

Národní centrum pro výzkum biomolekul & MetaCentrum

Petr Kulhánek

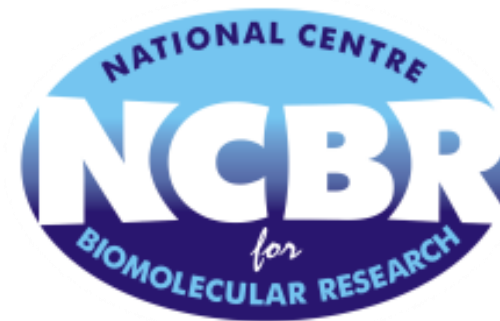
kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Masarykova Univerzita
Přírodovědecká fakulta, Kotlářská 2
61137 Brno

Obsah

- **Národní centrum pro výzkum biomolekul**
- **Projekty z oblasti výpočetní chemie**
- **Spolupráce s MetaCentrem**
 - **Hardware**
 - **Sdílení zdrojů**
 - **Software**
- **Shrnutí**

Národní centrum pro výzkum biomolekul



Oblasti zájmu

- Glykobiemie a proteinové inženýrství lektinů
- Interakce RNA/protein
- NMR spektroskopie
- Nanobiotechnologie
- Oprava DNA a stabilita genomu
- Výpočetní a teoretické metody, molekulové modelování
- Výpočetní studie na nukleových kyselinách
- Posttranskripční modifikace a degradace RNA

Projekty z oblasti výpočetní chemie

- Prof. RNDr. Koča Jaroslav, DrSc.
- Prof. RNDr. Jiří Šponer, DrSc.
- Prof. RNDr. Vladimír Sklenář, DrSc.



cca 40 aktivních uživatelů

Docking

Molekulová dynamika

Kvantově chemické výpočty

➤ virtuální screening

- dynamika molekulárních systémů
- konformační přeměny
- vazebné a aktivační volné energie

- chemická reaktivita
- interakční energie
- NMR parametry

náročnost úloh



počet úloh

Hardware

MetaCentrum

MetaCentrum
(produkční)

862 CPU

perian

160 CPU

orca

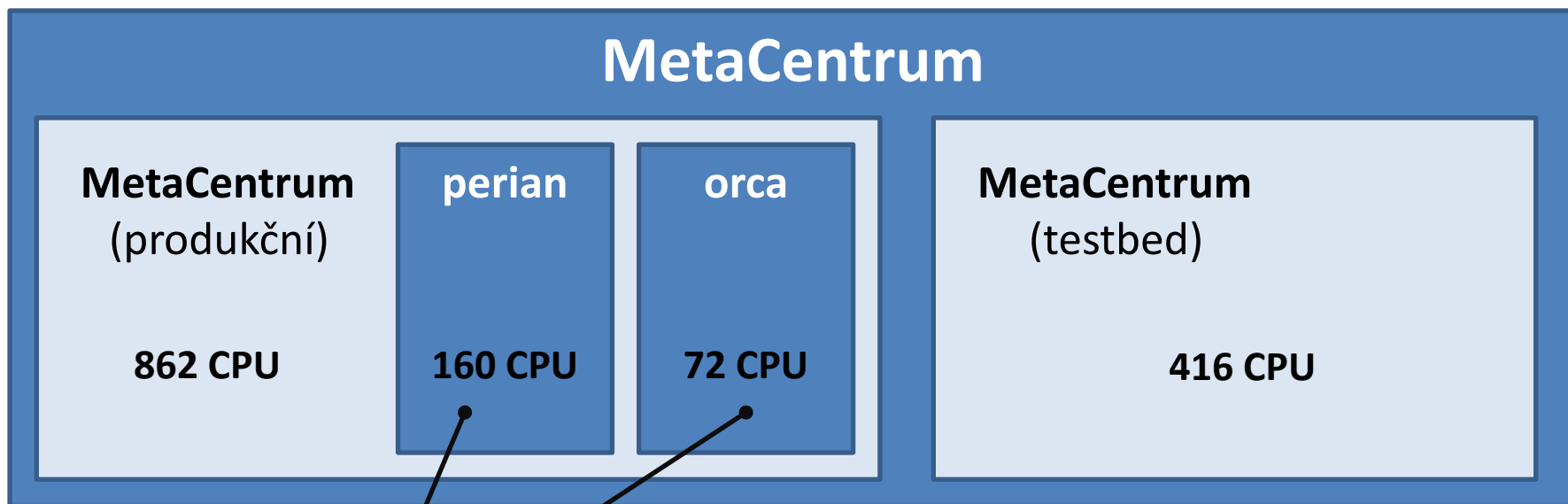
72 CPU

MetaCentrum
(testbed)

416 CPU

Hardware

MetaCentrum



**18 % z celkové kapacity MetaCentra
+ rozšíření klastru perian o dalších 160 CPU**

Sdílení zdrojů NCBR

Klastr perian:

- **virtuální doména 1**
 - fronta ncb
 - fronta normal
 - fronta short
 - fronta backfill
- **virtuální doména 2**
 - fronta preempt_ncbr

Klastr orca:

- **virtuální doména 1**
 - fronta preemptible
 - fronta backfill
- **virtuální doména 2**
 - fronta orca

Prioritní fronty pro uživatele NCBR: ncb, preempt_ncbr, orca

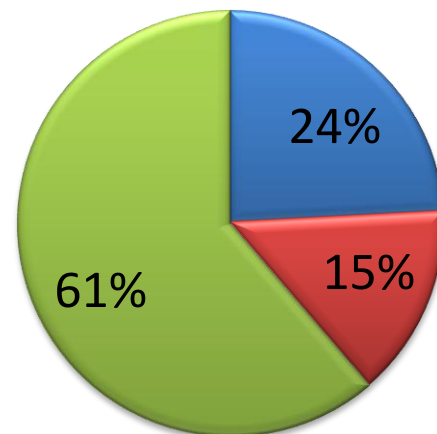
Fronty pro ostatní uživatele MetaCentra: normal, short, backfill

Virtuální screening (backfill/voce)

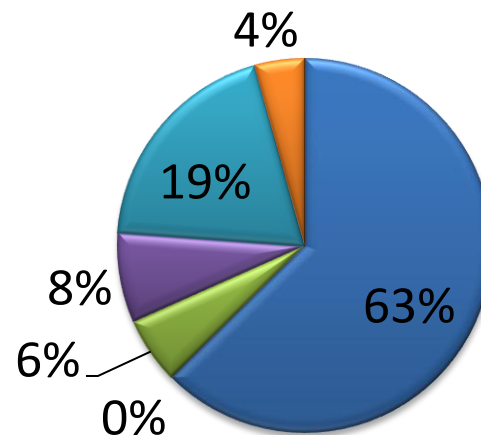
Dvoudenní test:

- autodock vina
- doba výpočtu cca 1-10 minut/ligand
- délka úloh cca 22 hodin
- vlastní nástroje pro distribuci ligandů
- celkem 2500 úloh
- cca 900 souběžně běžících úloh
- rychlost okolo 250 000 ligandů za den

■ meta ■ meta-testbed ■ voce



■ hr ■ cz ■ sk ■ pl ■ at ■ hu



Datová úložiště

/storage/home/<login>

[NFS]

- “primární“ úložiště dat

/software/ncbr

[AFS]

- úložiště pro vlastní software

Software & job management

- Vlastní řešení pro správu software

- Vlastní nástavbu pro správu úloh rozšiřující PBS

--- Molecular Mechanics and Dynamics -----

amber	amber-pmf	apbs	delphi	pmflib	solvate
amber-atd	ambertools	cicada	dynutil	red	whatif

--- Quantum Mechanics and Dynamics -----

cfour	cpmd	dftb+	gaussian	mag	orca	turbomole
clumo	dalton	gamess-us	link402	mopac	qmutil	

--- Docking and Virtual Screening -----

autodock	autodock-vina	cheminfo	dock	mgltools	
----------	---------------	----------	------	----------	--

--- Bioinformatics -----

blast	copasi	clustalw	modeller	rate4site	
blast+	cd-hit	fasta	muscle		

--- Conversion and Analysis -----

3dna	cats	dnaplots	mole	openbabel	retinal
babel	curves	inchi	msms	qhull	wham

--- Vizualization -----

blender	gnuplot	icm	molten	povray	swisspdbv	vmd
chimera	grace	icm-browser	mplayer	pymol	triton	

--- Crystallography -----

arp_warp	ccp4	chooch	coot	mosflm	phaser	
----------	------	--------	------	--------	--------	--

--- NMR Spectroscopy -----

copps	relax	sparky				
-------	-------	--------	--	--	--	--

Shrnutí

- **NCBR je a bude dlouholetým klíčovým partnerem MetaCentra**
- **do společné výpočetní infrastruktury nabízí okolo 250 CPU, která je částečně dostupná celé uživatelské komunitě MetaCentra**
- **využívá jednotné správy výpočetních zdrojů**
- **intenzivně využívá datové úložiště MetaCentra (/storage a /software/ncbr)**

Poděkování

- **tým MetaCentra**
- **tým NCBR**
- **POSTBIOMIN (finanční podpora)**