


# Instal·lacio de la Schrödinger Suite 2012

Aquest és el paquet de programes que inclou els programes Macromodel i Maestro, a més d'altres.

## Descàrrega del programa

Descarrego el programa ( 3,6 GiB!) del [lloc web de Schrödinger](#). Un cop descarregat, el descomprimeixo. Això crea la carpeta *Schrodinger\_Suite2012\_Linux-x86\_64\_NonCommercial* on, entre altres, hi ha,

- el fitxer amb les instruccions d'instal·lació,
- els scripts de comprovació del sistema (per exemple, platform), i
- el script d'instal·lació INSTALL.

## Instruccions breus

Aquests són els passos esmentats a la *Installation Guide. Schrödinger Suite 2012* per instal·lar els programes,

This is a summary of the installation process. For detailed instructions, see the page number provided in each step.

1. Check this guide for:
  - System requirements (page 5)
  - Disk space requirements (page 9)
  - Maestro requirements (page 9)
  - Product-specific installation information (page 11)
2. Mount the DVD (page 17) or download the software from the Schrödinger Support Center. If you download the software, extract the downloaded tar file: `tar xvf Schrodinger_Internet_Download.tar`
3. Run the platform script to verify that your machine meets the system requirements (page 18).
  - Run the INSTALL script to install the products (page 19).
  - Set the SCHRODINGER and DISPLAY environment variables (page 23).
  - Obtain a license for the products:
    - Obtain machine information (page 60).
    - Request a license (page 62).
    - Install the license (page 64).
4. Optional: Substitute run-time libraries (page 25).
5. Test the Maestro installation by typing `$SCHRODINGER/maestro` (page 23).










If jobs will be run on remote hosts:

1. Set up the hosts file (page 73).
2. Set up communication between hosts, if not already done (page 82).


3. Optional: Prepare for Batch Queue Submission (page 87).
4. Test the installation and communications (page 106).





# Comprovacions prèvies a la instal·lació

## System requirements

-  CPU, Memory, and Disk. En general el sistema compleix amb les especificacions recomanades.
-  *Scratch disk*. El disc actual té una velocitat de 7200 rpm, si féssim un ús intensiu de l'ordinador per càlculs caldria considerar la possibilitat d'instal·lar un disc addicional, potser d'estat sòlid (SSD), per millorar la velocitat del *scratch disk*.
-  Memòria. Per ara hi ha 6 GiB de memòria repartits en tres DIMM de 2 GiB instal·lats als bancs 0, 2 i 4 (comanda `lshw -class memory`). Segons quin sigui l'ús que fem de l'ordinador i la complexitat dels càlculs, caldrà ampliar la memòria per minimitzar l'ús de la memòria virtual en disc.
-  Targeta gràfica. Compleix amb les especificacions recomanades. Cal però, comprovar els controladors (drivers) i actualitzar-los si cal. Aquesta targeta no permet l'ús de CUDA amb aplicacions preparades per GPGPU.
- Programari,
  -  Perl version no earlier than 5.004 ("perl -version" diu *This is perl, v5.10.1 (\*) built for x86\_64-linux-gnu-thread-multi*).
  -  gunzip
  -  Python 3.0 (32-bit). Cal actualitzar la versió ("python -version" diu *Python 2.6.6*) disponible a Debian 6.0.5 (squeeze). Instal·lo els paquets *python3*, *python3-minimal* i *python3.1-minimal*; potser caldrà instal·lar altres paquets addicionals.
-  Targeta de xarxa
  -  Cal modificar la configuració de xarxa a estàtica per evitar problemes si la xarxa es penja. De totes formes, com que l'ordinador estarà a la xarxa interna del SeRMN, on aquesta és la configuració estàndard.

## GNU/Linux x86 64-bit executables








 La distribució Debian no és una de les que tenen suport tècnic. Tanmateix, per la seva proximitat i estreta relació amb la distribució Ubuntu, seguiré les recomanacions per aquesta distribució.

-  NFS file locking must be enabled. El paquet *nfs-common* està instal·lat i hauria de ser suficient. Si cal, es pot instal·lar el paquet *nfs-kernel-server*.
-  glibc version must be at least 2.5. La versió disponible és la 2.11.3-3.
-  On Ubuntu, the lsb subsystem and the mesa-utils must be installed. El paquet *mesa-utils* (v. 7.7.1-5) ja està instal·lat. Instal·lo el paquet *lsb-core* (v. 3.2-23.2squeeze1) i aquest arrossega i instal·la 34 paquets de programes addicionals necessaris per compilar codi font.
-  On Ubuntu, symbolic links to the the libssl and libcrypto libraries must be made because of

```
versioning differences (cd /usr/lib && ln -s libssl.so.0.9.8 libssl.so.6 && ln
-s libcrypto.so.0.9.8 libcrypto.so.6).
```

## Queueing Systems

Aquests són els gestors de cues amb què poden treballar els programes de la Schrödinger Suite. Indico quins paquets de Debian semblen correspondre al gestor de cues. En alguns casos la correspondència és clara, en altres caldrà comprovar-la.

-  PBS, including PBS Pro. El paquet *globus-gram-job-manager-setup-pbs* sembla correspondre's amb aquest gestor de cues.
-  Grid Engine, including SGE and GE. Hi ha disponibles els paquets *gridengine-common*, *gridengine-client*, *gridengine-exec*, *gridengine-master*, *gridengine-qmon* i també hi ha el paquet *globus-gram-job-manager-setup-sge* que està relacionat.
-  LSF. A Debian hi ha disponible el paquet *globus-gram-job-manager-setup-lsf* que sembla estar relacionat amb aquest gestor de cues.
-  Condor. A Debian hi ha disponible el paquet *globus-gram-job-manager-setup-condor* que sembla estar relacionat amb aquest gestor de cues.
-  SLURM. Hi ha disponible el paquet *slurm* i altres paquets addicionals relacionats amb ell.
-  Torque. A Debian hi ha disponibles els paquets *torque-common*, *torque-mom*, *torque-pam*, i *torque-server*.
-  LoadLeveler. No sembla estar disponible a Debian.

Requisits especials pels sistemes de gestió de cues:

- SGE version must be no earlier than 6.0u8. From 6.2u3 on, a patch or SGI reconfiguration is required if SGE preemption is used.

## Espai de disc per la instal·lació







Tenint present els requisits, `<blockquote> Disk space requirements for a full installation of Schrödinger software, including the documentation, are given in Table 2.1. These values do not include the PDB or BLAST databases which require 14 GB and 13 GB. The Pfam database (included) requires less than 1 GB. </blockquote> Installation Guide. Schrödinger Suite 2012>`

L'espai de disc disponible és més del necessari, ja que les bases de dades es poden instal·lar la partició */home*,

```
# df -h
Filesystem      Size  Used Avail Use% Mounted on
...
/dev/sda8       827G   7.6G   777G   1% /home
/dev/sda7       19G    173M   18G    1% /opt
```

## Maestro 9.3 Requirements

Aquest són els requisits específics del programa Maestro v. 9.3,

-  Targeta gràfica, preferiblement amb OpenGL
-  An X11R6 X server on any machine to which Maestro is displayed, compatible with XFree86 4.3.0. A Debian, com a molt d'altres distribucions, XFree86 ha estat substituït pel servidor X de XOrg. La versió disponible és la v. 1:7.5+8+squeeze1 procedent de Debian Backports.
-  X servers must include the GLX OpenGL extension, and OpenGL must be enabled. L'extensió GLX OpenGL i OpenGL estan instal·lats i en funcionament.
-  fontconfig, in a version compatible with 2.2.1-13. La versió instal·lada és la 2.8.0-2.1.
-  Firefox web browser for display of online help. Other browsers may be used, but are not guaranteed to work. La versió instal·lada actualment és la 13.0, però sota el nom *Iceweasel*, tanmateix la comanda `firefox` és reconeguda i obre aquest Firefox rebatejat.
-  PDF reader. For Adobe Reader a version no earlier than 7.0.5 is recommended. La versió d'Acrobat Reader disponible és la 9.5.1. A més, hi ha altres visors de PDF disponibles.

## Notes sobres els productes

Per ara em salto aquesta secció (2.4 *Product Notes*), ja que caldrà veure primer quins programes s'instal·len, i perquè molts dels comentarise semblen fer referència a instal·lacions en clusters d'ordinadors, i aquest no és el nostre cas.

## Verifying System Compliance

Faig servir la comanda `platform` per comprovar els requisits del sistema,

```
# ./platform
```

```
This looks like a Linux system (glibc 2.11.3), running on x86_64 hardware.
```

```
The recommended version for this system is: Linux-x86_64
```

```
These other versions should also work:      Linux-x86
```

```
# ./platform -s
```

```
System requirements: perl
```

```
Your perl installation is acceptable.
```

```
# ./platform -l
```

```
OS:          LINUX 3.2.0-0.bpo.2-amd64
```

```
Distribution: Debian GNU/Linux 6.0.5 (squeeze)
```

```
CPU:         x86_64
```

```
Processor:   Intel(R) Xeon(R) CPU W3550 @ 3.07GHz (1596 MHz)
```

```
Processors: 4
Memory: 6111600 kB
Swap: 11717628 kB
perl: 5.010
glibc: 2.11.3
```

# Instal·lació de la Schrödinger Suite

 La instal·lació la faig com a usuari root (sudo -s).

## Scratch disk

Abans de començar, creo la carpeta `/home/scratch` per fer-la servir com *scratch disk* ja que les carpetes que fa servir el programa per defecte no existeixen, i, si es vol fer servir una carpeta alternatia, el programa d'instal·lació no la crea.

## ./INSTALL

Aquesta és la sessió d'instal·lació del programa amb la comanda “./INSTALL”

### Inici

La primera pantalla ens proporciona unes breus instruccions d'ús del programa d'instal·lació,

```
root@cie-48-184:/home/sermnadmin/Downloads/Schrodinger_Suite2012_Linux-
x86_64_NonCommercial# ./INSTALL
```

#### Schrodinger Software Installer

```
Please respond to each question by entering the appropriate response
or pressing ENTER to accept the default (shown in parentheses).
You will be given a chance to review all of your installation choices
before any files are actually installed.
You can quit the installation at any time by pressing CTRL+C.
```

```
For more information, see the Installation Guide, which is in the file
"install_guide.pdf", in the same directory as this INSTALL script.
```

```
Proceed to Schrodinger Suite2012 installation...
```

```
[Press ENTER to continue]
```

## On instal·lar el programa?

A la pantalla següent, se'ns demana ón instal·lar el programa. Si el directori no existeix, ens pregunta si el volem crear. A GNU/Linux, el [Filesystem Hierarchy Standard](#) estableix que les *Optional application software packages* s'han d'instal·lar a la carpeta */opt*, que és la proposada pel programa d'instal·lació,

### SCHRODINGER directory

Select the directory where you want to install this software.

This directory will hold your license file, a script to launch each installed product, a subdirectory for each release of each product, and any documentation that is installed. To run the software, you must set the SCHRODINGER environment variable to this directory.

It is necessary to install the software for each major release in a separate SCHRODINGER directory. If you are installing additional products for a release, or upgrading a product to a new version with the same major version number, you can install into the same SCHRODINGER as the existing software from that release, but software from different major releases should never be mixed.

SCHRODINGER directory: (/opt/schrodinger)

That directory doesn't exist yet. Can I create it? [y/n] (y)

Your SCHRODINGER directory will be /opt/schrodinger.

OK? [y/n] (y) y

## Hardware/software platform

El programa d'instal·lació comprova en quin tipus de sistema s'està executant, i recomana la versió que millor s'ajusta a l'arquitectura i sistema operatiu de l'ordinador,

### 2) Hardware/software platform

This looks like a Linux system (glibc 2.11.3), running on x86\_64 hardware.

The recommended version for this system is: Linux-x86\_64

These other versions should also work: Linux-x86

You can install products for any platform you like, but only the versions listed above will run on the current machine. Product modules that are usable on the current machine will be marked as 'compatible' on the module selection screen, which will be displayed next.

```
For information on which modules to select for each Schrodinger
product, see the Schrodinger Product Installation Guide.

[ Now compiling product installation data... ]

[Press ENTER to continue]
```

Selecció de mòduls

En aquest apartat, el programa d'instal·lació ens permet triar els mòduls que volem instal·lar: tots, cap o alguns. En el nostre cas, només instal·lo els programes pels quals tenim llicència,

```
3) Module selection

You now need to select which modules to install,
or you can choose to install all available modules.

Install all available modules? [y/n] (y) n
The following modules are available for installation:
  product      version  platform      status      compatible  action
  -----
1) bioluminate  1.0 r023  Linux-x86_64  NEW         yes
2) hmmerpfamdb          <database>  NEW         yes
3) blastwebdb          <database>  NEW         yes
4) alldocs      1.2 r028  <docs>        NEW         yes
5) canvas      1.5 r023  Linux-x86_64  NEW         yes
6) mcpro       2.9 r023  Linux-x86_64  NEW         yes
7) psp        3.1 r024  Linux-x86_64  NEW         yes
8) blast              Linux-x86_64  NEW         yes
9) hmmerpfam          Linux-x86_64  NEW         yes
10) impact      5.8 r023  Linux-x86_64  NEW         yes
11) jaguar      7.9 r023  Linux-x86_64  NEW         yes
12) macromodel  9.9 r223  Linux-x86_64  NEW         yes
13) maestro     9.3 r024  Linux-x86_64  NEW         yes
14) qikprop     3.5 r023  Linux-x86_64  NEW         yes
15) combiglide  2.8 r023  Linux-x86_64  NEW         yes
16) phase      3.4 r023  Linux-x86_64  NEW         yes
17) epik       2.3 r023  Linux-x86_64  NEW         yes
18) knime      1.5 r023  Linux-x86_64  NEW         yes

To select modules for installation, enter the module numbers at
the prompt. Enter multiple numbers as a range ("2-5") or separated
by commas or spaces ("2,3,4,5"). To clear the selection, enter "none".
To select all modules, enter "all".

Modules selected for installation will be marked 'INSTALL'
in the rightmost column of the modules table.

Modules to install: [1-18,all,none]  4,12,13,18
```

Després d'entrar la llista de mòduls a triats, el programa d'instal·lació torna a mostrar la mateixa pantalla, però amb els mòduls seleccionats ara estan identificats amb "INSTALL" a la columna *action*. Això permet corregir qualsevol error que hàgim comès. Si estem d'acord amb la tria mostrada en pantalla, només cal prémer **ReTURN** per confirmar-la i passar a la pàgina següent,

### 3) Module selection

The following modules are available for installation:

product	version	platform	status	compatible	action
-----	-----	-----	-----	-----	-----
1) bioluminate	1.0 r023	Linux-x86_64	NEW	yes	
2) hmmerpfamdb		<database>	NEW	yes	
3) blastwebdb		<database>	NEW	yes	
4) alldocs	1.2 r028	<docs>	NEW	yes	INSTALL
5) canvas	1.5 r023	Linux-x86_64	NEW	yes	
6) mcpro	2.9 r023	Linux-x86_64	NEW	yes	
7) psp	3.1 r024	Linux-x86_64	NEW	yes	
8) blast		Linux-x86_64	NEW	yes	
9) hmmerpfam		Linux-x86_64	NEW	yes	
10) impact	5.8 r023	Linux-x86_64	NEW	yes	
11) jaguar	7.9 r023	Linux-x86_64	NEW	yes	
12) macromodel	9.9 r223	Linux-x86_64	NEW	yes	INSTALL
13) maestro	9.3 r024	Linux-x86_64	NEW	yes	INSTALL
14) qikprop	3.5 r023	Linux-x86_64	NEW	yes	
15) combiglide	2.8 r023	Linux-x86_64	NEW	yes	
16) phase	3.4 r023	Linux-x86_64	NEW	yes	
17) epik	2.3 r023	Linux-x86_64	NEW	yes	
18) knime	1.5 r023	Linux-x86_64	NEW	yes	INSTALL

To select modules for installation, enter the module numbers at the prompt. Enter multiple numbers as a range ("2-5") or separated by commas or spaces ("2,3,4,5"). To clear the selection, enter "none". To select all modules, enter "all".

Modules selected for installation will be marked 'INSTALL' in the rightmost column of the modules table.

Press ENTER to confirm the selections shown above and proceed to the next step, or select additional modules by entering the module numbers.

Modules to install: [1-18,all,none] [Enter]

## Directorí "Scratch"

Aquest és el directori que hem creat més amunt i que està a disposició dels programes de càlcul per guardar fitxers temporals,

### \*) Scratch directory



Most Schrodinger programs create temporary job directories for scratch files. To get the best performance from these programs, specify a directory where these temporary directories can be created.

Ideally, the scratch directory should be on a fast, local disk drive. Many sites provide a special local /scratch partition for such purposes. There should be at least 2GB of space available in the scratch directory.

This installer saves the location of the scratch directory as a tmpdir setting in the hosts file, schrodinger.hosts, which is in your

SCHRODINGER

directory. If you don't already have a tmpdir setting in this file, or if you don't have a schrodinger.hosts file, the installer creates them for you.

The hosts file must contain an entry for each machine on which jobs will be

run, specifying where Schrodinger software is installed and which scratch directory should be used on that machine.

The scratch directory is not used until someone runs a job. If you cannot identify an appropriate directory now, you can edit the hosts file and add

a tmpdir setting later. The scratch directory can be specified at runtime by setting the SCHRODINGER\_TMPDIR environment variable. See the Schrodinger

Product Installation Guide and the product manual for more information.

Scratch directory? (/scratch) /home/scratch

## Resum de les opcions d'instal·lació

Aquesta pantalla resumeix els mòduls que s'instal·laran i ens demana que confirmem la tria,

\*) Installation summary

Your installation choices were:

SCHRODINGER directory: /opt/schrodinger  
Scratch directory: /home/scratch

product	version	platform	status	compatible	action
alldocs	1.2 r028	<docs>	NEW	yes	INSTALL
macromodel	9.9 r223	Linux-x86_64	NEW	yes	INSTALL
maestro	9.3 r024	Linux-x86_64	NEW	yes	INSTALL
knime	1.5 r023	Linux-x86_64	NEW	yes	INSTALL
mmshare	2.1 r023	Linux-x86_64	NEW	yes	INSTALL

Note: The mmshare module provides common resources for all products. It is installed automatically when necessary.

Are these choices correct? [y/n] ( ) y

[ Verifying the integrity of the selected installer files... ]

## Fitxer 'schrodinger.host'

El pas següent és comprovar el contingut del fitxer *schrodinger.host* i corregir-lo si cal. En el nostre cas, com que només està previst que fem servir el programa l'ordinador on l'estem instal·lant, els paràmetres per defecte ja s'ajusten a la configuració final,

### \*) Configuring your schrodinger.host file

Finally, to be able to submit jobs to remote machines, or to a batch queue, you will need to configure the "hosts file",  
\$SCHRODINGER/schrodinger.hosts

following the instructions in section 6.1 of the Installation Guide. The entries in this file correspond to individual remote hosts or batch queues. Each entry can be as simple as the name of a remote machine; it can also specify an alternate software installation or scratch directory to use on that machine. Batch queue entries must specify the batch system used and any special arguments that need to be given when a job is submitted to the queue.

After you've configured your hosts file, please remember to

```
*****  
**    CHECK YOUR INSTALLATION!    **  
*****
```

The 'installation\_check' script will check the hosts file for common errors and run a quick test job for each entry. To run it, execute the following command, after first making sure the environment variable SCHRODINGER is set to /opt/schrodinger :

```
$SCHRODINGER/installation_check
```

We strongly recommend that you run this script after making changes to your hosts file.

[Press ENTER to continue]

La configuració emmagatzemada al fitxer */opt/schrodinger/schrodinger.hosts* és,

```
# Schrodinger hosts file  
#  
# The hosts file consists of a series of entries describing each  
# 'host' (machine) on which jobs can be run.  
#
```

```
# [...]
#
# If you need create a personalized version, copy this file to your
# ~/.schrodinger directory or to the job directory and modify that copy.
#
#####
# Note: The 'localhost' entry is special. It is used for jobs that
#       are run without specifying a host. Also, settings made in the
#       'localhost' entry are implicitly included in every other host
#       entry as well, so common settings (like 'schrodinger:') should
#       be made there.
#####

#
name:      localhost
schrodinger: /opt/schrodinger
tmpdir:    /home/scratch
```

Els paràmetres que potser caldrà modificar en funció de quin ús fem del programa són,

- name - si s'envien *jobs* des d'altres ordinadors caldrà posar el nom real de l'ordinador (el definitiu a la xarxa interna del SeRMN).
- processors - a les instruccions d'instal·lació no queda clar si fa referència al nombre de CPU o al nombre de cores dins una CPU. Per ara deixo el valor per defecte.

## Licensing

En aquesta pantalla apareix la informació necessària (machine name, host id) per sol·licitar la llicència.

### \*) Licensing

You will need one or more licenses before you can run the software you have just installed.

Please note the following information, which you will need in order to generate a license key:

Machine name: cie-48-184.uab.es

Host ID: 082e5f1dee86

If you are not performing this installation on your license server, you will need the output of:

```
$SCHRODINGER/machid -hostid
```

from your license server instead of the output above.

Then, visit the following web page for instructions on obtaining your license:

```
http://www.schrodinger.com/licensing  
[Press ENTER to continue]
```

## Finalment... la instal·lació

Després de prémer el botó **ENTER** a la pantalla anterior, comença el llarg procés d'instal·lar tots els programes... i mig segon després ens diu que ja ha acabat:

```
***** Schrodinger software installation is complete. *****  
root@cie-48-184:/home/sermnadmin/Downloads/Schrodinger_Suite2012_Linux-  
x86_64_NonCommercial#
```

Per ara, l'únic que podem fer és esperar que ens enviïn el fitxer de llicències. Llavors el podrem instal·lar i comprovar el funcionament dels programes instal·lats.

## Espai de disc ocupat

Un cop finalitzada la instal·lació, el programa ocupa ocupa 3,6 GiB (carpeta */opt/schrodinger*), que es reparteixen majoritàriament entre,

- 217 MiB ./docs
- 1240 MiB ./knime-v15023
- 359 MiB ./macromodel-v99223
- 252 MiB ./maestro-v93024
- 1585 MiB ./mmshare-v21023

## Configuració

El pas següent és configurar el sistema i els comptes dels usuaris per tal que puguin cridar i executar correctament els programes instal·lats.

## Gestor de cues

Això no és immediat, però si algun dia féssim servir molt i molt el Macromodel i altres programes de càlcul, no tindríem més remei que emprar un gestor de cues (veure "[Queueing systems](#)" més amunt) per organitzar les peticions de càlculs.

Mentre arriba aquest dia, aquesta és una recopilació d'enllaços d'interés per familiaritzar-se amb els gestors de cues. Per ara, no segueixen cap ordre.

- [Using a Scheduler and Queue](#) i les pàgines a què enllaça.
  - El lloc web [Debian Clusters for Education and Research](#) on es troba la pàgina anterior conté altre informació d'interès.

- [NeuroDebian](#) provides a turnkey software platform for neuroscience that is created by integrating research tools with the Debian operating system. If you are using such software on Debian or its derivatives, such as Ubuntu, chances are that you are already using NeuroDebian.
  - [gridengine-client](#) – Utilities for Grid Engine queue management.
- [Scheduling \(computing\)](#)
- [Job scheduler](#)
  - [TORQUE Resource Manager](#)
  - [Simple Linux Utility for Resource Management](#)
  - [Condor High-Throughput Computing System](#)
  - [Portable Batch System](#)
  - [Platform LSF](#)
  - [Oracle Grid Engine](#), anteriorment *Sun Grid Engine (SGE)*.

## Debian for chemists

Mentre buscava enllaços per l'apartat anterior, he començat a trobar d'altres sobre *Debian per químics* i, per mandra d'obrir una pàgina nova, els he acabat recopilant en aquesta pàgina, però aquesta és una situació transitòria 😊

- [DebiChem](#), a blend of Debian for chemists.
  - [List of Tasks making DebiChem](#).
- [Debian Med](#) is a “Debian Pure Blend” with the aim to develop Debian into an operating system that is particularly well fit for the requirements for medical practice and biomedical research. The goal of Debian Med is a complete free and open system for all tasks in medical care and research.
- [DebianScience](#)
  - [List of Tasks making DebianScience](#).
  - [Chemistry task at DebianScience](#).
  - ...

From:  
<https://sermn.uab.cat/wiki/> - **SeRMN Wiki**

Permanent link:  
[https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp\\_z400\\_macromodel\\_macromodel&rev=1339511191](https://sermn.uab.cat/wiki/doku.php?id=informatica:hp_z400_macromodel_macromodel&rev=1339511191)

Last update: **2012/06/12 16:26**

