϊνικών/πεπτιδικών αμινοξέων, τότε υπονοείται πρότυπη σύνδεση πρωτεϊνών και μεταφέρεται στο αρχείο .xyz. Για τα μη-πρωτεϊνικά μέρη του αρχείου PDB, η συνδεσιμότητα των ατόμων καθορίζεται από το πρόγραμμα βασισμένο στις διατομικές αποστάσεις. Έχει επίσης τη δυνατότητα να προσθέτει ή να αφαιρεί άτομα υδρογόνου από μια πρωτεΐνη, όπως απαιτείται από το πεδίο δυνάμεων που καθορίζεται κατά τη διάρκεια των υπολογισμών.

Ως input χρεάζεται μόνο το αρχείο *crambin.pdb* και ως output δημιουργεί τα αρχεία *crambin.xyz* και *crambin.seq (περιέχει την κύρια αλληλουχία ενός βιοπολυμερούς σε καθορισμένο one-letter κώδικα με 50 υποκαταστάτες ανά γραμμή)*.

- **<u>Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:</u>**

<u>CPU load</u>: ~10%
<u>RAM</u>: <1%
<u>Χρόνος εκτέλεσης</u>: <1 sec

Analyze

Παρέχει πληροφορίες σχετικά με μια συγκεκριμένη μοριακή δομή. Το πρόγραμμα ζητάει για το όνομα του αρχείου της δομής, το οποίο πρέπει να είναι σε μορφή TINKER .xyz και το είδος της επιθυμητής ανάλυσης. Οι επιλογές επιτρέπουν Output για: 1) συνολική δυναμική ενέργεια του συστήματος, 2) την κατανομή της ενέργειας από τον τύπο δυναμικής συνάρτησης ή πάνω σε μεμονωμένα άτομα, 3) τον υπολογισμό της συνολικής διπολικής ροπής και των συνιστωσών της, ροπές αδράνειας και γυροσκοπική ακτίνα., 4) την απαρίθμηση των παραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν για το υπολογισμό επιλεγμένων ενεργειών αλληλεπίδρασης, 5) τις ενέργειες που συνδέονται με συγκεκριμένες μεμονωμένες αλληλεπιδράσεις.

Input:

```
 ###############################################################################
  #############################################################################
 ###                                                                         ###
###            TINKER  ---  Software Tools for Molecular Design               ###
##                                                                           ##
##                          Version 7.1  February 2015                       ##
##                                                                           ##
##                Copyright (c)  Jay William Ponder  1990-2015               ##
###                           All Rights Reserved                           ###
 ###                                                                         ###
  #############################################################################
   ###########################################################################


Enter Cartesian Coordinate File Name :  crambin

The TINKER Analysis Facility can Provide :

General System and Force Field Information [G]
Force Field Parameters for Interactions [P]
Total Potential Energy and its Components [E]
Energy Breakdown over Each of the Atoms [A]
List of the Large Individual Interactions [L]
Details for All Individual Interactions [D]
Electrostatic Moments and Principle Axes [M]
Internal Virial, dE/dV Values & Pressure [V]
Connectivity Lists for Each of the Atoms [C]

Enter the Desired Analysis Types [G,P,E,A,L,D,M,V,C] :  ep

List Atoms for which Output is Desired [ALL] :
   >  -252 255
```

Output: αρχείο crambin.out1

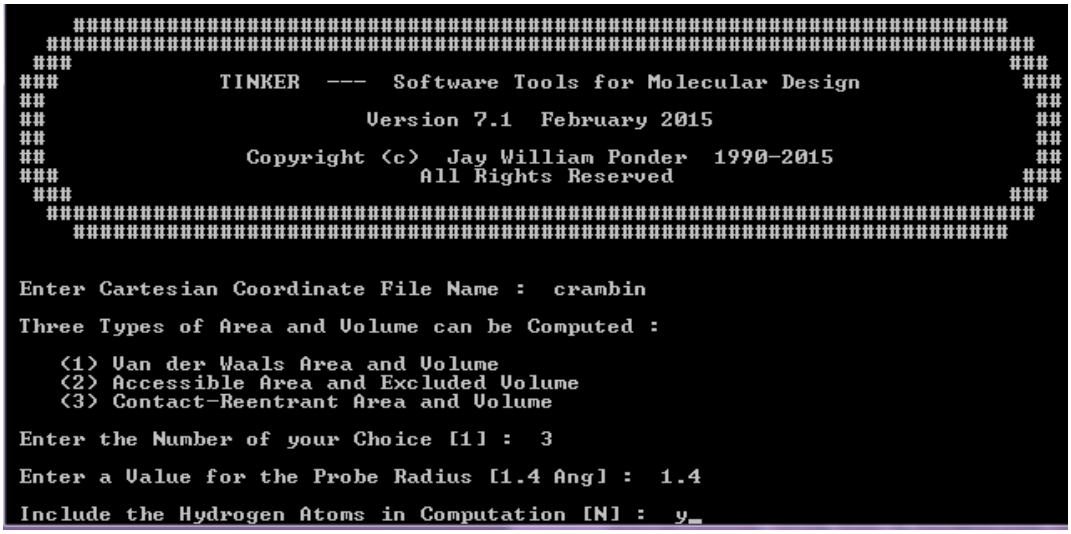
- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**

CPU load: ~20%
RAM: <1%
Χρόνος εκτέλεσης: <1 sec

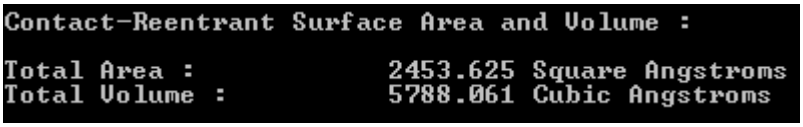
Spacefill

Το πρόγραμμα αυτό υπολογίζει τον όγκο και τα εμβαδά των επιφανειών των μορίων. Χρησιμοποιώντας μια τροποποιημένη έκδοση της αρχικής αναλυτικής περιγραφής της μοριακής επιφάνειας του Connolly, το πρόγραμμα καθορίζει είτε όγκο και επιφάνεια van der Waals είτε προσβάσιμες επιφάνειες και εξαιρεταίο όγκο είτε τον μοριακό (επαφή/επανείσοδος) όγκο και επιφάνεια. Τόσο το εμβαδόν όσο και ο όγκος διαχωρίζονται στις γεωμετρικές συνιστώσες τους και η επιφάνεια διαχωρίζεται στην κυρτή συνεισφορά κάθε ατόμου. Η προς διερεύνηση ακτίνα εισάγεται κατ' επιλογήν του χρήστη, και οι ατομικές ακτίνες μπορούν να καθοριστούν από το αρχείο keyword. Εάν το TINKER χρησιμοποιεί ένα αρχείο αρχειοθέτησης, τότε υπολογίζεται ο όγκος και το εμβαδόν της επιφάνειας για κάθε δομή που είναι αποθηκευμένη.

Παρακάτω φαίνεται το Input:



Output:



Αναλυτικά στο αρχείο crambin.out1

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**

CPU load: ~20%
RAM: 3%
Χρόνος εκτέλεσης: <1 sec

- **Σύγκριση με αρχείο log:**

Και τα 3 προγράμματα εμφάνισαν τα ίδια αποτελέσματα.

5) Τίτλος Εφαρμογής: *cyclohex*

- **Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:** *saddle, newton, vibrate, path*
- **Περιγραφή των προγραμμάτων:**

Saddle

Με το πρόγραμμα *Saddle* εντοπίζεται η μεταβατική κατάσταση μεταξύ δύο ενεργειακών ελαχίστων. Χρησιμοποιεί ιδέες από την τετραγωνική διαδρομή (*quadratic path*) των Bell-Crighton και από τις μεθόδους Σύγχρονης Διέλευσης των Halgren-Lipscomb. Η βασική ιδέα είναι να κάνει μια μη γραμμική βελτιστοποίηση των κλίσεων σε μια ορθογώνια υποπεριοχή σε κατάλληλα καθορισμένες συντεταγμένες αντίδρασης. Το πρόγραμμα απαιτεί ως είσοδο τις συντεταγμένες (TINKER .xyz αρχεία) των δύο ελαχίστων και ένα κριτήριο σύγκλισης της RMS κλίσης για τη βελτιστοποίηση. Η τρέχουσα εκτίμηση της δομής μεταβατικής κατάστασης καταγράφεται στο αρχείο *tstate.xyz*. Οι προσεγγιστικές δομές μεταβατικής κατάστασης που παράγονται από το *saddle* μπορούν μερικές φορές να βελτιωθούν με την χρήση του προγράμματος *newton*. Προαιρετικά, μπορεί να γίνει μία σάρωση του μονοπατιού ενδομετατροπών σε κάθε κύρια επανάληψη.

Το Input έχει ως εξής:

```
      TINKER  ---  Software Tools for Molecular Design

                        Version 7.1  February 2015

               Copyright (c)  Jay William Ponder  1990-2015
                          All Rights Reserved

Enter Cartesian Coordinate File Name :  cyclohex.chair

Enter Cartesian Coordinate File Name :  cyclohex.boat

Enter RMS Gradient per Atom Criterion [0.1] :  0.1

Perform Synchronous Transit Pathway Scans [N] :  y
```

Το Output είναι το αρχείο *tstate.xyz,* το οποίο στη συνέχεια το μετονομάζουμε σε *cyclohex.xyz* για χρήση του στα επόμενα προγράμματα.

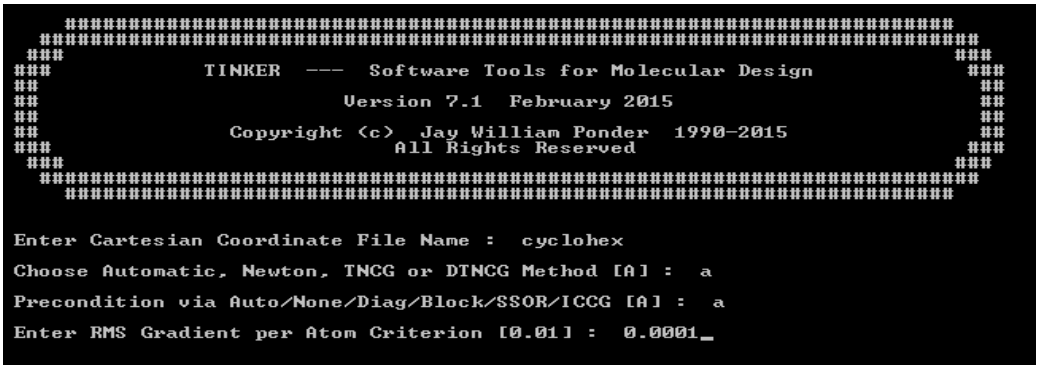
- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**

  CPU load: ~10%
  RAM: <1%
  Χρόνος εκτέλεσης: <1 sec

Newton

Το πρόγραμμα αυτό βελτιστοποιεί την ενέργεια για την εύρεση ακροτάτων της δυναμικής ενέργειας ενός μορίου, μέσω του αλγορίθμου *truncated Newton (TNCG) local optimizer* σε Καρτεσιανές συντεταγμένες. Έχει τη δυνατότητα να ελαχιστοποιεί εντελώς πολύ μεγάλες δομές και παρέχει πολλές επιλογές σχετικά με τη μέθοδο ελαχιστοποίησης και προϋποθέσεων των εξισώσεων του Νεύτωνα. Το *Newton* είναι συνήθως η καλύτερη επιλογή για ελαχιστοποιήσεις της τάξεως από 0.01 έως 0.000001 kcal/mole/Å σύγκλισης της κλίσης RMS. Δοκιμές για τις κατευθύνσεις αρνητικής καμπυλότητας μπορούν να αφαιρεθούν, επιτρέποντας το *Newton* να χρησιμοποιηθεί για βελτιστοποίηση των δομών μεταβατικής κατάστασης (π.χ. από *Saddle*). Η σύγκλιση ευνοείται εάν η αρχική δομή είναι πλησίον της μεταβατικής κατάστασης. Ως είσοδο χρειάζεται το αρχείο συντεταγμένων .xyz και η έξοδος είναι ένα ενημερωμένο σύνολο από ελαχιστοποιημένες συντεταγμένες και στατιστικές ελαχιστοποίησης.

Το Input είναι:



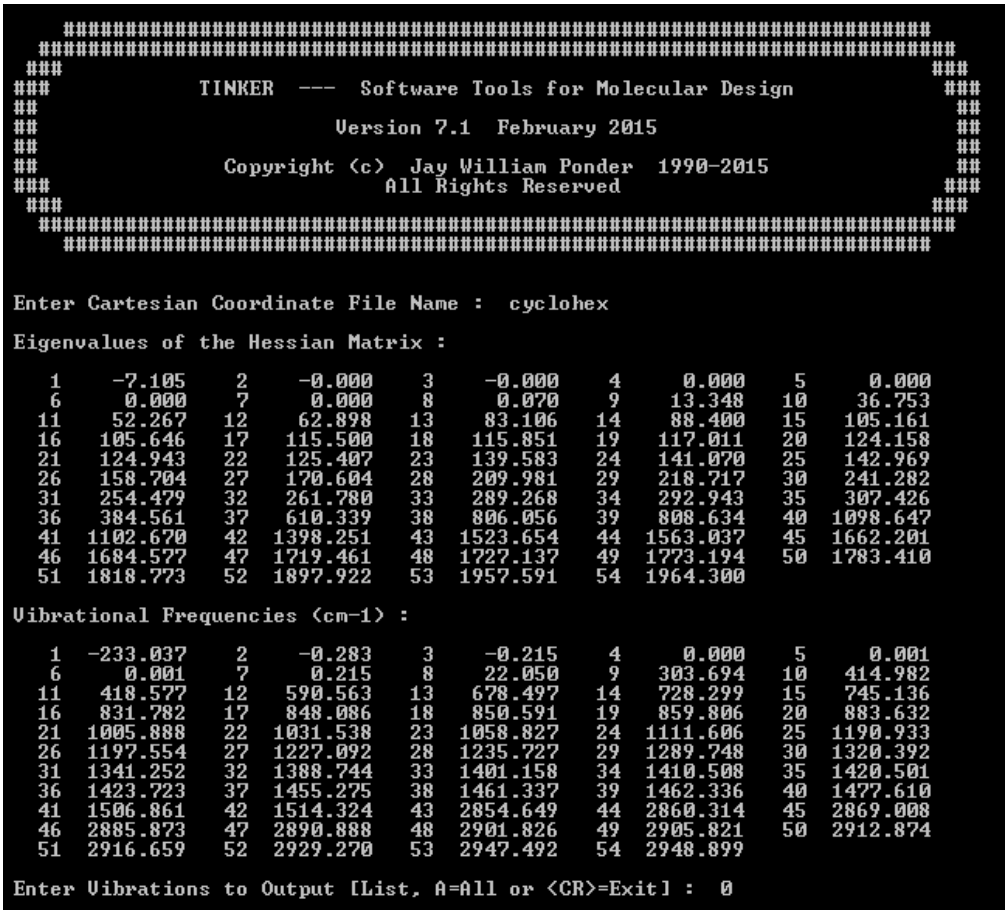
Το Output είναι το αρχείο *cyclohex.xyz_2* με τις νέες βελτιωμένες συντεταγμένες.

- **<u>Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:</u>**
  <u>CPU load</u>: 18%
  <u>RAM</u>: <1%
  <u>Χρόνος εκτέλεσης</u>: <1 sec

Vibrate

Το πρόγραμμα *Vibrate* υπολογίζει τους κανονικούς τρόπους δόνησης ενός μορίου, όταν αυτό βρίσκεται σε ελάχιστο ή σαγματικό σημείο του μοριακού δυναμικού. Κάνει διαγωνοποίηση του Εσσιανού πίνακα (*πίνακας δεύτερων μερικών παραγώγων*) μιας δομής εισόδου (*αρχείο συντεταγμένων .xyz*). Επιπλέον υπολογίζονται οι ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα του Εσσιανού πίνακα. Οι δομές των κανονικών τρόπων δόνησης μπορούν να αποθηκευτούν σε αρχεία με κυκλική αρίθμηση (.001, .010, κ.τ.λ..).

Μία εκτέλεση του προγράμματος εμφάνισε τα παρακάτω στην οθόνη:



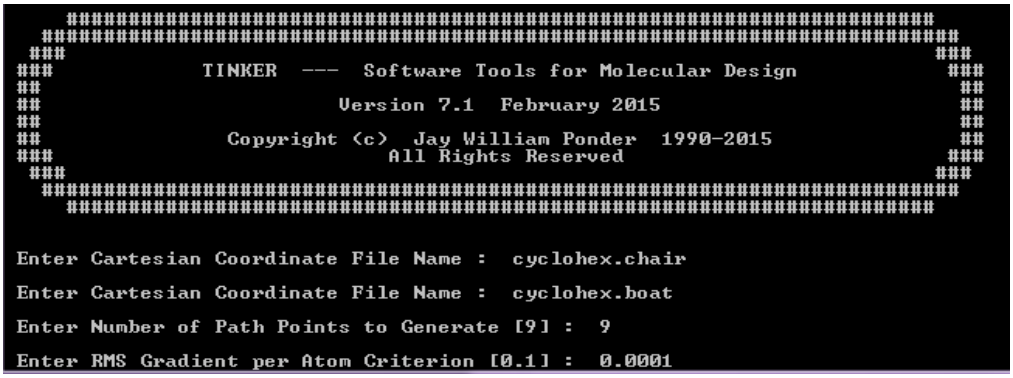
➢ **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**

CPU load: ~15%
RAM: <1%
Χρόνος εκτέλεσης: <1 sec

Path

Το πρόγραμμα *Path* εντοπίζει μια σειρά από δομές ομοιόμορφα κατανεμημένες σε ένα μονοπάτι αντίδρασης που συνδέει τις δομές του αντιδρώντος που εισάγεται και του προϊόντος. Γίνεται μία σειρά από περιορισμένες βελτιστοποιήσεις ορθογωνίως του μονοπατιού, μέσω των πολλαπλασιαστών Lagrange.

Input:



Output: αρχεία *cyclohex.001, cyclohex.002, cyclohex.003 … cyclohex.009*

➢ **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**

CPU load: ~20%
RAM: <1%
Χρόνος εκτέλεσης: 1 sec

Στη συνέχεια, εκτελούμε πάλι το πρόγραμμα *Newton,* αυτή τη φορά δίνοντας ως Input το αρχείο συντεταγμένων που δημιουργήθηκε προηγουμένως *cyclohex.006* και τα υπόλοιπα ίδια. Output τώρα είναι το αρχείο *cyclohex.xyz_3*.

Έπειτα, εκτελούμε ξανά το πρόγραμμα *Vibrate* με το ίδιο Input όπως προηγουμένως, όπου τώρα θα αναλύσει το αρχείο *cyclohex.xyz_3*.

- **Σύγκριση με αρχείο log:**

Υπάρχουν διαφορές στα αποτελέσματα που προκύπτουν (*cyclohex.out1*) σε σχέση με αυτά του *cyclohex.log*.

Στο πρόγραμμα *Saddle* έχουμε εμφανείς διαφορές, κυρίως στις επαναλήψεις. Οι πιο χαρακτηριστικές διαφορές είναι οι εξής:

cyclohex.log

```
Search for a Maximum along Synchronous Transit :
ST Iter    F Value       Path      RMS G      G Tan      Gamma    FG Call

    1      18.8601     0.5725     0.1740    -0.0128    0.00540      174
    2      18.8603     0.5704     0.1700    -0.0012    0.00005      179
    3      18.8603     0.5706     0.1703    -0.0022    0.00016      184
    4      18.8603     0.5705     0.1700    -0.0013    0.00006      189
    5      18.8604     0.5703     0.1697    -0.0002    0.00000      194

Search for a Minimum in Conjugate Directions :
CG Iter    F Value      RMS G     F Move    X Move    Angle    FG Call  Comment

    0      18.8604     0.1697                                    194
    1      18.8600     0.1568     0.0003    0.0002     8.25     197    Success
    2      18.8597     0.0818     0.0004    0.0004    46.97     200    Success
```

cyclohex.out1

```
Search for a Maximum along Synchronous Transit :
ST Iter     F Value        Path       RMS G       G Tan       Gamma    FG Call

    1       19.0532      0.5733      0.2801     -0.0229     0.00669      166
    2       19.0539      0.5698      0.2897     -0.0002     0.00000      171

Search for a Minimum in Conjugate Directions :
CG Iter     F Value       RMS G      F Move     X Move     Angle    FG Call  Comment

    0       19.0539      0.2897                                        171
    1       19.0530      0.2544      0.0009     0.0004     35.17     174     Success
    2       19.0520      0.1661      0.0010     0.0006     43.16     177     Success
    3       19.0516      0.1645      0.0005     0.0004     44.10     179     Success
    4       19.0510      0.1673      0.0005     0.0006     52.57     182     Success
    5       19.0506      0.1323      0.0004     0.0006     59.24     184     Success
    6       19.0504      0.0938      0.0002     0.0004     57.81     186     Success
```

Επίσης, στο “Search for a Minimum in Conjugate Directions :” πραγματοποιήθηκε μία λιγότερη επανάληψη, και γενικότερα εμφανίζονται λίγο διαφοροποιημένες όλες οι τιμές.

Για το πρόγραμμα *Newton* έχουμε τις εξής διαφορές:

cyclohex.log

```
Variable-Mode Truncated-Newton Conjugate-Gradient Optimization :

Algorithm : AUTO       Preconditioning : AUTO        RMS Grad : 0.10D-03

TN Iter     F Value       G RMS      F Move     X Move    CG Iter   Solve    FG Call

    0       18.8597      0.0818                                                  1
    1       18.8591      0.0016      0.0005     0.0014        4    TruncNewt      6
    2       18.8591      0.0000      0.0000     0.0001       14    TruncNewt     17

TNCG  --  Normal Termination due to SmallGrad

Final Function Value :           18.8591
Final RMS Gradient :          0.3698D-05
Final Gradient Norm :         0.1569D-04
```

cyclohex.out1

```
Variable-Mode Truncated-Newton Conjugate-Gradient Optimization :

Algorithm : AUTO       Preconditioning : AUTO        RMS Grad : 0.10D-03

TN Iter     F Value       G RMS      F Move     X Move    CG Iter   Solve    FG Call

    0       19.0504      0.0937                                                  1
    1       19.0495      0.0025      0.0009     0.0026        4    TruncNewt      6
    2       19.0495      0.0033      0.0000     0.0036       14    TruncNewt     17
    3       19.0495      0.0000      0.0000     0.0001       24    TruncNewt     28

TNCG  --  Normal Termination due to SmallGrad

Final Function Value :           19.0495
Final RMS Gradient :          0.2287D-05
Final Gradient Norm :         0.9702D-05
```

Υπάρχει μία παραπάνω επανάληψη και μια μικρή διαφορά των τιμών.

Τα αποτελέσματα του προγράμματος *Vibrate* εμφανίζουν ελάχιστες διαφορές, μέχρι και το δεύτερο ψηφίο του ακέραιου μέρους ορισμένων τιμών.

Στο πρόγραμμα *Path* εμφανίζονται πολύ διαφορετικές οι τιμές, κυρίως από το “Path Point 6” και μετά. Ειδικά οι τιμές στο “Target-Energy Difference” είναι μέχρι και 3 τάξεις μεγέθους διαφορετικές, ακόμη και με διαφορετικό πρόσημο.

Η μετέπειτα εκτέλεση του *Newton* είχε ως αποτέλεσμα 2 περισσότερες επαναλήψεις, καθώς και αρκετά διαφορετικές τελικές τιμές της συνάρτησης.

cyclohex.log

```
Variable-Mode Truncated-Newton Conjugate-Gradient Optimization :

Algorithm : AUTO       Preconditioning : AUTO        RMS Grad : 0.10D-03

TN Iter    F Value       G RMS     F Move    X Move   CG Iter  Solve   FG Call

    0      18.8353      0.1358                                            1
    1      18.8594      0.1543    -0.0242    0.0205       3   IntplnErr    5
    2      18.8592      0.0034     0.0003    0.0005       6   TruncNewt    9
    3      18.8591      0.0074     0.0000    0.0066      24   TruncNewt   29
    4      18.8591      0.0000     0.0000    0.0004      33   TruncNewt   39

TNCG  --  Normal Termination due to SmallGrad

Final Function Value :           18.8591
Final RMS Gradient :          0.4544D-04
Final Gradient Norm :         0.1928D-03
```

cyclohex.out1

```
 Variable-Mode Truncated-Newton Conjugate-Gradient Optimization :

 Algorithm : AUTO       Preconditioning : AUTO        RMS Grad : 0.10D-03

 TN Iter    F Value       G RMS     F Move    X Move   CG Iter  Solve   FG Call

     0      14.0649      0.2076                                            1
     1      14.0184      0.8593     0.0465    0.0792       9   TruncNewt   13
     2      13.9281      1.0209     0.0903    0.0592      11   TruncNewt   18
     3      13.9111      0.2688     0.0170    0.0094      12   TruncNewt   20
     4      13.9033      0.1014     0.0078    0.0207      15   TruncNewt   24
     5      13.9031      0.0042     0.0001    0.0008      17   TruncNewt   27
     6      13.9031      0.0000     0.0000    0.0003      23   TruncNewt   34

 TNCG  --  Normal Termination due to SmallGrad

 Final Function Value :           13.9031
 Final RMS Gradient :          0.2580D-04
 Final Gradient Norm :         0.1095D-03
```

Τέλος, από το *Vibrate* έχουμε τεράστιες διαφορές στις πρώτες 9 τιμές που εμφανίζονται, ενώ οι υπόλοιπες έχουν πολύ μικρή διαφορά.

cyclohex.log

```
Eigenvalues of the Hessian Matrix :

   1    -6.931    2    -0.000    3     0.000    4     0.000    5     0.000
   6     0.000    7     0.000    8     0.151    9    13.316   10    36.744
  11    52.166   12    62.974   13    82.701   14    88.411   15   104.981
  16   105.229   17   115.834   18   116.420   19   117.256   20   123.716
  21   124.000   22   125.026   23   139.292   24   139.931   25   143.076
  26   158.576   27   170.986   28   209.906   29   218.746   30   241.282
  31   254.931   32   262.640   33   290.227   34   292.608   35   308.066
  36   384.131   37   610.619   38   805.744   39   807.264   40  1097.768
  41  1103.727   42  1406.479   43  1538.386   44  1581.887   45  1650.362
  46  1682.903   47  1722.700   48  1741.831   49  1763.900   50  1774.968
  51  1792.146   52  1908.082   53  1957.098   54  1958.503

Vibrational Frequencies (cm-1) :

   1  -229.673    2    -0.236    3     0.000    4     0.001    5     0.001
   6     0.082    7     0.238    8    32.465    9   303.033   10   414.604
  11   417.915   12   589.005   13   679.162   14   728.491   15   734.536
  16   833.589   17   840.932   18   847.218   19   859.879   20   883.006
  21  1005.058   22  1032.458   23  1053.644   24  1098.244   25  1192.306
  26  1197.701   27  1227.471   28  1237.468   29  1289.678   30  1318.702
  31  1342.806   32  1389.732   33  1401.595   34  1411.379   35  1420.880
  36  1425.265   37  1457.370   38  1463.578   39  1466.124   40  1475.299
  41  1498.503   42  1504.522   43  2872.596   44  2880.806   45  2885.418
  46  2893.571   47  2896.505   48  2905.025   49  2925.191   50  2931.200
  51  2938.844   52  2938.970   53  2948.735   54  2950.494
```

cyclohex.out1

```
Eigenvalues of the Hessian Matrix :

    1      0.000     2      0.000     3      0.000     4      0.000     5      0.000
    6      0.000     7      1.543     8      7.669     9     11.912    10     35.265
   11     58.018    12     60.481    13     78.705    14     98.963    15    102.985
   16    104.797    17    110.598    18    114.079    19    116.315    20    123.291
   21    127.854    22    129.784    23    131.131    24    131.209    25    131.417
   26    150.496    27    173.009    28    213.182    29    217.836    30    238.351
   31    270.454    32    273.953    33    279.893    34    311.075    35    313.329
   36    387.794    37    593.600    38    771.611    39    798.713    40   1070.601
   41   1104.123    42   1401.244    43   1548.731    44   1570.681    45   1692.446
   46   1720.823    47   1753.013    48   1767.203    49   1773.942    50   1778.796
   51   1791.305    52   1899.380    53   1936.137    54   1943.990

Vibrational Frequencies (cm-1) :

    1      0.001     2      0.001     3      0.001     4      0.132     5      0.214
    6      0.272     7    103.066     8    243.140     9    279.287    10    420.675
   11    427.878    12    570.466    13    746.898    14    754.866    15    764.273
   16    845.208    17    846.632    18    866.749    19    889.227    20    923.667
   21   1010.590    22   1014.931    23   1042.768    24   1075.724    25   1180.680
   26   1198.389    27   1215.142    28   1217.003    29   1222.364    30   1251.726
   31   1345.855    32   1364.857    33   1384.768    34   1402.787    35   1407.802
   36   1414.378    37   1445.193    38   1456.343    39   1458.396    40   1460.147
   41   1462.113    42   1469.999    43   2872.846    44   2876.322    45   2883.021
   46   2888.675    47   2897.268    48   2900.007    49   2930.412    50   2931.144
   51   2935.807    52   2936.870    53   2945.937    54   2946.871
```

Οι διαφορές αυτές πιθανών να οφείλονται στους διαφορετικούς τυχαίους αριθμούς που δημιουργούνται κατά την εκτέλεση των προγραμμάτων, ή/και στα διαφορετικά λειτουργικά συστήματα, πόρους.

6) Τίτλος Εφαρμογής: *dhfr*

- **<u>Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:</u>** *Dynamic*
- **<u>Περιγραφή των προγραμμάτων:</u>**

Dynamic

Η περιγραφή του προγράμματος υπάρχει στη σελίδα 7 στην εφαρμογή *anion*.

```
                                      TINKER  ---  Software Tools for Molecular Design

                                                   Version 7.1  February 2015

                                        Copyright (c)  Jay William Ponder  1990-2015
                                                    All Rights Reserved

 ##################################################################
 Joint Amber-CHARMM Benchmark on Dihydrofolate Reductase in Water
 23558 Atoms, 62.23 Ang Cube, 9 Ang Nonbond Cutoffs, 64x64x64 PME
 ##################################################################

 Smooth Particle Mesh Ewald Parameters :

    Ewald Coefficient       PME Grid Dimensions       B-Spline Order

          0.5698              64    64    64               5

 Molecular Dynamics Trajectory via Modified Beeman Algorithm

 Random Number Generator Initialized with SEED :      123456789

    MD Step      E Total   E Potential     E Kinetic        Temp        Pres

          1   -46698.3314   -67883.0975    21184.7661      301.70    -763.35
          2   -46684.8478   -67822.9169    21138.0690      301.03    -690.86
          3   -46683.8130   -67810.8409    21127.0279      300.87    -646.14
          4   -46682.3362   -67854.6061    21172.2699      301.52    -654.44
          5   -46693.0057   -67866.4312    21173.4255      301.53    -675.67
          6   -46686.1729   -67770.8626    21084.6898      300.27    -670.06
          7   -46676.6569   -67703.1816    21026.5247      299.44    -693.94
          8   -46688.9111   -67785.2522    21096.3411      300.44    -790.16
          9   -46681.5292   -67915.0303    21233.5011      302.39    -871.27
         10   -46678.6486   -67933.6596    21255.0110      302.70    -843.67
```

➢ **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**
CPU load: ~100%
RAM: 8%
Χρόνος εκτέλεσης: 10 sec

Είναι αρκετά βαρύ πρόγραμμα λόγω των τεράστιων υπολογισμών που κάνει.

- **Σύγκριση με αρχείο log:**
Δεν υπάρχουν διαφορές.

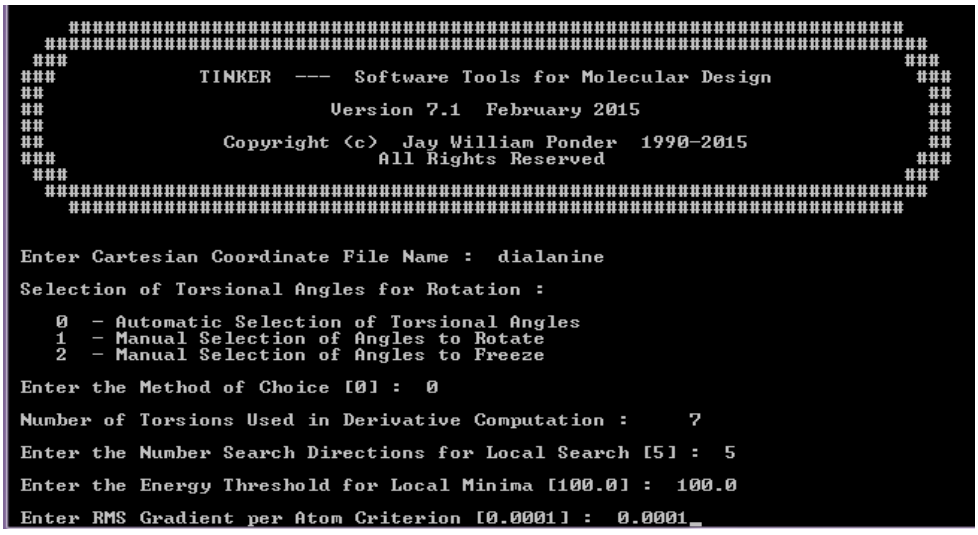
7) Τίτλος Εφαρμογής: *dialanine*

- **Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:** *Scan*
- **Περιγραφή των προγραμμάτων:**

Scan

Το *Scan* είναι ένα πρόγραμμα για τη γενική αναζήτηση διαμορφώσεων μιας ολόκληρης επιφάνειας δυναμικής ενέργειας μέσω της μεθόδου "Basin Hopping". Το πρόγραμμα δέχεται σαν είσοδο ένα .xyz αρχείο συντεταγμένων, το οποίο στη συνέχεια ελαχιστοποιείται για να βρεθεί το πρώτο τοπικό ελάχιστο για μια λίστα αναζήτησης. Μία σειρά από ενεργοποιήσεις κατά μήκος κανονικών τρόπων δόνησης από αυτό το αρχικό ελάχιστο χρησιμοποιούνται ως σημεία εκκίνησης για περαιτέρω ελαχιστοποιήσεις. Οποτεδήποτε εντοπίζεται ένα, έως τώρα, άγνωστο τοπικό ελάχιστο, αυτό προστίθεται στην λίστα αναζήτησης. Όταν όλα τα ελάχιστα στη λίστα έχουν υποβληθεί σε κανονικούς τρόπους ενεργοποίησης χωρίς να εντοπίζονται επιπλέον νέα ελάχιστα, το πρόγραμμα σταματάει. Τα ατομικά τοπικά ελάχιστα γράφονται σε κυκλικά αρχεία (*cycle files*) όσο ανακαλύπτονται. Ενώ το πρόγραμμα *Scan* μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τυπικές παραμορφωμένες επιφάνειες δυναμικής ενέργειας, πιστεύεται ότι είναι πιο χρήσιμο για γρήγορη σάρωση μιας ομαλής ενεργειακής επιφάνειας, για να απαριθμηστούν οι κύριες κοιλάδες των έλξεων που καλύπτουν ολόκληρη την επιφάνεια.

Input:



Output: Cycle files: dialanine.001, dialanine.002 … dialanine.022.

➢ **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**
CPU load: ~80%
RAM: 4%
Χρόνος εκτέλεσης: 5 sec

- **Σύγκριση με αρχείο log:**
  Καμία διαφορά.

8) Τίτλος Εφαρμογής: *enkephalin*

- **Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:** *Protein, Minimize, Vibrate*
- **Περιγραφή των προγραμμάτων**:

Protein

Το πρόγραμμα *Protein* δημιουργεί τις εσωτερικές και Καρτεσιανές συντεταγμένες ενός πολυπεπτιδίου από αλληλουχία αμινοξέων και τις τιμές δίεδρων γωνιών για τον πεπτιδικό σκελετό και τις πλευρικές αλυσίδες.

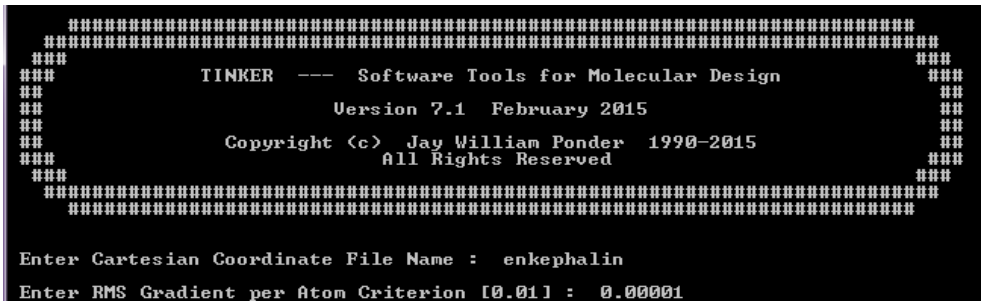
Input: αρχείο *enkephalin.dat*.

Output: αρχεία *enkephalin.xyz, enkephalin.seq, enkephalin.int*

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**
  CPU load: 15%
  RAM: <1%
  Χρόνος εκτέλεσης: <1 sec

Minimize

Περιγραφή στη σελίδα 9, εφαρμογή *argon*. Το Input φαίνεται παρακάτω:



Output: αρχείο *enkephalin.xyz_2*

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**
  CPU load: ~90%
  RAM: 5%
  Χρόνος εκτέλεσης: 3 sec

Vibrate

Περιγραφή στη σελίδα 15 στην εφαρμογή *cyclohex.* Input και Output στο αρχείο *enkephalin.out1*.

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**
  CPU load: 20%
  RAM: <1%
  Χρόνος εκτέλεσης: ~1 sec

- **Σύγκριση με αρχείο log:**

Δεν υπάρχουν αξιοσημείωτες διαφορές στα τρία προγράμματα. Οι πιο σημαντικές είναι στο *Minimize,* όπου εμφανίζονται λιγότερες επαναλήψεις απ' ότι στο log file. Η τελική τιμή της συνάρτησης όμως είναι ακριβώς η ίδια· αλλάζουν ελάχιστα μόνο τα τελικά RMS Gradient και Gradient Norm.

Στο *Vibrate* οι τιμές υπό το "Eigenvalues of the Hessian Matrix:" είναι ακριβώς ίδιες, ενώ διακρίνουμε διαφορές μόνο στις πρώτες τιμές (1-6) των "Vibrational Frequencies (cm-1) :" και στο δεύτερο με τρίτο δεκαδικό στις επόμενες τιμές.

9) Τίτλος Εφαρμογής: *ethanol*

- **Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:** *Torsfit*
- **Περιγραφή των προγραμμάτων**:

Torsfit

Το πρόγραμμα *Torsfit* εκλεπτύνει τις παραμέτρους του στροφικού πεδίου δυνάμεων βασισμένο σε μια κβαντομηχανική δυναμική επιφάνεια και αναλυτική κλίση.

Input: αρχείο *ethanol.dat.*

Output: αρχείο *ethanol.key_2* με τις παραμέτρους που υπολογίστηκαν.

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**

  CPU load: ~20%

  RAM: <1%

  Χρόνος εκτέλεσης: ~1 sec

- **Σύγκριση με αρχείο log:**

  Καμία διαφορά.

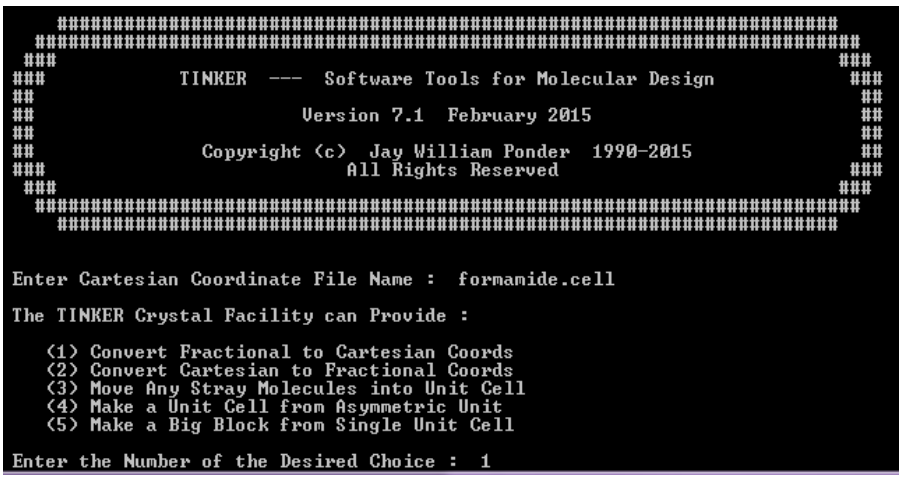
10) Τίτλος Εφαρμογής: *formamide*

- **Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:** *Crystal, Newton, Xtalfit*
- **Περιγραφή των προγραμμάτων:**

Crystal

Είναι ένα πρόγραμμα για τη μελέτη των κρυσταλλικών δομών, που περιλαμβάνεται από την ενδομετατροπή των κλασματικών και Καρτεσιανών συντεταγμένων, την παραγωγή της μονάδας κυττάρου από μία ασύμμετρη μονάδα, και την οικοδόμηση ενός κρυσταλλικού μπλοκ καθορισμένου μεγέθους μέσω της αντιγραφής μιας μόνο κυτταρικής μονάδας. Η παρούσα έκδοση μπορεί να χειριστεί περίπου 25 από τις πιο κοινές χωρικές ομάδες, μπορούν εύκολα να προστεθούν και άλλες, όπως απαιτείται από την τροποποίηση της ρουτίνας *SYMMETRY*.

Input:

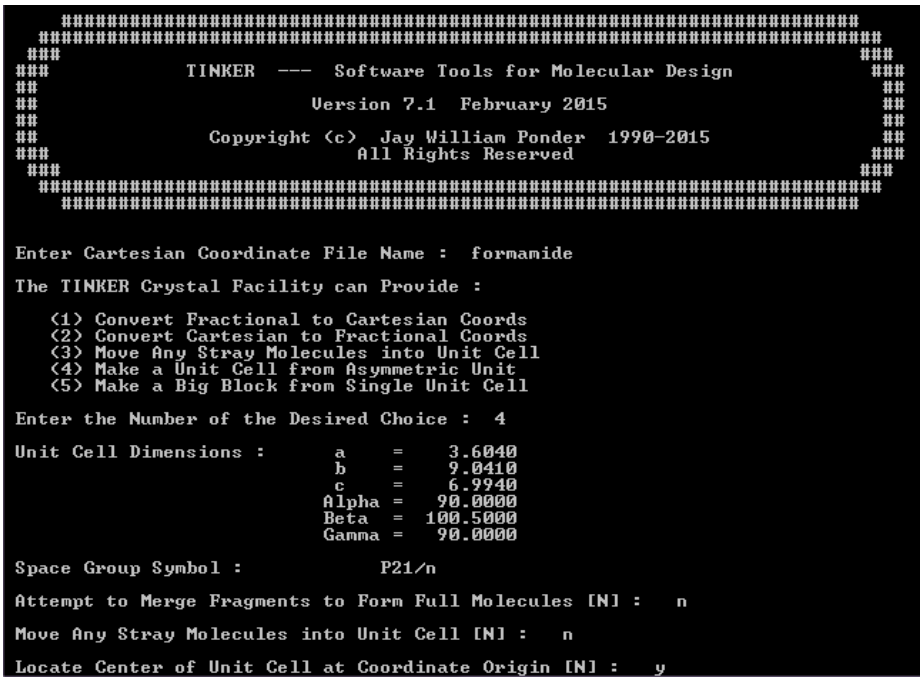


Output: αρχείο συντεταγμένων *formamide.xyz.*

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**

CPU load: ~10%
RAM: <1%
Χρόνος εκτέλεσης: <1 sec

Στη συνέχεια, εκτελούμε πάλι το ίδιο πρόγραμμα, με είσοδο αυτή τη φορά το νέο αρχείο συντεταγμένων *formamide.xyz.* Το νέο Input έχει ως εξής:



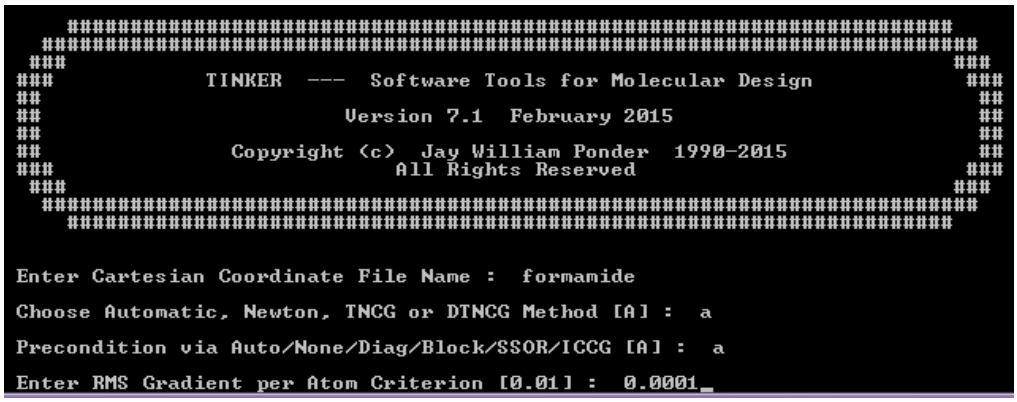
Output τώρα είναι ένα νέο αρχείο συντεταγμένων *formamide.xyz_2.*

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**

CPU load: ~10%
RAM: <1%
Χρόνος εκτέλεσης: <1 sec

Newton

Η περιγραφή του προγράμματος έχει προαναφερθεί στη σελίδα 12 στην εφαρμογή *cyclohex.*
Το Input φαίνεται παρακάτω:



Το Output είναι το νέο αρχείο συντεταγμένων *formamide.xyz_3.*

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**

CPU load: ~30%
RAM: <1%
Χρόνος εκτέλεσης: ~1 sec

Xtalfit

Το πρόγραμμα αυτό υπολογίζει ένα βελτιστοποιημένο σύνολο από παραμέτρους δυναμικής ενέργειας για καθορισμένες από το χρήστη αλληλεπιδράσεις Van der Waals και ηλεκτροστατικές, με την προσαρμογή της ενέργειας πλέγματος και των δεδομένων της μονομερούς διπολικής ροπής, στην κρυσταλλική δομή.

Input: από αρχείο *formamide.dat*

Output: Παράμετροι και σφάλματα *(formamide.out1)*

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**

CPU load: ~40%

RAM: 4%

Χρόνος εκτέλεσης: 3 sec

- **Σύγκριση με αρχείο log:**

Το πρόγραμμα *Crystal* εμφάνισε τα ίδια αποτελέσματα και στις 2 εκτελέσεις.

Στο πρόγραμμα *Newton,* ενώ οι τιμές είναι ακριβώς ίδιες μέχρι την 7η επανάληψη, από την 8η και πέρα διαφέρουν. Παρακάτω φαίνονται τα στιγμιότυπα με τις διαφορές από τα αρχεία καταγραφής:

formamide.log

8	-160.0512	0.0244	0.0001	0.0438	38	NegCurve	45
9	-160.0516	0.0480	0.0004	0.1049	52	NegCurve	62
10	-160.0522	0.0118	0.0006	0.1126	78	TruncNewt	91
11	-160.0523	0.0001	0.0000	0.0172	105	TruncNewt	119
12	-160.0523	0.0000	0.0000	0.0364	190	OverLimit	206

formamide.out1

8	-160.0513	0.0345	0.0002	0.0876	37	NegCurve	44
9	-160.0518	0.0426	0.0005	0.1225	54	NegCurve	64
10	-160.0522	0.0016	0.0004	0.0034	66	TruncNewt	77
11	-160.0523	0.0001	0.0000	0.1123	151	OverLimit	163
12	-160.0523	0.0015	0.0000	0.0508	206	NegCurve	221
13	-160.0523	0.0000	0.0000	0.0108	273	TruncNewt	289

Όπως φαίνεται υπάρχουν αξιοσημείωτες διαφορές, ξεκινώντας από το ότι υπάρχει μία επιπλέον επανάληψη και επίσης εμφανίζονται τελείως διαφορετικές τιμές στη στήλη “Solve” στην 11η και 12η επανάληψη. Τέλος, μεγάλες διαφορές επισημαίνονται και στις τελικές τιμές *(μία τάξη μεγέθους)*, με εξαίρεση, όμως, την τελική τιμή της συνάρτησης, που είναι ακριβώς η ίδια.

formamide.log

```
Final Function Value :          -160.0523
Final RMS Gradient :          0.3050D-04
Final Gradient Norm :         0.1494D-03
```

formamide.out1

```
Final Function Value :          -160.0523
Final RMS Gradient :          0.4815D-05
Final Gradient Norm :         0.2359D-04
```

Το πρόγραμμα ***Xtalfit*** έχει επίσης μεγάλες διαφορές σε πολλά σημεία, μέχρι και 1-2 τάξεις μεγέθους, μεγαλύτερες τιμές. Ακόμη, έχουν γίνει δύο παραπάνω επαναλήψεις. Παρολαυτα, οι τελικές τιμές δεν διαφέρουν σημαντικά, εκτός από μία που έχει τεράστια διαφορά, όπως φαίνεται παρακάτω:

formamide.out1

```
 Final Values of Parameters and Scaled Derivatives :

   ( 1)  Atomic Radius       Atom Type   178          1.6695        0.0011
   ( 2)  Well Depth          Atom Type   178          0.3150      -43.5035

 Final Residual Error Function Values :

   ( 1)  Force a-Axis          Structure   1         -2.2599
   ( 2)  Force b-Axis          Structure   1         -2.7529
   ( 3)  Force c-Axis          Structure   1          1.3136
   ( 4)  Force Alpha           Structure   1         -0.0000
   ( 5)  Force Beta            Structure   1          2.1442
   ( 6)  Force Gamma           Structure   1         -0.0000
   ( 7)  Lattice Energy        Structure   1         -0.9401
```

formamide.log

```
 Final Values of Parameters and Scaled Derivatives :

   ( 1)  Atomic Radius       Atom Type   178          1.6812        0.0012
   ( 2)  Well Depth          Atom Type   178          0.2923        0.0003

 Final Residual Error Function Values :

   ( 1)  Force a-Axis          Structure   1         -2.7814
   ( 2)  Force b-Axis          Structure   1         -3.0683
   ( 3)  Force c-Axis          Structure   1          0.9656
   ( 4)  Force Alpha           Structure   1          0.0000
   ( 5)  Force Beta            Structure   1          2.1598
   ( 6)  Force Gamma           Structure   1          0.0000
   ( 7)  Lattice Energy        Structure   1         -0.9833
```

11) Τίτλος Εφαρμογής: *gpcr*

- **<u>Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:</u>** *Vibbig*
- **<u>Περιγραφή των προγραμμάτων:</u>**

Vibbig

Είναι ένα πρόγραμμα, το οποίο πραγματοποιεί μια μεγάλης κλίμακας ανάλυση δονήσεων, χρησιμοποιώντας μόνο διανύσματα και εκτιμήσεις κλίσεων.

Input:

```
                TINKER  ---  Software Tools for Molecular Design

                           Version 7.1  February 2015

                Copyright (c)  Jay William Ponder  1990-2015
                            All Rights Reserved

 Enter Cartesian Coordinate File Name :  gpcr

 Start at Lowest or Highest Frequency Normal Mode [L] :  L

 Enter Desired Frequency Cutoff in cm-1 [0.0] :  1.0
```

Output: αρχεία *gprc.001, gpcr.vb1*, *gpcr.vb2*

- **<u>Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:</u>**

<u>CPU load</u>: 40-60%

<u>RAM</u>: 7%

<u>Χρόνος εκτέλεσης</u>: 30 min

Είναι πολύ χρονοβόρο λόγω του ότι τρέχει πάρα πολλούς υπολογισμούς, με πολλούς παραμέτρους.

- **Σύγκριση με αρχείο log:**

Κάθε φορά που εκτελείται το πρόγραμμα θα προκύπτουν διαφορετικά αποτελέσματα. Σε 2 εκτελέσεις που πραγματοποιήθηκαν, η μία εμφάνισε λιγότερες *(gpcr.out1)* και η άλλη περισσότερες *(gpcr.out2)* επαναλήψεις από το δεδομένο αρχείο καταγραφής (*gpcr.log*). Υπάρχουν διαφορές αλλά σε λογικά πλαίσια, λόγω του μεγάλου όγκου παραμέτρων και υπολογισμών που υπάρχουν στο πρόγραμμα.

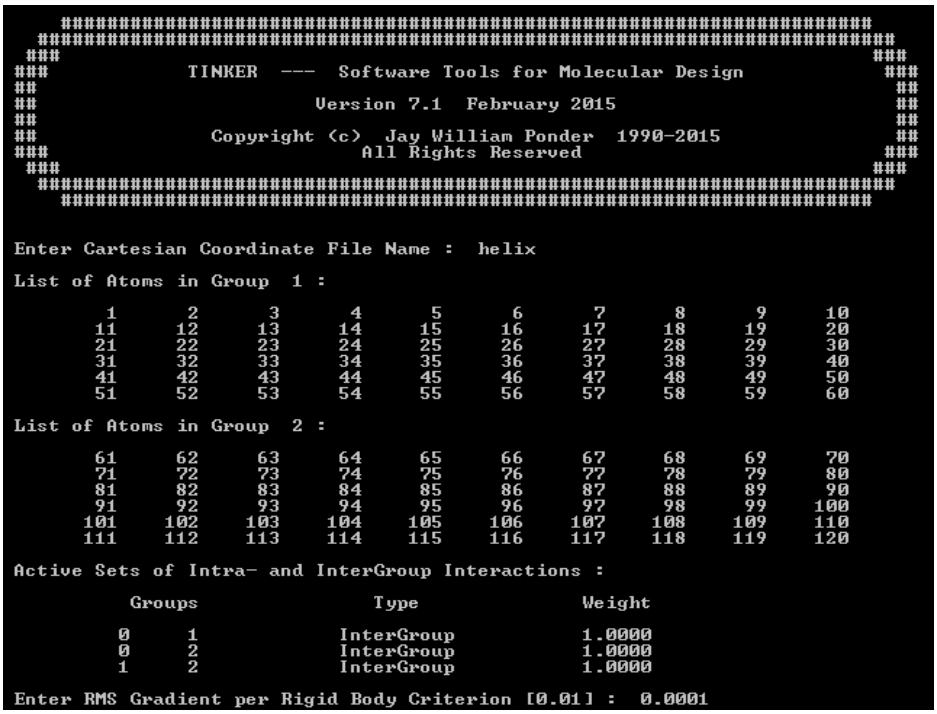
12) Τίτλος Εφαρμογής: *helix*

- **Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:** *Optrigid*
- **Περιγραφή των προγραμμάτων:**

Optrigid

Το *Optrigid* είναι παρόμοιο με το πρόγραμμα *Optimize (βελτιστοποίηση μιας δομής σε καρτεσιανές συντεταγμένες με βάση τον αλγόριθμο του William Davidon)* μόνο που λειτουργεί σε άκαμπτα σώματα, ξεκινώντας από ένα αρχείο συντεταγμένων *.xyz* και από τους ορισμούς των ατομικών ομάδων του άκαμπτου σώματος που βρίσκεται στο αντίστοιχο αρχείο *.key.* Η έξοδος αποθηκεύεται σε ένα ενημερωμένο αρχείο *.xyz* ή σε *cycle files*.

Παρακάτω φαίνεται το Input:



Το Output είναι το αρχείο *helix.xyz_2* με τις νέες συντεταγμένες.

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**

CPU load: 20%
RAM: <1%
Χρόνος εκτέλεσης: <1 sec

- **Σύγκριση με αρχείο log:**

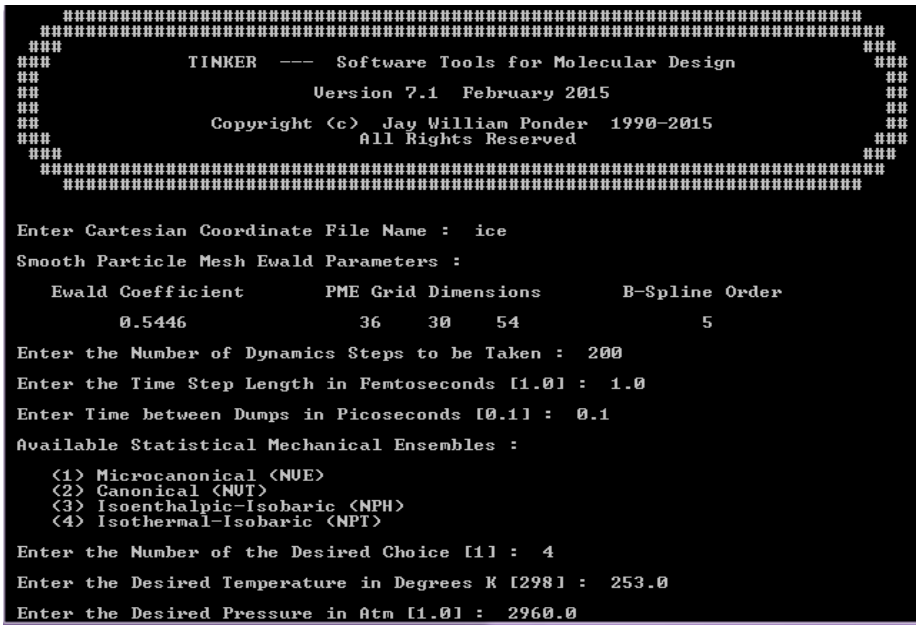
Δεν υπάρχουν σημαντικές διαφορές. Σχεδόν όλες οι τιμές είναι ίδιες.

13) Τίτλος Εφαρμογής: *ice*

- **Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:** *Dynamic*
- **Περιγραφή των προγραμμάτων:**

Dynamic

Περιγραφή του προγράμματος στη σελίδα 7, εφαρμογή *anion*. Ως Input έχουμε τα ακόλουθα:



Ως Output δημιουργούνται τα αρχεία *ice.arc* και *ice.dyn*.

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**
  CPU load: ~100%
  RAM: 5%
  Χρόνος εκτέλεσης: 24 sec

- **Σύγκριση με αρχείο log:**
  Δεν εμφανίζεται καμία απολύτως διαφορά.

14) Τίτλος Εφαρμογής: *ifabp*

- **Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:** *Distgeom*
- **Περιγραφή των προγραμμάτων:**

Distgeom

Είναι ένα πρόγραμμα για την εκτέλεση υπολογισμών για τη γεωμετρία των αποστάσεων χρησιμοποιώντας παραλλαγές για την κλασική μέθοδο της μετρικής πινάκων. Δημιουργείται ένας καθορισμένος από τον χρήστη αριθμός δομών, σύμφωνα με την εισαγώμενη απόσταση και τους δίεδρους περιορισμούς από το keyfile. Η απόσταση των δεσμών και οι περιορισμοί των γωνιών προέρχονται από τη δομή εισόδου. Δοκιμαστικές αποστάσεις ανάμεσα στα τριγωνικά εξομαλυμένα άνω και κάτω όρια μπορούν να επιλεχθούν μέσω οποιασδήποτε από τις διάφορες μεθόδους μετρικότητας, συμπεριλαμβανομένου ενός πολύ αποτελεσματικού μερικού τυχαίου σε ζεύγη σχεδίου. Η σωστή ακτίνα περιστροφής της δομής διατηρείται αυτόματα, επιλέγοντας δοκιμαστικές αποστάσεις από Γκαουσιανές κατανομές του κατάλληλου μέσου και πλάτους. Οι αρχικές ενσωματωμένες δομές μπορούν να βελτιωθούν περαιτέρω κατά ένα γεωμετρικά περιορισμένο δυναμικό, χρησιμοποιώντας είτε ένα πρωτόκολλο διαδοχικών ελαχιστοποιήσεων είτε προσομοιωμένη ανόπτηση.

Input: αρχείο *ifabp.dat*
Output: αρχεία *ifabp.001, ifabp.002*

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**
  CPU load: ~75-85%
  RAM: 6%
  Χρόνος εκτέλεσης: ~2 min

- **Σύγκριση με αρχείο log:**
  Οι τιμές στα 2 αρχεία καταγραφής είναι πολύ κοντά μεταξύ τους.

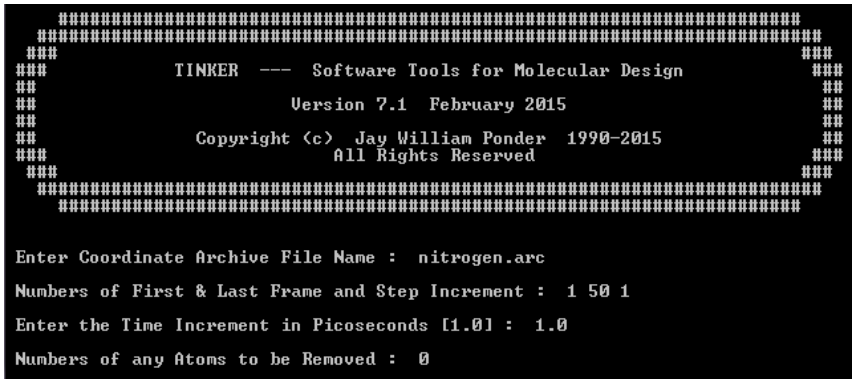
15) Τίτλος Εφαρμογής: *Nitrogen*

- **Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:** *Diffuse, Radial*
- **Περιγραφή των προγραμμάτων:**

Diffuse

Είναι ένα πρόγραμμα για τον υπολογισμό της σταθεράς αυτο-διάχυσης για ένα ομοιογενές υγρό μέσω της σχέσης Einstein. Διαβάζεται μία προηγουμένως αποθηκευμένη δυναμική τροχιά *(.arc file)* και "ξεδιπλώνεται" για να αντιστραφεί η μετατόπιση των μορίων, λόγω της χρήσης περιοδικών οριακών καταστάσεων. Στη συνέχεια χρησιμοποιείται η μέση κίνηση όλων των μορίων για να υπολογιστεί η σταθερά αυτο-διάχυσης. Ενώ το παρών πρόγραμμα θεωρεί ένα ομοιογενές σύστημα, θα ήταν εύκολο κάποιος να τροποποιείσει τον κώδικα, ώστε να χειριστεί τη διάχυση μεμονωμένων μορίων ή άλλα επιθυμητά αποτελέσματα.

Input:



Output: Δεν δημιουργεί κάποιο αρχείο. Εμφανίζει τα αποτελέσματα στην οθόνη (ή στο αρχείο καταγραφής *nitrogen.out1*)

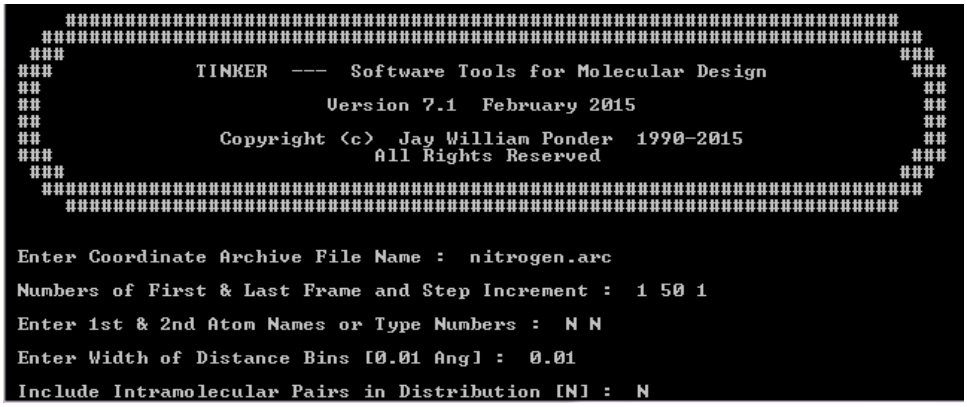
- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**
  CPU load: 15%
  RAM: <1%
  Χρόνος εκτέλεσης: <1 sec

Radial

Είναι ένα πρόγραμμα για τον υπολογισμό της συνάρτησης ζεύγους ακτινικής κατανομής ανάμεσα σε δύο τύπους ατόμων. Ο χρήστης τροφοδοτεί τα δύο ονόματα των ατόμων, για τα οποία πρόκειται να υπολογιστεί η συνάρτηση κατανομής, και το πλάτος στηλών (*bins*) για ανάλυση δεδομένων. Ως είσοδο διαβάζεται μία δυναμική τροχιά που έχει προηγουμένως αποθηκευτεί (*.arc file*). Η ακατέργαστη ακτινική κατανομή και μία ομαλοποιημένη έκδοση της με τη μέθοδο spline, δίνει αποτελέσματα από το μηδέν μέχρι μία απόσταση ίση με το μισό της ελάχιστης διάστασης του περιοδικού κουτιού.

Τα ονόματα των ατόμων αντιστοιχίζονται στην στήλη με τα ονόματα των ατόμων του αρχείου .xyz, ανεξάρτητα από το είδος του ατόμου.

Το Input έχει ως εξής:



Το Output εμφανίζεται στην οθόνη ή, αν δρομολογηθεί, στο αρχείο καταγραφής *nitrogen.out1*.

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**

CPU load: 15%
RAM: <1%
Χρόνος εκτέλεσης: <1 sec

- **Σύγκριση με αρχείο log:**

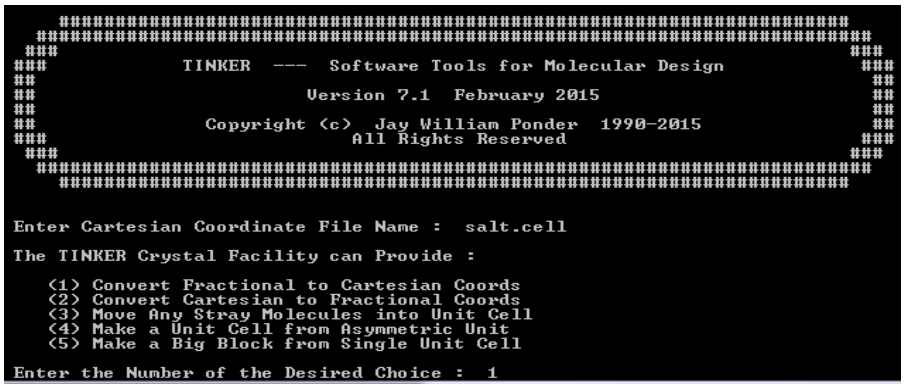
Εμφανίζονται ακριβώς τα ίδια αποτελέσματα και στα δύο αρχεία καταγραφής.

16) Τίτλος Εφαρμογής: *Salt*

- **Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:** *Crystal, Xtalmin*
- **Περιγραφή των προγραμμάτων:**

Crystal

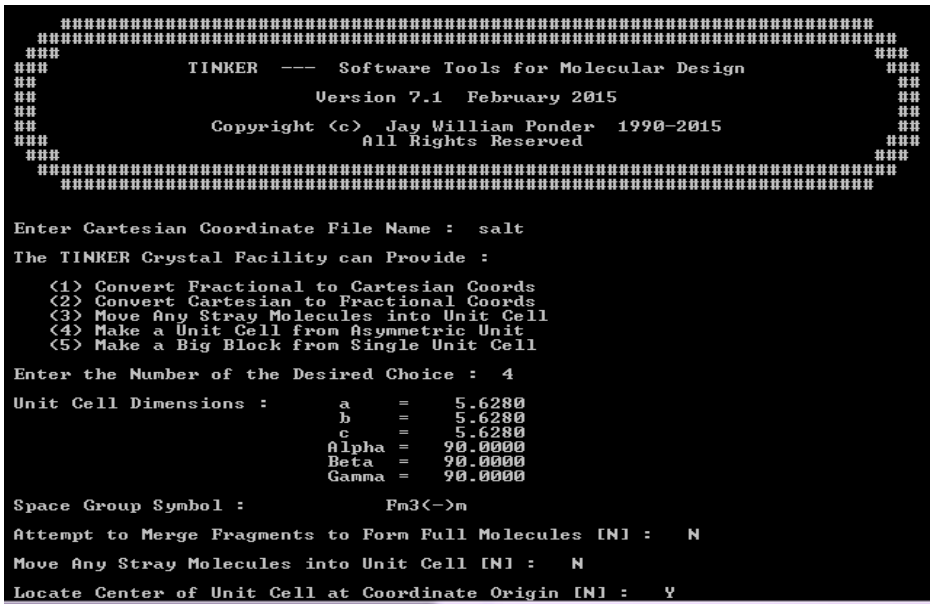
Η περιγραφή του προγράμματος υπάρχει στην σελίδα 22 στην εφαρμογή *Formamide.*
Αρχικά, εκτελούμε το πρόγραμμα *Crystal* με το εξής Input:



Δημιουργείται ως Output το αρχείο συντεταγμένων *salt.xyz*.

Εκτελούμε πάλι το ίδιο πρόγραμμα εισάγωντας το νέο αρχείο αυτή τη φορά.

Το Input τώρα είναι:



Το Output είναι το καινούργιο αρχείο συντεταγμένων *salt.xyz_2*.

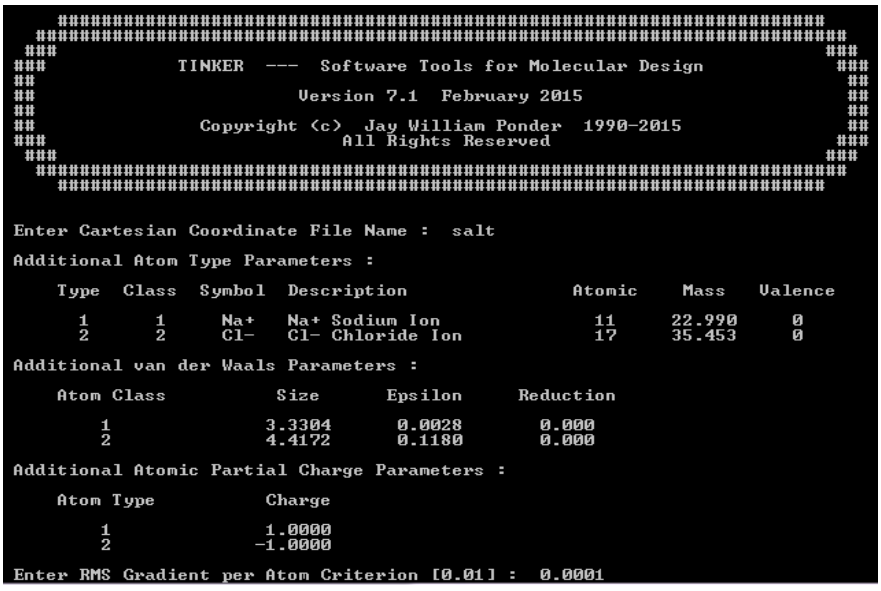
- **<u>Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:</u>**

  <u>CPU load</u>: ~10%
  <u>RAM</u>: <1%
  <u>Χρόνος εκτέλεσης</u>: <1 sec

Xtalmin

Είναι ένα πρόγραμμα για την εκτέλεση πλήρων κρυσταλλικών ελαχιστοποιήσεων. Δέχεται σαν είσοδο τις συντεταγμένες της δομής και τις παραμέτρους του στοιχειώδους κρυσταλλικού πλέγματος. Στη συνέχεια εναλλάσει κύκλους της, στυλ-Newton, βελτιστοποίησης της δομής και της βελτιστοποίησης των κλίσεων των παραμέτρων του κρυσταλλικού πλέγματος. Αυτή η εναλλασόμενη ελαχιστοποίηση είναι βραδύτερη από την πιο άμεση βελτιστοποίηση όλων των παραμέτρων με τη μία, αλλά είναι κάπως πιο αποτελεσματική. Η συμμετρία του αρχικού κρυστάλλου δεν εφαρμόζεται, έτσι μπορεί να παρατηρηθεί ενδομετατροπή των κρυσταλλικών μορφών σε ορισμένες περιπτώσεις.

Input:



Output: αρχείο συντεταγμένων *salt.xyz_3*

➢ **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**
CPU load: 55%
RAM: 5%
Χρόνος εκτέλεσης: ~1 sec

- **Σύγκριση με αρχείο log:**

Το πρόγραμμα *Crystal* εμφανίζει ακριβώς τα ίδια αποτελέσματα. Στο *Xtalmin* εμφανίζεται το εξής παράδοξο:

```
 CHKXYZ  --  Warning, Atoms     3 and     9 have Identical Coordinates
 CHKXYZ  --  Warning, Atoms     4 and    10 have Identical Coordinates
 CHKXYZ  --  Warning, Atoms     5 and    17 have Identical Coordinates
 CHKXYZ  --  Warning, Atoms     6 and    18 have Identical Coordinates
 CHKXYZ  --  Warning, Atoms     7 and    25 have Identical Coordinates
 CHKXYZ  --  Warning, Atoms     8 and    26 have Identical Coordinates
 CHKXYZ  --  Warning, Atoms    13 and    19 have Identical Coordinates
 CHKXYZ  --  Warning, Atoms    14 and    20 have Identical Coordinates
 CHKXYZ  --  Warning, Atoms    15 and    27 have Identical Coordinates
 CHKXYZ  --  Warning, Atoms    16 and    28 have Identical Coordinates
 CHKXYZ  --  Warning, Atoms    23 and    29 have Identical Coordinates
 CHKXYZ  --  Warning, Atoms    24 and    30 have Identical Coordinates
```

και τελειώνει έτσι:

```
Optimally Conditioned Variable Metric Optimization :

VM Iter     F Value       G RMS     F Move    X Move      Angle   FG Call


GRADIENT  --  Illegal Value for the Total Potential Energy

TINKER is Unable to Continue; Terminating the Current Calculation
```

Αυτό οφείλεται σε κάποιο λάθος στους υπολογισμούς, πιθανών στους τυχαίους αριθμούς που έχει επιλέξει το πρόγραμμα, και έτσι υπολογίζονται τιμές που δεν είναι επιτρεπτές.

Σε επόμενη εκτέλεση του προγράμματος δεν προέκυψε το ίδιο πρόβλημα, αλλά έκανε κανονικά τους υπολογισμούς και αυτή τη φορά δεν υπάρχουν διαφορές στις τιμές των αρχείων καταγραφής *salt.out2* και *salt.log*.

17) Τίτλος Εφαρμογής: *Tetraala*

- **Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:** *Protein, Monte*
- **Περιγραφή των προγραμμάτων:**

Protein

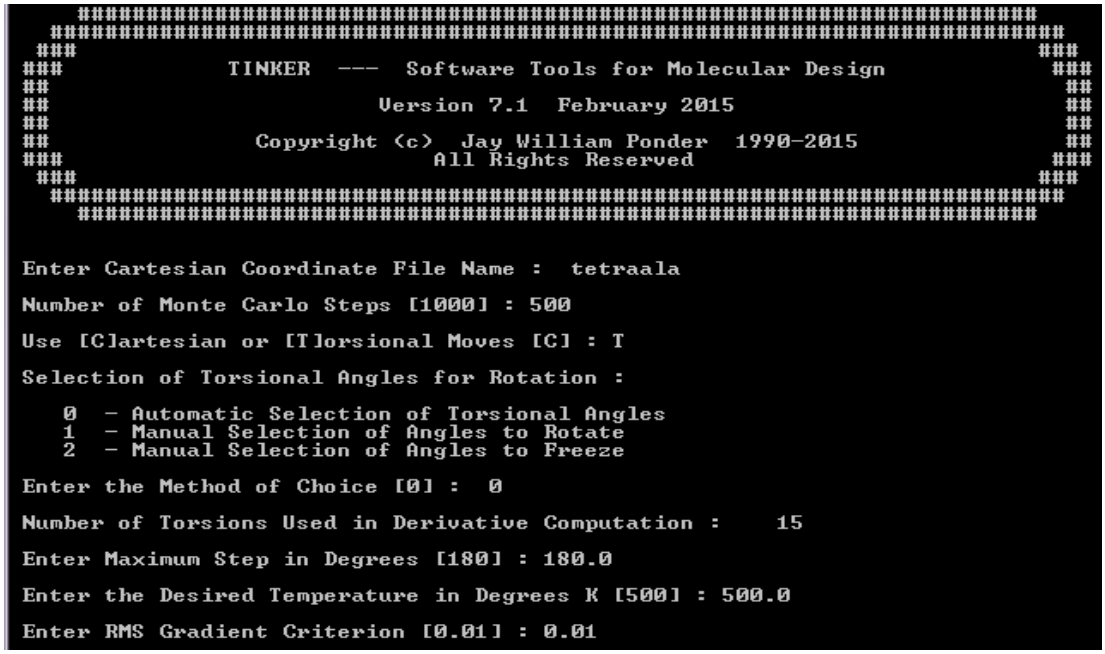
Για την περιγραφή του προγράμματος ανατρέξτε στη σελίδα 21, εφαρμογή *Enkephalin.*
Input: αρχείο *tetraala.dat.*
Output: αρχεία *tetraala.xyz, tetraala.seq, tetraala.int*

➢ **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**
CPU load: 15%
RAM: <1%
Χρόνος εκτέλεσης: <1 sec

Monte

Το πρόγραμμα *Monte* υλοποιεί τον αλγόριθμο Ελαχιστοποίησης Monte Carlo που αναπτύχθηκε από την ομάδα του Harold Scheraga και άλλους. Η διαδικασία κάνει βήματα Monte Carlo είτε για ένα μόνο άτομο είτε για μία μόνο γωνία περιστροφής, και μετά πραγματοποιεί μία ελαχιστοσποίηση πριν την εφαρμογή της μεθόδου δειγματοληψίας *Metropolis*. Αυτό οδηγεί σε αποτελεσματική δειγματοληψία μιας τροποποιημένης δυναμικής επιφάνειας, όπου τα μόνα πιθανά ενεργειακά επίπεδα είναι σχετικά με εκείνα των τοπικών ελαχίστων πάνω στην αρχική επιφάνεια.

Το Input έχει ως εξής:



Output: cycle files *tetraala.001, tetraala.002, tetraala.003, tetraala.004*

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**

  CPU load: ~95%

  RAM: 4%

  Χρόνος εκτέλεσης: ~20 sec

- **Σύγκριση με αρχείο log:**

Δεν υπάρχει καμία διαφορά στις τιμές των αρχείων καταγραφής.

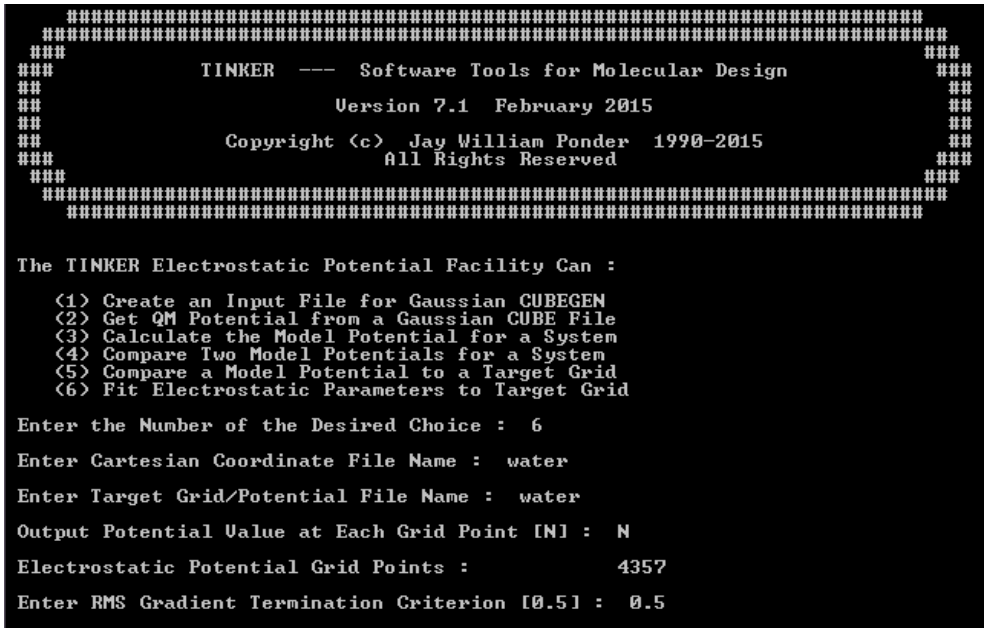
18) Τίτλος Εφαρμογής: *Water*

- **Προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν:** *Potential*
- **Περιγραφή των προγραμμάτων:**

Potential

Το πρόγραμμα αυτό υπολογίζει το ηλεκτροστατικό δυναμικό για ένα μόριο σε ένα σύνολο σημείων. Προαιρετικά, συγκρίνει με ένα πιθανό στόχο δυναμικού ή βελτιστοποιεί τις ηλεκτροστατικές παραμέτρους.

Το Input φαίνεται παρακάτω:



Ως Output δημιουργείται το αρχείο *water.key_2*.

- **Πόροι συστήματος κατά την εκτέλεση:**
  CPU load: ~30%
  RAM: <1%
  Χρόνος εκτέλεσης: ~1 sec

- **Σύγκριση με αρχείο log:**
  Δεν υπάρχουν διαφορές στα αρχεία καταγραφής.

IV) ΕΠΙΠΛΕΟΝ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ ΤΟΥ TINKER

➢ Προγράμματα δυναμικής ενέργειας

ANNEAL

Εκτελεί εναν υπολογισμό προσομοιωμένης ανόπτησης μοριακής δυναμικής. Το πρόγραμμα ξεκινάει από μια συγκεκριμένη μοριακή δομή που δίνεται ως είσοδο σε μορφή TINKER .xyz. Η τροχιά ενημερώνεται χρησιμοποιώντας είτε μία τροποποιημένη Beeman είτε μία "Velocity Verlet" μέθοδο ολοκλήρωσης. Το πρωτόκολλο ανόπτησης υλοποιείται επιτρέποντας ομαλές αλλαγές ανάμεσα στις αρχικές και τελικές τιμές της θερμοκρασίας του συστήματος μέσω της μεθόδου Groningen της σύζευξης με ένα εξωτερικό λουτρό. Η κλιμάκωση μπορεί να είναι γραμμικής ή σιγμοειδούς φύσεως. Επιπλέον, παράμετροι όπως η απόσταση αποκοπής μπορούν να μετασχηματιστούν με τη θερμοκρασία. Ο χρήστης πρέπει να δώσει ως είσοδο τον επιθυμητό αριθμό δυναμικών βημάτων τόσο για την εξισορρόπηση όσο και τα στάδια ψύξης, και ένα διάστημα μεταξύ αποθήκευσης συντεταγμένων/τροχιάς. Όλα τα αποθηκευμένα σύνολα συντεταγμένων κατά μήκος της τροχιάς τοποθετούνται σε διαδοχικά αριθμημένα κυκλικά αρχεία.

MINIROT

Το πρόγραμμα MINIROT χρησιμοποιεί την ίδια μέθοδο περιορισμένης μνήμης L-BFGS όπως το MINIMIZE, αλλά εκτελεί τον υπολογισμό με βάση τις δίεδρες γωνίες αντί για τις Καρτεσιανές συντεταγμένες. Η έξοδος αποθηκεύεται σε ένα ενημερωμένο αρχείο .int ή σε κυκλικά αρχεία.

MINIRIGID

Το πρόγραμμα MINIRIGID είναι παρόμοιο με το MINIMIZE, μόνο που λειτουργεί σε στερεά σώματα ξεκινώντας από ένα αρχείο συντεταγμένων TINKER .xyz και τους ορισμούς της ομάδας στερεού σώματος που βρίσκεται στο αντίστοιχο αρχείο .key. Η έξοδος αποθηκεύεται σε ένα ενημερωμένο .xyz αρχείο ή σε κυκλικά αρχεία.

NEWTROT

Το πρόγραμμα NEWTROT είναι παρόμοιο με το NEWTON με τη διαφορά ότι απαιτεί ένα αρχείο .int ως είσοδο και μετά λειτουργεί σε όρους δίεδρων γωνιών ως μεταβλητές ελαχιστοποίησης. Δεδομένου ότι ο Εσσιανός πίνακας δίεδρου χώρου μιας αυθαίρετης δομής είναι συνήθως αόριστος, αυτή η μέθοδος συχνά δεν αποδίδει εξίσου καλά με τους άλλους, απλούστερους βασιζόμενους σε δίεδρες γωνίες ελαχιστοποιητές.

OPTIMIZE

Το πρόγραμμα OPTIMIZE εκτελεί μία βέλτιστης κατάστασης μεταβλητή μετρική ελαχιστοποίηση μιας δομής που εισάγεται σε Καρτεσιανές συντεταγμένες, χρησιμοποιώντας έναν αλγόριθμο του William Davidon. Η μέθοδος δεν εκτελεί γραμμικές αναζητήσεις, αλλά απαιτεί υπολογισμό των ενεργειών και των κλίσεων, καθώς και την αποθήκευση για μια εκτίμηση του αντιστρόφου Εσσιανού πίνακα. Το πρόγραμμα λειτουργεί σε Καρτεσιανές συντεταγμένες από ένα αρχείο TINKER .xyz. Το OPTIMIZE θα συγκλίνει κάπως πιο γρήγορα και πιο ολοκληρωμένα από το MINIMIZE. Όμως, η ανάγκη για αποθήκευση και χειρισμό ενός πλήρους αντιστρόφου Εσσιανού πίνακα περιορίζει τη χρήση του σε δομές που περιέχουν λιγότερα από μερικά εκατοντάδες άτομα. Το OPTIMIZE χρειάζεται ως είσοδο συντεταγμένες και ένα κριτήριο αποκοπής της κλίσης RMS. Η συντεταγμένες που εξάγονται αποθηκεύονται σε ενημερωμένα αρχεία .xyz ή ως κυκλικά αρχεία *(cycle files*).

OPTIROT

Το πρόγραμμα OPTIROT είναι παρόμοιο με το OPTIMIZE εκτός από το ότι λειτουργεί σε δίεδρες γωνίες ξεκινώντας από ένα αρχείο εσωτερικών συντεταγμένων TINKER .int. Αυτό το πρόγραμμα είναι συνήθως η προτιμότερη μέθοδος για τα περισσότερα προβλήματα δίεδρων γωνιών, δεδομένου ότι οι μέθοδοι Truncated Newton φαίνεται να χάνουν λίγο την αποτελεσματικότητα τους στην μετάβαση από Καρτεσιανές σε στροφικές συντεταγμένες.

PSS

Εφαρμόζει την εκδοχή των κατασκευαστών του TINKER για την ομαλοποίηση της δυναμικής ενέργειας και του αλγορίθμου αναζήτησης για την ολική βελτιστοποίηση της μοριακής διαμόρφωσης. Αρχικά ελαχιστοποιείται μία αρχική δομή στη μορφή .xyz σε Καρτεσιανές συντεταγμένες, σε μια σειρά από ολοένα και πιο ομαλοποιημένες επιφάνειες δυναμικής ενέργειας. Στη συνέχεια, η διαδικασία ομαλοποίησης αντιστρέφεται με την ελαχιστοποίηση κάθε διαδοχικής επιφάνειας, ξεκινώντας από τις συντεταγμένες του ελαχίστου στην προηγούμενη επιφάνεια. Μία διαδικασία τοπικής αναζήτησης χρησιμοποιείται κατά τη διάρκεια της αντίστροφης πορείας για τη διερεύνηση εναλακτικών ελαχίστων καλύτερων από αυτών που βρέθηκαν στην τρέχουσα ελαχιστοποίηση. Το τελικό αποτέλεσμα είναι συνήθως μία πολύ χαμηλή ενέργειακή διαμόρφωση ή, σε ευνοϊκές περιπτώσεις, η ολική ελάχιστη ενεργειακή διαμόρφωση. Οι ομάδες συντεταγμένων ελάχιστης ενέργειας, που βρίσκονται σε κάθε επιφάνεια τόσο κάτα την προς τα εμπρός ομαλοποίηση όσο και στις διαδικασίες αντίστροφης πορείας, αποθηκεύονται σε διαδοχικά αριθμημένα κυκλικά αρχεία *(cycle files*).

PSSRIGID

Το πρόγραμμα αυτό υλοποιεί την μέθοδο εξομάλυνσης της δυναμικής ενέργειας και αναζήτησης όπως περιγράφεται παραπάνω για το πρόγραμμα PSS, αλλά εκτελεί τον υπολογισμό όσον αφορά τις ατομικές ομάδες άκαμπτου σώματος καθορισμένες από το keyfile, αντί για Καρτεσιανές συντεταγμένες. Η έξοδος αποθηκεύεται σε αριθμημένα κυκλικά αρχεία με τη μορφή αρχείου .xyz.

PSSROT

Το πρόγραμμα αυτό υλοποιεί τη μέθοδο ομαλοποίησης της δυναμικής ενέργειας και αναζήτησης όπως περιγράφεται παραπάνω για το πρόγραμμα PSS, αλλά εκτελεί τον υπολογισμό όσον αφορά μία ομάδα από καθορισμένες από το χρήστη δίεδρες γωνίες αντί για Καρτεσιανές συντεταγμένες. Η έξοδος αποθηκεύεται σε αριθμημένα κυκλικά αρχεία με τη μορφή αρχείου .int.

SNIFFER

Ένα πρόγραμμα που υλοποιεί τον αλγόριθμο Sniffer συνολικής βελτιστοποίησης των Butler και Slaminka, μία διακριτή εκδοχή της μεθόδου συνολικής αναζήτησης τροχιάς του Griewank. Το πρόγραμμα δέχεται ως είσοδο ένα αρχείο συντεταγμένων TINKER .xyz και το διαταράσσει έντονα μέσω μιας τροποποιημένης δυναμικής τροχιάς πριν, πιθανώς, εγκατασταθεί σε ένα χαμηλού ύψους ελάχιστο. Απαιτείται κάποια μέθοδος - δοκιμή και σφάλμα, αφού η τρέχουσα εφαρμογή είναι ευαίσθητη σε διάφορες παραμέτρους και ανοχές που διέπουν τον υπολογισμό. Προς το παρόν, αυτές οι παράμετροι δεν είναι προσβάσιμες από το χρήστη και πρέπει να αλλάξουν στον πηγαίο κώδικα. Ωστόσο, αυτή η μέθοδος μπορεί να κάνει καλά τη δουλειά της γρήγορης βελτιστοποίησης διαμόρφωσης μέσα σε ένα περιορισμένο εύρος σύγκλισης.

TESTGRAD

Το πρόγραμμα TESTGRAD υπολογίζει και συγκρίνει τις αναλυτικές και αριθμητικές πρώτες παραγώγους (δηλ. το διάνυσμα κλίσης) της δυναμικής ενέργειας για μια δομή καρτεσιανών συντεταγμένων που εισάγεται. Η έξοδος μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη δοκιμή ή την επίλυση σφαλμάτων του τρέχοντος δυναμικού ή οποιονδήποτε πρόσθετων, καθορισμένων από το χρήστη όρων ενέργειας.

TESTHESS

Το πρόγραμμα TESTHESS υπολογίζει και συγκρίνει τις αναλυτικές και αριθμητικές δεύτερες παραγώγους (δηλ., τον Εσσιανό πίνακα) της δυναμικής ενέργειας για δομή καρτεσιανών συντεταγμένων που εισάγεται. Η έξοδος μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη δοκιμή ή την επίλυση σφαλμάτων του τρέχοντος δυναμικού ή πρόσθετων, καθορισμένων από το χρήστη όρων ενέργειας.

TESTLIGHT

Ένα πρόγραμμα για τη σύγκριση της αποτελεσματικότητας των διαφόρων μεθόδων μη-συνδεδεμένων γειτόνων για το τρέχον μοριακό σύστημα. Το πρόγραμμα χρονομετρεί τον υπολογισμό της ενέργειας και της κλίσης για τους όρους δυναμικού van der Waals και φορτίο-φορτίο ηλεκτροστατικού δυναμικού, χρησιμοποιώντας έναν απλό διπλό βρόγχο πάνω σε όλες τις αλληλεπιδράσεις και χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο της Μεθόδου των Lights (*Method of Lights*) για την επιλογή γειτόνων. Τα αποτελέσματα μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να αποφασιστεί κατά πόσον η Μέθοδος των Lights έχει καθόλου πλεονέκτημα χρόνου CPU για την τρέχουσα δομή. Αμφότερες οι μέθοδοι θα πρέπει να δίνουν ακρίβως την ίδια απάντηση σε όλες τις περιπτώσεις, καθώς υπολογιζόνται οι πανομοιότυπες επιμέρους αλληλεπιδράσεις και από τις δύο μεθόδους.

Η προεπιλεγμένη μέθοδος διπλού βρόγχου είναι γρηγορότερη όταν δεν χρησιμοποιούνται όρια ή όταν η οριακή σφαίρα (*cutoff sphere*) περιέχει περίπου το μίσο ή περισσότερο από το συνολικό σύστημα της μοναδιαίας κυψελίδας. Στις περιπτώσεις όπου η οριακή σφαίρα είναι πολύ μικρότερη από το μέγεθος του συστήματος, η Μέθοδος των Lights μπορεί να είναι πόλυ πιο γρήγορη από τη στιγμή που αποφεύγει τον περιττό υπολογισμό των αποστάσεων πέρα από το εύρος των οριακών σφαιρών (*cutoff range*).

TESTROT

Το πρόγραμμα TESTROT υπολογίζει και συγκρίνει τις αναλυτικές και αριθμητικές πρώτες παραγώγους (δηλ., το διάνυσμα κλίσης) της δυναμικής ενέργειας σε σχέση με τις δίεδρες γωνίες. Ως είσοδος είναι ένα αρχείο TINKER εσωτερικών συντεταγμένων .int. Η έξοδος μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη δοκιμή ή την επίλυση σφαλμάτων των τρεχόντων δυναμικών συναρτήσεων ή πρόσθετων, καθορισμένων από το χρήστη όρων ενέργειας.

TIMER

Ένα απλό πρόγραμμα για την παροχή στατιστικών χρονισμού για τις κλήσεις συναρτήσεων ενέργειας μέσα στο πακέτο TINKER. Το TIMER απαιτεί ένα αρχείο εισόδου .xyz και εξάγει τον χρόνο της CPU (*χρόνος ρολογιού τοίχου σε κάποιους τύπους μηχανών*) που χρειάζεται για να εκτελεστεί ένας συγκεκριμένος αριθμός από αξιολογήσεις ενέργειας, κλίσεων και Εσσιανού πίνακα.

TIMEROT

Το πρόγραμμα αυτό είναι παρόμοιο με το TIMER, μόνο που λειτουργεί με δίεδρες γωνίες μέσω της εισόδου ενός αρχείου TINKER .int εσωτερικών συντεταγμένων. Στην παρούσα έκδοση, υπολογίζεται αριθμητικά ο περιστροφικός Εσσιανός από την αναλυτική κλίση περιστροφής.

VIBROT

Το πρόγραμμα VIBROT συμπληρώνει τον περιστροφικό Εσσιανό πίνακα δια μέσου της αριθμητικής παραγώγησης της αναλυτικής γωνίας περιστροφής. Ο Εσσιανός πίνακας στη συνέχεια διαγωνοποιείται και οι ιδιοτιμές είναι η έξοδος. Η παρούσα έκδοση δεν υπολογίζει τα στοιχεία του πίνακα κινητικής ενέργειας που χρειάζονται για τη μετατροπή του Εσσιανού πίνακα στους περιστροφικούς κανονικούς τρόπους δόνησης. Αυτό θα προστεθεί σε επόμενη έκδοση. Η απαιτούμενη είσοδος είναι ένα αρχείο TINKER εσωτερικών συντεταγμένων .int.

➢ Άλλα Βοηθητικά Προγράμματα (Utility Programs)

ARCHIVE

Ένα πρόγραμμα για τη συνένωση των κυκλικών αρχείων TINKER σε ένα ενιαίο αρχείο αρχειοθέτησης. Είναι χρήσιμο για την αποθήκευση των ενδιάμεσων αποτελεσμάτων των ελαχιστοποιήσεων, δυναμικών τροχιών, κ.ο.κ. Το αρχείο αρχειοθέτησης μπορεί να γραφεί σε μορφή TINKER ή σε μορφές που μπορούν να χρησιμοποιηθούν με το MSI's InsightII (το αρχείο τους CAR με επέκταση .msi) ή με το Xmakemol (η μορφή αρχείου τους με επέκταση .xmol). Μόνο δραστικά άτομα γράφονται στα αρχεία εξόδου του InsightII και του Xmakemol, επιτρέποντας την απεικόνιση των μερικών δομών. Το πρόγραμμα μπορεί επίσης να εξάγει μεμονωμένα κυκλικά αρχεία από ένα αρχείο αρχειοθέτησης του TINKER.

CORRELATE

Ένα πρόγραμμα για τον υπολογισμό συναρτήσεων χρόνου συσχέτισης από τις συλλογές των κυκλικών αρχείων TINKER. Η χρήση του απαιτεί μία ιδιότητα της συνάρτησης που παρέχεται από τον χρήστη, που υπολογίζει την τιμή της ιδιότητας για την οποία επιθυμείται μία συσχέτιση χρόνου για δύο δομές εισόδου. Παρέχεται μία ρουτίνα, η οποία υπολογίζει είτε μία συνάρτηση αυτοσυσχέτισης ταχύτητας είτε μία rms δομική υπέρθεση συναρτήσει του χρόνου. Το κυρίως μέρος του προγράμματος οργανώνει το συνολικό υπολογισμό με αποτελεσματικό τρόπο και εξάγει την τελική συνάρτηση συσχέτισης χρόνου.

DOCUMENT

Το πρόγραμμα DOCUMENT παρέχεται ως ένα εργαλείο ελάχιστης καταγραφής και τεκμηρίωσης. Λειτουργεί στον πηγαίο κώδικα του TINKER, είτε σε μεμονωμένα αρχεία είτε στον πλήρη κατάλογο πηγών που παράγεται από την εντολή δέσμης ενεργειών *listing.make,* για την δημιουργία καταλόγων από ρουτίνες, κοινές ομάδες ή έγκυρες λέξεις-κλειδιά. Επιπλέον, το πρόγραμμα έχει τη δυνατότητα να εξάγει μία μορφοποιημένη λίστα παραμέτρων από τα τυπικά αρχεία παραμέτρων του TINKER.

INTEDIT

Ένα πρόγραμμα που επιτρέπει την διαδραστική επιθεώρηση και τροποποίηση των ορισμών των εσωτερικών συντεταγμένων και των τιμών μιας δομής TINKER. Εάν έχει τροποποιηθεί η δομή, ο χρήστης έχει την επιλογή να γράψει ένα νέο αρχείο εσωτερικών συντεταγμένων κατά την έξοδο.

INTXYZ

Ένα πρόγραμμα για την μετατροπή ενός αρχείου εσωτερικών συντεταγμένων .int του TINKER σε ένα αρχείο Καρτεσιανών συντεταγμένων .xyz.

NUCLEIC

Ένα πρόγραμμα για την αυτοματοποιημένη κατασκευή δομών νουκλεϊκών οξέων. Μετά από διαδραστική είσοδο μιας αλληλουχίας νουκλεοτιδίων με προαιρετικές φωσφορικές γωνίες κορμού, το πρόγραμμα κτίζει εσωτερικές και Καρτεσιανές συντεταγμένες. Χρησιμοποιούνται πρότυπα μήκη δεσμού και γωνίες. Αμφότερες οι αλληλουχίες DNA και RNA υποστηρίζονται όπως είναι οι δομές A-, B- και Z-μορφής. Διπλές έλικες συμπληρωματικής αλληλουχίας μπορούν αυτόματα να κατασκευαστούν μέσω μιας άκαμπτης πρόσδεσης μεμονωμένων κλώνων.

POLARIZE

Ένα πρόγραμμα για τον υπολογισμό της μοριακής πόλωσης από ένα βασισμένο σε άτομα κατανεμημένο μοντέλο πόλωσης. Ένα περιορισμένο μοντέλο αλληλεπίδρασης που οφείλεται στον Thole είναι προαιρετικά μέσω των ρυθμίσεων του keyfile. Απαιτείται ένα αρχείο TINKER .xyz ως είσοδος. Η έξοδος αποτελείται από τον συνολικό τανυστή πόλωσης στις συνολικές συντεταγμένες και τις ιδιοτιμές του.

PRMEDIT

Ένα πρόγραμμα για την μορφοποίηση και την αλλαγή της αρίθμησης των αρχείων παραμέτρων πεδίου δυνάμεων του TINKER. Όταν προστίθενται τύποι ή κατηγορίες ατόμων σε ένα αρχείο παραμέτρων, αυτό το βοηθητικό πρόγραμμα έχει την ικανότητα να ξαναναριθμήσει διαδοχικά όλες τις καταχωρήσεις ατόμων, και να μεταβάλλει τους αριθμούς τύπου και κατηγορίας σε όλες τις άλλες καταχωρήσεις παραμέτρων, για τη διατήρηση της συνοχής.

SPECTRUM

Ένα πρόγραμμα για τον υπολογισμό ενός φάσματος ισχύος από τα δεδομένα αυτοσυσχέτισης της ταχύτητας. Ως είσοδο, το πρόγραμμα απαιτεί μία συνάρτηση αυτοσυσχέτισης της ταχύτητας όπως παράγεται από το πρόγραμμα CORRELATE. Σε αυτά τα δεδομένα, μαζί με ένα βήμα χρόνου που εισάγεται από το χρήστη, γίνεται μετασχηματισμός Fourier για να παραχθούν οι φασματικές εντάσεις σε ένα εύρος μήκους κύματος. Το αποτέλεσμα είναι ένα φάσμα ισχύος, και οι θέσεις των συχνοτήτων είναι αυτές που προβλέπονται για ένα υπέρυθρο ή Raman φάσμα. Ωστόσο, τα δεδομένα δεν είναι σταθμισμένα με τις παραγώγους των μοριακών διπόλων, όπως θα απαιτούσε η παραγωγή σωστών εντάσεων IR.

SUPERPOSE

Ένα πρόγραμμα για την υπέρθεση 2 μοριακών δομών στις 3 διαστάσεις. Μία ποικιλία από επιλογές για την είσοδο των ατομικών συνόλων που θα χρησιμοποιηθούν για την υπέρθεση, παρουσιάζονται διαδραστικά στο χρήστη. Η υπέρθεση μπορεί να σταθμιστεί με μάζα εάν είναι επιθυμητό, και οι συντεταγμένες της δεύτερες δομής που έχει υπερτεθεί στην πρώτη είναι προαιρετικά έξοδος. Εάν χρησιμοποιηθούν ως είσοδος αρχεία αρχειοθέτησης TINKER, το πρόγραμμα θα υπολογίσει όλα τα ζεύγη υπερθέσων μεταξύ των δομών στα αρχεία εισόδου.

SYBYLXYZ

Ένα πρόγραμμα για την μετατροπή ενός αρχείου TRIPOS Sybyl MOL2 σε αρχείο καρτεσιανών συντεταγμένων .xyz του TINKER. Η παρούσα έκδοση του προγράμματος δεν επιδιώκει την μετατροπή των ειδών των ατόμων Sybyl στα ενεργά είδη πεδίου δυνάμεων του TINKER, δηλαδή, όλα τα είδη των ατόμων ορίζονται απλά ως μηδέν.

TVIEW

Είναι ένα πρόγραμμα προβολής μορίων που προέρχονται από το ευρέως γνωστό πρόγραμμα RasMol του Roger Sayle. Το TVIEW έχει τροποποιηθεί για να απομακρύνει τις περισσότερες από τις επιλογές που έχουν να κάνουν με τις πρωτεΐνες και να διαβάζει απευθείας τη μορφή αρχείου TINKER .xyz. Το πρωτότυπο πρόγραμμα RasMol έχει τροποποιηθεί για να επιτρέπει την επιλογή και τον καθορισμό από τα άτομα αντί των υπολείπων. Σε μελλοντικές εκδόσεις του TVIEW είναι πιθανό να υπάρχει η δυνατότητα για απεικόνιση της προβολής της ακολουθίας των στιγμιότυπων των συντεταγμένων από μια ελαχιστοποίηση ή δυναμική τροχιά.

XYZEDIT

Ένα πρόγραμμα με διάφορες επιλογές για τον χειρισμό ενός αρχείου Καρτεσιανών συντεταγμένων .xyz του TINKER που δίνεται ως είσοδος. Η παρούσα έκδοση του προγράμματος έχει τις παρακάτω διαδραστικά επιλεγόμενες επιλογές: (1) Αντικατάσταση των αριθμών των τρεχόντων ατόμων, (2) Διαγραφή συγκεκριμένων μεμονωμένων ατόμων, (3) Διαγραφή συγκεκριμένων ειδών των ατόμων, (4) Διαγραφή των ατόμων εκτός εμβέλειας ορίων, (5) Εισαγωγή μεμονωμένων συγκεκριμένων ατόμων, (6) Αντικατάσταση παλιού τύπου ατόμου με ένα νέο τύπο ατόμου, (7) Εκχώρηση συνδέσεων με βάση την απόσταση, (8) Μετατροπή μονάδων από Bohr σε Angstrom, (9) Αντιστροφή δια της αρχής για να δωθεί εναντιόμορφο είδωλο, (10) Μετατροπή του κέντρου μάζας στην αρχή των αξόνων, (11) μετατροπή ενός συγκεκριμένου ατόμου στην αρχή των αξόνων, (12) Μετατροπή και περιστροφή σε αδρανειακό σύστημα, (13) Μετακίνηση σε συγκεκριμένες συντεταγμένες άκαμπτου σώματος, (14) Δημιουργία και γέμισμα ενός κουτιού περιοδικών ορίων, (15) Απορρόφηση τρέχοντος μορίου από διαλύτη, (16) Προσάρτηση ενός άλλου αρχείου XYZ στο τρέχον. Στις περισσότερες περιπτώσεις, πολλαπλές επιλογές μπορούν να εφαρμοστούν διαδοχικά σε ένα αρχείο εισόδου, Στο τέλος της διαδικασίας της επεξεργασίας, μία νέα έκδοση του αρχικού αρχείου .xyz γράφεται ως έξοδος.

XYZPDB

Είναι το αντίστροφο του προγράμματος PDBXYZ. Χρησιμοποιείται για την μετατροπή ενός αρχείου TINKER .xyz Καρτεσιανών συντεταγμένων σε αρχείο Brookhaven Protein Data Bank (αρχείο PDB).

XYZSYBYL

Είναι το αντίστροφο του προγράμματος SYBYLXYZ. Μετατρέπει ένα αρχείο Καρτεσιανών συντεταγμένων TINKER .xyz σε αρχείο TRIPOS Sybyl MOL2. Η μετατροπή παράγει μόνο τους MOLECULE (μόριο), ATOM (άτομο), BOND (δεσμός) και SUBSTRUCTURE (υποδομή) τύπους καταχώρησης στο αρχείο MOL2. Κοινοί τύποι ατόμων Sybyl χρησιμοποιούνται στις περισσότερες περιπτώσεις. Ενώ αυτοί οι τύποι ατόμων μπορεί να χρειαστούν μετατροπή σε κάποιες περιπτώσεις, το Sybyl συνήθως είναι ικανό να εμφανίζει σωστά το αρχείο MOL2 που προκύπτει.

V) ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. **Διαδικτυακή σελίδα του TINKER (*http://dasher.wustl.edu/tinker/*)**
2. **Οδηγός Χρήστη του TINKER (*http://dasher.wustl.edu/tinker/downloads/guide.pdf*)**