

Система управления
квантово-химическими задачами
на вычислительных кластерах

EasyQuanto

Руководство пользователя

ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Редакция 2020 года

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	2
КОМПЛЕКТАЦИЯ	3
ЛИЦЕНЗИЯ	3
УСТАНОВКА И НАСТРОЙКА	4
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
О лицензиях	16
Компиляция РНР	16
Рабочие директории	16
Удаленный доступ из Интернета	17
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, при этом не посвящая 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 **OPL Simulator**). Важным составляющим элементом EasyQuanto является модуль **Shedule** (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 и GAMESS-US. Получено свидетельство о государственной регистрации (№ 2015619026, заявитель и правообладатель ФГБУН ИФАВ РАН, автор – профессор РАН Толбин Александр Юрьевич).

КОМПЛЕКТАЦИЯ

В корневой директории EasyQuanto располагаются файлы и служебные директории, необходимые для работы системы. Запуск EasyQuanto осуществляется исполняемым файлом **eQ2.x**. Необходимым условием работы системы является наличие в корневой директории EasyQuanto файла лицензии. По умолчанию файл лицензии 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
/bin	Исполняемый и сопутствующие файлы, относящиеся к PHP ¹ .
/help	Справочная информация.
/include	Модули EasyQuanto и файлы PHP.
/ini	Файлы с глобальными переменными ядра EasyQuanto и параметрами инициализации.
/lib, /man, /etc	Библиотеки и сопутствующие файлы PHP.
/scripts	Shell-скрипты для запуска квантово-химических программ.
/remote	Файлы командера EasyQuanto для работы из web-приложения.
/userdata	Пользовательские данные: конфигурационные параметры, лог-файлы, результаты вычислений и т.д.

ЛИЦЕНЗИЯ

Для использования EasyQuanto необходимо заключить лицензионное соглашение с ФГБУН ИФАВ РАН – единственным правообладателем.

Лицензия	Пояснения
Демонстрационная версия	Полнофункциональная версия, ограниченная сроком использования – 2 недели. Скачать EasyQuanto можно только с официального сайта http://ipac.ac.ru/tolbin/easyQuanto .
Базовая версия	Запуск задач, контроль хода вычислений, архивирование, подготовка для последующего запуска задач. Ограниченное использование сроком до 2-х месяцев.
Расширенная версия	Базовая версия + анализ результатов вычислений (молекулярные орбитали, электронные переходы, спектры ЯМР, процесс оптимизации геометрии и сканирования поверхности потенциальной энергии, нелинейная оптика). Ограниченное использование сроком до 1 года.
Версия «Престиж»	Расширенная версия + модуль Shedule (автоматический запуск задач). Ограниченное использование сроком до 1 года.
Версия «Премиум»	Расширенная версия + модуль Shedule + модуль OPL Simulator (моделирование свойств оптических лимитеров).

¹ Создаются при автоматической установке, когда файлы интерпретатора PHP находятся внутри корневой директории EasyQuanto.

Только Демонстрационная версия является бесплатной. В остальных случаях стоимость лицензии обсуждается с официальными представителями ФГБУН ИФВ РАН. EasyQuanto постоянно совершенствуется, добавляются новые функции и возможности.

УСТАНОВКА И НАСТРОЙКА

Дистрибутив EasyQuanto загружается автоматически после выполнения команды *make*. Для этого необходимо скачать *Makefile* с сайта <http://ipac.ac.ru/tolbin/easyQuanto>. После распаковки архива перейдите в директорию *easyQuanto/install* и запустите инсталлятор *easyQuanto.Installer*:

```
make && cd ./easyQuanto/install && ./easyQuanto.Installer
```

Для работы EasyQuanto необходимо наличие интерпретатора PHP и PECL расширения *Vcompiler*, которые будут установлены в ходе инсталляции EasyQuanto. Настоящая версия EasyQuanto работает с задачами квантово-химических программ *PRIRODA* и *GAMESS-US*, которые должны быть предварительно установлены. Для запуска параллельных вычислений на сервере должна быть установлена библиотека Intel MPI. Запуск задач на расчет должен осуществляться командой *mpirun*. Должны присутствовать утилиты интерфейса MPI: *mps*, *mqinfo*, *mcancel*, *mkill* и др. При возникновении сложностей обратитесь к системному администратору.

EasyQuanto представлена в консольном варианте. Для удобства работы пользователей разработана система диалогов, включающих различные виджеты, а управление происходит при помощи курсорных и системных клавиш. Запускаем EasyQuanto:

```
cd ./ && ./eQ2.x
```

Первый виджет, который встречает пользователя при первом старте EasyQuanto на текущем хосте² – **Widget Input**. Необходимо установить параметры и пути до квантово-химических программ и рабочих директорий. Сами 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 виджета настройки EasyQuanto. Не повреждайте значения параметров.

² Для корректной работы с виджетами необходимо правильно настроить клавиатуру вашего терминала. Подробнее смотрите в разделе "Настройка терминала" секции Приложения.

```

----- [ HOST PARAMETERS ] -----
- Hostname                : login.mvs10p.jscs.ru
- Hostname description    : loginmvs10pjscsru
- Scratch Directory       : ./
- Hanged Time for tasks (hours) : 3
- Max. tasks to start     : 9
- Default proc. number    : 1
- Text Editor             : nano
----- [ PRIRODA CALCULATIONS ] -----
- Work Directory          : not specified, Press Enter ...
- Basis Directory         : not specified, Press Enter ...
- Punch Directory         : not specified, Press Enter ...
- Executable file         : not specified, Press Enter ...
----- [ GAMESS CALCULATIONS ] -----
- Work Directory          : not specified, Press Enter ...
- Executable file         : not specified, Press Enter ...
----- Press [F2] to Save and Exit -----

```

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.
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 может запустить пользователь (отправить в очередь).
Default proc. number	Количество параллельных процессов.
Text Editor	Текстовый редактор для просмотра и редактирования данных. Рекомендуем использовать <i>nano</i> .
PRIRODA CALCULATIONS	
- work directory	Директория для задач при работе с квантово-химической программой PRIRODA (автор – Лайков Д.Н.).
- 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. В этой директории также должен находиться скрипт запуска eQ.p³ .
GAMESS CALCULATIONS	
- 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. В этой директории также должен находиться скрипт запуска eQ.gms .

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 обе квантово-химические программы, то хотя бы для одной из них должны быть указаны

³ Скрипты запуска можно редактировать. Они автоматически копируются из директории [easyQuanto/scripts](#) в директории соответствующих квантово-химических программ на стадии конфигурирования.

требуемые параметры. После выхода из виджета, EasyQuanto попросит запустить себя повторно для применения настроек. Более детально конфигурирование EasyQuanto рассмотрено в дополнительном руководстве по Конфигурированию и настройке.

НАЧАЛО РАБОТЫ

EasyQuanto устанавливается на удаленный сервер. Доступ 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 MVS10P
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/games/)
* M.W.Schmidt et al. // J. Comput. Chem. 1993, Vol. 14, pp. 1347-1363
Licence: Research Group
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 OPL Simulator
```

Клавиши **C**, **S** и **P** позволяют открыть диалоговые окна конфигурирования EasyQuanto, запустить модули **Shedule** и **OPL 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**⁴. Полоса прокрутки не отображается, но когда курсор доходит до конца списка, последний начинает перемещаться вверх, порождая новые элементы. При

⁴ 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.

этом 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.jsc.ru/work/gms]
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
| Num | Task | Status | Last updated | mp1 ID | NP | T-1 | T-2 |
+-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----+
| 1 | dimer_ll_20HPcHH_RHF_MINI_MO | finished | 2 weeks ago | | | | |
| 2 | mono_pp2_PcHH_RHF_MINI_FFDET_0_001 | archived | 6 days ago | | | | |
| 3 | mono_pp2_PcHH_RHF_MINI_FFDET_0_002 | archived | 6 days ago | | | | |
| 4 | mono_pp2_PcHH_RHF_MINI_FFDET_0_003 | archived | 6 days ago | | | | |
| 5 | mono_pp2_PcHH_RHF_MINI_FFDET_0_004 | archived | 6 days ago | | | | |
| 6 | mono_pp2_PcHH_RHF_MINI_FFDET_0_005 | archived | 6 days ago | | | | |
| 7 | mono_pp2_PcHH_RHF_MINI_FFDET_0_006 | archived | 6 days ago | | | | |
| 8 | mono_pp2_PcHH_RHF_MINI_FFDET_0_007 | archived | 6 days ago | | | | |
| 9 | mono_pp2_PcHH_RHF_MINI_FFDET_0_008 | archived | 6 days ago | | | | |
| 10 | mono_pp2_PcHH_RHF_MINI_FFDET_0_009 | archived | 6 days ago | | | | |
| 11 | mono_pp2_PcHH_RHF_MINI_FFDET_0_012 | 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 mp1 ID. 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.jssc.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 меню действий. Набор опций зависит от статуса задачи. Ниже дана расшифровка возможных действий.

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** в меню действий появится меню анализа результатов. Набор опций отличается в зависимости от расчетной программы, статуса и типа решаемой задачи. Ниже перечислены 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	Построение ЯМР спектров.
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 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
----- [ NLC 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». 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.

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

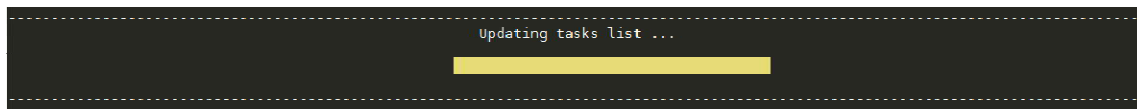
Caution! The number of options exceeds the display range. So, scrolling is available.

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

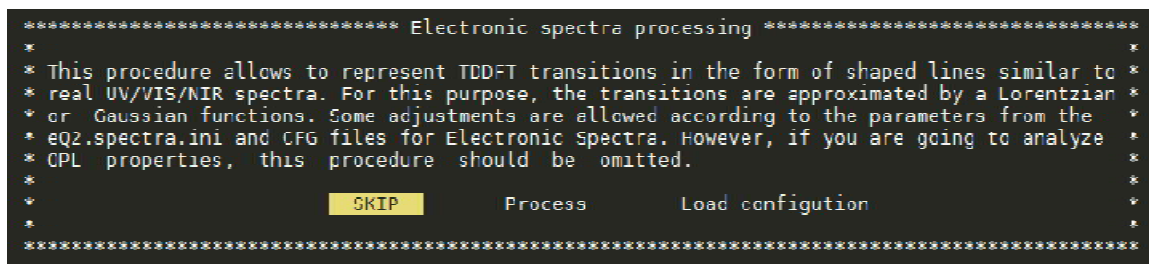
Виджет ProgressBar

```

-----
Extracting task [ mono_ppz_PcHH_RHF_MINI_FFDFDT_0_006 ]
| ████████████████████████████████████████████████████████████████████████████ | 60 % completed
-----
  
```



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;
- **Schedule** – расширение, представляющее собой резидентное приложение (фоновая программа), предназначенное для контроля очереди и автоматического запуска задач на расчет;

- **OPL Simulator** – расширение, предназначенное для моделирования свойств оптических лимитеров 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-Ni           | DIR       |
| j-Zn           | DIR       |
| m-HH           | DIR       |
| ppz_monoHH    | DIR       |
| density.factors.dat | 988.00 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-O41-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	$\cos\varphi = \frac{A_1 A_2 + B_1 B_2 + C_1 C_2}{(A_1^2 + B_1^2 + C_1^2)^{1/2} (A_2^2 + B_2^2 + C_2^2)^{1/2}}$	Угол между двумя плоскостями, построенными через первые три и последние три атома из набора из 4-х атомов: A, B, C – коэффициенты плоскостей.
Angle between two Planes		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 ⁵ .

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

Distance between Atom and Plane

$$d = \frac{|Ax + By + Cz + D|}{(A^2 + B^2 + C^2)^{1/2}}$$

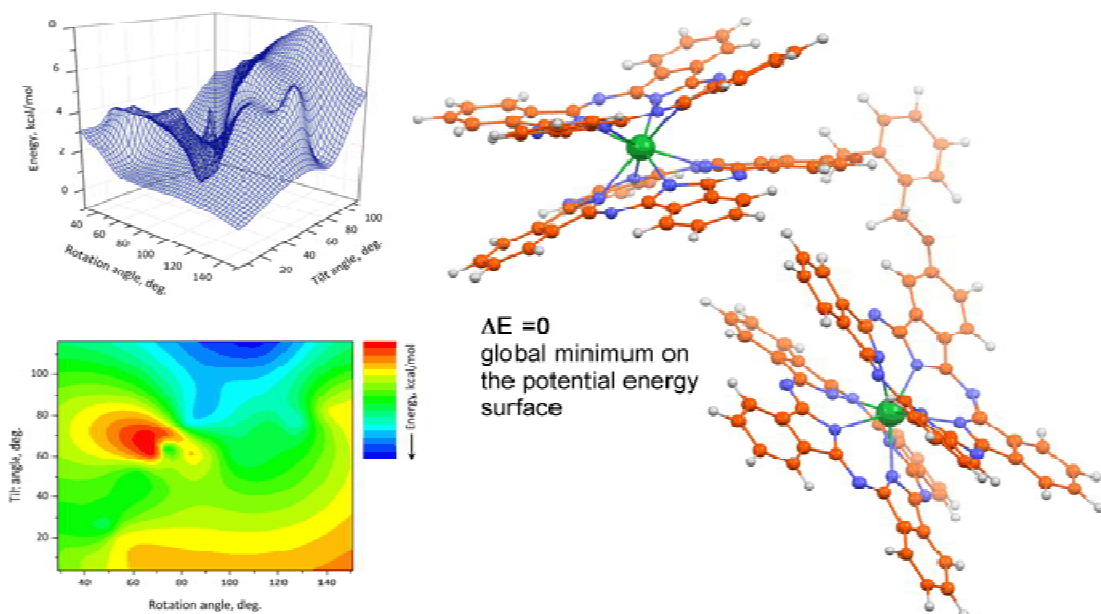
Расстояние между атомом и плоскостью, проведенной через 3 атома. A, B, C, D - коэффициенты плоскости, x, y, z - координаты атома.

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.

Описание к другим модулям и расширениям представлено в дополнительном руководстве по Модулям и расширениям.

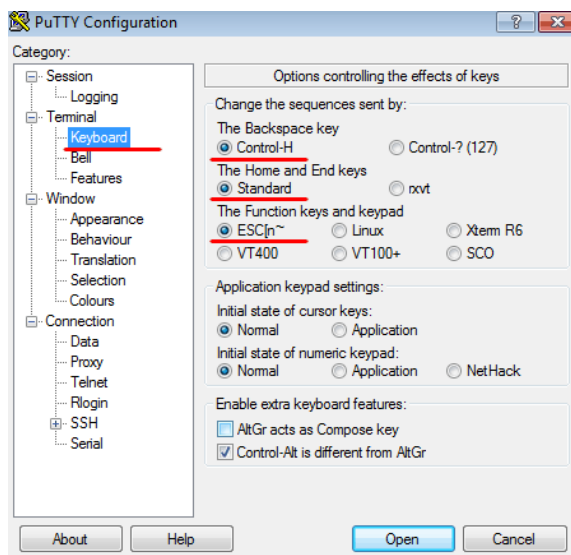
Система управления квантово-химическими задачами на вычислительных кластерах "EasyQuanto". Руководство пользователя – общее описание. Автор – профессор РАН Толбин Александр Юрьевич. Свидетельство о государственной регистрации № 2015619026. © ФГБУН ИФАВ РАН.

Инсталляция

Возможны два режима работы инсталлятора `easyQuanto.Installer`: полная автоматическая установка и установка "шаг за шагом". Рекомендуется использовать первый вариант. В этом случае PHP (<http://php.net>) будет установлен в корневую директорию EasyQuanto. Вслед за этим, будет установлено PECL расширение `Vscompiler` (<https://pecl.php.net>) для компиляции собственных модулей и расширений. Далее будет создан исполняемый файл `eQ2.x`.

При использовании варианта "шаг за шагом" инсталлятор предложит вам найти PHP в системе, указать путь к исполняемому файлу интерпретатора (уже установленного ранее) или произвести установку по умолчанию (в корневую директорию EasyQuanto). Во всех случаях после установки PHP последует установка расширения PECL `Vscompiler`, если инсталлятор не обнаружит, что оно уже было установлено ранее. После этого последует стандартная процедура компиляции модулей EasyQuanto и формирование файла запуска `eQ2.x`.

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.

О лицензиях

Если предполагается использование нескольких лицензий (разные Linux пользователи, разные хосты), то следует создать переменную окружения **EQ_LIC**, в которой указать имя файла лицензии, например:

```
export EQ_LIC=mylicense.lic
```

Для удобства можно создать bash-скрипт и поместить его в корневую директорию EasyQuanto:

```
#!/bin/bash
case `hostname -f` in
"host1.server.zone" ) EQ_LIC="license.host1.lic";;
"host2.server.zone " ) EQ_LIC="license.host2.lic";;
...
esac

export EQ_LIC=$EQ_LIC
./eQ2.x
```

листинг файла **run.bash**
файлы лицензий должны
находиться в корневой
директории EasyQuanto

Каждый пользователь может иметь собственный скрипт запуска, при этом директории **/userdata** и **/ini** должны быть доступны для записи.

Компиляция PHP

В файле инсталлятора **easyQuanto.Installer**, который представляет собой bash-скрипт, находится переменная **CONFIGURE_PHP_OPTIONS**. Здесь перечислены опции, с которыми компилируется PHP. Если при компиляции появляется сообщение об ошибке, значит в вашей системе не установлена какая-либо библиотека или расширение. Отчет о конфигурировании находится в файле **command.log** (директория **easyQuanto/install/tmp/php-5.2.10**). Оттуда можно узнать о причине появления ошибки.

Переменную **CONFIGURE_PHP_OPTIONS** можно модифицировать, включать дополнительные опции. Подробно об этом можно прочитать на сайте разработчика: <http://php.net/>.

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). Задачи, готовые для старта (статус *ready to start*), 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.

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..."

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 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.iscc.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. Это обеспечивает максимальную безопасность передачи данных. 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'. Ниже представлен скриншот веб-версии EasyQuanto с мобильного устройства:

PRIRODA TASKS ASSET

Welcome to PRIRODA Calculations! This is simple version of the EasyQuanto Controlling System. The directory for tasks is provided above the table. Before start calculations place input files into this directory on your remote server. To control the tasks use mouse cursor. To choose a task click on the task line. The appropriate actions will be displayed as soon as you select a task from the table. Within the table, NP, T-1 and T-2 are referred to number of processors given, requested and remaining time for a calculation, respectively. Control keys: < U > - Update; < A > - Change Asset.

MPI Actions: [mps](#) [mqinfo](#)

[/home2/chem1/pc/mvs10p.jssc.ru/work/pri]

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				

Change Host Upload new tasks Change Asset Update

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.jssc.ru>). Именно здесь гарантируется ее полнофункциональная работоспособность. Ввиду наличия огромного разнообразия дистрибутивов Linux, в которых системные команды могут отличаться версиями, набором параметров и функций, при установке и в процессе работы EasyQuanto нельзя исключать появления ошибок. Обо всех таких случаях вы можете сообщать автору EasyQuanto – профессору РАН Толбину Александру Юрьевичу (tolbin@ipac.ac.ru).

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