Биомедицинская химия, 2004, том 50, приложение №1, с.127-132

УДК 539.19:681.142.9
©Коллектив авторов

WEBQC: ВЕБ-ИНТЕРФЕЙС ДЛЯ ПРОГРАММ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

А.А. Московский, В.В. Вановский, Д.А. Фирсов, А.Н. Асратян, А.В. Немухин

МГУ, Химический факультет, 119899 г. Москва., Ленинские горы; тел. 939-48-40;
эл. почта: moskov@lcc.chem.msu.ru

Последние десятилетия наблюдается постоянный рост производительности вычислительной техники, в частности, экспоненциальный рост производительности процессоров. В молекулярном моделировании такой рост делает доступным решение всё более сложных задач более широким кругом исследователей, в том числе и не занимающихся профессионально молекулярным моделированием. В то же время, пользовательский интерфейс большинства пакетов молекулярного моделирования и квантово-химических расчётов ориентирован на исследователей, профессионально специализирующихся в данной области.

Разработанный нами веб-интерфейс призван, в первую очередь, обеспечить нужды "непрофессиональных" пользователей квантово-химических программ. Система предоставляет возможность использовать единый графический интерфейс пользователя для доступа к различным пакетам молекулярного моделирования. Визуализация трехмерных геометрических конфигураций осуществляется при помощи оригинального Java-апплета. Подключение новых пакетов к интерфейсу осуществляется при помощи изменения конфигурации пакета (XML-документов). В настоящее время поддерживаются квантовохимические пакеты PC GAMESS, Dalton.

Программный пакет может быть использован для организации удалённого доступа к вычислительным ресурсам, в образовании и для совместной работы в географически удалённых исследовательских коллективах.

Ключевые слова: молекулярное моделирование, квантовая химия, веб-интерфейс, XML.

ВВЕДЕНИЕ. В последние десятилетия наблюдается постоянный рост производительности вычислительной техники. В молекулярном моделировании и, в частности, в квантовой химии такой рост делает возможным решение всё более сложных задач более широким кругом исследователей, в том числе и не занимающихся профессионально молекулярным моделированием. Квантово-химические расчёты во многих случаях помогают получить ценную информацию о геометрических конфигурациях молекул, спектрах и предполагаемых механизмах реакций. В то же время, пользовательский интерфейс многих пакетов молекулярного моделирования и квантово-химических расчётов ориентирован на профессиональных исследователей в данной области.

Известно множество программных продуктов, как коммерческих, так и свободно распространяемых, упрощающих проведение расчётов методами молекулярного моделирования, предоставляя возможности визуализации, а также графические и веб-интерфейсы. К сожалению, объём данной работы не позволяет сколь-либо подробно останавливаться на обсуждении сравнительных характеристик данных систем. Перечислим лишь некоторые из проектов, аналогичных WebQC: Web MO [1], Grid GAMESS [2], Net Laboratory [3].

Описываемый в данной работе веб-интерфейс призван, в первую очередь, обеспечить нужды "непрофессиональных" пользователей квантово-химических программ. По нашему мнению, данной категории пользователей необходимы такие методы расчёта поверхности потенциальной энергии, которые не требуют знания специфических особенностей применения метода или деталей его вычислительной процедуры, а именно:

· Метод самосогласованного поля (ССП)
· Теория возмущений Мёллера-Плессе 2-го порядка (МП2).
· Метод функционала плотности.

· Метод молекулярной механики.

Система WebQC предоставляет возможность использовать единый графический интерфейс пользователя для доступа к различным пакетам молекулярного моделирования, что позволяет сократить время на обучение при использовании нового метода моделирования.

Другой отличительной чертой системы WebQC призвана стать возможность лёгкой интеграции новых квантово-химических пакетов с использованием технологий XML.

МЕТОДИКА. Система WebQC написана на языке Java, с использованием технологий Java Servlets и JSP [4]. В жизненном цикле большинства широко используемых программных систем, основная доля усилий программистов тратится на внесение изменений и исправлений в уже написанный код. В связи с этим мы предприняли ряд мер, которые призваны облегчить развитие программной системы: разработка системы ведется по модели "водопада", были выделены фазы составления требований, проектирования, кодирования и тестирования, а также был принят стандарт для оформления исходных текстов программ, для улучшения их читаемости.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ.

Возможности системы.

Работа в Web QC организована следующим образом. После ввода имени учетной записи и пароля пользователь попадает на главную страницу (рисунок 1). Для проведения расчёта сначала необходимо "создать молекулу" (ссылка New Molecule). При создании молекул, пользователь имеет возможность просматривать 3-х мерную модель системы при помощи Java-апплета (рис. 3).

Рисунок 1.
Главная страница системы

Затем, пользователь должен создать задачу, указав метод, цель расчёта (расчёт энергии в точке, оптимизация геометрических параметров или др.) (рис.2). Также необходимо указать параметры метода (например, точность и максимальное число итераций в методе ССП, базис атомных орбиталей и т.д.) и, наконец - объект исследования, то есть, молекулу (рисунок 4). Предусмотрена возможность сохранить однажды заданный набор параметров метода как "методику" для последующего применения в расчётах для других молекул.

После создания задача помещается в очередь на выполнение, где ожидает высвобождения вычислительных ресурсов - выполнена интеграция с системой очередей Open PBS [5]. OpenPBS способна распределять задачи на несколько доступных компьютеров, в том числе и такие задачи, для которых требуется распараллелить вычисления. Пользователь способен просматривать состояние задачи, а также прервать задачу.

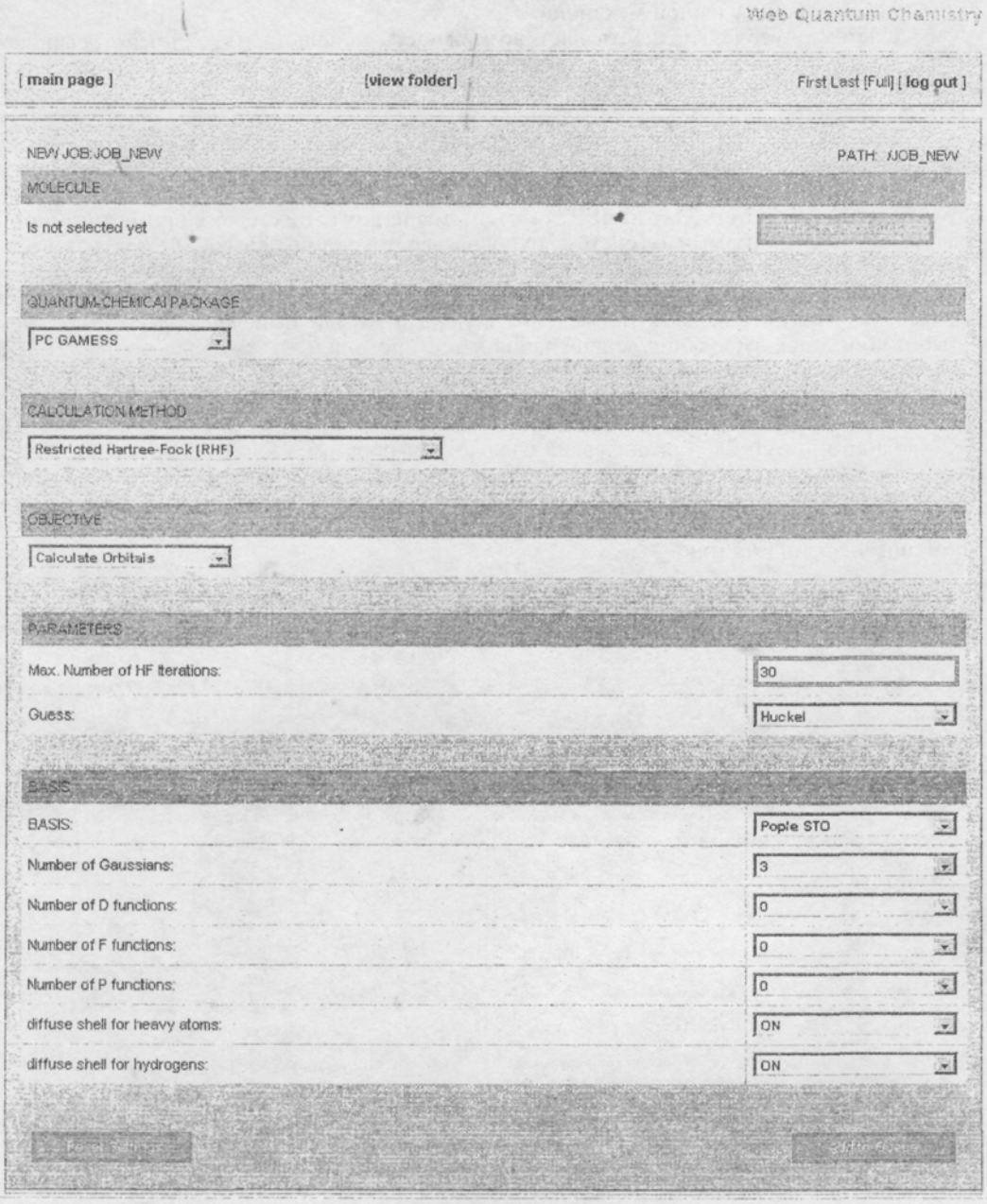

Рисунок 2.
Создание новой задачи

После окончания расчёта, задача видна пользователю как "завершившаяся", на странице представлены результаты вычислений (рисунок 6). Результаты включают в себя также и геометрические конфигурации молекулы, которые визуализируются при помощи того же апплета (рисунок 4), который используется при создании новой молекулы. Этот апплет позволяет просматривать несколько типов моделей геометрической конфигурации (шары, шары и связи, линии и т.д.), изменять расстояние, вращать модель, двигать отдельные атомы относительно всей молекулы. В то же время, размер файла, загружаемого вместе со страницей, невелик - всего около 30 килобайт. Следует отметить, что размер файлов аналогичных апплетов составляет около 100 КБ.

На случай, если предоставленных в веб-интерфейсе данных оказалось недостаточно, система позволяет загрузить на локальную машину пользователя и исследовать выходные файлы использованной квантовохимической программы.

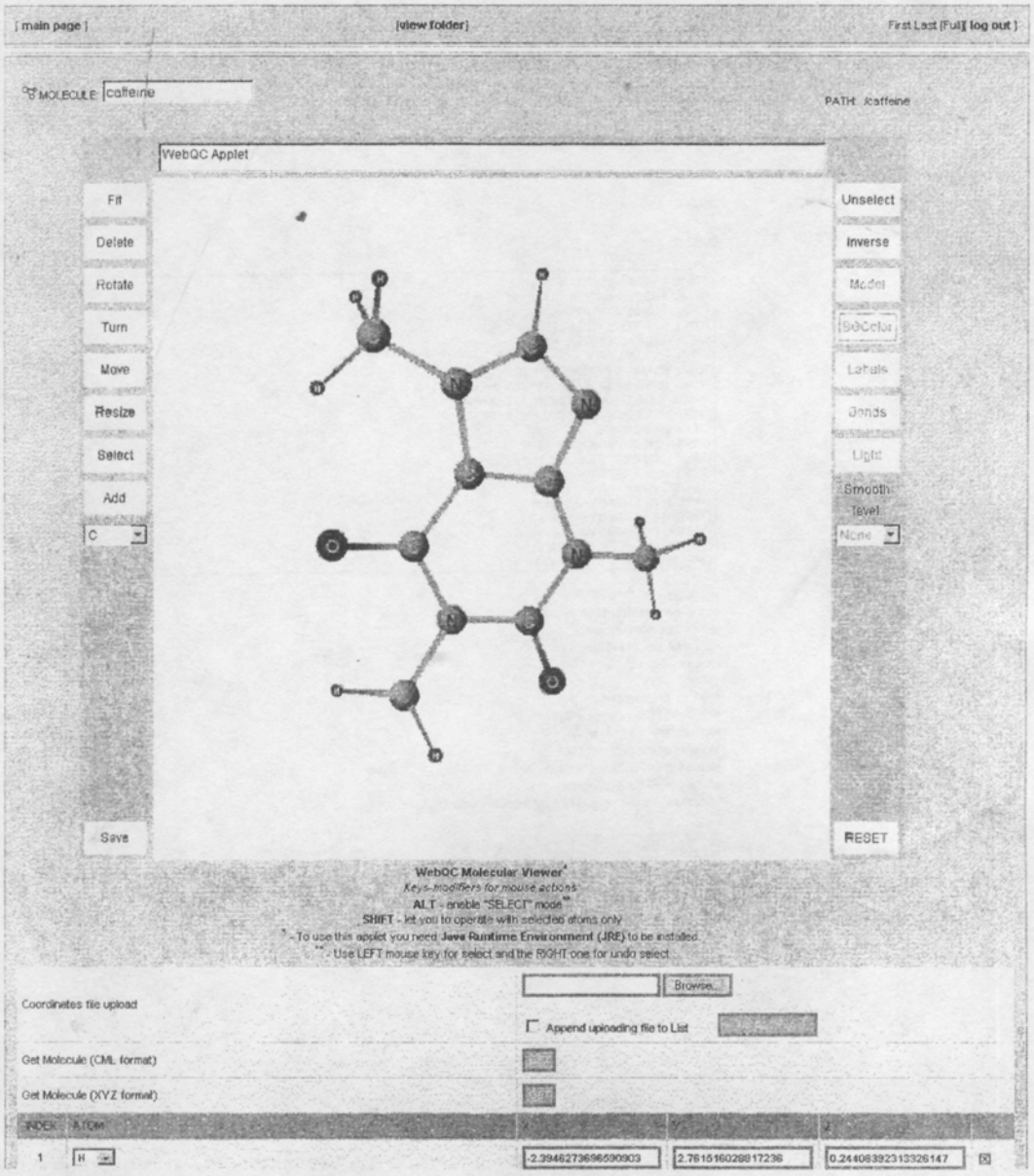

Рисунок 3.
Просмотр модели молекулы в веб-интерфейсе

Другими возможностями системы WebQC являются структурирование хранимой информации по "папкам" и обмен информацией между пользователями - через механизм "друзей".

Папки в системе полностью аналогичны папкам на локальном компьютере. Они могут содержать объекты системы - молекулы, методики расчёта, задачи. Пользователь имеет возможность перемещать объекты между папками, помещая их в буфер обмена.

Возможности обмена информацией между пользователями пока не полностью разработаны. Пользователь имеет возможность предоставить доступ ко всем своим данным одному или нескольким "друзьям". При этом для каждого из "друзей" пользователя задаётся уровень доступа - "только чтение" или "редактирование". Пользователи имеют возможность просматривать данные "дружащих-с-ними" пользователей в таком же интерфейсе, как и свои данные.

Особенности текущей реализации системы.

В качестве сервера для генерации динамических HTML документов используется Tomcat 4.1. Данные хранятся в системе в виде файлов в формате XML, в частности, формат CML использован для хранения геометрических конфигураций молекул.

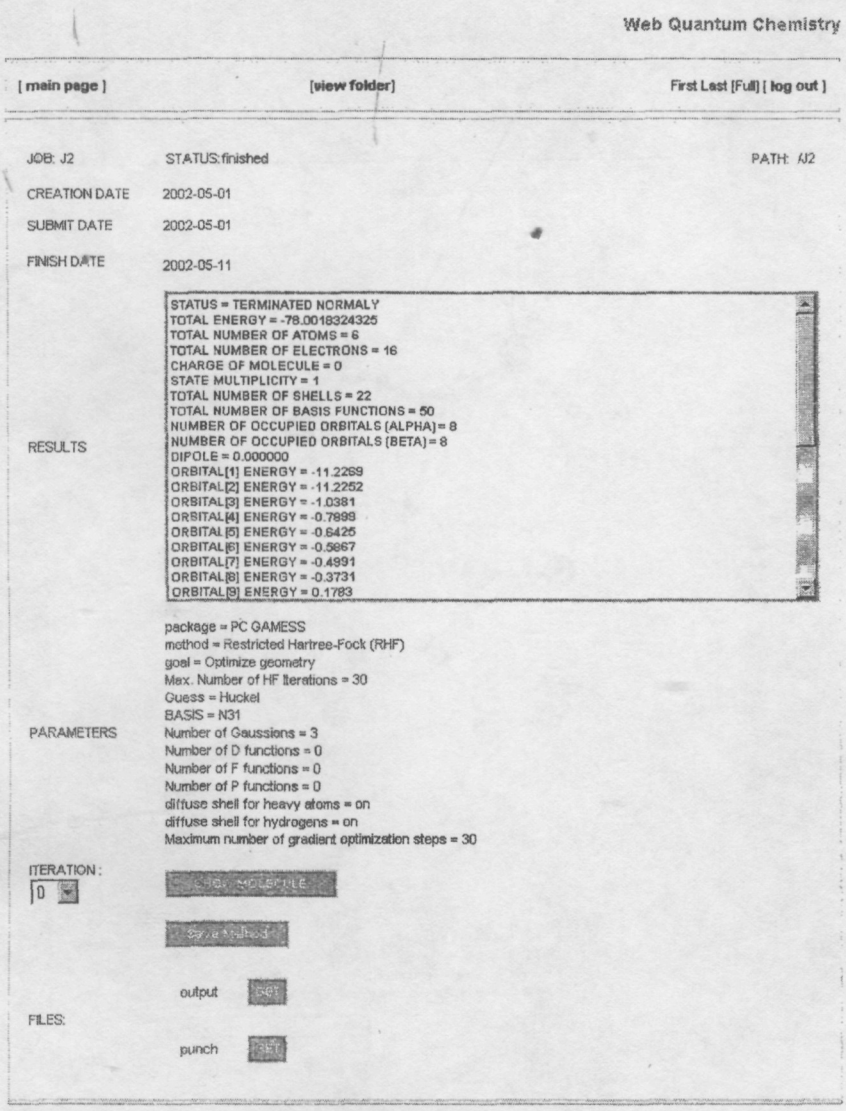

Рисунок 4.
Страница результатов расчёта

Для генерирования входных файлов для пакетов молекулярного моделирования используется технология XSL. Мы старались избежать необходимости дополнительного программирования в случае подключения нового пакета. Список доступных пользователю квантовохимических пакетов находится в конфигурационных файлах системы. Разбор выходного файла осуществляется с помощью специализированного модуля, позволяющего создавать XML-представление данных из текстовых файлов достаточно общего вида.

Преобразование для файлов каждого пакета также описывается в специальном конфигурационном файле. На сегодняшний день проведена интеграция пакетов PC GAMESS [6] и Dalton [7]. Сам пакет доступен для тестирования по URL http://lcc.chem.msu.ru/WebQC/index.html, в будущем предполагается его бесплатное распространение. В настоящий момент исходные тексты программы доступны по запросу у авторов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ВЫВОДЫ. Система WebQC предоставляет широкий набор возможностей для организации удалённого доступа к вычислительным кластерам и другим вычислительным ресурсам. Использованные технологии позволяют надеяться, что система получилась достаточно гибкой для удовлетворения большинства пользовательских запросов.

Работы по данной теме поддержаны Российским фондом фундаментальных исследований (проект 02-07-9011).

ЛИТЕРАТУРА

1. http://www.webmo.net.
2. Baldridge K., Greenberg J., https://gridport.npaci.edu/GAMESS.
3. http://qcc.ru/~netlab.
4. Hall M. "Core Servlets and JavaServer Pages", (2000). Sun Microsystems Press/Prentice Hall.
5. http://www.openpbs.org/about.html.
6. *Schmidt M.W., Baldridge K.K., Boatz J.A., Elbert S.T., Gordon M.S.,Jensen J.H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K.A., Se S.J., Windus T.L.,Dupius M., Montgomery J.A.* (1993) J.Comput. Chem. **14**, 1347-1363.
7. *T. Helgaker, H.J.Aa. Jensen, P. Jorgensen, J. Olsen, K. Ruud, H. Agren, A.A. Auer, K.L. Bak, V. Bakken, O. Christiansen, S. Coriani, P. Dahle, E.K. Dalskov, T. Enevoldsen, B. Fernandez, C. Hattig, K. Hald, A. Halkier, H. Heiberg, H. Hettema, D. Jonsson, S. Kirpekar, R. Kobayashi, H. Koch, K.V. Mikkelsen, P. Norman, M.J. Packer, T.B. Pedersen, T.A. Ruden, A. Sanchez, T. Saue, S.P.A. Sauer, B. Schimmelpfennig, K. O. Sylvester-Hvid, P.R. Taylor, and O. Vahtras* (2001) Dalton, a molecular electronic structure program, Release 1.2

WEBQC: A WEB-INTERFACE FOR MOLECULAR MODELING PROGRAMS

A.A. Moskovsky, V.V. Vanovsky, D.A. Firsov, A.N. Asratyan, A.V. Nemukhin

119899 Russian Federation, Moscow, Moscow State University, School of Chemistry;
tel: +7-095-939-48-40, e-mail: moskov@lcc.chem.msu.ru

Significant improvement in computer performance is observed during the last decades. In molecular modeling field this allows to solve more and more complex tasks by means of quantum chemistry available for a broader research community, including researchers, whose primary scientific interests are far from molecular modeling. At the same time, user interface of many molecular modeling programs is oriented on professional users with strong computer science background. The WebQC newly developed web-interface is intended to cater needs of newcomer users of molecular modeling programs and quantum chemistry methods. The software provides uniform interface to various molecular modeling packages. 3-D visualization of molecular geometry configuration is provided as well. Currently, the PC GAMES and Dalton quantum chemistry programs were integrated with the WebQC, but the integration of new packages requires only modification of WebQC configuration files, which are of XML format. The software can be helpful in providing remote access to computing facilities, in education and facilitate teamwork of geographically distributed research groups.

Key words: molecular modeling, web-interface, quantum chemistry, XML.