SCHRODINGER在集群的安装与使用示例

薛定谔简介

Schrodinger（薛定谔）是药物发现的完整软件包，包括：基于受体和配体结构的诱导契合和柔性对接模式；基于受体结构及配体极性的对接模式；基于受体结构及溶液环境性质的对接模式；组合化学库设计及基于组合库的对接模式；基于配体结构的药物设计，药效团和3D-QSAR；生物分子结构模拟，蛋白、糖、核酸、小肽等；基于靶点的药物设计；ADME性质预测。

在集群上安装薛定谔

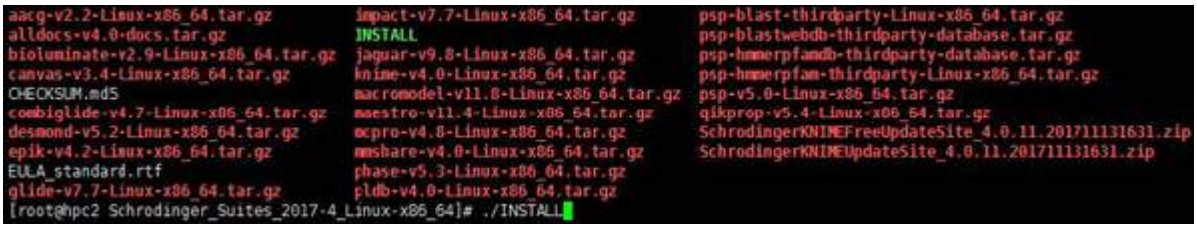
软件下载地址：

https://www.schrodinger.com/downloads/releases

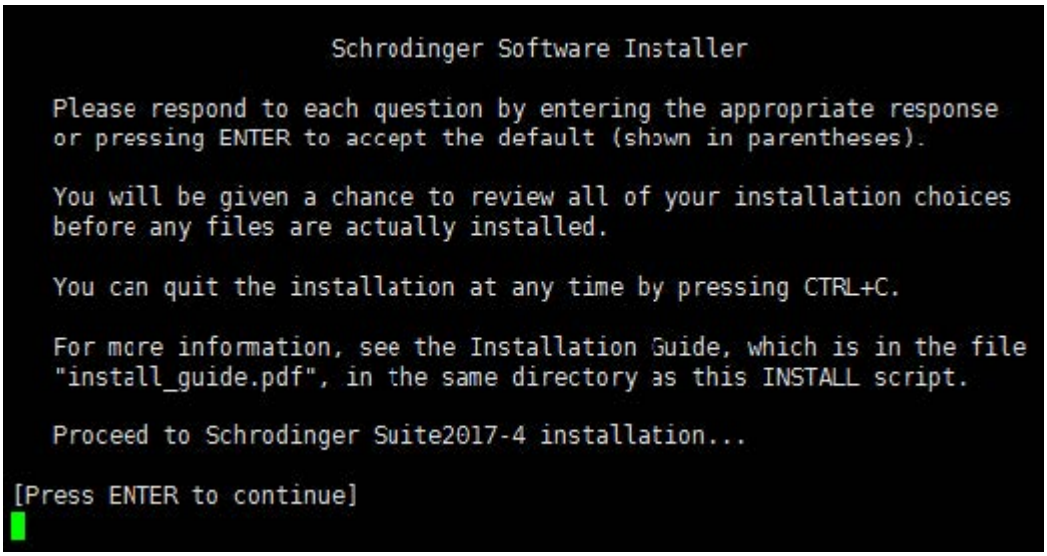
1.下载完成后，解压：

```
[root@hpc2 schrodinger]# ls
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64.tar
[root@hpc2 schrodinger]# tar -xvf Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64.tar
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/combiglide-v4.7-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/aacg-v2.2-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/canvas-v3.4-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/mcpro-v4.8-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/EULA_standard.rtf
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/psp-v5.0-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/phase-v5.3-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/glide-v7.7-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/epik-v4.2-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/jaguar-v9.8-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/impact-v7.7-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/bioluminate-v2.9-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/desmond-v5.2-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/psp-hmmerpfamdb-thirdparty-database.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/mmshare-v4.0-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/knime-v4.0-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/INSTALL
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/macromodel-v11.8-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/SchrodingerKNIMEFreeUpdateSite_4.0.11.201711131631.zip
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/qikprop-v5.4-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/SchrodingerKNIMEUpdateSite_4.0.11.201711131631.zip
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/alldocs-v4.0-docs.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/maestro-v11.4-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/psp-blastwebdb-thirdparty-database.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/pldb-v4.0-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/psp-hmmerpfam-thirdparty-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/psp-blast-thirdparty-Linux-x86_64.tar.gz
Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64/CHECKSUM.md5
```

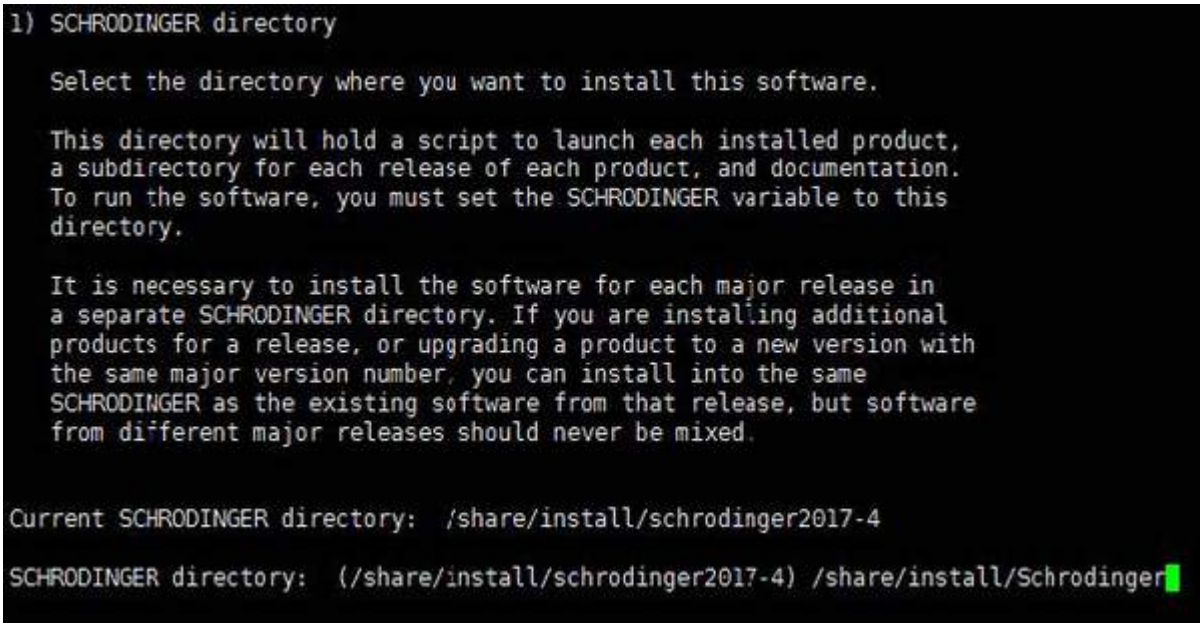
2.进入至解压目录，运行命令./INSTALL



3.按Enter以继续



4.此处需要输入安装的路径：以/share/install/Schrodinger（安装目录）为例



5.确认安装（y）

```
Your installation choices were:

    SCHRODINGER directory:            /share/install/Schrodinger
    SCHRODINGER_THIRDPARTY directory: /share/install/Schrodinger/thirdparty
    Scratch directory:                /usr/tmp

    product         version   platform        status      compatible  action
    -------------   --------  --------------  ----------  ----------  -------
    glide           7.7       Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    pldb            4.0       Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    bioluminate     2.9       Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    aacg            2.2       Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    hmmerpfamdb               <database>      NEW            yes      INSTALL
    blastwebdb                <database>      NEW            yes      INSTALL
    alldocs         4.0       <docs>          NEW            yes      INSTALL
    canvas          3.4       Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    desmond         5.2       Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    mcpro           4.8       Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    psp             5.0       Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    blast                     Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    hmmerpfam                 Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    impact          7.7       Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    jaguar          9.8       Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    macromodel     11.8       Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    maestro        11.4       Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    qikprop         5.4       Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    combiglide      4.7       Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    phase           5.3       Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    epik            4.2       Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    knime           4.0       Linux-x86_64    NEW            yes      INSTALL
    mmshare         4.0       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]  () 
```

6.完成安装

```
*) Configuring your installation


   If you need to request licenses, install or transfer licenses, or configure
   remote machines for calculations, run the the Schrodinger software
   configuration tool on a machine with a display.

   The tool can be launched directly via $SCHRODINGER/utilities/configure
   or by choosing the Configure Software item under the Help menu in Maestro.
   If the current machine has a display, you can also launch it from this screen.

Launch the configuration GUI now? [y/n]  () n


           ***** Schrodinger software installation is complete. *****

[root@hpc2 Schrodinger_Suites_2017-4_Linux-x86_64]# 
```

7.待完成安装后，在命令行中输入vi ~/.bashrc

导入软件的安装路径（此处为/share/install/Schrodinger）及license授权，将下面三行输入.bashrc文件中，保存并退出。安装完成。

```
export PATH=/share/install/Schrodinger:/share/install/Schrodinger/utilities:$PATH
export LM_LICENSE_FILE=27008@compbio.shanghaitech.edu.cn
export SCHRODINGER=/share/install/Schrodinger
```

安装完成后，需要修改Hosts文件才可以在计算集群上使用（如果只是在本地计算机上使用CPU的话可以忽视，要在本地使用GPU的话需要添加gpgpu信息），具体修改的文件为安装目录下的schrodinger.host文件。即，在Host文件中添加属于集群作业管理系统的信息：

本地添加GPU：

```
name: localhost
tmpdir: 自定义临时文件路径
gpgpu: 0, Tesla V100 (你的显卡型号)
```

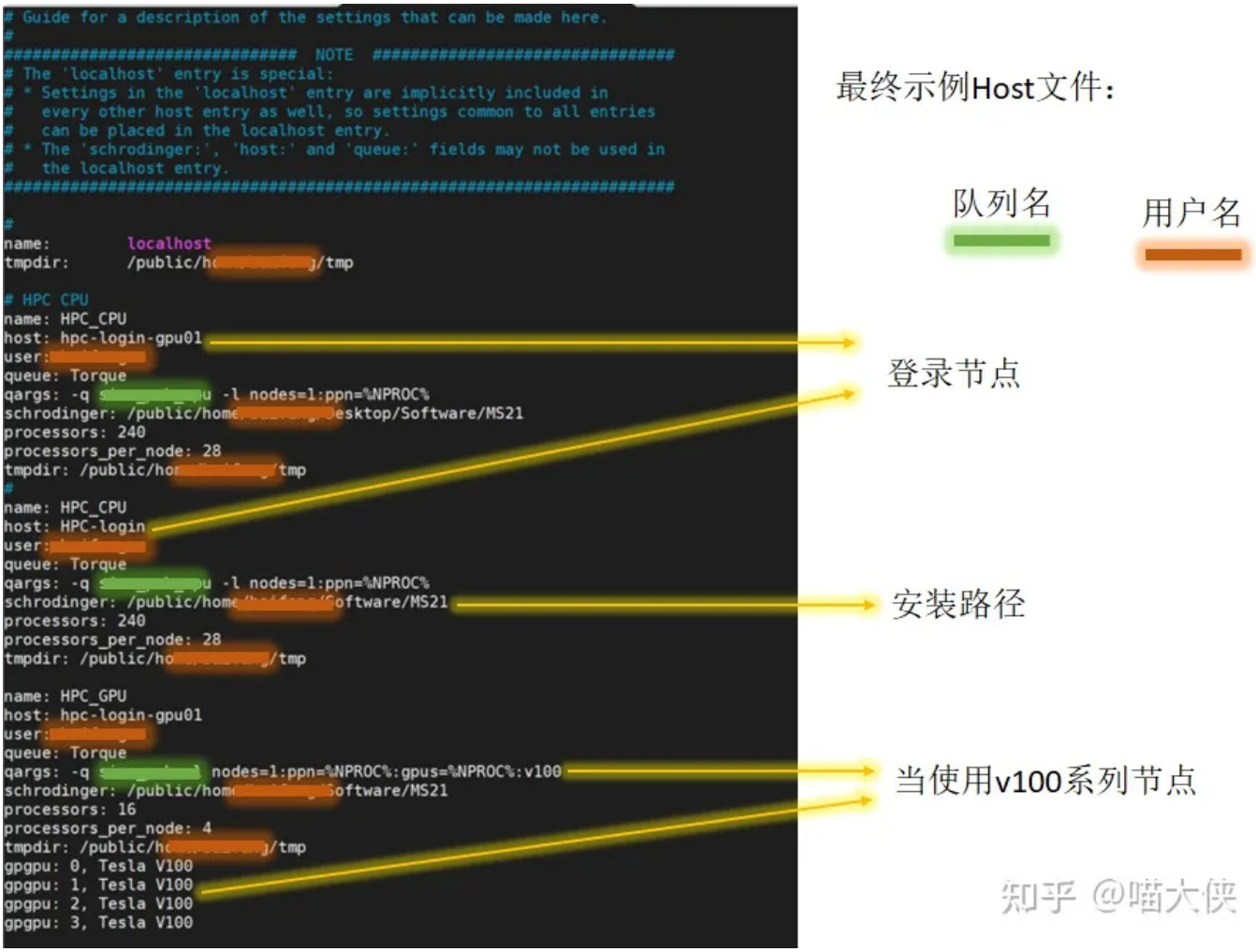
对于CPU队列（分子对接、同源建模、结构优化、量子化学任务）：

```
name: HPC_CPU（名字可以随便起）
host: hpc-login-gpu01（登录节点的hostname）
user: 用户名
queue: Torque（根据作业管理系统的类型更换）
qargs: -q 队列名 -l nodes=1:ppn=%NPROC%
schrodinger: 自己的薛定谔安装路径
processors: 240
processors_per_node: 28
tmpdir: 自定义临时文件路径
```

对于GPU队列（分子动力学模拟、机器学习任务）：

```
name: HPC_GPU （名字可以随便起）
host: hpc-login-gpu01（登录节点）
user:用户名
queue: Torque （根据作业管理系统的类型更换）
qargs: -q 队列名 -l nodes=1:ppn=%NPROC%:gpus=%NPROC%
```

```
schrodinger:自己的薛定谔安装路径
processors: 16
processors_per_node: 4
tmpdir: 自定义临时文件路径
（显卡类型和数量要跟随你使用的GPU节点来更换）
gpgpu: 0, Tesla V100
gpgpu: 1, Tesla V100
gpgpu: 2, Tesla V100
gpgpu: 3, Tesla V100
```



最终修改完的host文件如上图所示。

linux集群上的SCHRODINGER 使用实例-Ligpred

Glide作为广为人知的分子对接软件，提供了非常方便的各类型对接工作，接下来介绍如何方便的在无图形化界面的linux集群中进行分子对接前的配体准备

（Ligpred）

```
$SCHRODINGER/ligprep -isd my_2D_cts.sd -omae my_3D_cts.mae -HOST
HPC_CPU
```

其中，`-i***` 是输入的文件格式(sd格式写成 `-isd`)，一般输出文件格式选 `-omae`，并指定输出文件名，-HOST 指定为.hosts文件中的name，例如上述的HPC_CPU

我该怎么学习薛定谔

薛定谔的在线入门资源有很多，尤其是官方文档（英文），内容非常详尽，是软件使用方面的最好选择；其次，薛定谔有一系列在线的讲座（中英文都有）和培训，是入门的最佳选择。

- 讲座和会议：Upcoming Scientific Events
- 中文在线讲座：Chinese Life Sciences Webinar Series, Online
- 官方培训：Training | Schrödinger
- 软件使用教程：每一个Panel（面板）的右下角的问号，打开可查看程序的使用手册
- 官方脚本介绍：Scripts | Schrödinger
- 官方Python API文档：Python API | Schrödinger
- 官方文档：Documentation | Schrödinger

以2021-3版本为例，官方文档中包含如下内容：

遇到报错如何解决?

- 点击右上角的Monitor工具，双击查看任务的log，尤其是每个任务的子log，通常薛定谔的log文件会给出来比较详细的错误原因，如果找到了最深一层的报错还是不知道怎么办，可以在社区论坛求助；
- 比较常见的问题是没有做Protein Preparation和LigPrep，请注意一般导入外部文件后均需要进行预处理。

各个模块的内容如下：

- **Academy Tutorials** 包含了一些典型计算生物学任务的详尽教程，如 Generating and Visualizing Ligand Conformations, Covalent Docking for Virtual Screening and Pose Prediction, Cross-Docking with IFD-MD等；
- Quick Start Guide 是介绍各个程序使用方法的简单教程；
- **Best Practices** 是原理、应用场景与使用方法兼备的高级教程；
- Help 包含了软件中具体应用程序的使用方法
- **User Manual** 是各个应用程序原理、应用场景的介绍，着重介绍了当我们运行任务时，软件究竟在干什么，这将帮助我们了解出现了问题应该如何排查原因；
- Command References 是各种应用程序在命令行模式下的使用方法；

如果实在不喜欢英文教程，可以在B站和微信公众号搜索其他入门级中文教程。

参考学习资料

- Schrödinger(薛定谔) 入门级Q&A - 知乎 (zhihu.com)
- Schrodinger (shanghaitech.edu.cn)
- 流程化虚拟筛选和分子动力学模拟 Schrödinger脚本库：在Linux集群上轻松运行计算生物学任务 - 知乎 (zhihu.com)

特别致谢

上海科技大学王林