

GT-mc²: Minha Cloud Científica! - Macro-atividade # 275: Atividade 4: Desenvolvimento de ambientes de SaaS

Situação:	Em andamento	Prioridade:	Normal
Autor:	Antônio Tadeu Azevedo Gomes	Categoria:	
Criado em:	25/02/2013	Atribuído para:	Glaucio Souza
Alterado em:	27/12/2013	Data prevista:	30/10/2013
Título:	Atividade 4: Desenvolvimento de ambientes de SaaS específicos no CESUP/UFRGS		
Descrição:	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.