

**Guia da Máquina Virtual para a disciplina: Simulação Computacional
de Líquidos Moleculares e Soluções (PGF5216)**

Escrito por: Emanuel Mancio
Revisado por: Kaline Coutinho

São Paulo - SP
Março de 2021

1 Instalação

Para criar e usar a máquina virtual (VM) da disciplina PGF5216 é preciso baixar o programa VirtualBox nesse link: <https://www.virtualbox.org/wiki/Downloads>.

Com o programa VirtualBox instalado, é necessário copiar para o seu computador o arquivo PGF5216.ova da VM que está no link: https://www.dropbox.com/sh/8y7fsp82zajhygf/AAB6i1U6Y8s70U_W-7S4Fnd8a?dl=0.

Com o arquivo PGF5216.ova em seu computador siga as seguintes instruções abaixo para configurar a VM:

- abrir o programa VirtualBox
- clicar em Ferramentas (ou Tools), se esta aba estiver fechada,
- clicar em Importar (ou import),
- clicar no ícone da pasta na lateral direita, na nova janela aberta, para abrir o gerenciador de arquivos do seu computador e selecionar o arquivo PGF5216.ova, confirme e continue.
- Na próxima tela, confirme que o sistema é Ubuntu 64-bit, que ela tem 2 CPU e 2048 MB de RAM, além disso que todas as seleções de DVD, USB, Som e Internet estejam selecionadas. Verifique se a Pasta Padrão (ou Base Folder), que é a pasta onde a máquina virtual será instalada, é a que você deseja. Com tudo isso correto, prossiga com a importação dos dados da máquina virtual.
- Se todo o processo ocorrer sem problemas, abaixo de Ferramentas (ou Tools) vai aparecer a VM PGF5216.
- Para iniciar clique na VM e depois em start.
- O usuário e senha desta VM é pgf5216.

2 Testando a VM

Abrindo o programa VirtualBox e clicando na VM PGF5216 uma janela vai abrir com a tela principal de uma máquina virtual linux, ou também conhecida como área de trabalho. Caso apareça uma mensagem para informar um problema do sistema pode cancelar. Na área de trabalho existem 3 ícones: Lixeira, LXTerminal e Leafpad. No canto inferior esquerdo da tela principal existem 4 ícones: (1) Menu; (2) Gerenciador de arquivos; (3) Navegador web; e (4) Atualizador de programas. Para abrir um terminal de comandos de linha, ou clique no ícone do LXTerminal na área de trabalho ou clique no ícone Menu, escolha o item Sistema e depois o item LXTerminal. Com o terminal aberto, teste os seguintes comandos:

- Rode o comando **gmx**, precisa aparecer uma mensagem e a versão 5.1.5 do gromacs
- Rode o comando **vmd**, precisa aparecer duas janelas, para fechar basta fechar a janela VMD Main

- Rode o comando **dice4**, precisa aparecer uma mensagem do DICE, para sair aperte **Ctrl+c**
- Rode o comando **order**, precisa aparecer uma mensagem do order, para sair aperte **Ctrl+c**
- Rode o comando **anlgeom**, precisa aparecer uma mensagem do anlgeom, para sair basta apertar **Ctrl+c**
- Rode o comando **python**, precisa entrar no python versão 3.7.10, para sair escreva **exit()** e aperte enter.
- Rode o comando **g09**, precisa aparecer a seguinte mensagem: "Entering Gaussian System, Link 0=g09". Para sair use **Ctrl+c**.
- Rode o comando **gview**, deve abrir a interface gráfica do GaussianView. Feche a janela normalmente.

Após isso clique no ícone Gerenciador de arquivos, vá na pasta Documentos e garanta que as pastas **dicetools-master**, **clustering-traj-master** e **diceandorder** estejam lá.

3 Variáveis de Ambiente

A VM possui duas variáveis que podem auxiliar para rodar os principais scripts python da disciplina, são elas:

- **dicetools**
- **clustering**

Elas guardam o caminho para o diretório com os scripts de análise do dicetools (/home/pgf5216/Documentos/dicetools-master) e do clustering trajectory (/home/pgf5216/Documentos/clustering-traj-master), respectivamente. Para usá-las, utilize o comando no seguinte formato:

```
python $nome_da_variavel/nome_do_script
```

Exemplos:

```
python $dicetools/dicewin.py
python $dicetools/dice2gromacs.py
python $clustering/clustering_traj.py
```

4 Modificando a VM

4.1 Teclado

A VM vem com dois teclados configurados, português e inglês, caso o seu computador tenha o teclado brasileiro, não precisa se preocupar. Caso o teclado seja americano é possível variar entre os teclados configurados usando **Shift+CapsLock**. Caso precise adicionar outra configuração

de teclado, clique com o botão direito do mouse sobre o **BR**, ou **US**, no canto inferior direito, clique em **Configurações de "Manipulador de layout de teclado"** e depois em adicionar, selecione o idioma e confirme.

4.2 Compartilhamento de dados com o computador

A VM não terá acesso aos arquivos do seu computador logo que for exportada, mas você pode configurar pastas no seu computador para a VM ter acesso. Para fazer isso, na janela do **VirtualBox**, com a VM **PGF5216** selecionada, clique em **Configurações** (ou **Settings**), na aba clique em **Pastas Compartilhadas** (ou **Shared Folders**), depois clique na pasta com um sinal de mais (+) na lateral direita, selecione **Outros** (ou **Others**) para escolher a pasta a ser compartilhada, escreva o caminho da pasta na VM (exemplo: `/home/pgf5216/Documentos/Files`), selecione as opções **Montar Automaticamente** (ou **auto-mount**) e **Tornar Permanente** (ou **permanent**) e clique em **OK**. Com isso, a pasta estará disponível na área de trabalho da VM ou Gerenciador de arquivos no caminho escolhido. Você pode configurar quantas pastas quiser.

4.3 CPU e RAM

A VM foi configurada para acessar 2 cores do seu processador e 2GB de memória RAM. Para modificar esses valores, feche a área de trabalho (desligue a VM) e na janela do **VirtualBox**, com a VM **PGF5216** selecionada, clique em **Configurações** (ou **Settings**), na aba clique em **Sistema** (ou **System**), na aba **Placa-Mãe** (ou **Motherboard**) troque o valor de **Memória Base** (ou **Base Memory**) pelo desejado, de preferência múltiplos de **1024MB(1GB)**; na aba **Processador** (ou **Processor**), mude a quantidade de processadores disponíveis para a VM pelo desejado.

Caso o seu computador possua mais do que 4 cores sugerimos que aumente o número de cores para a VM, mas caso tenha 2, reduza para 1, principalmente se continuar usando programas pesados fora da VM. Se o seu computador possuir apenas 4GB de RAM, evite aumentar a memória disponível para a VM. Prefira manter a memória da VM igual à metade da memória total no seu computador.

4.4 Memória de Disco

A máquina virtual foi configurada para ocupar no máximo 100GB, ocupando logo que exportada 13GB, desse modo são 87GB disponíveis para os arquivos que serão gerados ao longo da disciplina, acreditamos que isso será mais do que suficiente. Como a modificação dessa configuração é mais complexa e considerada desnecessária para a disciplina não será explicado como fazer. Caso você pretenda usar a VM no futuro para realizar as suas pesquisas e análises indicamos que não mantenha arquivos pesados nela. O espaço em disco de 87GB é bastante, mas dependendo das simulações realizadas esse valor pode ser atingido rapidamente. Nessa situação, a melhor solução é instalar os programas diretamente no seu computador ou usar as pastas compartilhada (ou Shared Folders), subseção 4.2.

5 Possíveis Problemas com o GaussView

Caso o programa GaussView trave com frequência ou desligue a máquina virtual, é preciso desativar a configuração de 3D Acceleration. Para tanto, com a máquina virtual desligada, na janela do **VirtualBox**, com a VM **PGF5216** selecionada, clique em **Configurações** (ou **Settings**), na aba, clique em **Display** (ou **Monitor**) e garanta que a opção **3D Acceleration** esteja desmarcada.

Existe a possibilidade de que a desativação dessa opção impeça a sua VM de ligar, nesse caso, mantenha essa opção marcada e quando você rodar o GaussView use o seguinte comando:

```
gview -soft
```

Nessa situação, haverá problemas para salvar os arquivos cubes. Alternativamente, sugerimos a utilizar o Avogadro para visualizar os orbitais e salvar a imagem. A instalação do Avogadro na VM pode ser feito via comando de linha:

```
sudo apt-get install avogadro
```

Para visualizar os orbitais, abra o arquivo fchk com o Avogadro. Para exportar as figuras clique em Arquivo, exportar e gráficos. Outra opção é gerar o arquivos cube com o comando **cubegen**. No terminal rode:

```
cubegen 1 MO=All arquivo.fchk
```

Substitua arquivo.fchk pelo nome ou o caminho do seu arquivo fchk. Esse comando irá criar um arquivo cube, chamado test.cube, com todos os orbitais do seu sistema, sugerimos trocar "All" pelo número do orbital de interesse, por exemplo: HOMO e LUMO. Mais informações sobre o cubegen podem ser obtidas nesse link: <https://gaussian.com/cubegen/>.

Além disso, se o seu arquivo fchk estiver em alguma pasta que está na Área de Trabalho da máquina virtual, o GaussView não conseguirá gerar os arquivos cube, uma vez que ele não sabe lidar com espaços no caminho do arquivo, mude a localização da pasta onde estão os seus arquivos para outra que não tenha espaços no nome, como a Documentos.