

IQmol



- - Opis
 - Službena dokumentacija
 - Lokalna instalacija
 - Podešavanje udaljenog izvođenja
 - Udaljeno izvođenje
 - Supek
 - Verzije
 - Napomene
 - Primjer korištenja

Opis

IQmol je računalno-kemijska aplikacija za vizualizaciju molekula, komplementarna aplikaciji [Q-Chem](#).

Službena dokumentacija

- [IQmol korisnički priručnik](#)

Lokalna instalacija



Ako imate IQmol instaliran na Vašem računalu, možete koristiti njegovo grafičko sučelje i putem njega **podnositi poslove na Supeku**.

IQmol možete **besplatno** preuzeti za Vašu platformu s poveznice <http://iqmol.org/downloads.html>

Nakon podnošenja posla, IQmol provjerava stanje posla te po završetku nudi opciju spremanja podataka nazad na Vaše lokalno računalo.

Podešavanje udaljenog izvođenja

Iz alatne trake odaberite "Calculation" -> "Edit Servers". Kliknite gumb "+" ("Add new server")

- "Connection": **SSH**
- "Server Name": **Supek**
- "Queue System": **PBS**
- "Host Address": **login-cpu.hpc.srce.hr**
- "Authentication": **Public Key**
- "User Name": *Vaše korisničko ime na Supeku*

Supek

Verzije

Verzija	Modul	Podrška	Supek	Padobran
2.14	scientific/iqmol/2.14	CPU	✓	✓

Napomene



IQmol je potrebno koristiti isključivo za **vizualizaciju**.



Kako bi se aplikacija uspješno pokrenula, potrebno je spojiti se na pristupni čvor uz prosljeđivanje X11.

U slučaju korištenja **Linuxa** ili **macOS-a**, koristite naredbu:

```
ssh -X -i ~/.ssh/id_rsa username@login-cpu.hpc.srce.hr
```

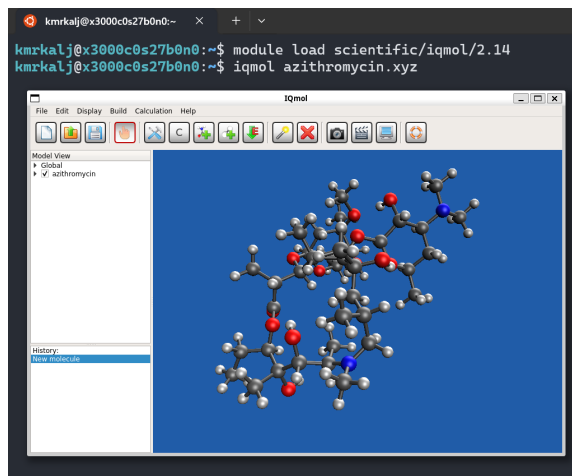
U slučaju korištenja **Windowsa**, potrebno je preuzeti aplikaciju **Xming** te je pokrenuti prije pokretanja **PutTY**-ja.

Unutar PuTTY-ja, potrebno je uključiti **X11 forwarding** (*Connection → SSH → X11, Enable X11 forwarding*).

Primjer korištenja

```
module load scientific/iqmol/2.14
```

```
iqmol azithromycin.xyz
```



- "Working Directory": *Željeni polazišni radni direktorij, u punoj putanji (npr. Vaš home direktorij)*

Kliknite na gumb "Configure SSH" te podesite putanje do "ssh datoteka" s Vašeg lokalnog računala, npr.:

- "Known Hosts": `\\wsl.localhost\Ubuntu-22.04\home\kmrkalj\sshknown_hosts`
- "Private Key": `\\wsl.localhost\Ubuntu-22.04\home\kmrkalj\sshid_rsa`
- "Public Key": `\\wsl.localhost\Ubuntu-22.04\home\kmrkalj\sshid_rsa.pub`

Kliknite na gumb "Configure PBS" te podesite opcije za PBS. Polja "Submit", "Query", "Kill", "Job File List" i "Queue Info" možete ostaviti izvornima.

Polje "Run File Template" možete prilagoditi po želji, npr.:

```
#PBS -q ${QUEUE}
#PBS -l select=1:ncpus=${NCPUS}:mem=${MEMORY}Mb

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/q-chem

qchem -nt ${NCPUS} ${JOB_NAME}.inp
```

Udaljeno izvođenje

Postavke Q-Chem simulacije, odnosno input datoteke Vaše molekule /strukture (tip računa, metoda, algoritam...) definirajte u poljima "Calculation" -> "Q-Chem Setup".

Ispod generirane input datoteke odaberite "Server": Supek te kliknete na gumb "Submit".

U sljedećem prozoru unesite ime radnog direktorija konkretnog posla (dotični će se kreirati), a idućem definirajte tražene resurse. Opciju "Scratch" možete zanemariti.

Odaberite "OK". Po završetku posla, dobit ćete opciju spremanja rezultata s klastera na računalo, odnosno u IQmol.

Stanje podnesenih poslova možete pratiti s "Calculation" -> "Job Monitor".