Efektywne wykorzystanie zasobów ACK Cyfronet AGH oraz PLGrid w chemii obliczeniowej

Obliczenia z wykorzystaniem wysokowydajnych maszyn obliczeniowych, superkomputerów oraz dużych zbiorów danych stają się jednym z podstawowych narzędzi pracy chemików. Przeprowadzane numerycznie analizy oraz symulacje pomagają projektować, modyfikować oraz interpretować wyniki badań eksperymentalnych oszczędzając czas oraz budżety projektów naukowych, przy okazji często przyspieszając znacznie osiągnięcie interesujących rezultatów.

PLGrid jest ogólnopolską infrastrukturą przeznaczoną dla obliczeń naukowych. Udostępnia zasoby oraz narzędzia z wszystkich akademickich centrów superkomputerowych, w tym zasoby ACK Cyfronet AGH, które koordynuje działalność całej infrastruktury. Wsród użytkowników PLGrid znaczącą grupę stanowią chemicy wykorzystujący oprogramowanie HPC dostępne w centrach superkomputerowych do modelowania różnorakich procesów chemicznych.

Celem szkolenia jest przygotowanie nowych użytkowników do pracy z superkomputerami oraz omówienie dobrych praktyk efektywnego przeprowadzania obliczeń naukowych na tych maszynach. Omówione zostaną sposoby dostępu do klastrów obliczeniowych, uruchamianie oraz efektywne prowadzenie obliczeń na tych maszynach. Szczególną uwaga zostanie poświęcona zadaniom obliczeniowym wykorzystujących programy do modelowania molekularnego oraz obliczeń kwantowochemicznych dostępne w szerokim portfolio oprogramowania dostępnego w infrastrukturze PLGrid.

Plan szkolenia:

- Informacje o ACK Cyfronet oraz PLGrid.
- Jak uzyskać dostęp do zasobów.
- Konta, logowanie oraz transfer danych na superkomputery.
- Sposoby prowadzenia obliczeń
- Omówienie pakietów chemicznych dostępnych na klastrze Prometheus
- Ćwiczenia z przeprowadzania przykładowych obliczeń pakietami takimi jak Gaussian, ADF, Molpro, Turbomole, NAMD, CP2K, CPMD etc.
- Dobre praktyki prowadzenia efektywnych obliczeń.
- Q&A