

Tutorial de como usar o DiceWin para fazer os gráficos e análises dos arquivos de saída do DICE

Thiago de Souza Duarte e Kaline Coutinho
Instituto de Física da USP

1. Abertura e análises do arquivo de saída (*.out) do DICE

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

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

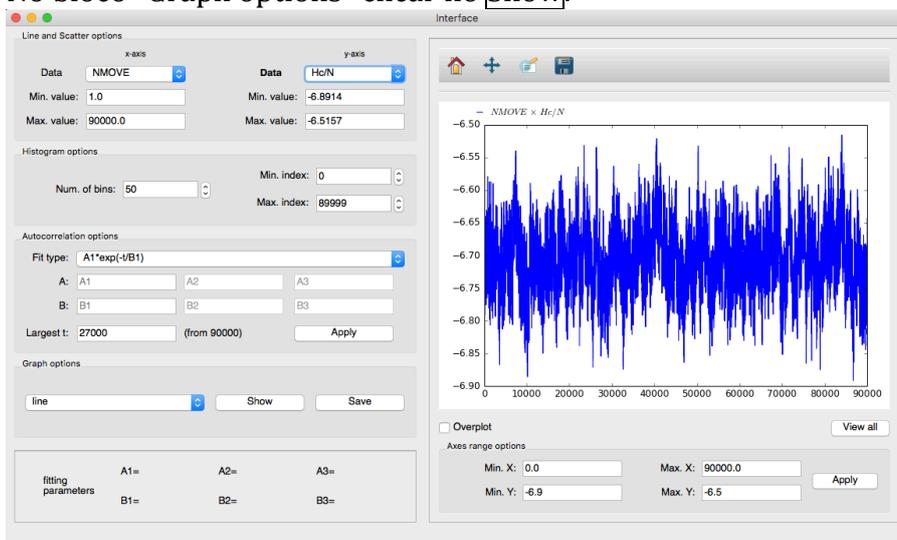


Figura 1: Gráfico da entalpia conformacional por molécula, H_c/N , versus o número de ciclos MC, NMOVE. Note que essa simulação tem 90mil ciclos no total.

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

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

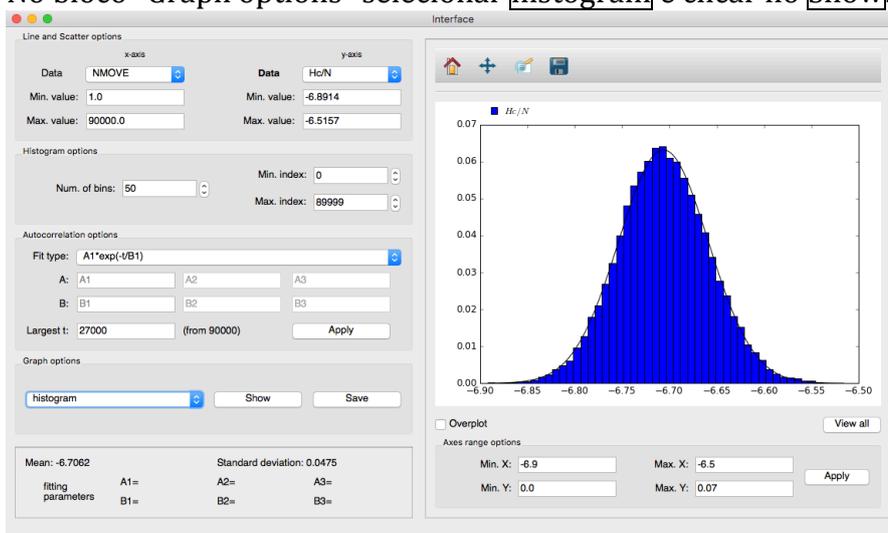


Figura 2: Gráfico do histograma de H_c/N . Essa simulação tem 90mil ciclos no total. Note no bloco inferior esquerdo o valor médio de -6.7062 kcal/mol e um desvio padrão de 0.0475 kcal/mol que foram usado no ajuste da função gaussiana mostrada no gráfico. Para salvar os dados numéricos deste gráfico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

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

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

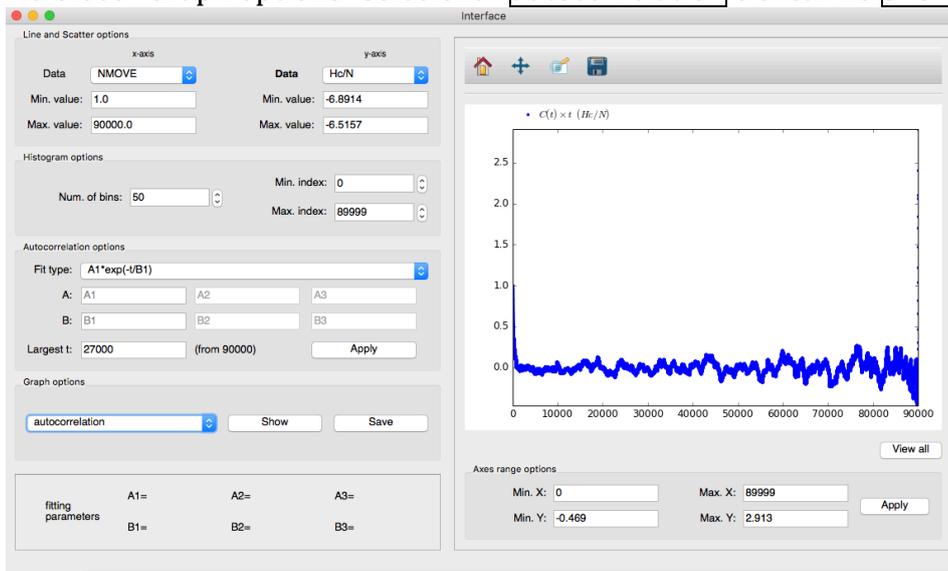


Figura 3: Gráfico da função de autocorrelação de Hc/N. Essa função foi calculada para os 90mil valores de Hc/N, porém apenas os primeiros 30% dos pontos apresentam boa representação estatística.

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

- No bloco "Autocorrelation options" selecionar a função exponencial dupla $A1*exp(-t/B1)+A2*exp(-t/B2)$; preencher os valores iniciais para A1: 0.5, B1: 100, A2: 0.5 e B2: 1000; usar apenas 30% (no máximo) dos dados no campo **Largest t** e clicar no **Apply**. A sugestão para obter um bom ajuste exponencial é usar 5% dos dados no campo **Largest t**

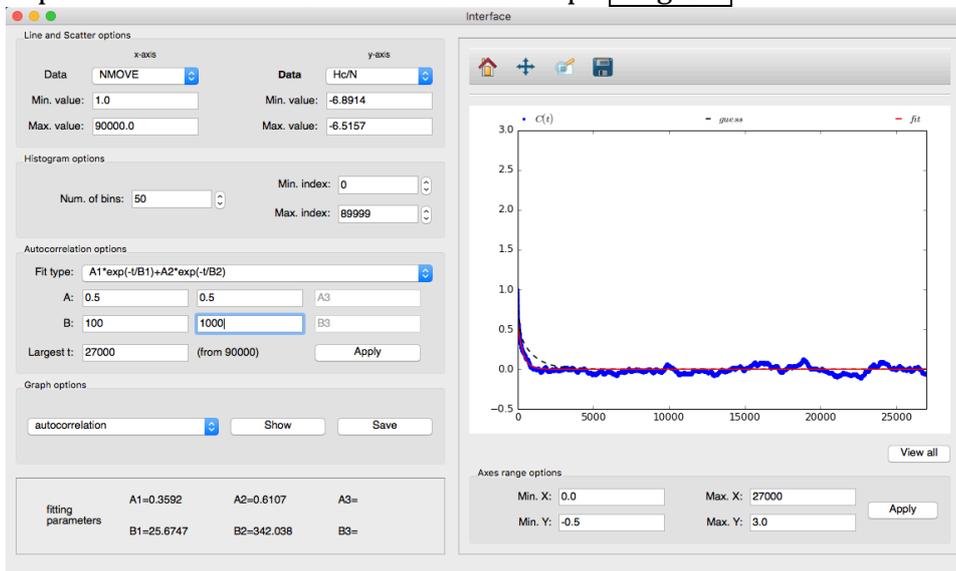


Figura 4: Gráfico da função de autocorrelação de Hc/N e a função de decaimento com exponencial dupla. A linha pontilhada é gerada com o seus valores iniciais de A1, B1, A2 e B2 e a linha sólida é a obtida do melhor ajuste. Note no bloco inferior esquerdo os valores obtidos do ajuste: A1= 0.35, B1= 25,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

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

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

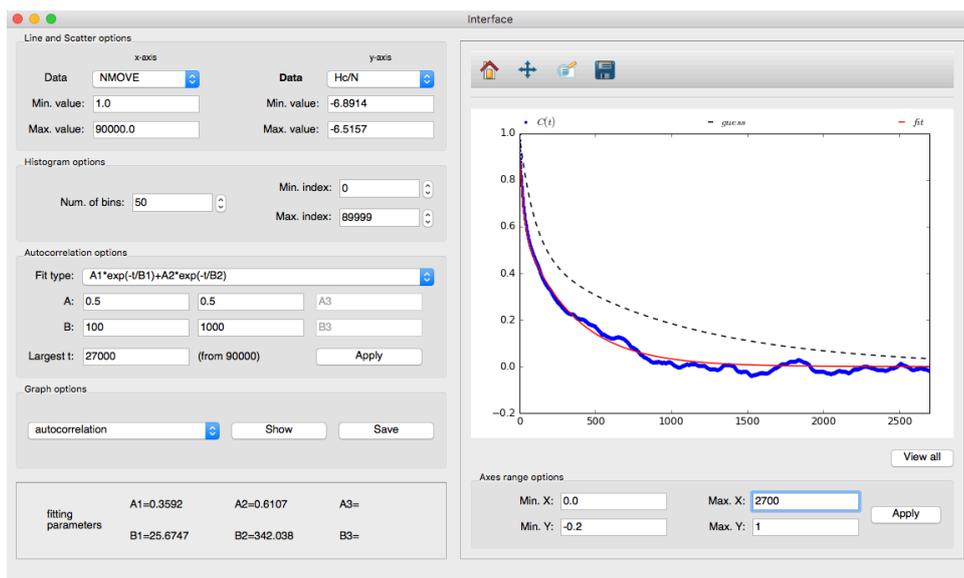


Figura 5: Gráfico da função de autocorrelação de H_c/N e a função de decaimento com exponencial dupla. A linha pontilhada é gerada com os seus valores iniciais e a linha sólida é a obtida do melhor ajuste de A_1 , B_1 , A_2 e B_2 . Para salvar os dados numéricos deste gráfico clicar no **Save**.

2. Abertura e análises do arquivo de saída (*.gr) do DICE

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

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

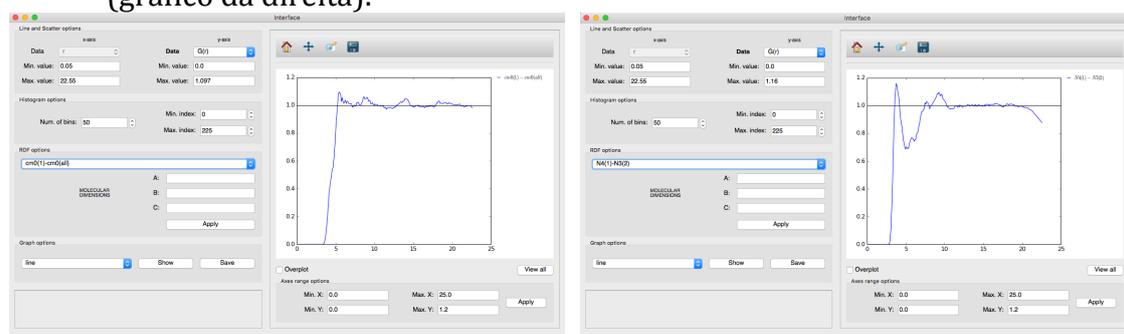


Figura 6: Gráfico da RDF entre: (esquerda) o centro de massa do soluto e os centros de massa das moléculas de solvente ($cm0(1)-cm0(2)$) e (direita) o átomo N_4 do soluto e N_3 do solvente ($N4(1)-N3(2)$). Para salvar os dados numéricos deste gráfico clicar no **Save**.

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

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

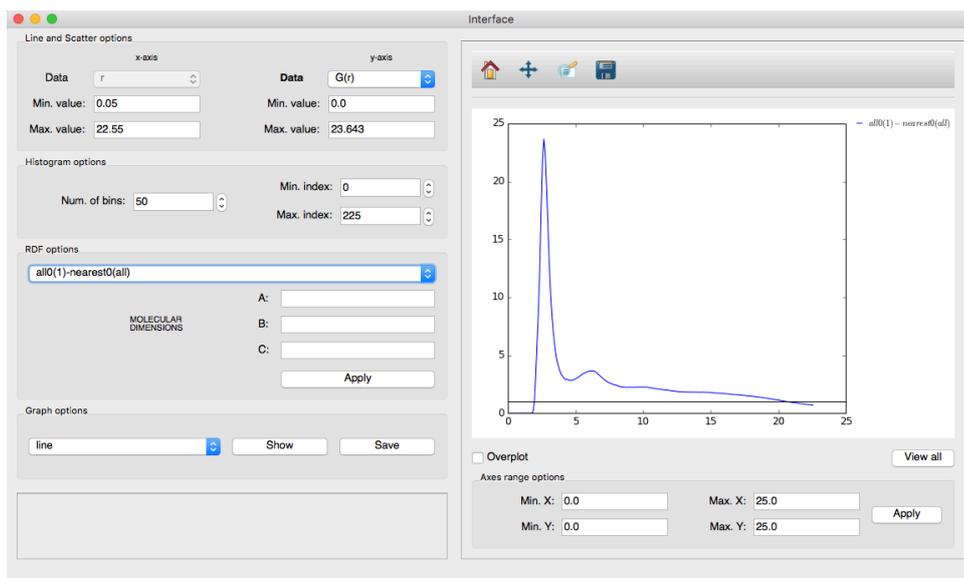


Figura 7: Gráfico da MDDF. Note que a normalização não está correta para moléculas com forma não esférica.

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

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

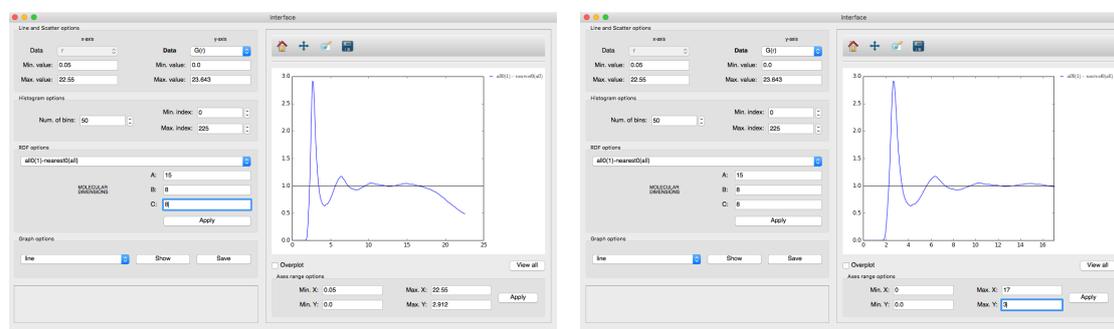


Figura 8: Gráfico da MDDF com a renormalização paralelogrâmica para uma molécula com dimensões 15x8x8Å. Note que como um eixo é maior que os demais, a caixa de simulação cúbica acabará no eixo X antes dos eixos Y e Z. Assim, pouco antes do final da caixa de simulação (neste caso cerca de 6 Å) a MDDF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