

# CHARMM

(Chemistry at HARvard Molecular Mechanics)

## INFORMACIÓN BÁSICA PARA LA UTILIZACIÓN

1. Por el momento, CHARMM está disponible en la estación de trabajo PC Intel P4 1.7 MHz, 256 MB RAM denominada `yoana.europa.fq.oc.uh.cu` y puede usarse desde cualquier cuenta.

2. Es preciso que en el directorio implícito desde donde se vaya a correr exista un fichero denominado `datadir.def` donde aparezcan datos necesarios para cada corrida. Ese fichero puede tener la estructura siguiente, específica para la instalación de esa máquina:

```
* CHARMM data directory assignment
*
faster on
set 0 /root/c30b1/test/data/      ! input data directory
set 9 /tmp/                       ! scratch directory
return
```

Note que aquí se está asignando la unidad de entrada 0 al directorio `/root/c30b1/test/data/` que es donde se encuentran los parámetros suministrados en la instalación disponible en esta máquina, que es la `c30b1`. La unidad 9 se está asignando al directorio `/tmp/` que será el de salida de datos de trabajo temporales durante la corrida.

3. El programa se corre con un comando como:

```
charmm < filename.inp >& filename.out [[param:value] ...] [ & ]
```

donde

```
charmm
```

El nombre real del programa (o *script* que ejecuta el programa) en el sistema de la computadora que se usa; el nombre puede no ser el mismo en todos los sistemas.

```
filename.inp
```

Un archivo del texto que contiene entrada de instrucciones CHARMM, usando la sintaxis de instrucciones descrita en la página <http://karin.fq.uh.cu/charmm/usage.doc>. El `filename` real depende del usuario, aunque es útil usar nombres cortos que indican al propósito global, p.e. `makpsf.inp`

```
filename.out
```

El nombre deseado para archivo de salida principal de la corrida de CHARMM, que contendrá un “eco” de las instrucciones de entrada, y una cantidad determinada de sus resultados. El nivel de salida de resultados (`print level`) puede aumentarse o puede disminuirse en general, y los procedimientos como `minimization` y `dynamics` tienen especificaciones de frecuencia de impresión propios.

```
param:value
```

Los parámetros de trabajo (`script parameters`) CHARMM (esencialmente con variables definidas por el usuario) que pueden definirse opcionalmente en la línea de comandos Unix usando la forma `param:value`; cada `value` se sustituye en correspondencia con ocurrencias de `@param` en el fichero de entrada.

&

Los ampersand (&) optativos pondrán el programa para su ejecución en el segundo plano bajo la mayoría de los *shells* de Unix. Note que el sistema de la computadora en uso puede tener un sistema de lotes para el trabajo en colas que normalmente debe usarse en lugar de correr CHARMM como un proceso en el segundo plano con la sintaxis anterior.

Este sistema aún no se ha implementado en la máquina arriba señalada, por lo que es recomendable abrir una terminal y usar la cadena aquí explicada insertando el comando inicial `nohup` en la cadena antes de la palabra `charm`. De esta forma, se correrá en segundo plano y no se desconectará al salir de la terminal abierta, pues sus salidas a pantalla se reorientan automáticamente a un fichero presente en el directorio implícito denominado `nohup.out`.

En general, los cálculos de CHARMM se deben limitar a alrededor de 12 a 16 horas, con el fin de promover el uso común de recurso computacionales y para minimizar la pérdida de datos debida a eventuales fallas de la máquina, la red o la energía eléctrica.

Para el uso del programa en primer plano, p.e. `graphics`, empiece el programa tecleándolo exclusivamente su nombre, espere por la aparición del encabezamiento del programa en la pantalla, y entre en un título. Entonces use un fichero "*stream*", p.e.

```
stream psf-crd.str
```

que leerá las instrucciones CHARMM del archivo nombrado `psf-crd.str` como si ellos estuvieran entrándose por el teclado; tal y como se deduce del nombre en inglés, el archivo *stream* lee el PSF, los PARAMetros, Coordenadas, etc., que son el punto de inicio básico para todo el trabajo con CHARMM.