



## Środowisko InSilicoLab dla chemii obliczeniowej

Klemens Noga

ACK Cyfronet AGH

Wydział Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego, Kraków, 9 XII 2016

## ■ InSilicoLab

- możliwości

## ■ Grid obliczeniowy

- certyfikaty
- wirtualne organizacje (VOs)


## ■ Warsztaty







<http://insilicolab.cyfronet.pl>

- Środowisko pracy z systemem zintegrowanych narzędzi, które:
  - wspomagają zarządzanie złożonymi obliczeniami
  - automatyzują powtarzalne cykle obliczeń
  - umożliwiają w wygodny sposób zarządzanie procesem obliczeń
  - ułatwiają zarządzanie rozproszonymi danymi eksperymentu
  - umożliwiają wspólną analizę rezultatów wielu równoległych obliczeń
  - ułatwiają współpracę pomiędzy badaczami pracującymi nad wspólnymi projektami
  - nie rozpraszają użytkowników wykorzystywaną technologią – bez forsowania zmiany sposobu myślenia naukowców




Log in... You are logged in as **anonymousUser** 

### Your Experiments

Menu    

- ✓ Benzene...ground state...RHF/STO-2G

### Welcome





#### Welcome to InSilicoLab Portal

To take advantage of the full portal functionality (including job submission and LFC directory management), it is required that you have a valid proxy configured. You can configure it now - using the left panel, or do it later at any time - by clicking the "Configure proxy..." button in the workspace.

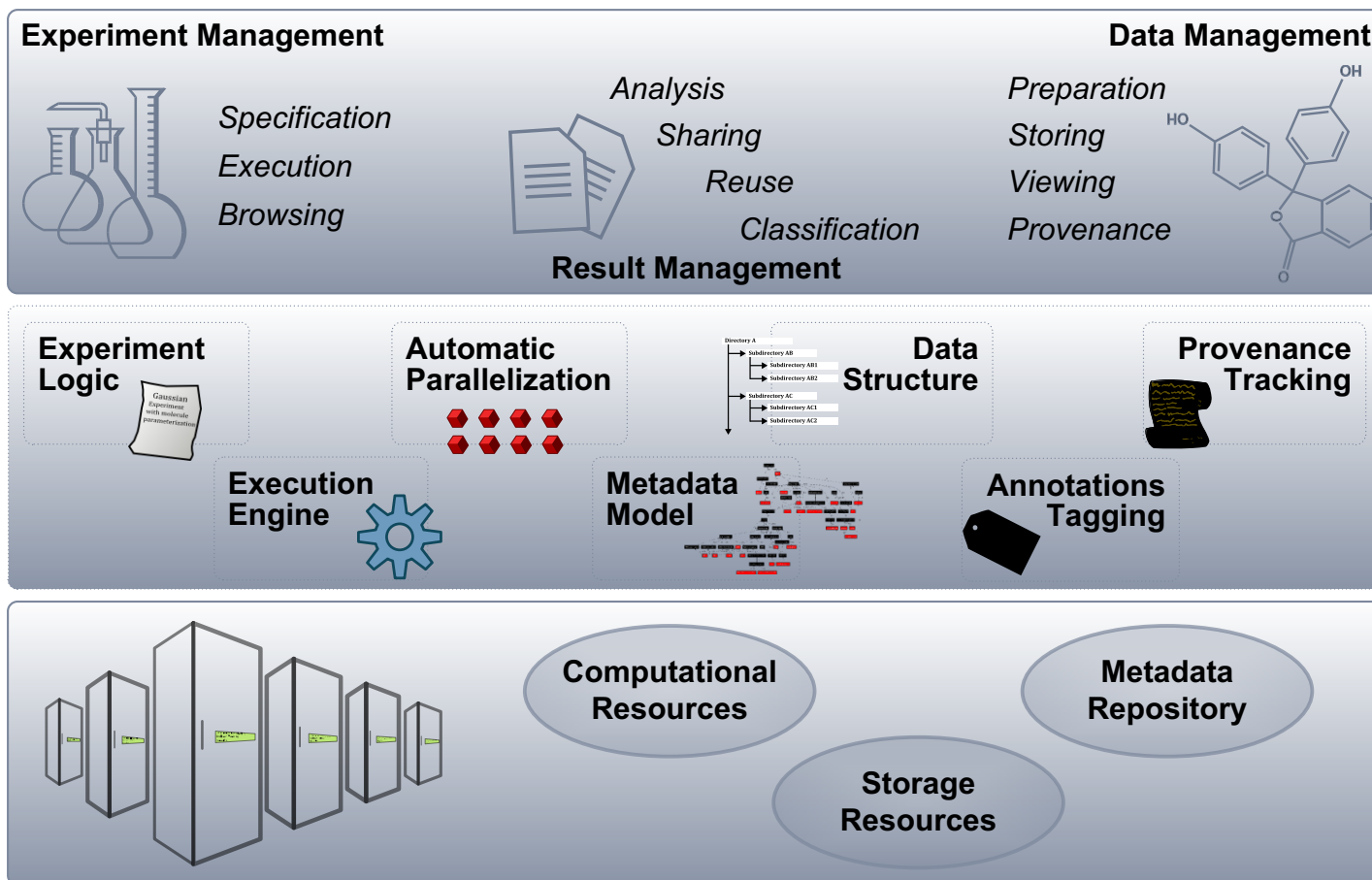
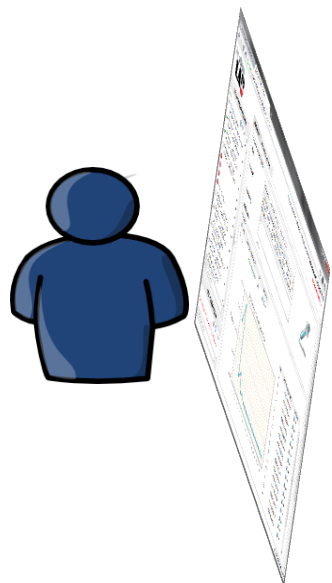
If you choose not to configure your proxy now, you can still access the portal and work with limited functionality. For this purpose, choose one of the options right panel below.

#### Actions

-  **Configure your proxy**
-  Create a new experiment:

<http://insilicolab.cyfronet.pl>

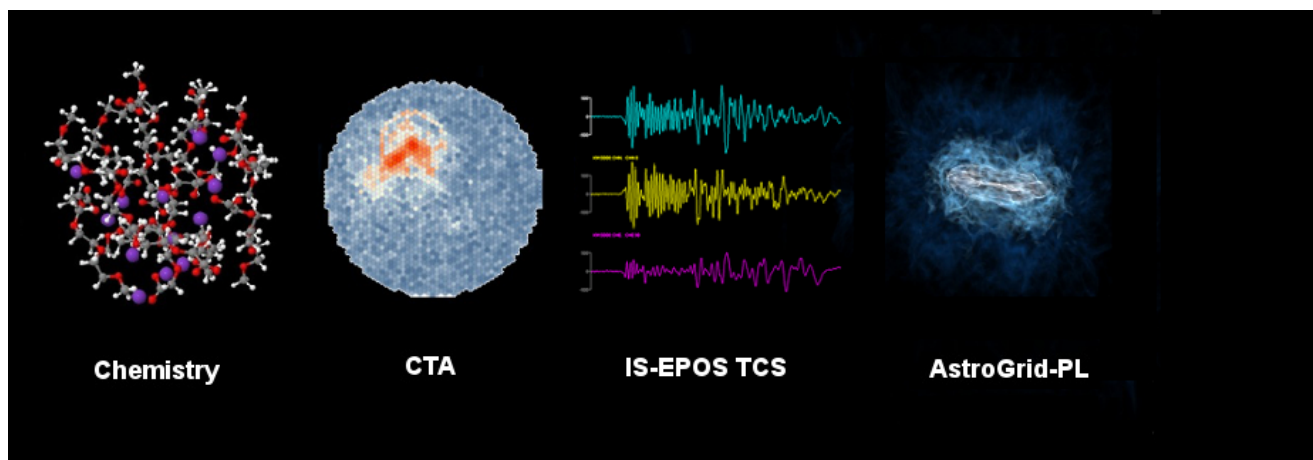
- Skrywa złożoność e-infrastruktury przed użytkownikiem





## Dostępne domeny badawcze

- Chemia kwantowa oraz biochemia
- Astrofizyka
  - obliczenia hydrodynamiczne metodami objętości skończonej
  - obliczenia dla konsorcjum Cherenkov Telescope Array (CTA)
- Geofizyka
  - środowisko dla badań dotyczących sejsmiki indukowanej (IS-EPOS)



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

- Pełne środowisko pracy w **przeglądarce internetowej**
- Pomaga w
  - przygotowaniu inputu do różnych obliczeń pakietami chemii kwantowej
  - przeprowadzaniu obliczeń na infrastrukturze gridowej
  - kontroli nad złożonymi lub powtarzalnymi obliczeniami
  - zbieraniu oraz archiwizacji plików wynikowych
  - analizie otrzymanych wyników (również z wielu obliczeń jednocześnie)
- **Możliwości**
  - automatyczne zrównoleglanie obliczeń
  - automatyczna wstępna analiza rezultatów
  - wizualizacja wyników (JMol)
  - możliwość łatwego powtórnego użycia plików wejściowych lub wynikowych



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

- Dwa typy eksperymentów
  - obliczenia z wykorzystaniem metod chemii kwantowej
  - Trajectory Sculptor

- Obliczenia metodami chemii kwantowej

- dostępne aplikacje

- Gaussian

- GAMESS

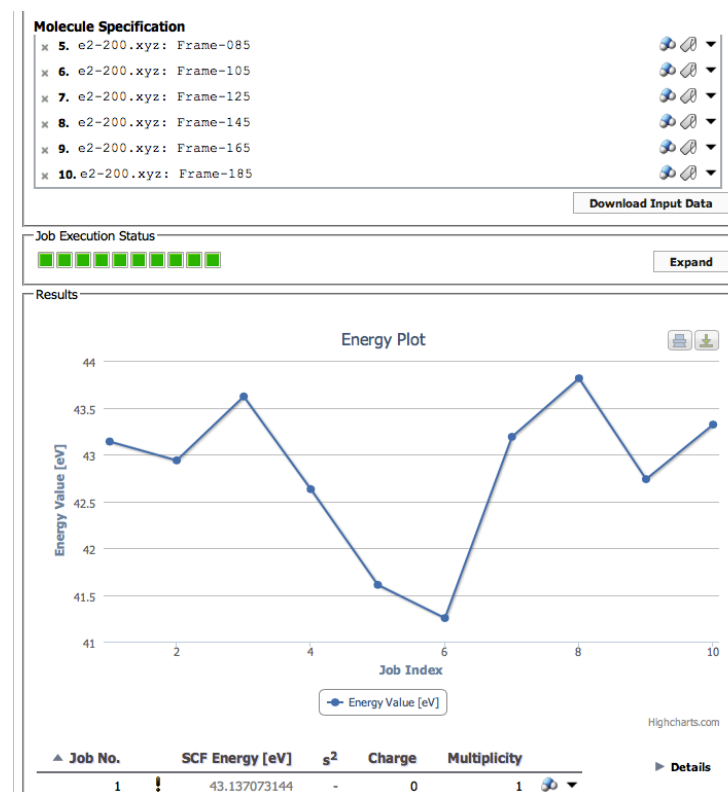
- TUROBMOLE

- Niedoida

- Terachem (wykorzystując GPGPU)

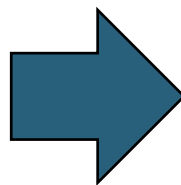
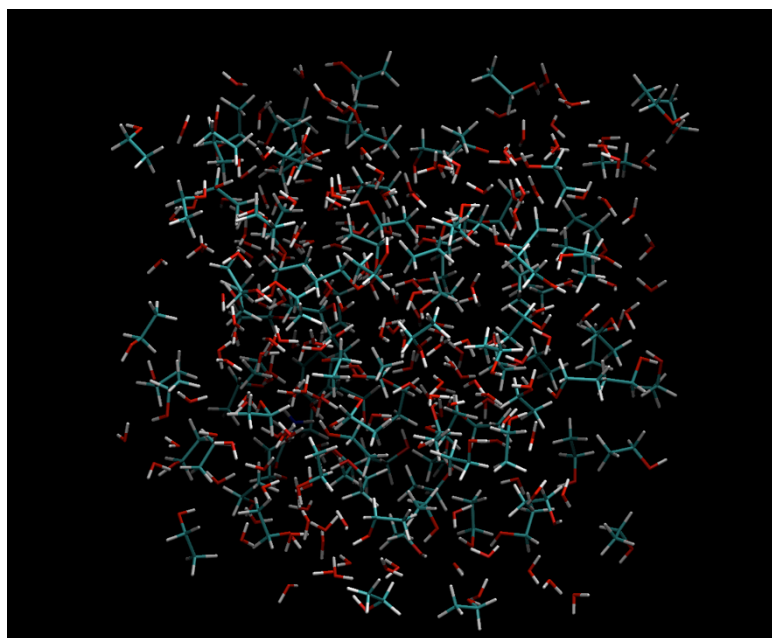
- automatyczna wstępna analiza wyników obliczeń

- możliwość równoczesnych obliczeń dla różnych geometrii w jednym eksperymencie



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

- **Trajectory Sculptor** – narzędzie do przetwarzania trajektorii wynikowych z obliczeń dynamiki molekularnej
  - automatyczna ekstrakcja istotnych dla użytkownika fragmentów struktur z trajektorii MD
  - automatyczne przycinanie ramek trajektorii wybranych przez użytkownika
  - wyniki eksperymentu mogą być użyte w obliczeniach wykorzystujących metody chemii kwantowej





## Co jest potrzebne by użyć InSilicolab?

- Certyfikat gridowy (standard X.509)
  - PEM and PKCS#12 (.p12) – oba formaty wspierane
- Uczestnictwo w wirtualnej organizacji (Virtual Organisation - VO)
  - dostępne VOs: gaussian, vo.plgrid.pl
- Pewna wiedza o obliczeniowej chemii kwantowej



- Certyfikat jest niezbędny do dostępu do infrastruktury gridowej, jest „dowodem osobistym” użytkownika i potwierdza jego tożsamość w usługach gridowych – zastępuje hasło
- Certyfikaty są wystawiane przez zaufane Centra Certyfikacji (ang. *Certification Authority, CA*)
- Certyfikaty zwykle ważne są **jeden rok**
- Zadania obliczeniowe posługują się certyfikatem krótko żyjącym (proxy)
  - możliwe jest jego automatyczne odnawianie



- Dla użytkowników PL-Gridu dostępne są dwa CA
  - Simple CA (<http://plgrid-sca.wcss.wroc.pl>)
  - Polish Grid CA (<https://plgrid-ca.pl>)
- Simple CA:
  - certyfikat uzyskuje się poprzez portal <https://portal.plgrid.pl/>
  - generowany na żądanie dla każdego użytkownika (automatycznie)
  - dostęp ograniczony do polskich zasobów
- PL-Grid CA
  - certyfikat uzyskuje się poprzez portal <https://plgrid-ca.pl>
  - użytkownik musi potwierdzić tożsamość w Urzędzie Rejestracji (RA)
  - umożliwia pracę na całości gridu w European Grid Initiative (EGI)

- Certyfikaty gridowe mogą być przechowywane w różnych formatach. Najbardziej rozpowszechnione to:
  - PKCS #12
    - certyfikat wraz z kluczem prywatnym znajduje się w jednym pliku binarnym zwykle o rozszerzeniu `.p12`
  - PEM
    - certyfikat stanowi para plików tekstowych:
      - klucz prywatny (zwykle `userkey.pem`)
      - plik certyfikatu (zwykle `usercert.pem`)
- Certyfikaty w formacie PEM używane są
  - większość oprogramowania pośredniczącego (często domyślny format)
- Certyfikaty w formacie PKCS #12 używane są przez
  - przeglądarki internetowe
  - większość oprogramowania pośredniczącego

## GUI

**Zakładki** (Tabs) - points to the 'Welcome' tab at the top left of the main workspace.

**Podręcznik użytkownika** (User manual) - points to the gear icon in the top right corner.

**Informacja o użytkowniku i zarządzanie proxy** (User information and proxy management) - points to the text 'You are logged in as Klemens Noga' in the top right.

**Utwórz nowy eksperyment** (Create new experiment) - points to the 'Create a new experiment:' section in the 'Actions' panel.

**Przestrzeń robocza** (Workspace) - points to the main content area of the portal.

**Eksperymenty użytkownika** (User experiments) - points to the list of experiments in the 'Your Experiments' sidebar.

**Katalog plików** (File catalogue) - points to the 'LFC Catalogue' sidebar.

**GUI** - points to the overall interface.

**© 2013 InSilicoLab v1.1** (bottom left) and **Report a problem** (bottom right)

## Przykładowy eksperyment

### Zakładki

You are logged in as **Klemens Noga**



#### Your Experiments

- Menu
- ✓ dye
- ✓ method2/basis2 // method1/basis1 test 2
- ✓ method2/basis2 // method1/basis1 test
- ✓ Opt/Freq test
- ✓ RDX ground state
- ✓ B3LYP/cc-pVDZ geometry optimization
- ✓ RDX ground state
- ✓ B3LYP/de2-SVP geometry optimization
- ✓ RDX ground state
- ✓ B3LYP/cc-pVDZ geometry optimization
- ✓ testing no of proc - 4
- ✓ testing no of proc
- ✓ RDX ground state
- ✓ MP2/de2-SVP geometry optimization
- ✓ RDX ground state
- ✓ MP2/de2-SVP geometry optimization
- ✓ RDX ground state
- ✓ MP2/de2-SVP geometry optimization

#### LFC Catalogue

- ~
- experiments

© 2013 InSilicoLab v1.1

Experiment **dye**

Started **2013-06-21** at 03:47:43  
Status **Completed**  
Identifier **1371779263636**  
LFC directory **/grid/vo.plgrid.pl/insilicolab/c.PL\_\_o.GRID\_\_o.UW\_\_cn.Klemens\_Noga/experiments/experiment-1371779263636**

Experiment Input Data

Load prepared input

**Title Section**  
semiempirical single point energy

**Link 0 Section**  
%mem=512mb

**Route Section**  
pm3

**Charge & Multiplicity**  
0 & 1

Additional Parameters

**Molecule Specification**

1.	e2-200.xyz: Frame-005
2.	e2-200.xyz: Frame-025
3.	e2-200.xyz: Frame-045
4.	e2-200.xyz: Frame-065
5.	e2-200.xyz: Frame-085
6.	e2-200.xyz: Frame-105

Job Execution Status

Results

Energy Plot

Frame	Energy Value [eV]
1	43.2
2	43.0
3	43.7
4	42.7
5	42.0
6	43.8

Dane wejściowe

Eksperymenty użytkownika

Status zadań obliczeniowych

Wyniki

Katalog plików

Report a problem

## Przygotowanie certyfikatu oraz utworzenie proxy

- Zaloguj się do usługi InSilicoLab for Chemistry (<http://insilicolab.chemia.plgrid.pl/>) wykorzystując OpenID
- Otwórz na portalu InSilicoLab for Chemistry zakładkę **Configure your proxy**
  - załaduj Twój certyfikat w formacie .p12
  - wybierz VO: vo.plgrid.pl
  - zaznacz, że chcesz korzystać z MyProxy (dla długich odnawianych proxy)
  - wpisz hasło do certyfikatu
  - naciśnij przycisk “Generate proxy”
- Jesteś gotowy do eksperymentów *in silico*!

<http://tinyurl.com/2016-chemia-uj>

## Obliczenia kwantowo-chemiczne z wykorzystaniem pakietu Gaussian

- Stwórz nowy „Quantum Chemistry experiment”
  - załaduj plik rdx.pm3.gjf
  - zobacz geometrię cząsteczki
  - wgraj inną konformację (i.e. rdx.aae.xyz or rdx.all.xyz)
  - sprawdź poprawność danych
  - uruchom eksperyment przyciskiem „Run”
  
- Po chwili
  - sprawdź, która z konformacji miała najniższą energię
  - zobacz optymalną geometrię cząsteczki
  - zobacz pełny log z obliczeń Gaussiana
  - użyj struktury o najniższej energii do optymalizacji geometrii przy użyciu metody B3LYP/cc-pVDZ



## Eksperyment Trajectory Sculptor

- Stwórz nowy „Trajectory Sculptor experiment”
  - załaduj trajektorię MD z pliku md.small.1-40
  - zobacz jedną z ramek wejściowych
  - znajdź cząsteczki w roztworze
    - atomy należące do cząsteczki rozpuszczonej to 1-38
    - są trzy typy cząsteczek rozpuszczalnika
      - acetonitryl (o sekwencji atomów CNCHHH)
      - aniony nadchloranowe (o sekwencji atomów ClOOO)
      - kationy litu (Li)
    - przejrzyj znalezione cząsteczki
  - zaproponuj warunki przycięcia ramki
    - możesz zastosować różne metryki dla różnych rozpuszczalników
    - by uzyskać strukturę bez ładunku można użyć metryki o zdefiniowanej ilości najbliższych cząsteczek (i.e. 20 cząsteczek acetonitrylu oraz po jednym z jonów; składnia: 20;1;1)
    - przejrzyj przyciętą ramkę

## Eksperyment Trajectory Sculptor – cd

- zdefiniuj zakres ramek które mają zostać przycięte (jest ich 40 w pliku z MD)
- użyj uzyskane przycięte ramki w eksperymencie QC (i.e. PM3 single point w pakiecie Gaussian)
- przejrzyj uzyskane wyniki
- użyj ponownie wybranych ramek stosując dokładniejszą metodę obliczeń

## Obliczenia kwantowo-chemiczne z wykorzystaniem pakietu Terachem

- Utwórz nowy eksperyment „Terachem”
  - załaduj plik z koordynatami cząsteczki np. rdx.eee.xyz
  - dobierz parametry obliczeń i ilość zaalokowanych kart GPGPU
  - uruchom eksperyment przyciskiem „Run”



Rejestracja: <https://portal.plgrid.pl>

[helpdesk@plgrid.pl](mailto:helpdesk@plgrid.pl)

+48 12 632 33 55 wew. 312