

Software para Minimização Remota de Estruturas Moleculares

Fábio Meletti de Oliveira Barros
Bolsista de Iniciação Científica, Informática, UFRJ

Peter Rudolf Seidl
Orientador, Químico, Ph.D

Arikerne Rodrigues Sucupira
Co-orientador, Engenheiro Químico, L.D.

RESUMO

Esse trabalho consistiu em definir, e implementar um método para a comunicação, através da Internet, entre o microcomputador e a estação Silicon Graphics, rodando o sofisticado software de modelagem molecular Cerius2, de modo a realizar a minimização de moléculas criadas pelo MOLBOX, acessando remotamente o software Cerius2. Para isso foi necessária a criação de uma ferramenta denominada Software de Acesso Remoto.

1. INTRODUÇÃO

A modelagem computacional de materiais em escala molecular ou atômica é reconhecidamente um método importante na pesquisa de materiais, tornando possível a simulação e a previsão de estruturas moleculares, seu comportamento, e a *performance* em testes laboratoriais e procedimentos analíticos.

Com a criação do software MOLBOX, desenvolvido pelo Grupo de Modelagem Molecular, tornou-se possível a criação e visualização de moléculas compatíveis com o software CERIUS² (1) da *Molecular Simulations*, em microcomputadores. Contudo, a molécula gerada pelo MOLBOX não corresponde a sua estrutura de conformação espacial mais estável, pois as coordenadas dos seus átomos modelados não correspondem às posições de mínima energia. Portanto, para a obtenção de resultados mais precisos, é necessária a minimização da energia dessas estruturas moleculares, operação esta que demanda elevada *performance* computacional, tendo em vista a complexidade dos cálculos

envolvidos. Isto exige a utilização de plataformas mais robustas, como estações de trabalho, forçando a mudança do ambiente de desenvolvimento.

No entanto, o advento das redes de computadores permitiu o compartilhamento de recursos entre máquinas de diferentes plataformas, tornando possível a utilização remota de uma máquina a partir da outra, e com isso a minimização da energia de moléculas utilizando as estações de trabalho e o software CERIUS², a partir de microcomputadores conectados à rede.

2. OBJETIVO

O presente trabalho tem como objetivo a utilização de redes de computadores, em particular a Internet, bem como do Software de Acesso Remoto, que se constitui em uma interface gráfica para a geração das instruções compreendidas pelo software CERIUS², visando a minimização da energia de estruturas moleculares a partir do próprio ambiente de desenvolvimento, tornando o processo de modelagem de estruturas moleculares mais eficiente em microcomputadores.

3. METODOLOGIA

O processo de minimização da energia de estruturas moleculares utilizando a rede de computadores consiste das seguintes fases :

- a) definição dos parâmetros de minimização e geração de um arquivo contendo instruções reconhecidas pelo programa CERIUS² através do Software de Acesso Remoto;
- b) envio à estação de trabalho através da rede (Internet), utilizando o protocolo FTP (*File Transfer Protocol*) do arquivo contendo a molécula gerada pelo MOLBOX, e do arquivo contendo as instruções a serem executadas na estação de trabalho;
- c) execução remota do programa CERIUS² através de uma linha de comando, utilizando um software Telnet, que permite utilizar remotamente o ambiente Unix (3) da estação de trabalho. A linha de comando é a seguinte:

```
cerius2 -n -o <SAIDA.LOG> <ENTRADA.LOG>
```

Onde ENTRADA.LOG é o arquivo gerado pelo Software de Acesso Remoto e SAIDA.LOG é o arquivo contendo os resultados dos cálculos de energia, e

- d) busca dos arquivos produzidos na minimização, utilizando o protocolo FTP: um arquivo referente à representação gráfica da molécula e outro contendo os resultados dos cálculos da energia.

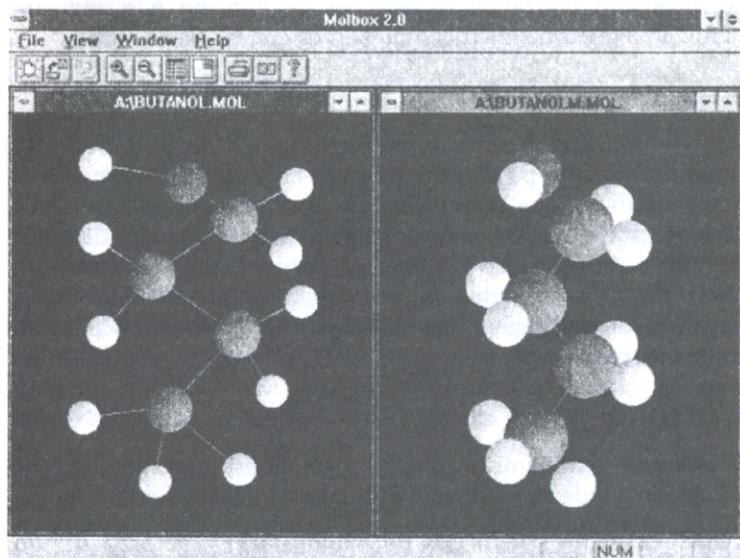


Figura 1 - Exemplo de molécula (butanol) construída no MOLBOX (lado esquerdo da tela) e sua representação após a minimização de energia (lado direito da tela)

O Software de Acesso Remoto é uma ferramenta desenvolvida utilizando o programa Borland Delphi 1.0 for Windows (2), uma ferramenta visual baseada na linguagem de programação Pascal. Tem por finalidade a criação de um arquivo contendo as instruções e parâmetros utilizados pelo programa CERIU² na minimização. Esses parâmetros são definidos pelo usuário através da interface gráfica implementada pelo programa.

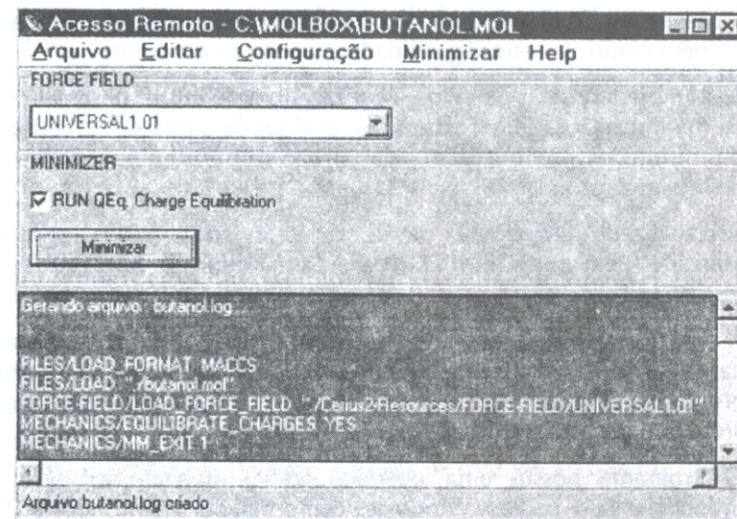


Figura 2 - Tela do Software de Acesso Remoto

Os parâmetros a serem definidos pelo usuário são:

Campo de Força (1): forma a base de todos os cálculos de energia realizados pelo programa CERIU². A escolha do Campo de Força adequado é de vital importância para a aquisição de resultados satisfatórios dos cálculos de energia. São os seguintes campos de força disponíveis nessa versão:

- UNIVERSAL1.01: campo de força de propósito geral, válido para compostos do grupo principal, moléculas orgânicas e metais complexos;
 - DREIDING2.11: campo de força de propósito geral, que pode ser utilizado para a previsão de estruturas e cálculos dinâmicos de moléculas orgânicas, biológicas e inorgânicas do grupo principal;
 - mm2_85_1.01: campo de força adequado para o cálculo em pequenas moléculas orgânicas.
- b) Equalização de Cargas (1): selecionando-se essa opção, o programa CERIU² realiza o cálculo das cargas dos átomos pelo método de equalização de cargas de Rappé e Goddard.

Esse método de previsão de cargas leva em conta a geometria, bem como as eletronegatividades, de todos os átomos.

A primeira fase da metodologia consistiu em definir os parâmetros de minimização a serem utilizados, analisando a relação: precisão dos resultados x tempo gasto pela estação de trabalho nos cálculos de minimização.

Foi realizado um estudo da estrutura do arquivo de entrada utilizado pelo programa CERIU², para definir o formato das instruções.

A chave para o sucesso na conclusão do projeto foi a descoberta da linha de comando particular que permite a execução do programa CERIU² em modo texto, tendo como parâmetro um arquivo externo com instruções de execução.

O programa possui uma interface gráfica bastante amigável, rodando sob o padrão Windows, composta por menus de fácil compreensão de forma a facilitar a sua utilização por usuários com pouca experiência na área de informática. Incorpora um guia passo a passo (opcional), através de mensagens na tela, para auxiliar o usuário na operação dos softwares de comunicação com a estação de trabalho (FTP e Telnet), informando, por exemplo, quando e como enviar ou receber os arquivos.

COMENTÁRIOS GERAIS

A minimização remota de estruturas moleculares representa uma expansão das potencialidades do software MOLBOX, que passa a ser uma ferramenta bem mais completa, e dessa forma proporciona um melhor aproveitamento das potencialidades do ambiente de desenvolvimento, permitindo a realização, de modo mais eficiente, de um maior número de operações dentro da modelagem molecular utilizando microcomputadores.

Algumas melhorias estão previstas para o Software de Acesso Remoto:

- a) inclusão de um número maior de parâmetros de minimização, como outros campos de força, visando atingir uma gama maior de aplicações dentro da modelagem molecular, e
- b) operações de FTP e Telnet incorporadas ao Software de Acesso Remoto, tornando a operação muito mais simples e rápida.

BIBLIOGRAFIA

1. MOLECULAR SIMULATIONS, INC Cerius2 Simulation Tools User's Reference, Version 1.0 (1994).
2. BORLAND DELPHI 1.0 Developer's Guide.
3. Thomas, R. *Unix Total*, 1989.