

Od PBS ke Kubernetes: Webové aplikace pro molekulární výpočty pomocí Claude Code.

Martin Krupička

Ústav organické chemie, VŠCHT Praha

**“To jsem nikdy nedělala,
to mi určitě půjde.”**



Pippilotta Viktualia Rullgardina Krusmynta Efraimsdotter Långstrump

Grid-PBS

- Omezená doba běhu
- Příkazová řádka
- Dávkové zpracování
- Ruční práce
- Dostupný velký výkon
- Predikovatelné čekání

Kubernetes

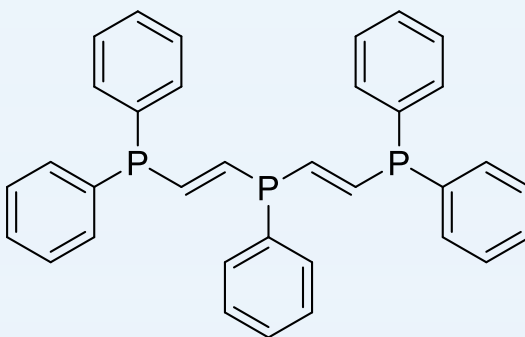
- Stále běžící služba
- Výběr z existujících
 - Nebo vlastní vývoj
- Průmyslový standard
- Troška programování nutná

Claude Code

- LLM nástroj pro programování
- Srozumitelný i pro neprogramátory
- \$20/měsíc
- Běží i v terminálu metacentra

Molekulární výpočty

- Je daná molekula dobrým kandidátem na organické polovodiče?



1. Optimalizuj geometrii molekuly
2. Prohledej konformační prostor pro neutrální molekulu
3. Optimalizuj geometrii příslušného kationtu a aniontu
4. Pro optimalizované geometrie vypočti energii neutrální, aniontové a kationtové formy

Linux perian.grid.cesnet.cz 6.12.101+deb13-amd64 #1 SMP PREEMPT_DYNAMIC Debian 6.12.101-1+zs1 (2026-08-10) x86_64
Last login: Tue Sep 22 13:33:47 2026 from aftr-62-216-215-62.dynamic.mnet-online.de



Your Home Directories

Avail	DATA	FILES	Backup	Storage
space	quota	used	quota	used
142T	1.25G	64k	1M	29
252T	none	601M	none	283
875T	4.29T	343G	2.5M	635k
514T	3.22T	24k	1M	7
29T	10.7T	24k	none	8
957T	3.22T	10.3G	3M	33.0k
53T	7.34G	24k	none	7
163T	1.25G	108k	10k	13
33T	7.34G	16k	none	5
36T	2.14T	117G	2M	646k
			snap	brno11-elixir
			snap	brno12-cerit
			snap	brno2
			full	budejovice1
			-	liberec3-tul
			snap	plzen1
			-	praha2-natur
			full	praha5-elixir
			full	pruhonice1-ibot
			snap	vestec1-elixir

CPUs

cesnet

qsub(1B)

PBS Professional

qsub(1B)

NAME

qsub - submit a job to PBS

SYNOPSIS

qsub [-a <date and time>] [-A <account string>] [-c <checkpoint spec>]
[-C <checkpoint suffix>] [-d <destination>] [-E <environment>] [-f <file>] [-h <host>] [-i <input file>] [-j <job file>] [-k <key file>] [-l <limit>] [-m <mailing list>] [-n <name>] [-o <output file>] [-p <priority>] [-r <resource list>] [-s <script file>] [-t <time limit>] [-u <user>] [-v <verbose>] [-w <work directory>] [-x <exit code>] [-y <queue>] [-z <zone>]

qstat(1B)

PBS Professional

qstat(1B)

NAME

qstat - display status of PBS jobs, queues, or servers

SYNOPSIS

Displaying Job Status
Default format:
qstat [-E] [-J] [-p] [-t] [-w] [-x] [[<job ID> | <destination>] ...]

Long format:
qstat [-E] [-J] [-p] [-t] [-w] [-x] [[<job ID> | <destination>] ...]
LESS(1) General Commands Manual

NAME

less - display the contents of a file in a terminal

SYNOPSIS

less -?
less --help
less -V
less --version
less [-[+]aABcCdeEfgGgiIjKlMmNnQqRrRsSuUVvwWx~*] [-b space] [-h lines] [-j line] [-k keyfile] [-l line] [-m line] [-n line] [-o file] [-p pattern] [-r file] [-s file] [-t file] [-u file] [-v file] [-w file] [-x file] [-y file] [-z file]

NAME

grep, egrep, fgrep, rgrep - print lines that match patterns

SYNOPSIS

grep [OPTION...] PATTERNS [FILE...]
grep [OPTION...] -e PATTERNS ... [FILE...]
grep [OPTION...] -f PATTERN_FILE ... [FILE...]

DESCRIPTION

grep searches for PATTERNS in each FILE. PATTERNS is one or more patterns separated by newline characters, and grep prints each line that matches a pattern. Typically PATTERNS should be quoted when grep is used in a shell command.

A FILE of "-" stands for standard input. If no FILE is given, recursive searches examine the working directory, and nonrecursive searches read standard input.

Debian also includes the variant programs egrep, fgrep and rgrep. These programs are the same as grep -E, grep -F, and grep -r, respectively. These variants are deprecated upstream, but Debian provides for backward compatibility. For portability reasons, it is recommended to avoid the variant programs, and use grep with the related option instead.

OPTIONS

Generic Program Information
--help Output a usage message and exit.

-V, --version Output the version number of grep and exit.

requests re-

LESS(1)

has

they

GREP(1)

GREP(1)

it have to read the entire in-

text editors like vi(1). Less

is. There is even limited

be printed at the top of the

number, called N in the descrip-

for example ESC-v means the

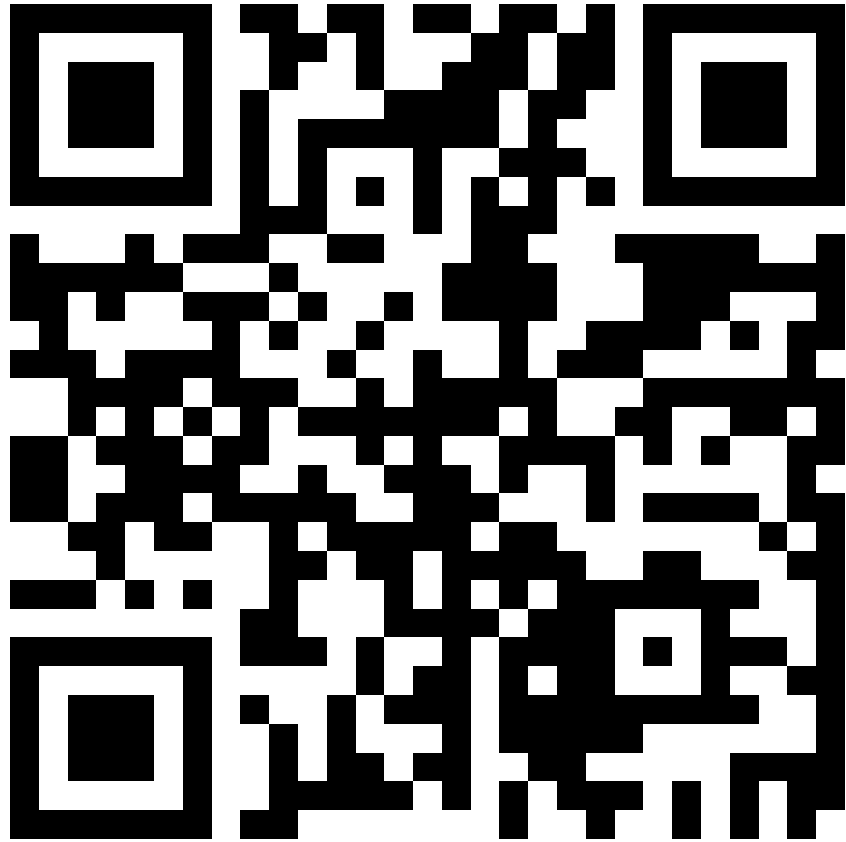
mands, remember this one.

Zadání projektu

1. Automatizace procesu výpočtu

- Ověření fronty, správa dat, automatizace čekání na výsledky
- Zabalit to jako webovou službu
- Webové rozhraní (protože koncový uživatel „nemá rád“ CLI)
- Jednoduchý způsob zadávání molekuly
- Zcela automatická sekvence výpočtu
- Dostatečně rychlý výpočet

<https://lambda-xtb.dyn.cloud.e-infra.cz/>



P(/C=C/P(C1=CC=CC=C1)C2=
CC=CC=C2)(C3=CC=CC=C3)/
C=C/P(C4=CC=CC=C4)C5=CC
=CC=C5



<https://github.com/krupickm/lambda-xtb>

Co fungovalo

- Claude Code – LLM naučený na stávajících SW projektech
- Kubernetes (k8s) + GitHub
- Python
- CI/CD
- Úmyslně ani řádka napsaná ručně
- **Příkazy pro kubectl, git a gh zadává člověk**
- Vývoj na frontendu, VSCode remote, Claude v terminálu
- Pozor – vyprchává Kerberos ticket

Postup

- Claude projekt, návrhová fáze, použít nejlepší dostupný model
- Nutit Claude do Minimal Viable Product (MVP)
- Navrhnout rozhraní (API), ukládání dat
- Aktivně omezovat bobtnání, Claude rád staví velké věci
- Pečlivě prohledat omezení knihoven
 - Jako první krok otestovat neobvyklé integrace

Výsledek:

- zadání projektu
- rozsekané na WP
- vyřešená návaznost úloh
- plán pro „coding agent“ Claude code

Žádné větší akce

- Ne autonomní agenti (Hermes, OpenClaw)
- Nepřetěžovat kontext
 - manažer neprogramuje
 - jednotlivé WPs pro jednotlivé agenty
- Udržovat know-how společné pro všechny úlohy
- Pravidelný úklid – „Claude verbal diarrhea“
 - Kód, komentáře, dokumentace
- **Krotit nadšení, dbát o pořádek**

Od MVP k lepšímu využití prostředků

- MVP: Jeden kontejner, rezervované 1-4 CPU, výpočet synchronně
- Vylepšení:
 - Frontend (0,25 CPU) a výpočetní kontejner (14 CPU)
 - Výpočet přes volání API přes http
 - Životnost výpočetního kontejneru zajišťuje k8s (na jedno použití)
 - Data v SQLite databázi uvnitř frontendu (na PVC)

λ -xTB reorganization energy calculator

SMILES string

*/C=C/P(C1=

Email (optional)

krupickm@vscht.

► Method detail

build v1.3

Calculating λ ...

Calculating λ ...



Status: PROCESSING

This page refreshes itself automatically — you can leave it open, or close it and come back to this link later. A calculation typically takes 1–2 minutes.

<http://lambda-xtb.dyn.cloud.e-infra.cz/pending/55edcab4-26a7-4d49-a82b-3a471b7e6908>

build v1.3

This page r

<http://1>

Běh pro ukázkovou molekulu zhruba 60s

[← New calculation](#)

All runs

Molecule: C(=C/P(c1ccccc1)c1ccccc1)\P(/C=C/P(c1ccccc1)c1ccccc1)c1ccccc1

Summary (5 runs)

305.2 meV λ^+ (hole) mean ± 34.8 meV std**343.5 meV** λ^- (electron) mean ± 16.8 meV std

Individual runs

#	Date (UTC)	λ^+ (meV)	λ^- (meV)	Details
5	2026-09-27 20:12	289.8	335.8	view ← this run
4	2026-09-25 13:42	289.9	336.1	view
3	2026-09-25 12:07	289.3	335.9	view
2	2026-03-14 21:15	289.4	336.1	view
1	2026-03-14 10:42	367.4	373.6	view

[← New calculation](#)**Results for:** $P(/C=C/P(C1=CC=CC=C1)C2=CC=CC=C2)(C3=CC=CC=C3)/C=C/P(C4=CC=CC=C4)C5=CC=CC=C5$ Calculated 2026-09-27 · canonical: C(=C/P(c1ccccc1)c1ccccc1)\P(/C=C/P(c1ccccc1)c1ccccc1)c1ccccc1

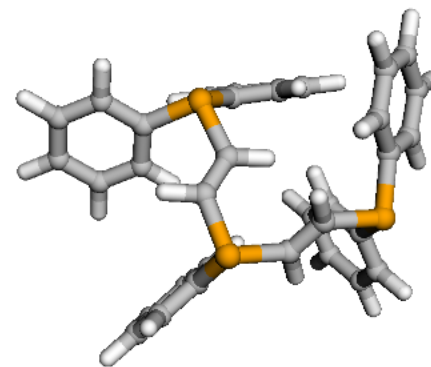
Reorganization energies

Type	Value
λ^+ (hole)	289.8 meV (0.2898 eV)
λ^- (electron)	335.8 meV (0.3358 eV)

Partial contributions

Component	Energy (eV)
λ_1^+ (cation relaxation)	0.1328
λ_2^+ (neutral relaxation)	0.157
λ_1^- (anion relaxation)	0.1024
λ_2^- (neutral relaxation)	0.2334

3D geometry (neutral)



Závěr a poděkování

- Claude Code velmi použitelný
- Vyzkoušení na menším projektu dotaženém do konce
- MVP ~ 20 hodin, vylepšení ~ 20 hodin
- Kubernetes infrastruktura výborně dostupná pro nasazení

TODO já:

- Napojení do PBS pro DFT výpočty
- Mailové upozornění

TODO e-infra:

- Dokumentace pro agenty
- Skills