



MetaCentrum

MetaCentrum – Český národní gridový projekt

MetaCentrum Aplikace a jejich další podpora

Jan Kmuníček
CESNET & ÚVT MU

meta.cesnet.cz

- **Obecná charakteristika**
- **Dostupné programy**
 - Licence
- **Aplikační podpora**
- **Nové služby**



- **Aplikace v MetaCentru různorodé**
 - různé oblasti výzkumu
 - různé aplikační programy
 - různé typy výpočetních úloh
 - sekvenční (10 min - 30 dní)
 - paralelní
 - interaktivní
 - různé typy paralelní běhu
 - MPI implementace, PVM
 - sdílená paměť, speciální toolboxy

- **Základní aplikace**
 - aplikace pořizované Meta či ve spolupráci
 - spravované Meta adminy
- **Rozšiřující aplikace**
 - nainstalované na požádání, dostupné všem
 - spravované Meta adminy
 - dokumentace, příklady použití
- **Uživatelské aplikace**
 - uživatelem instalované specifické aplikace pro individuální použití

Contents

Raman Spectroscopy of Flexible Molecules, Petr Bouř and Josef Kapitán	3
Attenuation Estimation in Ultrasonic Transmission Tomography, Radovan Jiřík et al.	6
Protein Engineering of Enzymes Haloalkane Dehalogenases, Loschmidt Laboratories	11
Theoretical Simulation of Liquid Water Radiolysis by Charged Particles, Marie Davidková	26
Study of the Non-classical Bonding in <i>cyclo</i>-[(η^5-C₅HMe₄)₂Ti{C=C(SiMe₃)₂SiMe₂}], Róbert Gyepes	28
Stereochemistry of newly prepared heteroboranes of different architecture and building blocks, Drahomír Hnyk	33
New Amorphous Quaternary Materials SiBCN: an Ab-initio Study, Ing. Jiří Houška	37
Validation of Computing Model of ATLAS Experiment, Jiří Chudoba et al. . . .	42
Properties of Arc Discharge with Water Vortex and Hybrid Stabilizations – Numerical Study, Jiří Jeništa	44
Research Projects of National Centre for Biomolecular Research, Jaroslav Koča et al.	50
Simulation of Stress Wave Propagation, V. Pelikán, P. Hora, A. Machová, O. Červená	65
The First Principles Research of NiTi Alloy, Petr Šesták, Miroslav Černý, Jaroslav Pokluda	88
Quantum Mechanical Modeling of Charge Carrier Mobility in Conjugated Polymers Doped with Dipolar Species, Petr Toman	95
Quantum Chemical Calculations of ¹⁵N NMR Chemical Shifts of Pd and Pt Complexes with Nitrogen Containing Heterocycles, Jaromír Toušek	99
Theoretical Study of Ion Behavior at Phase Interfaces, Luboš Vrbka	103
Combinatorial Generation of Matroid Representations: Theory and Practice, Petr Hliněný	106

Přehled nejpoužívanějších programů

Přehled za období od 22.11.2007 do 21.11.2008

Od: Vybrat do: Vybrat

Nalezeno 1,712 položek, zobrazuji záznamy od 1 do 20. [První/Předchozí] 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 [Další/Poslední] Počet na stránku:

Aplikace	Název příkazu	Součet časů běhu	Součet časů uživatele	Součet časů systému	
Ostatní	marc	30361:34:30,01	193753:22:07,69	2978:35:12,14	Zobrazit uživatele
Amber	_pmemd.mpi	212871:10:07,51	185798:27:29,67	13025:14:33,12	Zobrazit uživatele
Gaussian	i9999.exe	127820:01:46,72	177150:13:20,10	2155:57:24,22	Zobrazit uživatele
Gromacs	mdrun_d_mpic	174162:16:03,59	133083:18:52,78	6369:18:47,99	Zobrazit uživatele
Amber	_sander.mpi	117599:36:26,79	98174:36:45,94	9036:16:09,04	Zobrazit uživatele
Amber	sander.MPI	96287:06:59,99	95731:47:51,25	282:16:14,87	Zobrazit uživatele
VASP	vasp_nclm	110649:08:20,06	92400:02:55,96	9302:07:19,86	Zobrazit uživatele
Fluent	fluent_mpi.6.3.	113363:09:13,46	88430:25:11,89	21177:30:27,69	Zobrazit uživatele
Amber	pmemd.MPI	70903:16:43,78	67672:13:26,56	2576:44:40,90	Zobrazit uživatele
Gaussian	i502.exe	25280:12:16,95	64002:19:40,54	530:50:14,92	Zobrazit uživatele
Abinit	abinip_v5.3.5_m	71278:59:36,15	62165:36:13,49	3536:33:37,51	Zobrazit uživatele
Ostatní	Espresso_bin	61700:03:08,75	61598:41:34,36	73:37:46,92	Zobrazit uživatele
Gromacs	mdrun	65494:46:00,44	58100:07:15,36	5989:54:39,56	Zobrazit uživatele
Amber	sander	42338:57:40,57	41892:42:36,94	24:27:20,47	Zobrazit uživatele
Ostatní	leis-fsa	36568:22:07,37	35857:13:22,38	5:15:18,37	Zobrazit uživatele
Ostatní	dart.exe	36170:31:58,67	32336:28:50,13	40:20:32,72	Zobrazit uživatele
Ostatní	flukahp	26201:18:47,22	26128:44:16,12	35:41:58,64	Zobrazit uživatele
Gaussian	i120.exe	13282:46:46,72	25460:06:36,80	530:27:17,28	Zobrazit uživatele
R	Recognition.exe	13532:07:01,85	24841:25:13,27	113:40:10,18	Zobrazit uživatele
Ostatní	gamess.00.x	39970:54:03,63	23100:21:33,07	52:37:53,17	Zobrazit uživatele

O METACentru

Vybavení

Návody

Příhláška

Můj účet

Stav

Aktuality

Dokumentace

Interní část

Odkazy

Dokumentace

Gridové konference

Statistiky

EGEE Materiály

META Materiály

Výpadky a novinky

Accounting

Moje úlohy

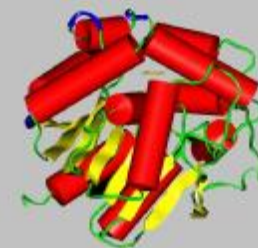
Uživatelé

Statistika

Sběry dat

- **Počítačová chemie**

- Amber (bio)molekulární simulace
- Gaussian elektronická struktura molekul
- Gromacs molekulová dynamika
- WIEN2k elektronová struktura pevných látek

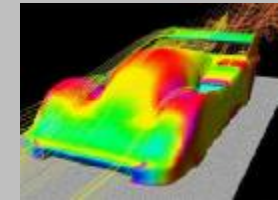


- **Vývojové nástroje a prostředí**

- Intel a PGI kompilátory C, C++, F77, F90
- Vampir debuggery
- MPI různé implementace paralelismu
- Prolog logický programovací jazyk

- **Technické a materiálové simulace**

- ANSYS sada inženýrských programů
- Fluent výpočetní fluidní dynamika
- MSC.Marc strukturní materiálové studie

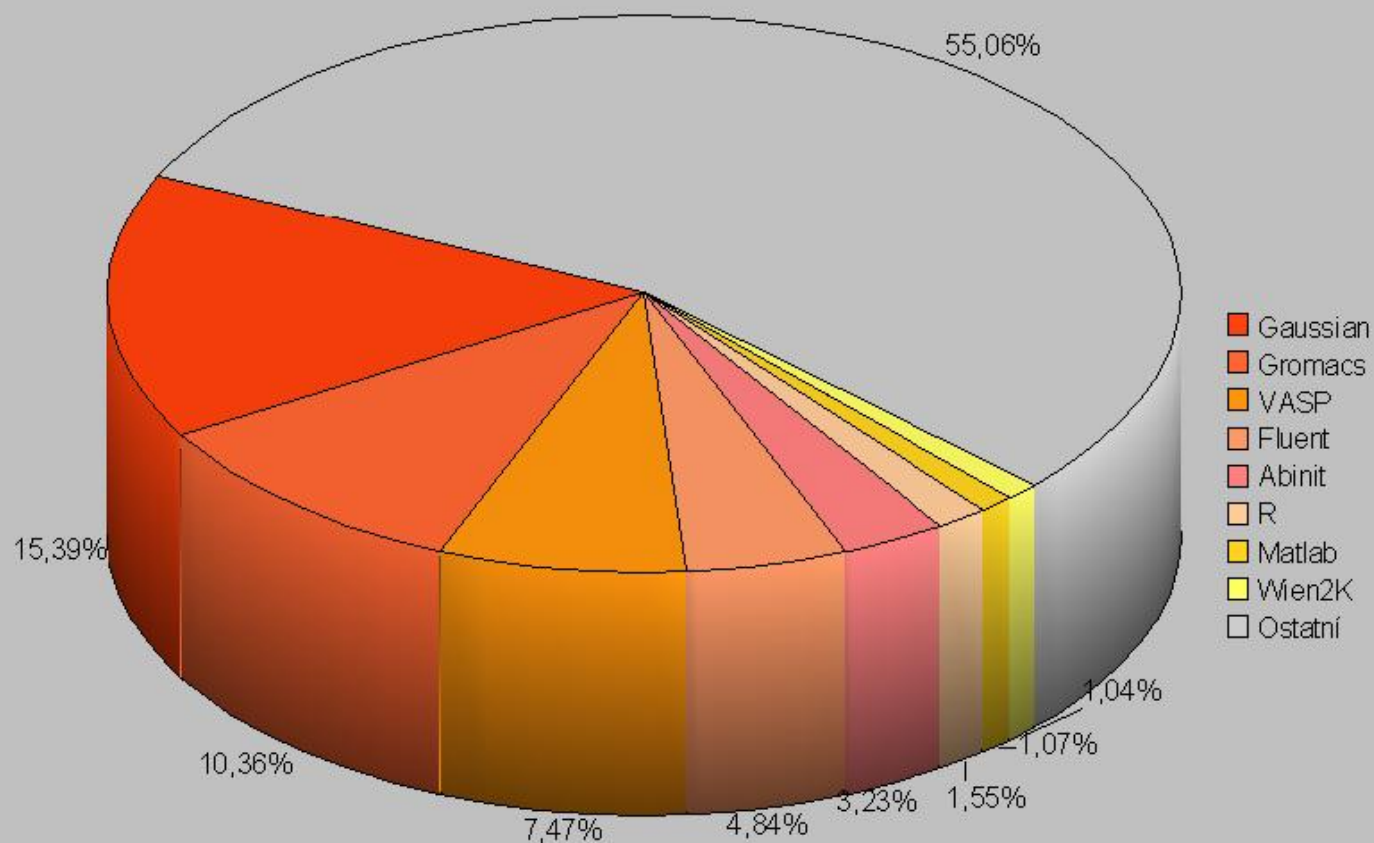


- **Matematické a statistické modelování**

- Maple komplexní řešení matematických úloh
- Matlab numerické výpočty, modelování
- R statistické výpočty a grafika

- **Rozšiřující aplikace**
 - na základě zájmu uživatelů/komunit
 - Gamess
 - WIEN2k
 - Gromacs, *NAMD*, *Tinker*
 - *Vasp*, *Abinit*
- **Uživatelské aplikace**
 - instalovány samotnými uživateli
 - DL-POLY, Dalton, MPQC,

Propočítaný čas (user time, poslední rok)



- **Základní koncept**
 - uživatel používá aplikační software (OpenSource či komerční)
 - na základě žádosti, podle licence a zvážení prospěšnosti pro Meta uživatele pomáháme instalovat a provozovat **software uživatelů**
 - účast MetaCentra na nákladech pro dokoupení licencí pokrývajících (pokud možno) celé MetaCentrum

- **Příklady licenčních politik**
 - Gaussian
 - univerzitní licence příslušející dané fyzické adrese
 - Amber
 - licence pro akademické pracovníky
 - zpřístupnění všem vlastníkům licencované kopie programu
 - Matlab
 - plovoucí licence z licenčních serverů
 - 150 základních / 50 rozšiřujících / 25 speciálních

- **Formy aplikační podpory**
 - instalace a update programů
 - žádosti do RT
- **Vývoj uživatelských rozhraní**
- **Řešení šitá „na míru“**
 - CharonGUI, Multiple ligand trajectory docking
- **Testování trial verzí**
 - program ADF

MetaCentrum – Český národní gridový projekt

CharonGUI <@skirit.ics.muni.cz>

Projects Jobs Settings

Jobs Projects Modules

- Molecular dynamics
 - AMBER package testing
 - Free enzyme dynamics
- Quantum mechanics
 - Single point energy
- Docking studies

Job details

Name AMBER package testing

Description The computational study of lectin-saccharide interactions employs methods of molecular docking and molecular dynamics. The aim of the project is a development of a reliable in silico based method of precognition of defined mutants of the important proteins.

id not assigned yet

Status idle

Job submission

psubmit long plsek 1 Submit

.....

/home/kmunicek/plsek Xterm

File Name	Size	Last Modified
plsek		90 Jul 9, 2008
pokus.com		98 Jul 9, 2008

New file Copy files Clean Charon files Edit job Delete job

MetaCentrum – Český národní gridový projekt

Multiple Ligand Trajectory Docking

Receptor name: acetylcholinesterase (1N5M). (guid:93f7e8a-be64-482c-99f-e5e52de2a0d5)

Job ID	Ligand	Radius	Grid size	Flexibility	Energy	Rank	Comment
1	HOX	0.1,0					
101	HBP	0.1,0					
201	HOX	1,1,0					-64.21
301	HBP	1,0,0					-63.02
401	HOX	2,1,0					
501	HOX	0,0,1					-70.70
601	HOX						-65.19
701	HBP	0,1,0			13.74		-74.74
801	HOX	0,1,0					
901	HBP				-74.74		
1001	HOX	2,0,3			-71.55		-65.84
1101	HBP	1,1,0			-78.54		-71.91
1201	HOX	1,1,0			-75.28		
1301	HOX						-66.42
1401	HBP	0,1,1					
1501	HOX				-75.75		
1601	HBP	-62.89			-69.77		-62.94
1701	HOX	-62.85					-65.44
1801	HBP				-78.07		
1901	HOX						-66.15

Status	Radius	Grid size	Flexibility	Energy	Rank	Comment
Aborted	1.4	0.3	flexible			
done/OK	1.4	0.3	flexible	-74.735390 82		Look at 2. conformer. It is with good accordance with crystal structure
done/OK	1.4	0.3	flexible	-64.957024 82		Look at 1. conformer. It is with good accordance with crystal structure
jd FAILED	1.4	0.3	flexible			
jd FAILED	1.4	0.3	flexible			

Visualise Annotate job Submit Job

Parameter	Value	Origin Detail
Job id	https://skusuf66-1.cesnet.cz:9000/d/YWm3S7QG2h6IBj6X8MCA	
Job owner	/DC=cz/DC=cesnet-ca/O=University of West Bohemia/CN=Zdenek Sustr	
receptorName	1N5M	(null)
receptorURI	guid:93f7e8a-be64-482c-99f-e5e52de2a0d5	(null)
ligandName	HOX	(null)
ligandURI	guid:83303b33-62b8-41cc-a96f-c29a2a45a0ac	(null)
snapNumber	1001	(null)
snapURI	guid:aa15d8bd-2338-4fa-8ba7-6338c4e02ba5	(null)
snapTime	1201.000	(null)
dockSurfaceProbeRadius	1.4	(null)
dockDistance	7.0	(null)
dockGridRes	0.3	(null)
dockResidueList	TYR72, TYR124, SER203, TRP285	(null)
dockNumScoredConformersWritten	4	(null)
dockMethod	flexible	(null)
dockProtocol	protocol.xml	(null)
proteinSurface	24776.54	um.org:glite
gridMinX	39.937000	um.org:glite
gridMinY	41.829000	um.org:glite
gridMinZ	37.361000	um.org:glite
gridMaxX	70.847000	um.org:glite
gridMaxY	68.885000	um.org:glite

Show Jobs Show Metrics Show Annotations

egEE CESNET gLite NCU

Refresh Quit

- **Nadstavby aplikací**
 - Charon -> CEL -> CharonGUI
 - různorodost „high-level“ nástrojů i požadavků uživatelských skupin
 - webová rozhraní k dávkovému systému
 - *PBSWeb*
 - generické systémy (CLI plus GUI)
 - *Ganga, GridWay, gEclipse*
 - portálová řešení
 - *P-Grade, GENIUS*

- **Nadstavby aplikací**
 - každé komunitě vyhovuje něco jiného
 - potvrzeno zpětnou vazbou z ankety
 - univerzální nástroj pro všechny neexistuje
 - řešení formou nabídky dostupných nástrojů
 - obdoba programu RESPECT

- **Dlouhodobý cíl**
 - **uživatelsky řízená infrastruktura**
- **Prostředek dosažení cíle**
 - individualizace výpočetního prostředí za použití virtualizace





- **Přínos virtualizace pro uživatele**
 - podpora nových způsobu použití
 - podpora preempce
 - pozastavení virtuálního stroje a umožnění běhu vysoce prioritních úloh
 - uživatelsky modifikovatelné prostředí
 - až po vlastní operační systém
 - mnohonásobně jednodušší správa zdrojů