

Система управления  
квантово-химическими задачами  
на вычислительных кластерах

# EasyQuanto

Руководство для пользователей МСЦ РАН

ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

*Редакция 2022 года*

# СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ .....	2
КОМПЛЕКТАЦИЯ .....	3
ЛИЦЕНЗИЯ .....	3
УСТАНОВКА И НАСТРОЙКА.....	3
НАЧАЛО РАБОТЫ .....	6
Главное меню .....	6
Меню задач.....	6
ВИДЖЕТЫ .....	9
СИСТЕМНЫЕ МОДУЛИ И РАСШИРЕНИЯ .....	11
Модуль <i>File Commander</i> .....	12
Модуль <i>Geometry Analyzer</i> .....	13
ПРИЛОЖЕНИЕ .....	15
Инсталляция.....	15
Настройка терминала.....	15
Рабочие директории .....	16
Удаленный доступ из Интернета.....	16
Техническая поддержка .....	18
Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ .....	19

## ВВЕДЕНИЕ

---

С недавних пор квантово-химические расчеты активно входят в практику все большего числа исследователей в различных сферах науки и образования. Причиной этому послужили простые и доступные для использования квантово-химические программы, которые способны решать очень сложные задачи, не посвящая при этом в детали алгоритмов и математических вычислений самого исследователя. Однако с увеличением количества решаемых задач существенно возрастает рутинная нагрузка на исследователя, так как большинство квантово-химических программ работает в ОС Linux и не имеет удобного диалогового интерфейса. Команды запуска задач, проверки состояния вычислительных процессов; остановка, приостановка или продолжение процесса, архивирование данных и многие другие функции должны выполняться пользователем в ручном режиме, а именно – в консоли. Даже создание bash-скриптов существенно не решает проблему, ибо сами такие скрипты нужно еще обдумать и сформировать.

С целью оптимизации рабочего времени исследователей, занимающихся квантово-химическими расчетами, создана *Система управления квантово-химическими задачами* – **EasyQuanto**. Благодаря удобному диалоговому интерфейсу работа с расчетными задачами превращается в веселую игру, а все рутинные процедуры выполняются сами по себе, без участия пользователя. Реализована возможность пакетной обработки результатов квантово-химических вычислений, куда входят достаточно сложные алгоритмы по анализу выходных данных: моделирование спектров, построение таблиц, удобных для копирования в научную статью, анализ данных о возбужденных состояниях молекул и нелинейно-оптических свойствах среды, а также моделирование эффекта оптического ограничения лазерного излучения (модуль **Simulator**). Важным составляющим элементом **EasyQuanto** является модуль **Shedule Daemon** (резидентное приложение), который отвечает за автоматический запуск задач путем отслеживания очереди. В ядро **EasyQuanto** встроено множество команд ОС Linux и интерфейса MPI (универсальный интерфейс передачи сообщений между вычислительными модулями на вычислительных кластерах). В настоящее время **EasyQuanto** работает с квантово-химическими программами PRIRODA, GAMESS-US и Q-CHEM (с 2021 года). Получено свидетельство о государственной регистрации (№ 2015619026, заявитель и правообладатель ФГБУН ИФАН РАН, автор – профессор РАН Толбин Александр Юрьевич).

## КОМПЛЕКТАЦИЯ

В корневой директории **EasyQuanto** располагаются файлы и служебные директории, необходимые для работы программы. Запуск **EasyQuanto** осуществляется исполняемым файлом **eQ2.x**. В корневой директории **EasyQuanto** располагается файл лицензии. По умолчанию он называется **license.lic** и предоставляется конкретному пользователю. При первом запуске этот файл создается автоматически после принятия лицензионного соглашения.

**EasyQuanto** состоит из большого набора модулей, имеющих расширение BIN и располагающихся в директории **easyQuanto/include**. Ниже представлен перечень и назначение служебных директорий **EasyQuanto**.

Директория	Назначение
/help	Справочная информация
/include	Модули <b>EasyQuanto</b>
/ini	Файлы с глобальными переменными ядра <b>EasyQuanto</b> и параметрами инициализации
/scripts	Shell-скрипты для запуска квантово-химических программ
/remote	Файлы командера <b>EasyQuanto</b> для работы из web-приложения
/userdata	Пользовательские данные: конфигурационные параметры, лог-файлы, результаты вычислений и т.д.

## ЛИЦЕНЗИЯ

Демонстрационная полнофункциональная версия предназначена для ознакомления с возможностями **EasyQuanto** в течение 14 дней с момента первого запуска. Для пользователей МСЦ РАН предлагается собранная версия, готовая к быстрому запуску на сервере **mvs10q.jscs.ru**. Все служебные пути уже настроены (см. далее). По истечении 14 дней, если возникнет желание продолжать пользоваться **EasyQuanto**, необходимо связаться с автором и отправить запрос на электронную почту **tolbin@ipac.ac.ru** для снятия временных ограничений, сообщив USER\_ID, прописанный в файле **license.lic**.

**EasyQuanto** постоянно совершенствуется, добавляются новые функции и возможности.

## УСТАНОВКА И НАСТРОЙКА

Дистрибутив **EasyQuanto** для пользователей МСЦ РАН можно взять в директории **/home1/tolbin** на сервере **mvs10q.jscs.ru**. Архив нужно поместить в персональное окружение и распаковать:

```
tar -xzf easyQuanto.jscs.20XX.tar.gz && cd ./easyQuanto.jscs.20XX
```

где суффикс XX имеет отношение к году последней редакции.

Настоящая версия **EasyQuanto** работает с задачами квантово-химических программ **PRIRODA**, **GAMESS-US** и **Q-CHEM**, которые уже скомпилированы и готовы к использованию. **EasyQuanto** представлена в консольном варианте. Для удобства работы пользователей разработана система диалогов, включающих в себя различные виджеты, а управление происходит при помощи курсорных и системных клавиш.

Запускаем **EasyQuanto**:

```
./eQ2.x
```

Проверить конфигурацию окружения **EasyQuanto** на текущем хосте<sup>1</sup> и внести изменения можно при помощи виджета **Widget Input**. Вызвать его можно из Главного меню, нажав клавишу **C**. В появившемся меню нужно выбрать первый пункт – ‘EasyQuanto Core Settings Widget’. Появится следующее окно:

```
~~~~~ [ HOST PARAMETERS ] ~~~~~
- Hostname           : login4.mvs10q.jscs.ru
- Hostname description : MVS10Q
- Scratch Directory  : /dev/shm
- Hanged Time for tasks (hours) : 3
- Max. tasks to start : 6
- Default number of cores : 1
- Text Editor        : nano
~~~~~ [ PRIRODA CALCULATIONS ] ~~~~~
- Work Directory     : /home2/chem1/easyQuanto.demo/priroda/wdir
- Basis Directory    : /home1/tolbin/priroda/basis
- Punch Directory    : /home2/chem1/easyQuanto.demo/priroda/punch
- Executable file    : /home1/tolbin/priroda/p_mvs10q
~~~~~ [ GAMESS CALCULATIONS ] ~~~~~
- Work Directory     : /home2/chem1/easyQuanto.demo/gamess/wdir
- Executable file    : /home1/tolbin/gamess.2019R1/gamess.2019R1.x
~~~~~ [ QCHEM CALCULATIONS ] ~~~~~
- Work Directory     : /home2/chem1/easyQuanto.demo/qchem/wdir
- Executable file    : /home2/qchem/6.0/bin/qchem_batch
~~~~~ Press [F2] to Save and Exit ~~~~~
```

Глобальные переменные находятся в файле `easyQuanto/ini/eQ2.host.ini`. Они представлены в виде нечитаемых строк для каждого хоста и могут быть отредактированы только из данного виджета настройки **EasyQuanto**. Не повреждайте эти строки. Применение настроек осуществляется нажатием клавиши **F2**. Чтобы отредактировать пути до файлов и директорий, наведите на нужную опцию курсор и нажмите **Enter** – откроется виджет **File Commander**. Все значения должны быть заданы, однако если вы не предполагаете использовать все квантово-химические программы, то хотя бы для одной из них должны быть указаны требуемые параметры. После выхода из виджета, **EasyQuanto** попросит запустить себя повторно для применения настроек.

<sup>1</sup> Для корректной работы с виджетами необходимо правильно настроить клавиатуру вашего терминала. Подробнее смотрите в разделе "Настройка терминала" секции Приложения.

Переменная	Назначение
Hostname	Имя хоста, ответ сервера на команду: <i>hostname -f</i> .
Hostname description	Здесь вы можете задать более простое и понятное вам значение для данного хоста, чтобы отличать его от остальных.
Scratch directory	Директория для временных файлов, порождаемых квантово-химическими программами (рекомендуется использовать <i>/dev/shm</i> ).
Hanged Time for tasks	Минимальное время (в часах), которое должно пройти с момента старта задачи, чтобы задачу можно было считать «зависшей» при условии отсутствия изменений в OUT файле к настоящему времени.
Max. tasks to start	Максимальное количество задач, которые пользователь может отправить в очередь (ожидающие + запущенные задачи).
Default number of cores	Количество ядер по умолчанию <sup>2</sup> .
Text Editor	Текстовый редактор для просмотра и редактирования данных. Рекомендуем использовать <i>nano</i> .
<b>PRIRODA CALCULATIONS</b>	
- work directory	Директория для задач при работе с квантово-химической программой PRIRODA (автор – Д.Н. Лайков).
- basis directory	Путь к директории, где находятся файлы базисных наборов.
- punch directory	Путь к директории, где будут располагаться файлы векторов молекулярных орбиталей.
- executable file	Путь к исполняемому файлу программы PRIRODA.
<b>GAMESS CALCULATIONS</b>	
- work directory	Директория для задач при работе с квантово-химической программой GAMESS-US (Gordon Research Group).
- executable file	Полный путь к исполняемому файлу программы GAMESS.
<b>QCHEM CALCULATIONS</b>	
- work directory	Директория для задач при работе с квантово-химической программой Q-CHEM (Q-Chem Inc., Q-Chem developer community, <a href="https://www.q-chem.com">https://www.q-chem.com</a> ).
- executable file	Полный путь к скрипту запуска программы Q-CHEM. Текущее расположение: <i>/home2/qchem/6.0/bin/qchem_batch</i> <sup>3</sup> .

Пути к файлам и директориям можно изменять. Для проверки работоспособности **EasyQuanto** для начала вы можете скопировать в рабочие директории *wdir*, находящиеся в */home2/chem1/easyQuanto.demo/{prog}*, собственные входные файлы расчетов (некоторые примеры там уже имеются). В дальнейшем вам нужно будет определить место для хранения файлов в собственном окружении. Пути к программам можно не изменять, за исключением тех случаев, когда вы решите самостоятельно их обновить (откомпилировать). Это не относится

<sup>2</sup> Вычислительные узлы делятся на ядра, на которых запускаются процессы, которые, в свою очередь, могут делиться на нити. Все непросто, поэтому рекомендуется использовать один узел и указывать действительное количество ядер на нем. По умолчанию каждому процессу соответствует одна нить. Например, в подсистеме *slk* предусмотрено 48 ядер на узел.

<sup>3</sup> Может измениться. Сборка и настройка осуществляется сотрудниками МСЦ РАН.

к Q-Chem – соответствующую работу выполняют сотрудники МСЦ РАН, а программные директории не доступны для записи обычным пользователям.

## НАЧАЛО РАБОТЫ

Доступ к **EasyQuanto** осуществляется через SSH-соединение с использованием **SSH-клиентов**. Необходимое количество символов по ширине и высоте должно быть не менее 134 и 34 соответственно. О настройке SSH-клиентов смотрите в разделе "Настройка терминала" Приложения.

### Главное меню

При запуске исполняемого файла **eQ2.x** появится главный экран. Перемещение курсора осуществляется клавишами **↑↓** («стрелка вверх» и «стрелка вниз»). **Enter** – выбор пункта меню. Для завершения работы с **EasyQuanto** нажмите клавишу **Q**.

```
unlimited                                     current user: tolbin
                                           EASYQUANTO AT MVS10Q
                                           Written by Prof. Alexander Yu. Tolbin, (c) 2015-2019 IPAC RAS
----- ver. 2.0 The Second Professional Edition -----
                                           *** EASYQUANTO MAIN MENU ***

PRIRODA Calculations
One of the fastest and undemanding quantum chemical programs for DFT-calculations, written by D.N. Laikov
* Laikov D.N., Ustynyuk Yu.A. // Russ. Chem. Bull., Int. Ed., 2005, Vol. 54, No 3, pp. 820-826
* Laikov D.N. // Chem.Phys.Lett., 2005, Vol. 416, pp. 116-120
Licence: limited

GAMESS (US) Calculations
Maintained by the members of the Gordon research group at Iowa State University (http://www.msg.ameslab.gov/gamess/)
* M.W.Schmidt et al. // J. Comput. Chem. 1993, Vol. 14, pp. 1347-1363
Licence: Research Group

QCHEM Calculations
A Quantum Leap into the Future of Chemistry (https://www.q-chem.com/)
* Y. Shao et al., Mol. Phys. 2015, Vol. 113, pp. 184-215
License: Joint Supercomputer Center of the Russian Academy of Sciences (site)

Exit EasyQuanto
Full information about EasyQuanto you can find at http://ipac.ac.ru/tolbin/easyQuanto
* Press key [C] to Configure; key [S] to run Shedule; key [P] to start EasyQuanto Simulator
```

Клавиши **C**, **S** и **P** позволяют открыть диалоговые окна конфигурирования **EasyQuanto**, запустить модули **Shedule Daemon** и **Simulator** соответственно. Из любого виджета в любой момент времени нажатие клавиши **E** приведет к выходу в данное Главное меню.

### Меню задач

Меню задач представлено в виде скроллингового меню **Widget Menu**<sup>4</sup>. Полоса прокрутки не отображается, но, когда курсор доходит до конца списка, последний начинает перемещаться вверх, порождая новые элементы. При этом

<sup>4</sup> Для того чтобы покинуть любой из текущих экранов (выйти без сохранения т.п.), необходимо нажать ESC. Нажатие клавиши "E" в большинстве случаев позволяет выйти в Главное меню EasyQuanto. Таким образом, последовательное нажатие клавиш "E"+"Q" даст полный выход. Использовать CTRL+C не рекомендуется, т.к. может исчезнуть курсор, исказиться отображение другой информации, и потребуются перезагрузка терминала. Выход из EasyQuanto всегда должен осуществляться корректно.

появляется информационное сообщение: «*Caution! The number of options (XX) exceeds the display range (YY). So, scrolling is available*».

```

unlimited
EASYQUANTO AT MVS10P
Written by Prof. Alexander Yu. Tolbin, (c) 2015-2019 IPAC RAS
----- ver. 2.0 The Second Professional Edition -----
*** GAMESS CALCULATIONS :: CONTROL THE TASKS ***

Welcome to Shell EasyQuanto Controlling System! This is powerful instrument to control calculations and analyze the results.
The directory for tasks is provided above the table. Before start calculations place input files into this directory. To move the
cursor line use arrow keys on your keyboard. To choose a task press key [Enter]. The appropriate actions will be displayed as soon as
you select a task from the table. Designations in Table: NP, T-1 and T-2 are referred to number of processes given, requested and
remaining time for a calculation, respectively. Control keys: [R] - refresh; [S] - start; [T] - archive; [X] - extract; [D] - delete
tasks; [ESC] - return; [C] - Configure EasyQuanto; [E] - display EasyQuanto Main menu.

[/home2/chem1/pc/mvs10p.jssc.ru/work/gms]
-----
| Num | Task | Status | Last updated | mpi ID | NP | T-1 | T-2 |
-----
| 1 | dimer_ll_20HPcHH_RHF_MINI_M0 | finished | 2 weeks ago | | | | |
| 2 | mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDF0_0001 | archived | 6 days ago | | | | |
| 3 | mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDF0_0002 | archived | 6 days ago | | | | |
| 4 | mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDF0_0003 | archived | 6 days ago | | | | |
| 5 | mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDF0_0004 | archived | 6 days ago | | | | |
| 6 | mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDF0_0005 | archived | 6 days ago | | | | |
| 7 | mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDF0_0006 | archived | 6 days ago | | | | |
| 8 | mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDF0_0007 | archived | 6 days ago | | | | |
| 9 | mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDF0_0008 | archived | 6 days ago | | | | |
| 10 | mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDF0_0009 | archived | 6 days ago | | | | |
| 11 | mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDF0_0012 | archived | 6 days ago | | | | |
-----
Caution! The number of options (13) exceeds the display range (11). So, scrolling is available.

```

При небольшом количестве опций список не прокручивается. Список задач нужно периодически обновлять (клавиша **R**). Краткая справка представлена в заголовке каждого экрана. Ниже дана расшифровка статуса задач:

Статус	Пояснения
ready to start	Задача представлена в виде единственного входного файла и готова к запуску.
queued	Задача отправлена в очередь и ожидает запуска, который произойдет автоматически.
started	Задача успешно запустилась и работает («считается»).
finished	Задача завершилась успешно, есть результат вычислений.
archived	Архив задачи (*.tar.gz). Представляет собой содержимое директорий, принадлежащих данной задаче. Удобный вариант для выгрузки на локальный компьютер.
aborted	Задача прервана. Это случается, если не хватает заданного времени для расчета или если произошла расчетная ошибка.
abnorm. term.	Задача не запустилась. Имеется ошибка во входном файле.
hanged	Задача «зависла». Такое случается редко, однако необходимо как-то отличить все еще работающую задачу от «зависшей». Многие вычисления перед обновлением выходного файла требуют значительного времени, и может показаться, что задача «зависла», однако по факту это не так. Поэтому не спешите с действиями, когда увидите данный статус. Обратите внимание на колонку <i>mpi ID</i> . Если идентификатор процесса отсутствует или дублирует уже существующий (для другой задачи – запущенной или поставленной в очередь), вероятнее всего, данная задача, действительно, «зависла».
I/O error	Произошла ошибка выделения дисковых ресурсов.
broken	Задача «развалилась» на старте. Это означает, что не поступил ответ от вычислительного модуля относительно невозможности запустить задачу в данный момент. Немного подождите и обновите список задач.
unconverged	Задача не может продолжать счет, т.к. не решились уравнения самосогласованного поля для нулевого шага.



Из Меню задач можно запускать (клавиша **S**), архивировать (клавиша **T**) / извлекать из архивов (клавиша **X**) и удалять (клавиша **D**) задачи – по одной или серией. Если задача имеет статус *started* или *queued*, то при попытке ее удалить, как такового удаления не произойдет, и задача приобретет статус *ready to start* или *aborted*. Будьте внимательны – восстановить удаленные задачи не представляется возможным. Нажатие клавиши **Enter** на выделенной курсором задаче позволяет получить о ней подробную информацию:

```

[ /home2/chem1/pc/mvs10p.jscs.ru/work/gms ]
+-----+-----+-----+
| Task                | Status      | Last updated |
+-----+-----+-----+
| mono_ppz_PchH_RHF_MINI_FFDF_T_0_001 | queued      | 4 seconds ago |
+-----+-----+-----+

mpi ID       : eQ.gms.1      Number of processes : 16      Queued date : 19.05.20
Requested time : 10 min      Remaining time      : b-37 min   Queued time  : 13:14
+-----+-----+-----+

3 Action(s) available for controlling:

Files for this task
Edit input file
Delete from Queue

```

За информационным блоком следует перечень действий. Набор опций зависит от статуса задачи. Ниже дана расшифровка возможных действий (примеры).

Действие	Описание
Start this task	Запуск (постановка в очередь) задачи.
Track a calculation	Просмотр изменений в OUT файле в режиме реального времени.
Files for this task	Отображаются файлы, принадлежащие текущей задаче.
Edit input file	Запустится текстовый редактор, в котором вы сможете отредактировать входной файл для расчета.
Archive the result	Создание единого архива *.tar.gz для всех файлов задачи. Громоздкие файлы векторов (DAT – для GAMESS) исключаются. Их можно экспортировать отдельно.
Export PUNCH	Только для GAMESS. Позволяет заархивировать DAT файл (архив *.zip) для удобства выгрузки на локальный компьютер.
Extract this task	Извлекает содержимое *.tar.gz архива.
Prepare to restart	Извлекает входной файл из директории задачи, удаляя все остальное содержимое, относящееся к ней. После этого задача будет иметь статус <i>ready to start</i> .
Continue the calculation	Создает новый входной файл задачи, стартуя с последнего шага предыдущего вычисления (например, с последней геометрии или матрицы векторов молекулярных орбиталей). Не могут быть продолжены (с точки обрыва) прерванные вычисления, такие как расчет гессианов, электронных переходов и др.
Delete from queue	Удаляет задачу из очереди. После этого задача будет иметь статус <i>ready to start</i> .
Kill this process	Удаляет процесс, привязанный к данной задаче («снимает» задачу). После этого задача будет иметь статус <i>aborted</i> или аналогичный.
Rename this task	Переименовывает задачу (все файлы, относящиеся к ней).
Remove this task	Навсегда удаляет неактивную задачу. Остальные (ранее стартованные или поставленные в очередь) приобретают пассивный статус ( <i>ready to start</i> , <i>aborted</i> и т.п.).

При нажатии клавиши **A** появится меню анализа результатов. Набор опций отличается в зависимости от расчетной программы, статуса и типа решаемой задачи. Ниже перечислены лишь некоторые опции:

Действие	Квантово-химическая программа	Описание
Geometry of the structure	PRIRODA	Анализ геометрических параметров оптимизированной структуры.
Geometry optimization	PRIRODA, GAMESS	Формирование таблицы с параметрами, демонстрирующими ход оптимизации структуры.
Relaxed scan	PRIRODA	Анализ геометрических параметров серии структур, полученных в ходе релаксированного сканирования, для построения поверхностей потенциальной энергии.
Molecular orbitals	PRIRODA	Информация об энергиях и типах молекулярных орбиталей, расчет ширины запрещенной зоны, интегральной величины переноса заряда для дырок и электронов и т.п.
Extract MOLDEN vectors	PRIRODA	Для задач с опцией <i>print=molden+vectors</i> . Позволяет изъять из OUT файла вектора в формате Molden для последующего анализа.
TDDFT spectrum and transitions	PRIRODA, GAMESS	Анализ OUT файла на предмет электронных переходов. Формирование электронных спектров поглощения и построение таблицы и графика (*.html) с электронными переходами (или спектрами).
NMR spectra	PRIRODA Q-CHEM	Построение ЯМР спектров. Q-Chem умеет также рассчитывать константы спин-спинового расщепления. В сочетании с хим. сдвигами можно построить спектр, близкий к реальному.
Field induced properties	PRIRODA, GAMESS	Анализ нелинейно-оптических свойств на основе метода FF-DFT.
CIS spectrum and transitions	GAMESS	Анализ электронных переходов на основе метода CIS.
TDHF-based NLO properties	GAMESS	Анализ нелинейно-оптических свойств на основе метода Time-dependent HF for NLO properties. Построение таблиц (*.html) с параметрами для каждого свойства и длины волны внешнего источника.

По завершении анализа в директориях задач создаются дополнительные файлы с таблицами в формате ASCII TXT и/или HTML.

## ВИДЖЕТЫ

О двух виджетах **Scrolling Menu** и **Widget Input** было упомянуто выше. Виджеты – это вспомогательные элементы интерфейса, упрощающие общение пользователя с программой. В консольном варианте виджеты не могут изобиловать изысканной графикой. Однако приложен максимум усилий для улучшения функциональности и обратной связи.

В виджетах управление осуществляется курсорными клавишами **↑↓** («стрелка вверх», «стрелка вниз»). Выбор опций – нажатие клавиши **Enter**. Выход из текущего экрана – клавиша **ESC**. Остальные управляющие клавиши указаны в подсказке перед следованием диалогового элемента.

Остановимся подробнее на **Widget Input**.

```

----- [ COMMON PARAMETERS ] -----
Number of decimal places for:
- Dipole moments      : 3
- Hartree Energies   : 5
----- [ ELECTRONIC TRANSITIONS ] -----
Whether to print forbidden transitions : false
Threshold value for osc. strength      : 0.001
Threshold value for % transitions      : 10
Number of decimal places for:
- Percents             : 0
- Wavelengths         : 0
- Oscillator Strengths : 4
----- [ NLO PARAMETERS ] -----
Exponent index for:
- Polarizability (esu) : *
- 1st HyperPolarizability (esu) : -30
- 2st HyperPolarizability (esu) : -34
----- Press [Enter] when all is done -----

```

Существует два типа полей – редактируемые и не редактируемые. Для первых нажатие клавиши **Backspace** приведет к стиранию последнего символа. Во втором случае произойдет смена заранее заданных значений. Для удаления всего содержимого поля, нажмите клавишу **Del** (или **Shift+Backspace**), для вставки из буфера обмена – **Shift+Insert**. Вставка не произойдет, если содержимое не соответствует заданной маске ввода или размеру поля. Для выхода из виджета с применением введенных данных нажмите **Enter**.

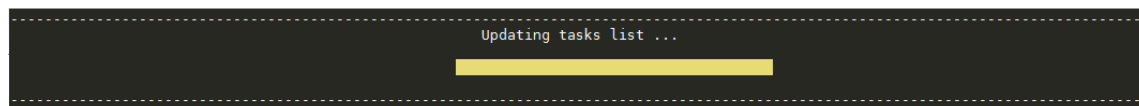
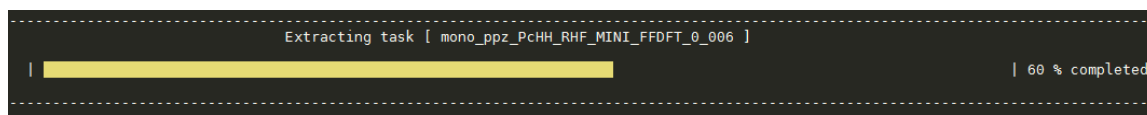
Виджет **CheckBox Menu** – это скроллинговое меню с возможностью выбора опций путем установки отметки «X».

Selected	Task	Status
X	mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDFDT_0_002	archived
	mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDFDT_0_003	archived
	mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDFDT_0_004	archived
X	mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDFDT_0_005	archived
X	mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDFDT_0_006	archived
	mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDFDT_0_007	archived
X	mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDFDT_0_008	archived
	mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDFDT_0_009	archived
	mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDFDT_0_012	archived
X	mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDFDT_0_015	archived
	mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDFDT_0_01	archived

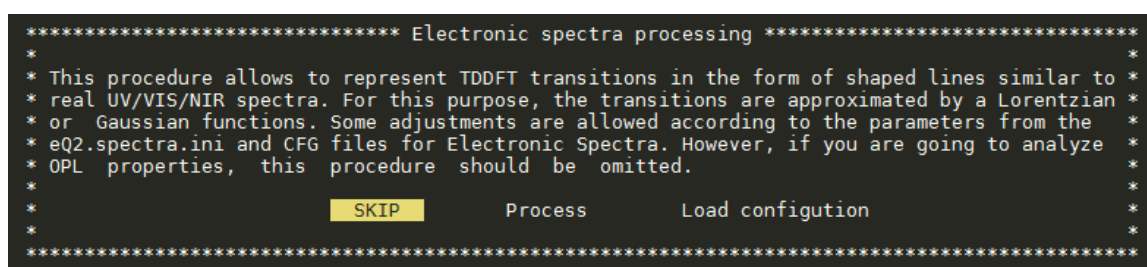
Caution! The number of options exceeds the display range. So, scrolling is available.

Если количество опций превышает размер активной области, произойдет автоматический скроллинг. Чтобы отметить какой-либо пункт или снять отметку, нажмите клавишу **Space**. Клавиши **\*** («звездочка») и **-** («минус») позволяют отметить все опции или снять отметку со всех опций соответственно.

Виджеты **ProgressBar** и **Wait** предназначены для информирования о ходе выполнения процесса:



Виджет **Window** позволяет отобразить информацию в отформатированном виде. Часто совмещен с диалогами и другими виджетами, например, **Inline Menu**:



Управление в **Inline Menu** аналогично обычному меню, только перемещение курсора осуществляется горизонтальными стрелками.

Назначение виджетов **Message** и **Table** аналогично виджету **Window**. Используются в основном для формирования отчетов.

## СИСТЕМНЫЕ МОДУЛИ И РАСШИРЕНИЯ

Главными управляющими элементами в **EasyQuanto** являются системные модули. Низкоуровневые модули представляют собой сгруппированные функции и классы, откомпилированные в бинарный код и составляющие ядро **EasyQuanto**. Модули высокого уровня (расширения) построены на виджетах. К их числу относятся – запуск задач на расчет, управление задачами и анализ результатов вычислений. Наивысший уровень модулей – самостоятельные приложения, однако требующие вспомогательных функций, и поэтому запускаются только из ядра **EasyQuanto**:

- **Task Starter** – модуль, предназначенный для запуска задач на расчет;
- **Task Controller** – модуль, предназначенный для управления задачами;
- **Task Analyzer** – модуль, предназначенный для анализа выходных файлов квантово-химических программ;

- **Shedule Daemon** – расширение, представляющее собой резидентное приложение (фоновая программа), предназначенное для контроля очереди и автоматического запуска задач на расчет;
- **Simulator** – расширение, предназначенное для моделирования свойств оптических лимитеров, цветовых характеристик и прочих оптических эффектов на основе метода FF-TDDFT;
- **Geometry Analyzer** – модуль, предназначенный для анализа геометрических параметров структур, построения таблиц для формирования 3D поверхностей потенциальной энергии;
- **File Commander** – модуль, представляющий собой систему диалогов для управления пользовательскими файлами и директориями.

В данном руководстве мы ограничимся описанием двух последних модулей.

### Модуль *File Commander*

Данный модуль может быть представлен в виде встраиваемого экрана, либо иметь свой собственный независимый экран. В последнем случае возможна функция редактирования ASCII файлов при помощи текстового редактора. В зависимости от ситуации существует возможность создания (и/или удаления, переименования) новых директорий, редактирования, удаления, переименования файлов конфигурации. Над списком файлов и директорий перечислены управляющие клавиши и их назначение. Отображаются только те файлы/директории, которые доступны для чтения/записи. Программная директория **EasyQuanto** не отображается в списках, переход в нее невозможен. Нажатие **Enter** на файле обычно позволяет выбрать его для редактирования или изменения его содержимого. Если это запрещено алгоритмом вызова виджета, то при нажатии **Enter** на файле ничего не произойдет.

```

*** FILE COMMANDER ***

This widget allows you to manage the content of directories. You may create and delete directories. Only ASCII files can be edited,
renamed or deleted.

Actions keys: [F1] Create Dir. [F2] Edit [F3] Delete [F4] Rename

[ /nethome/tolbin/easyQuanto/userdata/oplSimulator ]
-----+-----
| File/Directory                                     | Type/Size |
|-----+-----|
| j-Co                                              | DIR       |
| j-Cu                                              | DIR       |
| j-HH                                              | DIR       |
| j-Mg                                              | DIR       |
| j-N1                                              | DIR       |
| j-Zn                                              | DIR       |
| m-HH                                              | DIR       |
| ppz_monoHH                                       | DIR       |
| density_factors.dat                             | 908.00 B  |
| fields.dat                                       | 2.39 K    |
| oplAnal_532.ini                                  | 3.58 K    |
|-----+-----|
Caution! The number of options (18) exceeds the display range (11). So, scrolling is available.

```

Для того чтобы выбрать директорию, обычно нужно нажать какую-либо текстовую клавишу (это указано в тексте над таблицей); чтобы покинуть виджет, нажмите **ESC**.

### Модуль *Geometry Analyzer*

Данный модуль предназначен для изучения геометрических параметров структур. Он может быть вызван как для единичной структуры, так и для серии структур, полученных в ходе процедуры релаксированного сканирования. Позволяет анализировать большое число геометрических параметров на основе выражений линейной алгебры.

```

- Geometry Analyzer -
Use arrow up/down keys to move cursor, key [Enter] to edit parameter, key [D] to delete parameter, key [S] to save parameters, key [L]
to load parameters from a CFG file, key [A] to add new parameter. Press key [P] to process analysis.

5 Parameter(s) available for analyzing:
Valence Angle : H99-041-C10
Angle between two Vectors : {C93->C75}/{N17->N35}
Bond Length : C23-C78
Dihedral (Torsion) angle : C3-C6-C22-C11
Angle between two Planes : {C67-C90-H54}/{C23-H44-C11}

```

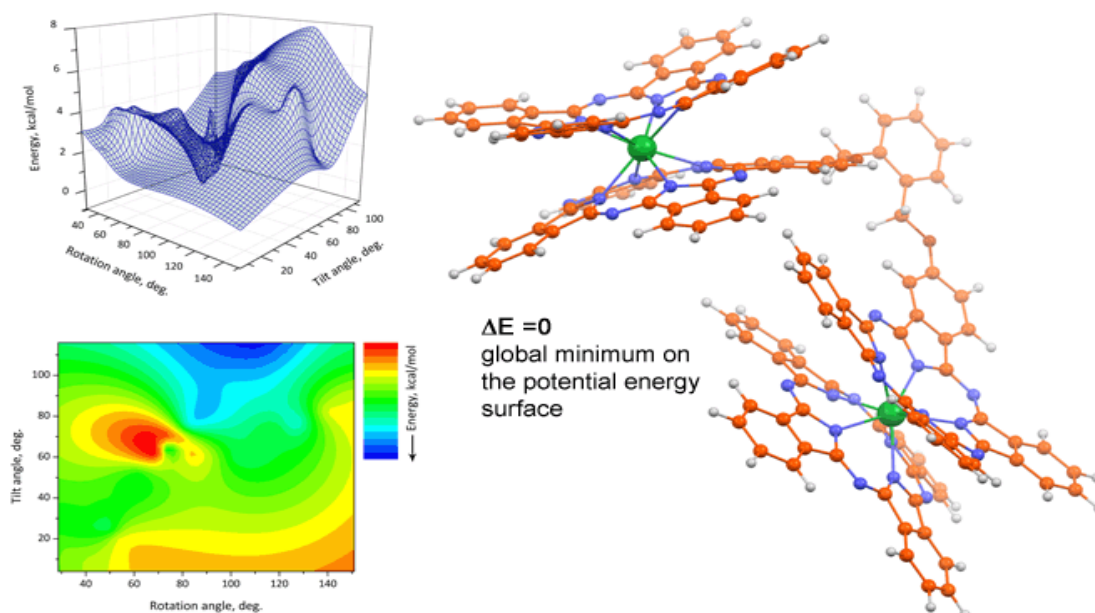
Параметры можно сохранять и загружать. Сохранение осуществляется в директорию [easyQuanto/userdata/cfg/geom](#). Внутри этой директории можно создавать и удалять файлы \*.cfg и каталоги. Управляющие клавиши указаны перед следованием меню. Ниже дана расшифровка параметров:

Параметр	Формула	Пояснение
Valence Angle		Валентный угол или плоскостной угол между тремя атомами: $a, b$ – вектора, исходящие из одной точки.
Angle between two Vectors	$\cos\varphi = \frac{a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z}{(a_x^2 + a_y^2 + a_z^2)^{1/2} (b_x^2 + b_y^2 + b_z^2)^{1/2}}$	Угол между двумя векторами, каждый из которых проведен через два произвольных атома: $a, b$ – вектора, имеющие произвольное направление.
Dihedral (Torsion) angle		Угол между двумя плоскостями, построенными через первые три и последние три атома из набора из 4-х атомов: $A, B, C$ – коэффициенты плоскостей.
Angle between two Planes	$\cos\varphi = \frac{A_1 A_2 + B_1 B_2 + C_1 C_2}{(A_1^2 + B_1^2 + C_1^2)^{1/2} (A_2^2 + B_2^2 + C_2^2)^{1/2}}$	Угол между двумя плоскостями, построенными каждая через три произвольных атома: $A, B, C$ – коэффициенты плоскостей.
Angle between Vector and Plane	$\cos\varphi = \frac{ Au_x + Bu_y + Cu_z }{(A^2 + B^2 + C^2)^{1/2} (u_x^2 + u_y^2 + u_z^2)^{1/2}}$	Угол между вектором $u$ и плоскостью, имеющей коэффициенты $A, B, C$ .

Bond Length		Длина ковалентной связи или произвольное расстояние между атомами.
Distance between two Centroids	$d = ((x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2)^{1/2}$	Расстояние между двумя центроидами <sup>5</sup> .
Distance between Atom and Plane	$d = \frac{ Ax + By + Cz + D }{(A^2 + B^2 + C^2)^{1/2}}$	Расстояние между атомом и плоскостью, проведенной через 3 атома. $A, B, C, D$ - коэффициенты плоскости, $x, y, z$ - координаты атома.
Distance between Centroid and Plane		Расстояние между центроидом и плоскостью.

Главной особенностью работы модуля **Geometry Analyzer** является выполнение всех рутинных действий автоматически для неограниченного количества структур. Более того, далеко не все параметры могут быть исследованы известными коммерческими структурными редакторами.

Нажатие клавиши **P** приведет к выполнению анализа. В случае релаксированного сканирования мы получим таблицу, на основе которой можно построить поверхность потенциальной энергии. На рисунке показана сама 3D-поверхность, ее 2D-сечение и структура, отвечающая глобальному минимуму на этой поверхности.



Возможности модуля **Geometry Analyzer** не ограничены даже фантазией пользователя, а все трудоемкие процедуры вычислений происходят за секунды.

<sup>5</sup> *Центроид* – воображаемый элемент пространства, равноудаленный от заданных точек (в нашем случае центроид может быть построен с использованием двух, трех или четырех атомов).

### Инсталляция

Для пользователей МСЦ РАН не требуется самостоятельно компилировать **EasyQuanto**. Это уже сделано разработчиком. Вам необходимо войти на сервер [mvs10q.jssc.ru](http://mvs10q.jssc.ru) под своей учетной записью, перейти в директорию [/home1/tolbin](#) и скопировать оттуда архив [easyQuanto.jssc.2022.tar.gz](#) в свое окружение:

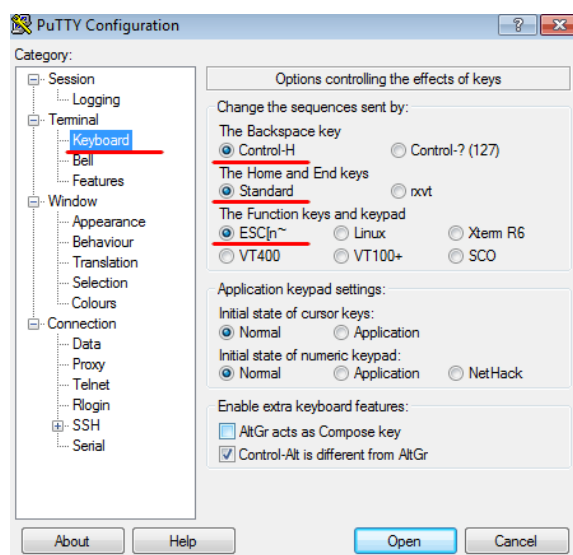
```
cp /home1/tolbin/easyQuanto.jssc.2022.tar.gz ./
```

После распаковки архива вы увидите каталог [easyQuanto.jssc.2022](#), который содержит исполняемый файл [eQ2.x](#) и служебные директории. После первого запуска появится файл лицензии [license.lic](#).

В директории [/home1/tolbin](#) также имеются собранные квантово-химические программы: PRIRODA (предоставлена автором – Д.Н. Лайковым) и GAMESS-US версии 2019R1. Соответствующие пути уже прописаны в настройках конфигурации **EasyQuanto**.

Также вам потребуется доступ к разделу [/home2/chem1](#), где располагается директория [easyQuanto.demo](#), а в ней созданы рабочие директории для задач с целью демонстрации работы **EasyQuanto**. Впоследствии пути к квантово-химическим программам и директориям вы можете изменить самостоятельно.

### Настройка терминала



Удаленный доступ к серверу осуществляется по протоколу SSH с использованием SSH-клиентов. Наиболее известным среди них является **PuTTY** – простая бесплатная программа (<http://www.putty.org/>). Для корректной работы с виджетами **EasyQuanto** необходимо проверить настройки клавиатуры (см. скриншот). Обратите особое внимание на параметры "Backspace key" и "Function keys", от которых зависит

работа управляющих клавиш **F1–F10**. Аналогичные опции есть и у других SSH-клиентов (их название может немного отличаться). В виджетах **EasyQuanto** курсорное выделение активной части списков (меню, строка ввода и т.д.) имеет



белый цвет для фона и черный – для символов. Поэтому установите цвет рабочей зоны терминала контрастно к этой комбинации цветов. Мы рекомендуем использовать синий или черный цвет для фона и белый для символов и курсора.

## Рабочие директории

Рабочие директории для квантово-химических программ содержат входные данные для расчета (\*.in, \*.inp), результаты расчета (\*.out), архивы \*.tar.gz, \*.zip и файлы обработки результатов (ASCII \*.txt, \*.html).

**папки с файлами задач**

**входные файлы, архивы другие файлы**

**в файлы \*.log записывается информация о старте, постановке в очередь и завершении задач**

**Это пример рабочей директории. При постановке в очередь, либо старте задачи в рабочей директории создается каталог для временных файлов. Входной файл и результаты расчета хранятся в таком каталоге до момента архивации данных, либо до момента удаления самого каталога по желанию пользователя.**

Remote Name	Size	Type
eQ.p.2		Folder
2-OH_Bu_PcMgDimer_NHcoord_L1_optimize_2.in	12,345	QCC Fro...
2-OH_Bu_PcMgDimer_NHcoord_L1_optimize_2.log	231	Текстов...
2-OH_Bu_PcMgDimer_NHcoord_L1_optimize_2.out	2,536,036	QCC Fro...
eQ.p.img	7,062	Файл "IMG"
machines.c10326	72	Файл "C1..."
machines.i10324	0	Файл "I1..."

Задачи, готовые для старта (статус *ready to start*), или заархивированные задачи (статус *archived*), представлены в виде одного файла, а остальные задачи – в виде директорий с тем же именем, что и входной файл, в которых содержатся результаты расчета и анализа. Нежелательно хранить в рабочих директориях посторонние файлы, т.к. это может привести к неправильной интерпретации содержимого рабочих директорий.

## Удаленный доступ из Интернета

С 2017 года всем пользователям **EasyQuanto** доступна возможность управления задачами из веб-приложения по адресу:

<http://eQ.tolbin.com/remote>

Это особенно актуально в поездках, когда нет возможности взять с собой устройство, поддерживающее полноценный SSH-доступ к серверу. А мобильный телефон, планшет и подобные устройства – как правило, всегда под рукой. Для настройки удаленного доступа к задачам необходимо установить серверную часть **EasyQuanto**, затем на экране конфигурирования (клавиша **C** в Главном меню) выбрать функцию 'Remote Web Access':

```

*** EDIT CONFIGURATION ***

To make it easier to control tasks, you may remotely access your server from the EasyQuanto Web Application. It's not always possible
to take your computer with you on a trip, and a mobile phone and internet are always at hand. EasyQuanto Web Application is a
simplified version of the Shell EasyQuanto Controlling System and is endowed with only basic functions.

Web access was configured. Following information is an important to work with EasyQuanto from outside:

EasyQuanto Web Server : http://eQ.tolbin.com/remote
Web Authorization    : Apache Web Server username/password
Remote Authorization : Public SSH key
Security             : Encrypted session

Hostname             : mvs10p.jssc.ru
Login                : ██████████
Password             : ██████████

To disable the remote access press key [D], another key to return: █

```

После того, как вы подтвердите, что доверяете узлу <http://eQ.tolbin.com>, на ваш сервер будет скопирован и установлен публичный SSH-ключ, необходимый для общения двух серверов, без ввода действующих SSH-паролей. Далее вам будет предоставлена пара Login/Password для аутентификации на веб-сервере. В результате вы получите доступ на веб-сервер <http://eQ.tolbin.com/remote>, откуда будет осуществляться управление задачами в 'один клик'.

Вместо *http* можно использовать *https*. Однако даже наличие установленного SSL сертификата еще не гарантирует безопасность передачи команд между серверами. Для усиления такой защиты был внедрен особый бинарный алгоритм шифрования команд с закрытым ключом: команда не исполнится, если будет нарушена двухуровневая проверка цифровой подписи.

Ниже представлен скриншот веб-версии **EasyQuanto** с мобильного устройства:

The screenshot shows the 'PRIRODA TASKS ASSET' interface. It includes a welcome message, instructions on how to use the task table, and a set of MPI Actions (mps, mqinfo). Below this is a table of tasks with columns for Task, Status, Last updated, mpi ID, NP, T-1, and T-2. At the bottom, there are four buttons: Change Host, Upload new tasks, Change Asset, and Update.

Task	Status	Last updated	mpi ID	NP	T-1	T-2
jAl_CC_decr_scan_2	aborted	8 months ago				
jAl_obliq_L1_NmesoH_scan_1	finished	9 months ago				
ppz-O-jMg_obliq_L1_opt	archived	1 week ago				
ppz_1Pc_L1_opt	started	24 seconds ago	eQ.p.1	16	200	200
test	ready to start	1 week ago				

Интерфейс **EasyQuanto** предельно понятен, а на каждом экране и в каждом диалоговом окне представлена информация или подсказка к действиям.

## Техническая поддержка

**EasyQuanto** успешно протестирована на серверах Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН (<http://www.jscs.ru>). Именно здесь гарантируется ее полнофункциональная работоспособность.

### КОНТАКТЫ:

Профессор РАН Толбин Александр Юрьевич

[tolbin@ipac.ac.ru](mailto:tolbin@ipac.ac.ru)

[www.ipac.ac.ru/tolbin/](http://www.ipac.ac.ru/tolbin/)

Свидетельства о регистрации программ для ЭВМ

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2015619026

Система управления квантово-химическими задачами -  
EasyQuanto

Правообладатель: *Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физиологически активных веществ Российской академии наук (ИФАВ РАН) (RU)*

Автор: *Толбин Александр Юрьевич (RU)*



Заявка № 2015615768

Дата поступления 24 июня 2015 г.

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ 21 августа 2015 г.

Заместитель руководителя Федеральной службы  
по интеллектуальной собственности

Л.Л. Кирий

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



## СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

**№ 2017616354**

**Моделирование свойств оптических лимитеров - OPL  
Simulator for EasyQuanto**

Правообладатель: *Федеральное государственное бюджетное  
учреждение науки Институт физиологически активных веществ  
Российской академии наук (ИФАВ РАН) (RU)*

Автор: *Толбин Александр Юрьевич (RU)*

Заявка № **2017613809**

Дата поступления **25 апреля 2017 г.**

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ **06 июня 2017 г.**

*Руководитель Федеральной службы  
по интеллектуальной собственности*

 *Г.П. Ивлиев*

