

Chemia: InSilicoLab for Chemistry (wycofane)

Krótki opis usługi

Usługa InSilicoLab ma na celu wsparcie uruchamiania złożonych eksperymentów obliczeniowych chemii kwantowej na infrastrukturze PL-Grid. Pozwala na przygotowanie danych wejściowych (w tym serii plików o wspólnej strukturze) dla wspieranych programów kwantowochemicznych, wysłanie przygotowanych zadań na grid i ich uruchomienie, a następnie zebranie plików wynikowych i ich wstępną analizę. Przygotowywanie danych wejściowych do usługi InSilicoLab for Chemistry może zostać dodatkowo ułatwione poprzez użycie narzędzia [Quantum Chemistry Advisor](#).

Dzięki zapisywaniu danych w katalogach sieciowych, możliwe jest przekazywanie danych z jednego eksperymentu obliczeniowego do drugiego oraz dostęp do nich niezależny od komputera, z którego zlecono zadania. Możliwość zapamiętania eksperymentu pozwala na łatwe odtworzenie cyklu obliczeniowego.

Eksperymenty usługi InSilicoLab ułatwiają planowanie sekwencyjnych schematów obliczeniowych wymagających przygotowania serii plików z danymi bazujących na wspólnym schemacie. Usługa przeznaczona jest dla osób wykonujących obliczenia kwantowochemiczne na tego typu zestawach danych.

Obecnie dostępne są następujące eksperymenty InSilicoLab:

Obliczenia kwantowochemiczne

Eksperyment ten pozwala przygotowanie plików danych wejściowych dla kilku programów obliczeniowych chemii kwantowej (*Gaussian*, *Gamess*, *Turbomole*, *Niedoida*), specyfikację żądań zasobów a następnie uruchomienie obliczeń na infrastrukturze gridowej.

Po zakończeniu obliczeń użytkownik ma możliwość pobrania plików wynikowych, przeprowadzenia wstępnej analizy (w tym uzyskania zestawienia obliczonych parametrów w formacie XML) oraz zachowania danych i wyników w przestrzeni storage'owej w celu dalszego wykorzystania w kolejnych eksperymentach.

Trajektorie Sculptor

Trajektorie Sculptor jest narzędziem ułatwiającym manipulacje danymi podczas sekwencyjnego modelowania kwantowochemicznego złożonych układów, w szczególności cząsteczek w roztworach.

Jednym z typowych podejść uwzględniania efektów solwatacyjnych jest strategia MD/QC: w pierwszym etapie układ modelowany jest dynamiką molekularną (klasyczną lub *ab initio*), następnie z określonych etapów uzyskanej trajektorii wybierana jest część układu (cząsteczka rozpuszczona + najbliższe cząsteczki rozpuszczalnik) do dalszych obliczeń kwantowochemicznych (dokładniejszą metodą lub w celu obliczenia dodatkowych wielkości jak np. energie wzbudzeń czy przesunięcia chemiczne).

Narzędzie Trajektorie Sculptor automatyzuje przygotowanie danych do drugiego etapu obliczeń (realizowanego następnie w eksperymencie obliczeń kwantowochemicznych InSilicoLab): wybór klatek trajektorii i wycięcie z nich interesującej części układu – cząsteczki w otoczeniu rozpuszczalnika. Dzięki możliwości definiowania wielu typów cząsteczek rozpuszczalnika możliwe jest badanie cząsteczek w mieszaninach rozpuszczalników, cieczach jonowych lub roztworach elektrolitów.

Niezbędnymi danymi wejściowymi jest trajektoria dynamiki molekularnej i informacja o warunkach brzegowych. Użytkownik ma do dyspozycji wiele możliwości specyfikacji otoczki solwatacyjnej wycinanej wraz z cząsteczką rozpuszczoną dzięki różnym sposobom określania odległości rozpuszczalnik-cząsteczka rozpuszczona oraz wybierania wycinanych cząsteczek rozpuszczalnika (do zadanej odległości lub zadana liczba cząsteczek). Na każdym etapie pracy możliwa jest wizualizacja wyników. Efektem działania narzędzia są geometrie układów wyciętych z poszczególnych ramek zapisane w osobnych plikach lub jako trajektoria w pojedynczym pliku. Możliwe jest też przekazanie ich do innego eksperymentu InSilicoLab w celu uruchomienia obliczeń na infrastrukturze PL-Grid.

Eksperyment Cubegen

Służy do generowania tzw. plików cube programu Gaussian. Niezbędne jest dostarczenie (np. z przestrzeni storage'owej użytkownika) wygenerowanego wcześniej (np. w ogólnym eksperymencie InSilicoLab) pliku checkpoint z przechowanymi danymi obliczeń.

TeraChem

Eksperyment ten ułatwia użycie programu TeraChem służącego do wykonywania obliczeń kwantowochemicznych na kartach graficznych ogólnego przeznaczenia (GP GPU computing). Pozwala to na znaczne, nawet kilkunastokrotne przyspieszenie niektórych obliczeń (w zależności od rozmiaru układu i stosowanej metody).

Aktywowanie usługi

Aby skorzystać z usługi *InSilicoLab for Chemistry* należy aktywować ją w [katalogu aplikacji i usług](#).

Dodatkowo, do wykonywania obliczeń kwantowochemicznych, wymagane jest aktywowanie usługi "Globalny dostęp gLite". Aktywowanie tej usługi może się odbyć wyłącznie po zarejestrowaniu co najmniej jednego certyfikatu osobistego w [Portalu PL-Grid](#) - informację na temat [rejestracji](#) oraz możliwości uzyskania [certyfikatu](#) można znaleźć w rozdziale "[Pierwsze kroki w Portalu Użytkownika](#)" niniejszego podręcznika.

Uwaga: Zaraz po aktywowaniu usługi "Globalny dostęp gLite" informacje na temat konta użytkownika muszą zostać przekazane do infrastruktury - ten proces może trwać maksymalnie do 6 godzin. W tym czasie może nie być dostępna pełna funkcjonalność eksperymentów kwantowochemicznych (uruchamianie eksperymentów oraz pobieranie danych). Po sprogowaniu wszystkich danych pełna funkcjonalność systemu jest dostępna.

Wykonywanie obliczeń z użyciem pakietu TeraChem wymaga także aktywowania dodatkowych usług:

- Dostęp do klastra ZEUS - Cyfronet
- Dostęp do GPGPU - Cyfronet
- PLG-Data: mini-usługa do zarządzania plikami na klastrze
- Rimrock

Zwracamy również uwagę że, w związku z przejściem na nowy system scratch na maszynie Zeus, dla osób które używały starego systemu scratch, konieczne jest przełączenie na nowy. Sprawdzenia, który system jest używany można dokonać wyświetlając zmienną \$SCRATCH (echo \$SCRATCH) - powinna ona wskazywać /mnt/lustre/scratch2/people/<nazwa_użytkownika>. Przełączenia na nowy system scratch można dokonać w następujący sposób:

1. Należy zalogować się przy użyciu ssh na maszynę zeus.cyfronet.pl (nazwa użytkownika i konta jest tożsama z użytkownikiem i kontem w portalu <http://portal.plgrid.pl>)
2. Usunąć plik ~/.zeusoldscratch (rm ~/.zeusoldscratch)
3. Zalogować się ponownie
4. Sprawdzić czy zmienna \$SCRATCH wskazuje właściwą lokalizację (echo \$SCRATCH) - /mnt/lustre/scratch2/people/<nazwa_użytkownika>

Informacje dotyczące usług i ich aktywowania można znaleźć w [podręczniku użytkownika](#).

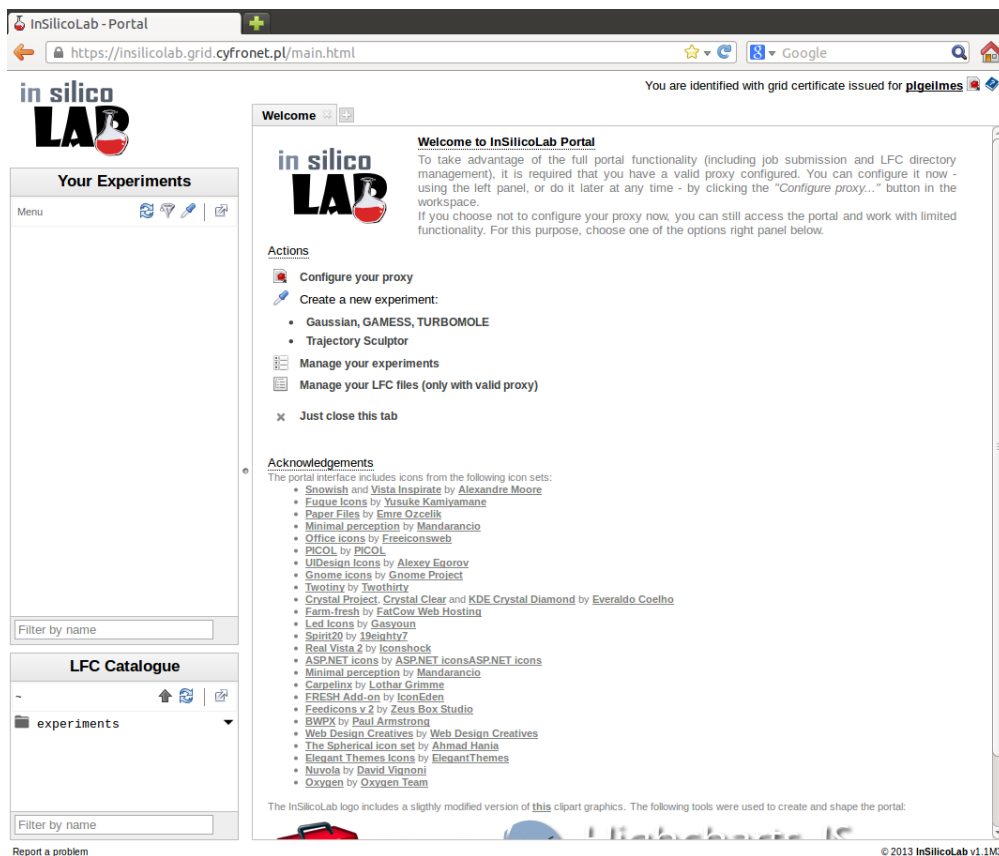
Pierwsze kroki

Należy połączyć się z serwerem usługi

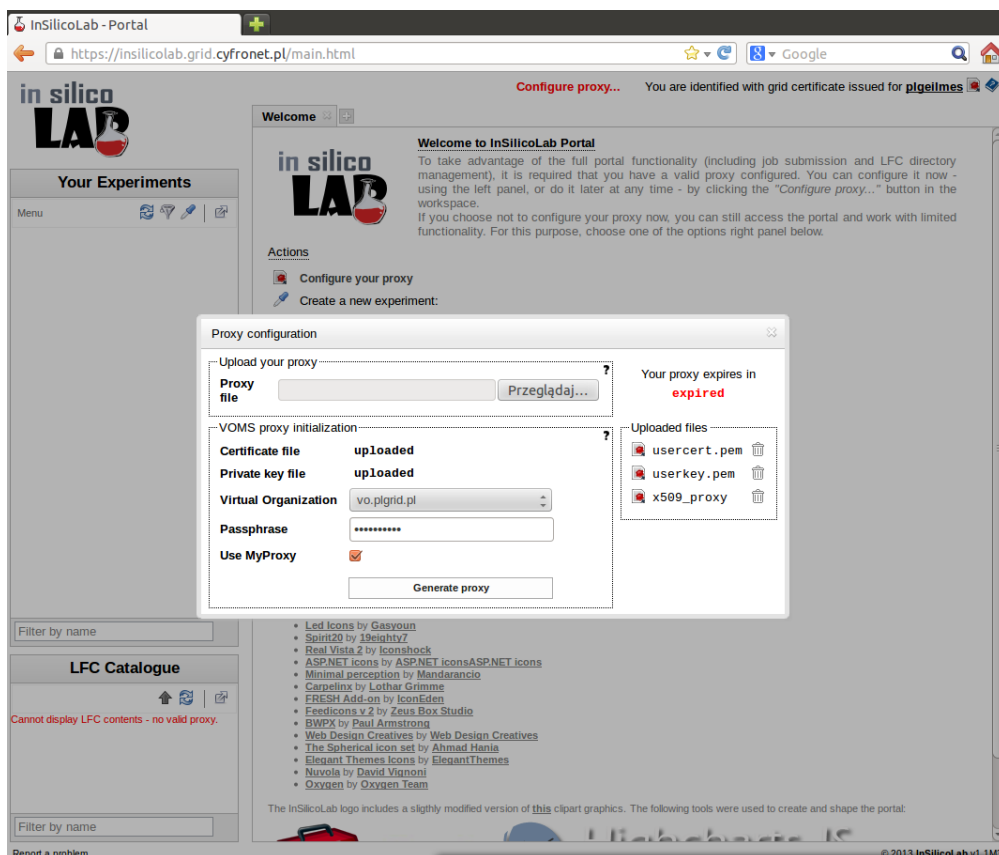
<https://insilicolab.chemia.plgrid.pl/>

Po wejściu do usługi, otwiera się ekran. Jeśli nie byliśmy wcześniej zalogowani do usługi, dostępny jest dla nas jedynie ekran anonimowego użytkownika. Logowanie do własnego konta następuje po przyciśnięciu przycisku **Log in...** i jest możliwe jest na dwa sposoby:

- Logowanie poprzez certyfikat zarejestrowany w przeglądarce użytkownika (nasze dane zostaną sczytane z certyfikatu)
- Logowanie poprzez OpenID dla infrastruktury PL-Grid. W tym wypadku zostaniemy przekierowani na stronę OpenID dla PL-Grid i poproszeni o wpisanie danych dostępowych do infrastruktury - nazwy użytkownika i hasła (tych samych które podajemy w [Portal PL-Grid](#)) lub sczytany zostanie certyfikat umieszczony w przeglądarce. Jeśli usługa *InSilicoLab for Chemistry* nie była aktywna wcześniej zostanie ona aktywowana automatycznie po zaakceptowaniu odpowiedniego komunikatu. Po zalogowaniu zostaniemy automatycznie przekierowani z powrotem na stronę usługi.



W celu przeprowadzenia obliczeń niezbędne będzie skonfigurowanie odpowiedniego certyfikatu proxy przez kliknięcie na link **Configure your proxy**:



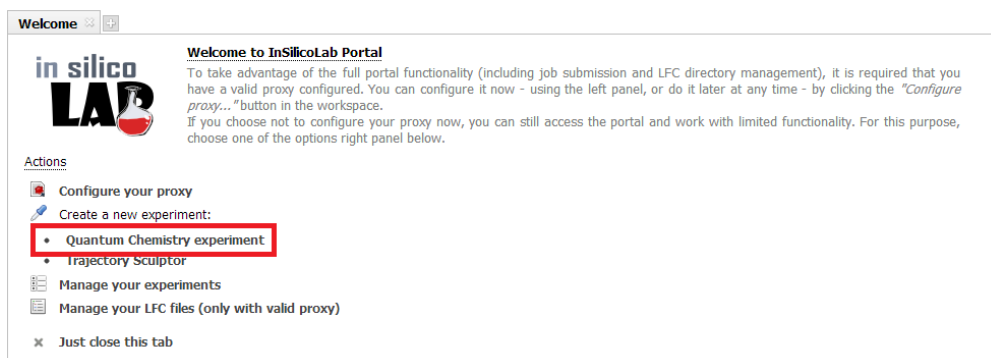
Certyfikat proxy konieczny jest do przeprowadzania obliczeń z wykorzystaniem infrastruktury PL-Grid a także przeglądania danych zgromadzonych w zasobach tej infrastruktury. Nie jest natomiast konieczny do przeglądania konta użytkownika i zapisanych przez niego analiz a także do wstępnego przygotowania danych przy pomocy narzędzia Trajectory Sculptor (patrz rozdział "Zaawansowane użycie").

Istnieją dwie możliwości konfiguracji proxy w portalu:

1. Załadowanie istniejącego proxy - wygenerowanego uprzednio na infrastrukturze. Instrukcja jak wygenerować takie proxy dostępna jest po kliknięciu w pytajnik w polu **Upload your proxy**. Jest to opcja bezpieczniejsza dla użytkownika, ale wymaga każdorazowego ładowania proxy po upływie jego ważności (12 godzin).
2. Generacja proxy z poziomu portalu. Aby wygenerować proxy w portalu, należy załadować do niego pliki certyfikatu i klucza w formacie PEM (najczęściej są to *usercert.pem* i *userkey.pem*) lub PKCS12 (np. *usercert.p12*). Jest to czynność jednorazowa, i nie będzie potrzeby ponawiania jej w przyszłości jeśli certyfikat użytkownika nie ulegnie zmianie. Następnie należy wybrać wirtualną organizację - dla infrastruktury PL-Grid jest to **vo.plgrid.pl**, podać hasło do załadowanego klucza (UWAGA: hasło nie jest przechowywane nigdzie w systemie) oraz kliknąć przycisk **Generate proxy**. Zaznaczenie opcji **Use MyProxy** da nam możliwość automatycznego przedłużania certyfikatu proxy dla uruchomionych zadań do 168. Dodatkowe instrukcje (m. in. instrukcje postępowania w przypadku kiedy certyfikat użytkownika jest w formacie innym niż PEM) dostępne są po kliknięciu w pytajnik w polu **VOMS proxy initialization**.

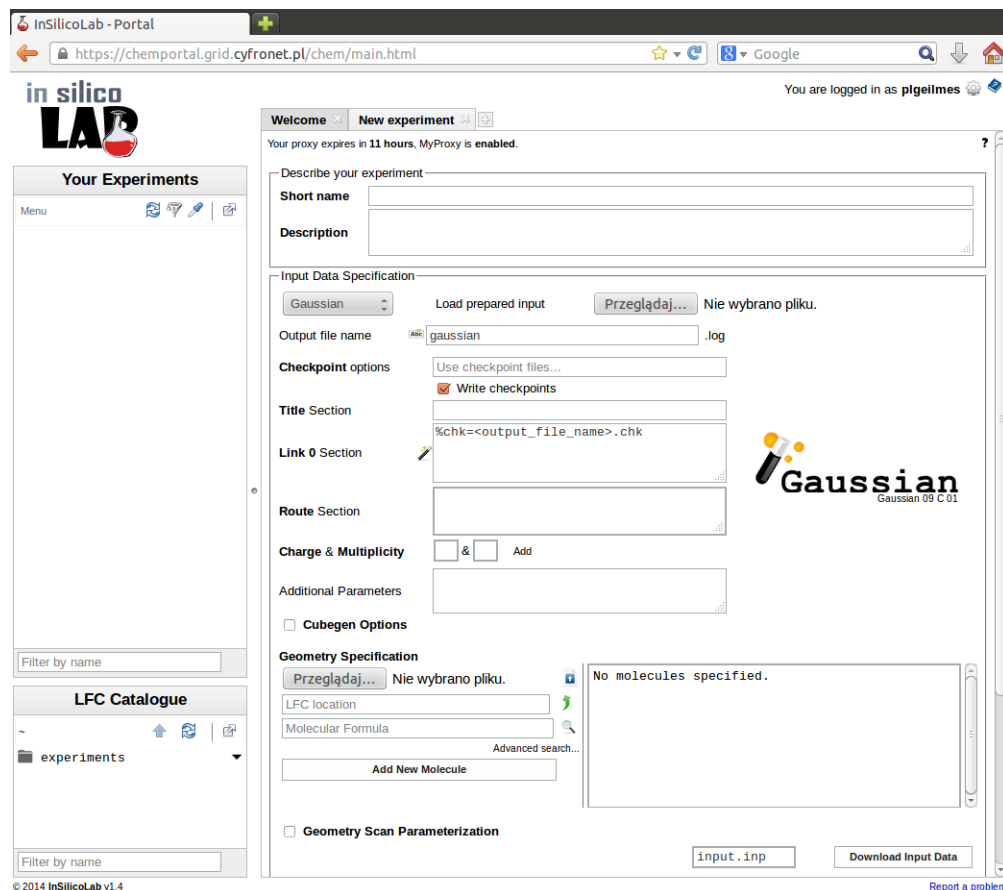
W obu przypadkach, jeśli proxy zostało skonfigurowane poprawnie, zostanie wyświetlona na zielono ilość pozostałego czasu ważności proxy w portalu (w polu **Your proxy expires in**).

Po skonfigurowaniu certyfikatu proxy można przystąpić do właściwego eksperymentu. W celu wykonania obliczeń kwantowochemicznych z menu **Create a new experiment** należy wybrać pozycję **Quantum Chemistry experiment**.



W przeglądarce otworzy się karta nowego eksperymentu obliczeniowego wykorzystującego programu chemii kwantowej.

Uwaga: przy wyborze odpowiedniego programu chemii kwantowej, a także przy uzupełnianiu jego parametrów, można skorzystać z usługi [Quantum Chemistry Advisor](#), agregującej dane o tych programach i wspomagającej wybór odpowiedniego do danych obliczeń.



Identyfikację eksperymentu wprowadzamy podając jego krótką nazwę oraz (opcjonalnie) dłuższy opis. W przypadku niepodania krótkiej nazwy, wykorzystane zostanie pole **Title** formatki aplikacji kwantowochemicznej. Jeśli oba pola zostaną puste, jako krótka nazwa użyty zostanie tekst "(no title)".

Describe your experiment

Short name

Description

Prostą metodą zadania geometrii badanego układu jest wprowadzenie jej przez załadowanie przygotowanego wcześniej pliku w **Geometry Specification** a następnie określenie jego typu (np. XYZ) w otwierającym się oknie menu. Domyślnie typ pliku ustawiany jest na podstawie jego rozszerzenia. Przyciskiem **Finish** kończymy wprowadzanie geometrii układu.

Choose/convert molecules

Choose a subset of geometries from the file

Start From

End At

Each

☒ Molecule-001

Use another format to read the file:

☐ Do not process the molecule file

☒ Convert to XYZ

Back Cancel Finish

Rozwijając listę menu w oknie zawierającym spis wprowadzonych danych możemy np. obejrzeć na ekranie strukturę wybranego układu wyświetlając ją jako applet Jmol:

Molecule Specification

LFC location

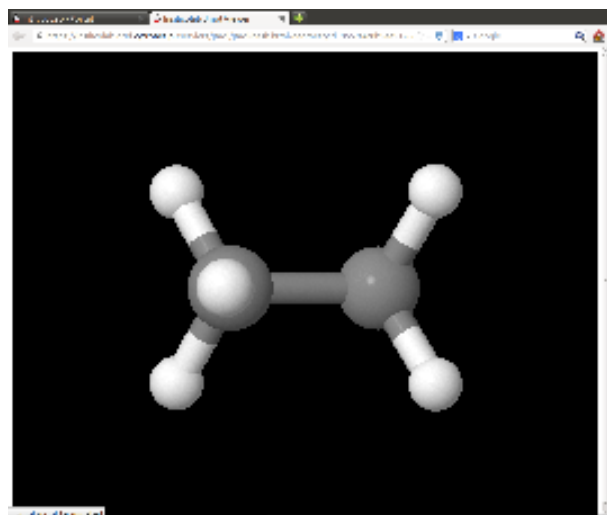
Molecular Formula

Advanced search...

Add New Molecule

1. CC

- Show in Jmol
- Show as text
- Download
- Reuse
- Tags...
- Annotations...



Po wybraniu z listy jednego z dostępnych programów wprowadzamy specyfikację wybranej metody i parametrów obliczeń. Rodzaj wprowadzanych danych zależy od wybranego pakietu kwantowochemicznego.

Dla programu Gaussian będzie to krótki opis zadania (**Title**), parametry wykonania programu określone w sekcji **Link 0** (np. limit pamięci), metodę i rodzaj obliczeń w sekcji **Route** (w przykładzie jest to optymalizacja geometrii z wykorzystaniem funkcjonału B3LYP w bazie 6-31+G*) oraz ładunek i multipletowość badanego układu. Możemy też określić nazwę pliku wynikowego (domyślnie jest to gaussian.log), zażądać zachowania plików "checkpoint" lub wygenerować plik typu cube).

Input Data Specification

Gaussian

Load prepared input

Przeglądaj...

Nie wybrano pliku.

Output file name

gaussian.log

Checkpoint options

Use checkpoint files...

☒ Write checkpoints

Title Section

C2H6

Link 0 Section

%chk=etan.chk
%Mem=256MB

Route Section

#B3LYP/6-31+g* opt

Charge & Multiplicity

0 & 1 Add

Additional Parameters

☐ Cubegen Options



Pomocne przy zadawaniu parametrów w **Link 0 section** jest użycie ikony obok pola, ułatwiającej poprawny zapis ustawień pamięci i liczby procesorów:

Link 0 Section

%chk=etan.chk
%Mem=256MB

Route Section

☒ %Mem=
☐ %NProcShared=
 Click outside of this popup to close it

Kliknięciem przycisku **Run** wydajemy polecenie wysłania zadania do wykonania na infrastrukturze PL-Grid. Aktualny stan zadania możemy śledzić w polu **Job Execution Status**

InSilicoLab - Portal

https://chemportal.grid.cyfronet.pl/chem/main.html

You are logged in as **plgeilmes**

Your Experiments

Menu

C2H6

Filter by name

LFC Catalogue

experiments

Filter by name

© 2014 InSilicoLab v1.4

Welcome | New experiment | **C2H6**

Title Section
C2H6

Link 0 Section
%chk=etan.chk
%Mem=256MB

Route Section
#B3LYP/6-31+g* opt

Charge & Multiplicity
0 & 1

Additional Parameters

☐ Cubegen Options

Geometry Specification

1. CC

☐ Geometry Scan Parameterization

input.inp [Download Input Data](#)

Job Execution Status

☐ Job 01: **EXTERNAL** CC

Input Data

Index 1

Job ID No job ID assigned yet.

Status external

Additional status -

LFC location /grid/vo.plgrid.pl/insilicolab-test/c.PL_o.PL-Grid_o.Uzytkownik_o.CYFRONET_cn.Andrzej_Eilmes_cn.plgeilmes/experiments/experiment-1393444726417/job-01

[Download job files](#)

[Report a problem](#)

Po rozpoczęciu wykonywania obliczeń status ten zmienia się na ***RUNNING*** ...

Job Execution Status

Input Data

☒ Job 01: ***RUNNING*** CC

Index 1

Job ID https://lb02.grid.cyf-kr.edu.pl:9000/qe4hMNKZTA6qydU8kadmJg

Status ***running***

Additional status **JSAGA:RUNNING_QUEUED**

LFC location /grid/vo.plgrid.pl/insilicolab-test/c.PL_o.PL-Grid_o.Uzytkownik_o.CYFRONET_cn.Andrzej_Eilmes_cn.plgeilmes/experiments/experiment-1393444726417/job-01

[Download job files](#)

[Collapse](#) [Abort all jobs](#) [Download All Job IDs](#)

... a po ich zakończeniu na ***FINISHED***.

Job Execution Status

Input Data

Job 01: **FINISHED** CC

Index 1

Job ID https://lb02.grid.cyf-kr.edu.pl:9000/qe4hMNKZTA6qydU8kadmJg

Status **finished**

Additional status JSAGA:RUNNING_POST_STAGING

Live log https://chemportal.grid.cyfronet.pl/livelogging/view.php?id=1393444726417-job1&token=9a55bd32c4a49b3443ca311c07b6e398

LFC location o.PL-Grid_o.Uzytkownik_o.CYFRONET_cn.Andrzej_Eilmes_cn.plgeilmes/experiments/experiment-1393444726417/job-01

Download job files

Collapse

Abort all jobs

Download All Job IDs

W sekcji **Results** dostajemy podsumowanie charakterystycznych parametrów wykonanych zadań, np. końcową energię układu po zakończeniu procesu optymalizacji geometrii (możemy wybrać jednostki, w których podawane są wartości energii):

Results

Job No.	SCF Energy [eV]	s ²	Charge	Multiplicity
1	-2172.38238081	-	0	1

Check for results

Export data

Change energy unit eV

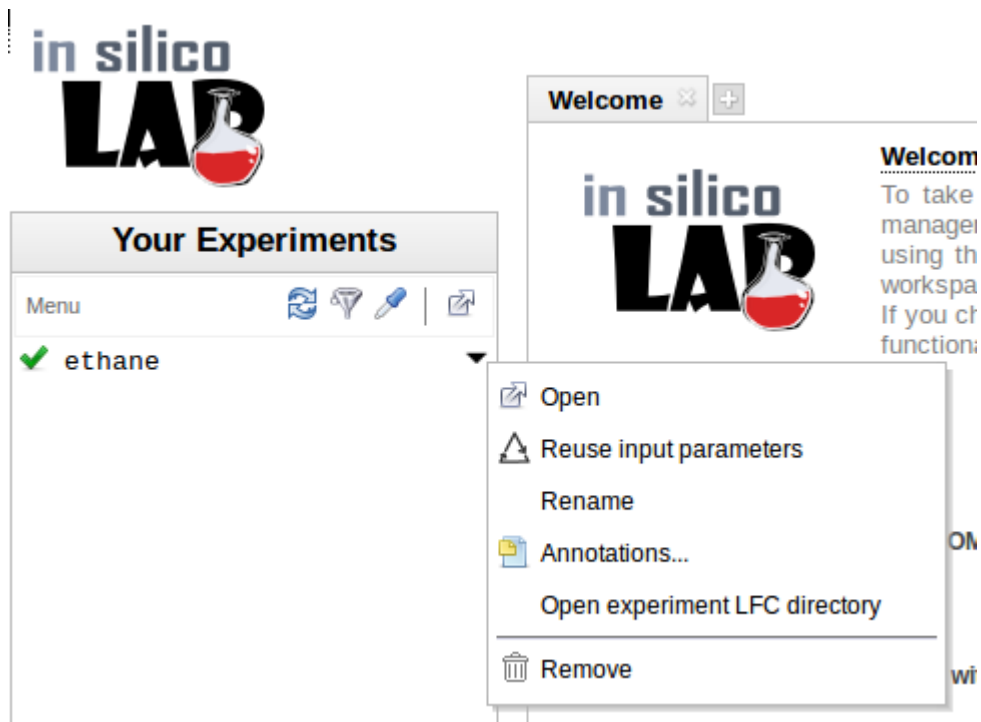
Rozwijając menu **Download job files** możemy pobrać zarchiwizowane pliki zadania (input, log oraz checkpointy Gaussiana) a także wydobyte z pliku outputowego wyniki obliczeń, np. geometrie i wartości energii w kolejnych krokach optymalizacji geometrii, energie orbitalne i inne parametry (zależnie od rodzaju wykonanych obliczeń).

```

InSilicoLab - Portal
file:///tmp/parsed_data.xml
file:///tmp/parsed_data.xml
<job archive_filename="jobfile.tar.gz">
  <computation parse_successful="true" output_filename="jobfile.log">
    <parameters multiplicity="1" charge="0" normal_termination="true" number_of_atoms="8"/>
    <geometry_optimization stable_geometry_found="true">
      <optimization_step number="0">
        <geometry units="Angstroms" symmetry="CS">
          C 0.0 -0.725002 0.0 H -1.026721 -1.087998 0.0 C 0.0 0.725004 0.0 H 0.513358 -1.088004 0.88916 H 0.513358
          -1.088004 -0.88916 H 1.02672 1.088 0.0 H -0.513355 1.087997 -0.88916 H -0.513355 1.087997 0.88916
        </geometry>
        <SCF units="eV" energy="-2172.20951486"/>
        <S2 value="."/>
      </optimization_step>
      <optimization_step number="1">
        <geometry units="Angstroms" symmetry="CS">
          C 0.0 -0.767407 0.0 H -1.017693 -1.177425 0.0 C 0.0 0.767407 0.0 H 0.508886 -1.17734 0.881364 H 0.508886
          -1.17734 -0.881364 H 1.017693 1.177425 0.0 H -0.508885 1.177338 -0.881365 H -0.508885 1.177338 0.881365
        </geometry>
        <SCF units="eV" energy="-2172.37922916"/>
        <S2 value="."/>
      </optimization_step>
      <optimization_step number="2">
        <geometry units="Angstroms" symmetry="CS">
          C 0.0 -0.765822 0.0 H -1.021396 -1.16562 0.0 C 0.0 0.765823 0.0 H 0.510739 -1.165542 0.884561 H 0.510739
          -1.165542 -0.884561 H 1.021396 1.16562 0.0 H -0.510739 1.165541 -0.884562 H -0.510739 1.165541 0.884562
        </geometry>
        <SCF units="eV" energy="-2172.38231538"/>
        <S2 value="."/>
      </optimization_step>
      <optimization_step number="3">
        <geometry units="Angstroms" symmetry="CS">
          C 0.0 -0.765822 0.0 H -1.021577 -1.1652 0.0 C 0.0 0.765823 0.0 H 0.510834 -1.165129 0.884716 H 0.510834
          -1.165129 -0.884716 H 1.021577 1.1652 0.0 H -0.510834 1.165129 -0.884716 H -0.510834 1.165129 0.884716
        </geometry>
        <SCF units="eV" energy="-2172.38238081"/>
        <S2 value="."/>
      </optimization_step>
    </geometry_optimization>
    <orbitals units="eV" computation="restricted">
      <orbital energy="-276.957199327" number="1" symmetry="A"/>
      <orbital energy="-276.951484936" number="2" symmetry="A"/>
      <orbital energy="-20.4899004147" number="3" symmetry="A"/>
      <orbital energy="-16.7964991965" number="4" symmetry="A"/>
      <orbital energy="11.8480252667" number="5" symmetry="A"/>
    </orbitals>
  </computation>
</job>

```

Parametry i dane zakończonych zadań mogą zostać zachowane w spisie eksperymentów użytkownika, w celu późniejszego wykorzystania lub powtórzenia.

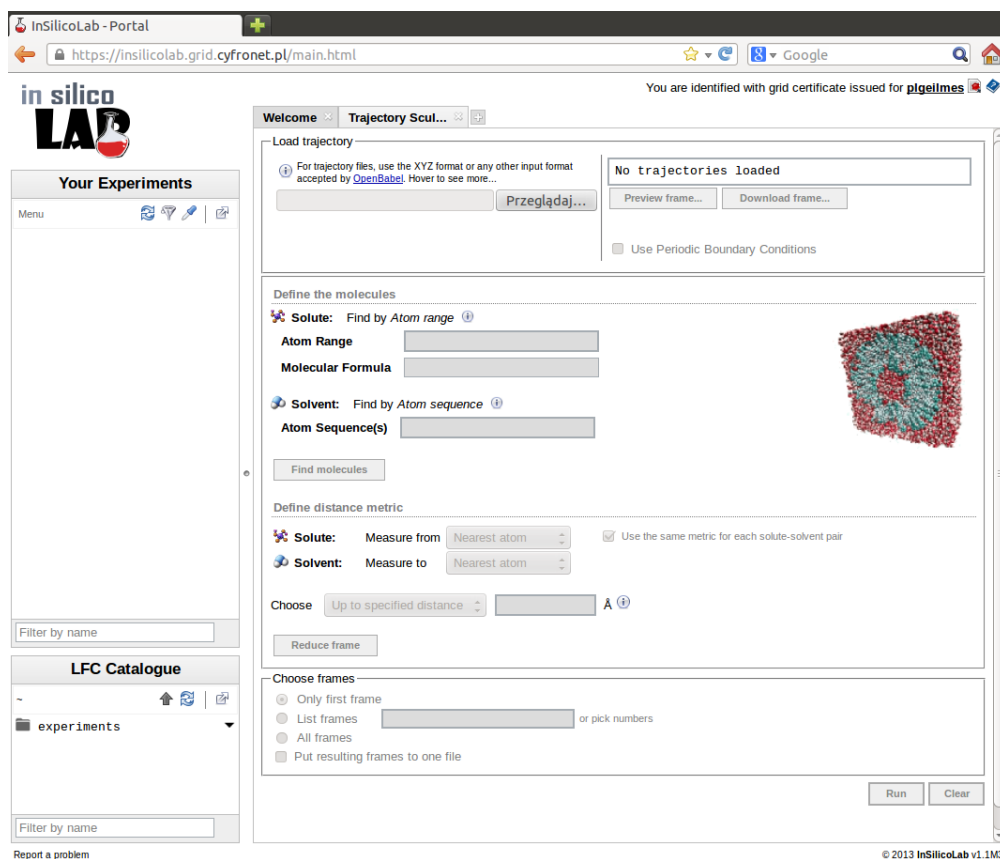


Zaawansowane użycie

Po połączeniu się z serwerem usługi

<https://insicolab.chemia.plgrid.pl>

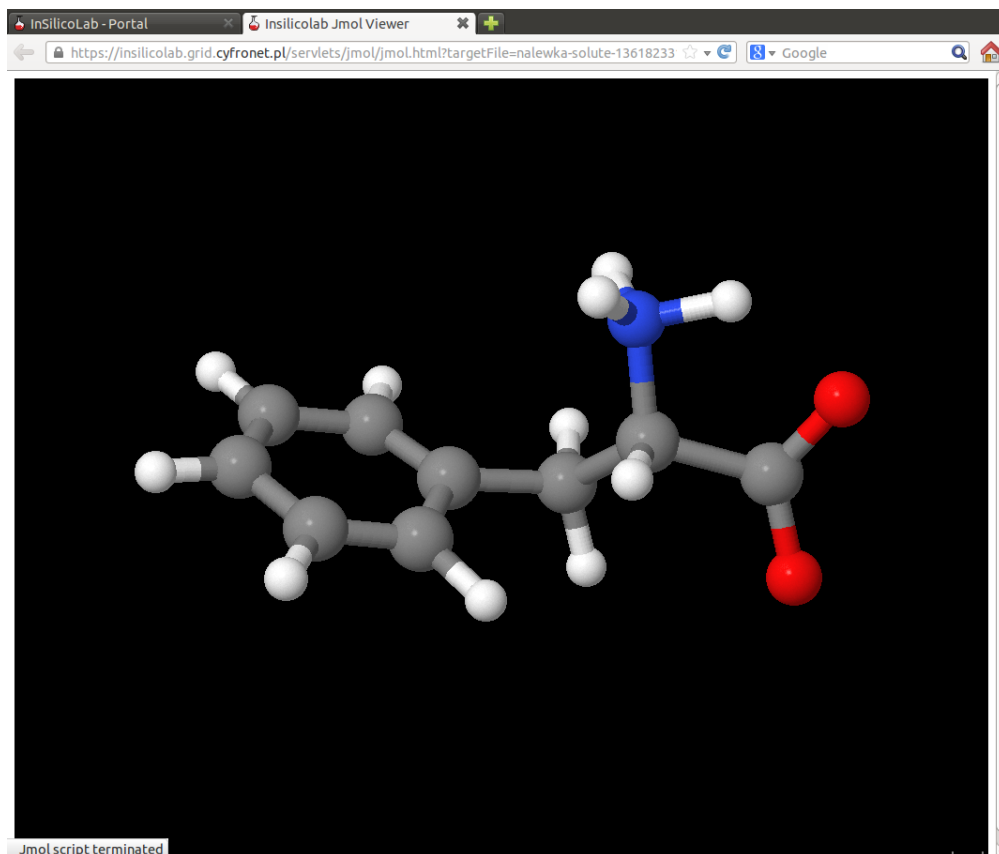
przejdź do portalu InSilicoLab i skonfigurowaniu proxy (patrz **Pierwsze kroki**) z menu **Create a new experiment** wybieramy pozycję **Trajectory Sculptor**. W przeglądarce otworzy się karta eksperymentu pozwalającego przygotować dane do obliczeń kwantowochemicznych poprzez wycięcie wybranych fragmentów układu z ramek trajektorii dynamiki molekularnej.



Pierwszą czynnością jest załadowanie pliku z trajektorią MD, typowo w formacie XYZ. Klikając przycisk **Przeglądaj...** w menu **Load trajectory** możemy wybrać żądany plik. Po jego przesłaniu na serwer usługi pojawia się komunikat "Trajectory <filename> loaded" oraz informacja o liczbie ramek znalezionych w trajektorii. W przypadku symulacji dynamiki wykorzystującej periodyczne warunki brzegowe niezbędne jest podanie informacji o długości periodów identyczności po zaznaczeniu opcji **Use Periodic Boundary Conditions** i wypełnieniu pól z periodami. Jeśli wszystkie trzy wartości są jednakowe, po zaznaczeniu opcji **Equal period values** wystarczy zadać tylko period A, pozostałe dwie wartości zostaną automatycznie powielone.

Kolejnym krokiem jest zadanie informacji o cząsteczce rozpuszczonej (jednej w układzie) oraz o cząsteczkach rozpuszczalników. W prezentowanym przykładzie cząsteczką rozpuszczoną była fenyloalanina w roztworze mieszaniny wody i etanolu. Cząsteczkę rozpuszczoną (**Solute**) podaje się poprzez zakres odpowiadających jej numerów atomów (**Atom Range**) w ramach trajektorii, np. 1501-1523. Cząsteczki rozpuszczalnika (**Solvent**) definiowane są przez podanie ciągu sybli chemicznych (**Atom Sequence(s)**) tworzących je atomów; sybole te muszą być podane dokładnie w kolejności, w jakiej występują w ramach trajektorii. Jeśli w układzie występuje więcej niż jeden rodzaj cząsteczek rozpuszczalnika, przyciskiem **Add...** dodaje się pola dla kolejnych rozpuszczalników. W przykładzie sekwencje symboli opisujących rozpuszczalniki to OHH (woda) oraz OHHCHCHHH (etanol). Po kliknięciu w przycisk **Find molecules** zanalizowana zostaje pierwsza ramka trajektorii a na ekranie zostają wyświetlone liczby i wzory sumaryczne znalezionych w niej cząsteczek.

Kliknięcie opcji **Preview** pozwala obejrzeć model wybranej cząsteczki (np. cząsteczki rozpuszczonej) przy pomocy skryptu JMola:



W celu wycięcia z układu cząsteczki rozpuszczonej wraz z otaczającymi ją molekułami rozpuszczalnika niezbędne jest określenie sposobu mierzenia odległości cząsteczka rozpuszczona - rozpuszczalnik (Define distance metric). Najprostszym sposobem jest wybranie **Nearest atom** zarówno dla **Solute: Measure from** jak i **Solute: Measure to**. Wybór ten oznacza, że odległość między dwiema cząsteczkami jest zdefiniowana jako odległość między najbliższymi sobie atomami obu cząsteczek. Jeśli dodatkowo zaznaczona będzie opcja **Use the same metric for each solute-solvent pair**, w ten sam sposób mierzona będzie odległość do każdego typu rozpuszczalnika. Następnie określić należy, ile cząstelek rozpuszczalników należy wyciąć z każdej ramki. Opcja **Closest molecules** oznacza, że wycięta będzie podana liczba molekuł rozpuszczalnika najbliższych (w sensie zdefiniowanej uprzednio metryki) do cząsteczki rozpuszczonej; jeśli liczby te są różne dla różnych typów rozpuszczalników, wartości oddziela się średnikami. W poniższym przykładzie zażądano wycinania 10 cząstecek wody i 5 cząstecek etanolu. Kliknięcie przycisku **Reduce frame** uruchamia wycięcie cząstecek z przykładowej pierwszej ramki i wyświetlenie liczby wybranych molekuł.

Define distance metric

Solute: Measure from Nearest atom ☒ Use the same metric for each solute-solvent pair
Solvent: Measure to Nearest atom

Choose Closest molecules molecules

The reduced frame contains:

1 solute with molecular formula: C₉N₁O₂H₁₁

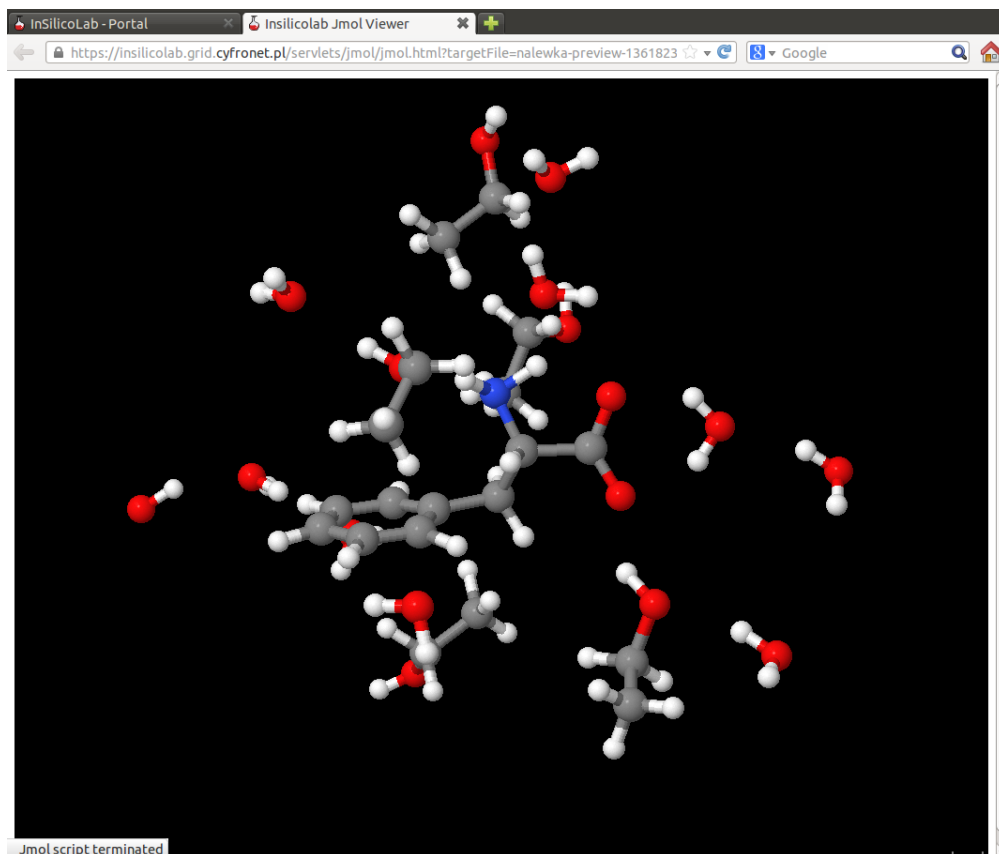
10 solvents (out of total 200) with molecular formula: O₁H₂

5 solvents (out of total 100) with molecular formula: C₂O₁H₆

Reduce frame

[Preview result](#)

Klikając polecenie **Preview result** można efekt przycięcia pierwszej ramki obejrzeć w skrypcie JMola, co pozwala użytkownikowi ewentualnie zmodyfikować swój wybór przed przejściem do analizy całej trajektorii:



Ostatnim etapem jest wybranie ramek, które mają być analizowane. Możemy wybrać pojedyncze ramki lub zadać zakres i krok wyboru

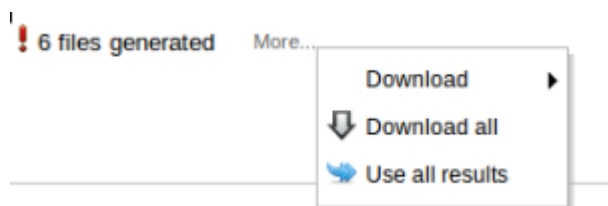
Choose frames

☐ Only first frame
☐ List frames
☒ Define range to step
☐ All frames
☐ Put resulting frames to one file

Run Clear

Dokonawszy wyboru ramek uruchamiamy ich przycinanie za pomocą przycisku **Run**.

Po zakończeniu analizy trajektorii pojawia się informacja o liczbie utworzonych plików z geometriami przyciętych ramek. Rozwijając menu **More** możemy przekazać je do eksperymentu kwantowochemicznego (**Use all results**).



Otwiera się wtedy karta nowego eksperymentu, a w części **Geometry Specification** widoczna jest lista przekazanych geometrii układów.

InSilicoLab - Portal
<https://insilicolab.grid.cyfronet.pl/main.html>
 You are identified with grid certificate issued for **plgelmes**

Welcome Trajectory Scul... New experiment

Your proxy expires in 11 hours, MyProxy is enabled.

Describe your experiment

Short name

Description

Input Data Specification

Gaussian Load prepared input Przeglądaj...

Title Section

Link 0 Section

Route Section

Charge & Multiplicity

Additional Parameters

Molecule Specification

Przeglądaj...

LFC location

Molecular Formula

Advanced search...

Add New Molecule

Grid Settings

Number of CPUs per job 1

Number of collocated CPU cores 1

Create result replicas

Open experiment after start

Run Duplicate Clear

© 2013 InSilicoLab v1.1M3

W sposób opisany w sekcji **Pierwsze kroki** uzupełniamy opis eksperymentu, dokonujemy wyboru programu kwantowochemicznego i zadajemy rodzaj i parametry żądanych obliczeń, np. obliczenie 30 najniższych wzbudzeń elektronowych metodą ZINDO:

Describe your experiment

Short name roztwor

Description fenylalanina w roztworze woda/etanol

Input Data Specification

Gaussian Load prepared input Przeglądaj...

Title Section phenylalanine

Link 0 Section %mem=512MB

Route Section #zindo(nstates=30)

Charge & Multiplicity 0 & 1

Additional Parameters

Gaussian

Kliknięcie przycisku **Run** tworzy pliki wejściowe do programu kwantowochemicznego na podstawie zadanych parametrów oraz geometrii przekazanych z eksperymentu **Trajectory Sculptor** i wysyła zadania na infrastrukturę gridową.

InSilicoLab - Portal

https://insilicolab.grid.cyfronet.pl/main.html

You are identified with grid certificate issued for **plgelmes**

Welcome Trajectory Scul... New experiment roztwor

Experiment **roztwor**

Started 2013-02-25 at 21:21:57

Status **running**

Identifier 1361823717317

LFC directory /grid/vo.plgrid.pl/insilicolab-test/c.PL_o.PL-Grid_o.Uzytkownik_o.Uniwersytet_Jagiellonski_cn.Andrzej_Eilmes_cn.plgelmes/experiments/experiment-1361823717317

fenyloalanina w roztworze woda/etanol

Experiment Input Data

Load prepared input

Title Section phenylalanine

Link 0 Section %mem=512MB

Route Section #zindo(nstates=30)

Charge & Multiplicity 0 & 1

Additional Parameters

Molecule Specification

1. nalewka.xyz: Frame-005
2. nalewka.xyz: Frame-010
3. nalewka.xyz: Frame-015
4. nalewka.xyz: Frame-020
5. nalewka.xyz: Frame-025
6. nalewka.xyz: Frame-030

Job Execution Status

Input File

Job	Status	File	Index	Job ID	Status	Additional status	LFC location
Job 01:	EXTERNAL	8fc5f4ab34fcb78a31b6c668747ec00d	1	No job ID assigned yet.	external		/grid/vo.plgrid.pl/insilicolab-
Job 02:	EXTERNAL	1bc6390d6afaf6edaa8256aced9904a7					
Job 03:	EXTERNAL	3b5046a9f74b97367d9305da6cfc605a					
Job 04:	EXTERNAL	1101488cd701f54964ac5b4d6c573ac7					

Report a problem

© 2013 InSilicoLab v1.1M3

W polu **Job Execution Status** możemy śledzić jak stan wysłanych zadań zmienia się z **EXTERNAL**, poprzez **SUBMITTED** i **RUNNING** do **FINISHED**.

Job Execution Status

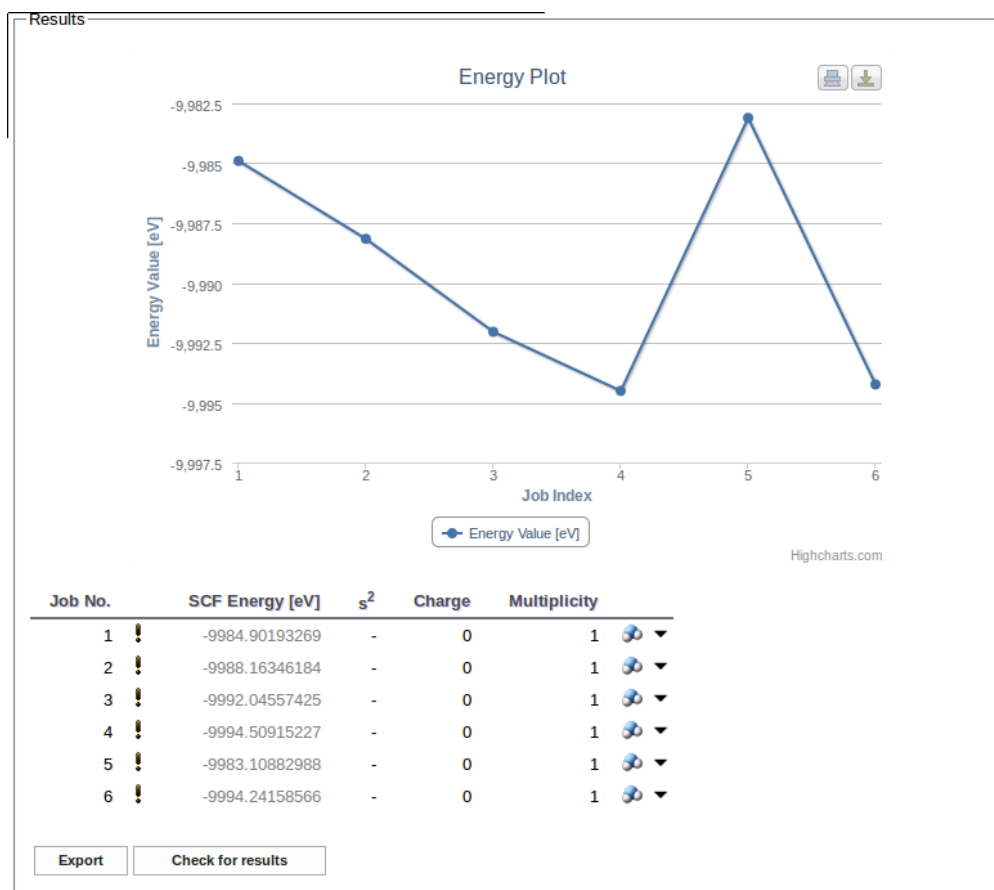
Input File

Job	Status	File	Index	Job ID	Status	Additional status	LFC location
Job 01:	RUNNING	8fc5f4ab34fcb78a31b6c668747ec00d	1	https://1b02.grid.cyf-kr.edu.pl:9000/-f10PpyDLzNGLIB0xPZfQg	running	JSAGA: RUNNING_QUEUED	/grid/vo.plgrid.pl/insilicolab-test/c.PL_o.PL-Grid_o.Uzytkownik_o.Uniwersytet_Jagiellonski_cn.Andrzej_Eilmes_cn.plgelmes/experiments/experiment-1361823717317/job-01
Job 02:	RUNNING	1bc6390d6afaf6edaa8256aced9904a7					
Job 03:	RUNNING	3b5046a9f74b97367d9305da6cfc605a					
Job 04:	SUBMITTED	1101488cd701f54964ac5b4d6c573ac7					
Job 05:	SUBMITTED	c20a7e6c1e51846b7f3a5bc85e9eff14					
Job 06:	SUBMITTED	ab550d4ceb96044e282df667ac0233f4					

Download job files

Collapse Abort all jobs Get All Job IDs

W trakcie kończenia się poszczególnych zadań tworzony jest wykres energii SCF oraz tabela z jej wartościami:



Rozwijając listę **Download job files** możemy dla wybranego zadania pobrać pliki (dane wejściowe i pliki wynikowe) jako plik .tar.gz oraz plik XML z wybranymi z pliku wynikowego rezultatami obliczeń.

Job Execution Status

Input File

Job 01: FINISHED	8fc5f4ab34cb78a31b6c668747ec00d
Job 02: FINISHED	1bc6390d6afaf6edaa8256aced9904a7
Job 03: FINISHED	3b5046a9f74b97367d9305da6cfc605a
Job 04: FINISHED	1101488cd701f54964ac5b4d6c573ac7
Job 05: FINISHED	c20a7e6c1e51846b7f3a5bc85e9eff14
Job 06: FINISHED	ab550d4ceb96044e282df667ac0233f4

Index 3

Job ID https://lb02.grid.cyf-kr.edu.pl:9000/8C4fwBZTUqgmLfGeYSQrXQ

Status finished

Additional status JSAGA:RUNNING_POST_STAGING

LFC location /grid/vo.plgrid.pl/insilicolab-test/c.PL_o.PL-Grid_o.Uzytkownik_o.Uniwersytet_Jagiellonski_cn.Andrzej_Eilmes_cn.plgeilmes/experiments/experiment-1361823717317/job-03

Download job files

- jobfiles.tar.gz
- parsed_data.xml

Collapse

Collapse Abort all jobs Get All Job IDs

W szczególności dla obliczeń widm elektronowych plik ten zawiera dane o energii przejść oraz ich sile oscylatora:

```
InSilicoLab - Portal
file:///tmp/p...ed_data-1.xml
file:///tmp/parsed_data-1.xml

<orbital energy="10.5620988937" number="203" symmetry="A"/>
<orbital energy="10.8491790002" number="204" symmetry="A"/>
<orbital energy="11.3596645734" number="205" symmetry="A"/>
<orbital energy="11.4916397882" number="206" symmetry="A"/>
<orbital energy="12.3191379908" number="207" symmetry="A"/>
<orbital energy="12.4200922273" number="208" symmetry="A"/>
<orbital energy="15.0402764408" number="209" symmetry="A"/>
</orbitals>
-<Electronic_transitions number_of_ET="30" energy_units="cm^-1">
  <ET energy="33643.23072" osc_strength="0.0005" number="1" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="38508.40064" osc_strength="0.0157" number="2" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="40285.25232" osc_strength="0.0009" number="3" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="42396.01984" osc_strength="0.1477" number="4" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="49328.40304" osc_strength="0.5356" number="5" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="50305.1472" osc_strength="0.4842" number="6" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="51060.89392" osc_strength="0.1953" number="7" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="52370.74736" osc_strength="0.1139" number="8" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="53116.0088" osc_strength="0.2633" number="9" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="54110.49728" osc_strength="0.0807" number="10" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="55571.984" osc_strength="0.0626" number="11" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="55709.0992" osc_strength="0.0019" number="12" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="56720.52544" osc_strength="0.031" number="13" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="57310.92736" osc_strength="0.0383" number="14" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="57593.22336" osc_strength="0.0113" number="15" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="58277.18624" osc_strength="0.0082" number="16" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="58778.06" osc_strength="0.0022" number="17" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="60008.87056" osc_strength="0.0002" number="18" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="60106.46432" osc_strength="0.0055" number="19" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="60524.2624" osc_strength="0.0158" number="20" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="61053.36576" osc_strength="0.0171" number="21" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="61210.64496" osc_strength="0.0072" number="22" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="61459.06544" osc_strength="0.0018" number="23" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="61899.4472" osc_strength="0.0025" number="24" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="62047.85424" osc_strength="0.0149" number="25" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="62896.35536" osc_strength="0.0038" number="26" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="63204.46128" osc_strength="0.0012" number="27" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="63402.87504" osc_strength="0.005" number="28" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="63730.3384" osc_strength="0.0039" number="29" symmetry="Singlet-A"/>
  <ET energy="64577.2264" osc_strength="0.0072" number="30" symmetry="Singlet-A"/>
</Electronic_transitions>
</computation>
</job>
```

Użycie programu niedoida w eksperymencie kwantowochemicznym

Program niedoida rozwijany jest na Wydziale Chemii UJ we współpracy z Akademickim Centrum Komputerowym ACK Cyfronet AGH. Implementuje standardowe metody chemii kwantowej (HF, MP2, metody DFT i TD DFT). Unikatowymi cechami programu jest implementacja Laplace-Transform MP2 oraz dressed-TD DFT.

Poniżej przedstawiono użycie programu na przykładzie obliczeń MP2 wykorzystujących transformację Laplace'a przyspieszającą obliczenia dla układów rozciągniętych przestrzennie.

Po uruchomieniu z menu ogólnego eksperymentu kwantowochemicznego w sekcji **Input Data Specification** wybieramy z listy program niedoida.

Input Data Specification

Niedoida

Load prepared input

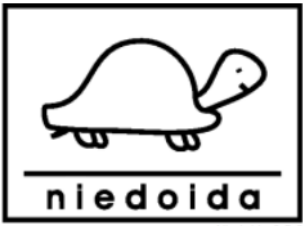
Przeglądaj...

Nie wybrano pliku.

Title

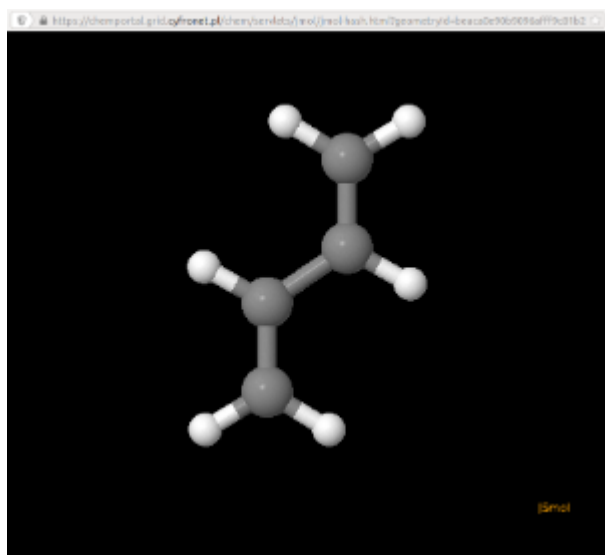
Basis Set

Other Parameters



Niedoida 0.5.3

W sekcji **Geometry Specification** wprowadzamy współrzędne badanego układu - w przykładzie jest to cząsteczka butadienu. Klikając symbol molekuly możemy zweryfikować poprawność geometrii w aplikacji JMol.



Kolejnym etapem jest uzupełnienie specyfikacji inputu:

Welcome x New experiment x

Your proxy expires in 10 hours, MyProxy is enabled.

Describe your experiment

Short name: butadiene, LT-MP2

Description: butadiene molecule, MP2 with Laplace transform

Input Data Specification

Niedoida Load prepared input Browse... No file selected.

Title: butadiene, LT-MP2

Basis Set: 6-31++g**

Other Parameters:

```
moller_plesset:
order: 2
type: laplace_ao
quadrature: fitted_simple
```

Geometry Specification

Browse... No file selected.

LFC location

Molecular Formula

Advanced search...

Add New Molecule

1. butadiene.xyz

Niedoida 0.5.3

W polu **Basis Set** podajemy żadaną bazę funkcyjną (w powyższym przykładzie jest to 6-31++G**) a pozostałe elementy specyfikacji obliczeń w polu **Other Parameters**. W naszym przykładzie jest to:

units:

```
length: angstrom
energy: hartree
```

moller_plesset:

```
order: 2
type: laplace_ao
quadrature: fitted_simple
```

Określiśmy jednostki odległości i energii oraz zażądaliśmy obliczeń *post*-HF metodą MP2 z wykorzystaniem transformacji Laplace'a.

Obliczenia uruchamiamy kliknięciem w przycisk **Run**. Po ich zakończeniu możemy ściągnąć plik outputowy (niedoida.log) oraz plik XML ze sparsowanymi wynikami.

InSilicoLab - Portal

https://chemportal.grid.cyfronet.pl/chem/main.html

You are logged in as **pijeilmes**

in silico LAB

Your Experiments

Menu

butadiene, dressed TD DF

butadiene, LT-MP2

Filter by name

LFC Catalogue

experiments

Filter by name

Job Execution Status

Input Data

Job 01: **FINISHED** butadiene.xyz

Index 1

Job ID https://lb02.grid.cyf-kr.edu.pl:9000/zMt6GT0sB5HP0U4t60po6Q

Status **finished**

Additional status JSAGA:RUNNING_POST_STAGING

Live log https://chemportal.grid.cyfronet.pl/liveLogging/view.php?id=1396043797855-job1&token=9cef1320b35a1761684cda15c1d7f6c7

LFC location /grid/vo.plgrid.pl/insilicolab-test/c.PL_o.PL-Grid_o.Uzytkownik_o.CYFRONET_cn.Andrzej_Eilmes_cn.pijeilmes/experiments/experiment-1396043797855/job-01

Download job files

experimentConfig.py

niedoida.inp

niedoida.log

output.txt

parsed_data.xml

Results

Job No.	SCF Energy [eV]	S ²	Charge	Multiplicity
1	-4216.02356033	-	0	1

Check for results Export data Change energy unit eV

Experiment Log

```
[DEBUG] pythonConfiguration: {"experimentId":"1396043797855-job1",
"loggerHost":"chemportal.grid.cyf-kr.edu.pl", "loggerToken":"LOGGER_TOKEN",
"gridEngine":"JSAGA", "vo":"vo.plgrid.pl", "lfcHost":"lfc.grid.cyf-kr.edu.pl",
"dpmList":["dpm.cyf-kr.edu.pl","se.reef.man.poznan.pl","se.polgrid.pl"]},
"replicaDpmList":[""], "createReplica":"False", "LFCOutputDirectory":"/grid/vo.plgrid.pl
```

Zwróćmy uwagę, że w polu **Results** podawana jest energia na poziomie HF SCF, zatem aby odczytać interesującą nas energię w metodzie MP2 należy obejrzeć output programu, lub (wygodniej) odczytać wartość z pliku `parsed_data.xml` ("MP2 energy"):

InSilicoLab - Portal

file:///tmp/p...ed_data-1.xml

file:///tmp/parsed_data-1.xml

This XML file does not appear to have any style information associated with it. The document tree is shown below.

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8" standalone="no" ?>
<job>
  <computation output_filename="niedoida.log" parse_successful="true">
    <parameters charge="0" multiplicity="1" normal_termination="true" number_of_atoms="10"/>
    <geometry_optimization stable_geometry_found="true">
      <optimization_step number="0">
        <geometry symmetry="C2h" units="Angstroms">
          C 0.601615759066 1.750961305 0.0 C 0.601615759066 0.410956836744 0.0 C -0.601615759066 -0.410956836744 0.0
          C -0.601615759066 -1.750961305 0.0 H 0.325521871565 -2.31855207836 0.0 H -1.52375339202 -2.32251107375 0.0 H
          1.52375339202 2.32251107375 0.0 H -0.325521871565 2.31855207836 0.0 H 1.55104038286 -0.124334951661 0.0 H
          -1.55104038286 0.124334951661 0.0
        </geometry>
        <SCF energy="-4216.02356033" units="eV"/>
        <S2 value="-"/>
        <MP2 energy="-4231.84870698" units="eV"/>
      </optimization_step>
    </geometry_optimization>
  </computation>
  <orbitals computation="restricted" units="eV">
    <orbital energy="-11.24653889" homo="false" number="1"/>
    <orbital energy="-11.24573883" homo="false" number="2"/>
  </orbitals>
</job>
```

Obliczenia kwantowochemiczne na GPU (program TeraChem)

Dostępny na klastrze Zeus program TeraChem pozwala na przyspieszenie części typowych obliczeń kwantowochemicznych poprzez wykonywanie ich na kartach graficznych NVidia.

Uwaga: aby móc skorzystać z obliczeń TeraChemem, należy aktywować dodatkowe usługi - patrz rozdział [Aktywowanie usługi](#).

Szablon odpowiedniego eksperymentu wywołuje się klikając nazwę TeraChem w głównym menu.

Parametry możliwe do ustawienia w eksperymencie to:

- **Coordinates file** - pozwala na załadowanie pliku w formacie xyz zawierającego geometrię układu
- **Basis** - baza funkcyjna żądana w obliczeniach
- **Charge** - całkowity ładunek układu
- **Multiplicity** - multipletowość układu
- **Spin restriction** - typ obliczeń restricted lub unrestricted. W przypadku, gdy multipletowość jest większa od 1, wybór typu restricted oznacza uruchomienie obliczeń restricted open-shell.
- **Method** - metoda kwantowochemiczna. Możliwe jest wykonywanie obliczeń metodą Hartree-Focka lub obliczeń DFT z użyciem różnych funkcjonałów
- **Dispersion** - pozwala uwzględnić w obliczeniach empiryczną poprawkę dyspersyjną Grimme'a (w wersji D2 lub D3)
- **Calculation type** - rodzaj obliczeń: obliczenia energii (single point), optymalizacja geometrii, poszukiwanie stanu przejściowego, dynamika Born-Oppenheimera, obliczenie energii i gradientu oraz projekcja funkcji falowej
- **QM/MM** - zaznaczenie tej opcji pozwala na uwzględnienie wody traktowanej metodą mechaniki molekularnej
- **Additional parameters** - pole pozwalające na podanie innych słów kluczowych programu
- **GPU count** - liczba kart graficznych, na których ma zostać uruchomiony program (od 1 do 8)
- **Use a non-default grant** - standardowo obliczenia wykonywane są w ramach zasobów z domyślnego grantu użytkownika PL Grid. Zaznaczenie tej opcji pozwala na podanie nazwy innego grantu obliczeniowego użytkownika

Jeśli jako **Calculation type** wybrano **Born-Oppenheimer Dynamics**, w dodatkowych polach zadaje się:

- **Maximum steps** - liczbę kroków dynamiki
- **Initial temperature** - temperaturę określającą początkowy rozkład prędkości
- **Thermostat temperature** - temperaturę, która ma być utrzymywana w trakcie obliczeń
- **Temperature control** - sposób utrzymywania zadanej temperatury: termostat Langevina lub skalowanie prędkości

Wybór opcji **QM/MM** pozwala na wykonanie obliczeń, w których część układu traktowana jest na poziomie wybranej metody kwantowochemicznej a otaczające ją cząsteczki wody opisywane są mechaniką molekularną w parametryzacji TIP3P. W takim przypadku należy użyć listy **TIP3P water molecules** do załadowania pliku xyz z geometrią cząsteczek wody (część kwantowochemiczna zdefiniowana jest przez plik podany w **Coordinates file**). Cząsteczki wody w pliku zapisywane są kolejno, atomy cząsteczki muszą być podawane w kolejności OHH.

W poniższym przykładzie zażądano wykonania 1000 kroków symulacji dynamiki Born-Oppenheimera z początkową temperaturą 350 K oraz żadaną temperaturą układu 350 K utrzymywaną przez termostat Langevina. Wybrano kombinowaną metodę QM/MM. Geometria kwantowochemicznej części układu zawarta jest w pliku mc1.xyz, jej ładunek i multipletowość wynoszą 0 i 1. Obliczenia kwantowochemiczne mają zostać wykonane metodą RB3LYP w bazie 6-31G z uwzględnieniem poprawki dyspersyjnej D3. Gęstość gridu używanego w obliczeniach DFT ustawiono na poziomie 2. Kwantowochemiczna część układu otoczona jest cząsteczkami wody TIP3P o początkowej geometrii zadanej w pliku mc1-w.xyz. Obliczenia mają być wykonane z użyciem 8 kart GPU w ramach domyślnego grantu użytkownika.

InSilicoLab - Portal

https://chemportal.grid.cyfronet.pl/chem/main.html

Search

You are logged in as **Andrzej Eilmes**

in silico LAB

Your Experiments

Menu

- terachem-mc1.xyz
- ✓ woda-mw1.xyz
- ✓ terachem-mw1.xyz
- ✓ terachem-mw1.xyz
- ✓ BOMD-mc.xyz
- ✓ terachem-mc.xyz

Filter by name

Files Catalogue

Welcome | terachem-mc1.xy...

Coordinates file: mc1.xyz

Basis:

Charge:

Multiplicity:

Spin restriction:

Method:

Dispersion:

Calculation type:

Maximum steps:

Initial temperature: K

Thermostat temperature: K

Temperature control:

QM/MM: ☒ TIP3P water molecules: mc1-w.xyz

Additional parameters (see [TeraChem](#) documentation):

GPU count:

Use a non-default grant: ☐

Kliknięcie przycisku **Run** powoduje przesłanie zadania do wykonania na klastrze Zeus.

Po zakończeniu obliczeń użytkownik ma możliwość pobrania pliku log (output programu TeraChem) oraz pliku tar z zawartością katalogu scr (poza stałe pliki wynikowe tworzone przez program).

Gdzie szukać dalszych informacji?

- [Szczegółowy podręcznik użytkownika \(j. angielski\)](#)
- [Film, demonstrujący użycie usługi](#)
- [Film demonstrujący użycie usługi z wykorzystaniem obliczeń na GPGPU](#)
- [Strony pomocy dla użytkowników PL-Grid](#)