

## GT-mc<sup>2</sup>: Minha Cloud Científica! - Macro-atividade # 275: Atividade 4: Desenvolvimento de ambientes de SaaS

<b>Situação:</b>	Em andamento	<b>Prioridade:</b>	Normal
<b>Autor:</b>	Antônio Tadeu Azevedo Gomes	<b>Categoria:</b>	
<b>Criado em:</b>	25/02/2013	<b>Atribuído para:</b>	Glaucio Souza
<b>Alterado em:</b>	27/12/2013	<b>Data prevista:</b>	30/10/2013
<b>Título:</b>	Atividade 4: Desenvolvimento de ambientes de SaaS específicos no CESUP/UFRGS		
<b>Descrição:</b>	Esta atividade contempla a divulgação da plataforma mc2 junto a potenciais usuários no CESUP/UFRGS, com o objetivo de identificar aplicações que possam ser executadas na plataforma mc2. Identificadas essas aplicações, as mesmas serão utilizadas para a configuração de ambientes de SaaS customizados que facilitem a utilização da aplicação por seus usuários.		

### Histórico

#### Sexta, 26 de Abril de 2013, 10:57 hs - Glaucio Souza

- Data prevista ajustado para 30/10/2013

- Início ajustado para 25/02/2013

- % Terminado alterado de 0 para 20

# 04/03/2013: Definida relação de aplicações utilizadas no CESUP/UFRGS

# 05/04/2013: Realizado treinamento remoto Grade PADBR e Plataforma mc2

# 08/04/2013: Reunião Técnica dos CENAPADs

#### Terça, 30 de Abril de 2013, 10:05 hs - Glaucio Souza

# Selecionado o pacote GROMACS para ser utilizado em ambiente SaaS na plataforma mc2

# Contato com usuários do GROMACS no CESUP para coleta de informações

Em andamento:

# Estudo das informações coletadas de usuários do CESUP para implementar portal GROMACS

#### Terça, 30 de Abril de 2013, 19:18 hs - Antônio Tadeu Azevedo Gomes

- Situação alterado de Nova para Em andamento

#### Sexta, 31 de Maio de 2013, 17:35 hs - Glaucio Souza

- % Terminado alterado de 20 para 30

# Gerados os arquivos de configuração e script de chamada de execução do binário da aplicação que serão utilizados na implementação do portal

# Gerados os arquivos necessários para execução de uma simulação GROMACS

# Simulação GROMACS testada em ambiente de linha de comando para servir de parâmetro na execução de testes iniciais no portal

Em andamento:

# Instalação do algoritmo no servidor CSGrid de produção

# Construção do portal GROMACS

#### Quarta, 12 de Junho de 2013, 12:13 hs - Glaucio Souza

- % Terminado alterado de 30 para 40

# Algoritmo GROMACS instalado no servidor CSGrid de produção

# Testes do algoritmo foram realizados com sucesso no cluster gauss do CESUP

# Testes do algoritmo no cluster fermi do CESUP em espera devido à grande carga no cluster

Em andamento:

# Construção do portal GROMACS

#### Segunda, 24 de Junho de 2013, 17:00 hs - Glaucio Souza

- % Terminado alterado de 40 para 50

# O portal GROMACS foi gerado utilizando o PortEditor e colocado em produção

Em andamento:

# Testes com o portal e estudos dos ajustes necessários

#### **Quinta, 01 de Agosto de 2013, 15:17 hs - Glaucio Souza**

- % Terminado alterado de 50 para 60

# Foram realizados testes bem sucedidos do portal GROMACS tanto no modo de usuário cadastrado como com usuário convidado

# Foi adicionada uma nova versão do algoritmo fixando o número de núcleos de processamento disponibilizados para cada job

Em andamento:

# Divulgação do portal para alguns usuários selecionados testarem as funcionalidades existentes

# Analisar avaliação dos usuários buscando a melhoria do portal

# Selecionar e implementar modificações sugeridas

# Restringir mais o acesso aos recursos computacionais disponibilizados para os usuários convidados

#### **Quarta, 25 de Setembro de 2013, 17:36 hs - Glaucio Souza**

- % Terminado alterado de 60 para 80

Em andamento:

# Usuários realizando testes no portal

Próximos passos:

# Realização de seminário para grupo de pesquisa apresentando os serviços disponíveis na plataforma MCC

# Analisar avaliação dos usuários buscando a melhoria do portal

# Selecionar e implementar modificações sugeridas

# Restringir mais o acesso aos recursos computacionais disponibilizados para os usuários convidados

#### **Terça, 05 de Novembro de 2013, 16:19 hs - Glaucio Souza**

# Foi realizado um seminário para um grupo de pesquisa em bioinformática apresentando os serviços disponíveis na plataforma MCC. O grupo em questão está utilizando experimentalmente o portal GROMACS buscando identificar e sugerir modificações necessárias

# Os usuários experimentais sugeriram algumas modificações na plataforma e no algoritmo, de forma a facilitar o uso do portal e fornecer algumas funcionalidades que o GROMACS já oferece por linha de comando

Em andamento:

# As sugestões dos usuários estão sendo implementadas

# As restrições ao acesso para os usuários convidados serão implementadas junto a implementação das sugestões dos usuários

#### **Terça, 05 de Novembro de 2013, 16:19 hs - Glaucio Souza**

- % Terminado alterado de 80 para 90

#### **Sexta, 27 de Dezembro de 2013, 18:13 hs - Glaucio Souza**

- % Terminado alterado de 90 para 100

\* Foi criado um novo algoritmo que contempla a possibilidade de uso do arquivo de checkpoint do GROMACS de forma que o usuário possa iniciar uma simulação a partir de um ponto de parada anterior.

\* Embora o portal forneça funcionalidades básicas para uma simulação GROMACS, possibilitando a execução da parte principal de uma simulação, ainda existem uma grande variedade de outras ferramentas do pacote que podem ser implementadas. O portal oferece os recursos necessários para a implementação de tais ferramentas, sendo necessário o estudo para definir quais são viáveis e qual a melhor forma de desenvolver seus algoritmos.

\* O portal foi considerado muito útil, funcional e amigável pelos usuários que realizaram os testes. Tal plataforma é considerada de grande valor para o avanço de pesquisas que necessitem de poder computacional, cumprindo seu papel de facilitadora na execução de simulações

científicas.

\* Estão em andamento colaborações entre o CESUP e os usuários que testaram a plataforma buscando a melhoria da mesma e identificar novas possibilidades de uso do que ela oferece.