

Cuby Installationsanleitung

Kim Radke und Şirin Cebeli

8. April 2019

1 Download von cuby4

Unter folgendem Link kann die neuste Version von Cuby heruntergeladen werden. Dafür muss zunächst das auf der Seite gegebene Formular ausgefüllt werden. Danach steht der Download bereit.

<http://cuby4.molecular.cz/download.php>

2 Installation

Erstelle zuerst den Ordner `Cuby` an beliebiger Stelle im Laufwerk. Um das heruntergeladene Package zu installieren, muss zunächst in der Shell Konsole in den Installationspfadordner `Cuby` navigiert werden. Setze die Umgebungsvariable mit folgendem Befehl in der Shell Konsole:


```
$ export PATH=~/.Cuby/cuby4:$PATH
```

Mit den folgenden zwei Befehlen kann überprüft werden, ob die Installation erfolgreich war:

```
$ cuby4 --info
$ cuby4 --test
```

Dann sollte folgende Ausgabe erscheinen:

```
bioinfo@linux-23in:~/Cuby> cuby4 --info
Installation directory: /home/bioinfo/Cuby/cuby4
Ruby interpreter used: /usr/bin/ruby
Binary extensions used:

bioinfo@linux-23in:~/Cuby> cuby4 --test
#####
Test calculation: Singlepoint energy calculation using the built-in forcefield
#####
 Energy calculation
Energy: 7.374911 kcal/mol

#####
If you see a nice output with a result, the test was successful!
#####
```

3 Konfiguration

Um in Cuby externe Programme verwenden zu können müssen diese zunächst konfiguriert werden. Dazu wird in der Ordnerstruktur von `cuby4` in den Ordner `config` navigiert und die Datei mit dem Namen `keyword_defaults.yaml` geöffnet. Für jedes externe Programm, wie zum Beispiel Turbomole, Mopac und Charmm, werden nun die entsprechenden Pfade angegeben. Bei einigen Programmen ist es auch wichtig die Version anzupassen.

Diese `yaml`-Datei wird dann in demselben Pfad wie der Ordner `cuby4` gespeichert und in `cuby4_config.yaml` umbenannt.

1. Navigiere in den Ordner `config`
2. Öffne die Datei `keyword_defaults.yaml`
3. Gebe alle Pfade für externe Programme an.
4. Speichere die Datei mit dem Namen `cuby4_config.yaml` in demselben Pfad wie der Ordner `cuby4` ein.

4 Beispiel

Um zu überprüfen, ob alles geklappt hat, kann folgendes Beispiel ausgeführt werden. Es wird eine `yaml`-Datei mit dem Namen `input.yaml` erstellt. In der Datei wird folgender Code implementiert und abgespeichert.

```
job: optimize
geometry: start.xyz
interface: water_ff
```

Als nächstes wird die Datei `start.xyz` erstellt. Diese Datei erhält folgenden Beispielinput:

```
O   -0.702196054  -0.056060256   0.009942262
H   -1.022193224   0.846775782  -0.011488714
H    0.257521062   0.042121496   0.005218999
O    2.220871067   0.026716792   0.000620476
H    2.597492682  -0.411663274   0.766744858
H    2.593135384  -0.449496183  -0.744782026
```

In der Shell Konsole wird dann folgender Befehl ausgeführt:

```
$ cuby4 input.yaml
```