

Narzędzia dostępne QosCosGrid



Zlecenie i kontrolowanie zadań w infrastrukturze PL-Grid odbywać się może w zależności od preferencji i przyzwyczajeń użytkownika z wykorzystaniem różnych Klientów.

Podstawowymi narzędziami dostępowymi QosCosGrid są klient tekstowy (QCG-SimpleClient) oraz narzędzie graficzne (QCG-Now).

- QCG-SimpleClient (klient tekstowy)
- QCG-Now (klient graficzny)
- Portale dziedzinowe
 - Nanotechnology-Gateway

QCG-SimpleClient (klient tekstowy)

QCG-SimpleClient jest zastawem poleceń wzorowanych na poleceniach systemu kolejkowego. Polecenia są jednakowe i niezależne od systemu kolejkowego dając jednolity dostęp i kontrolę zadań w całej infrastrukturze PL-Grid.

Pełna dokumentacja poleceń oraz formatu opisu zadań (QCG-Simple) znajduje się pod adresem: <https://docs.plgrid.pl/qcg-client>.

Dla wygody użytkowników QCG-SimpleClient zainstalowany jest na [maszynach dostępowych do infrastruktury QCG](#).

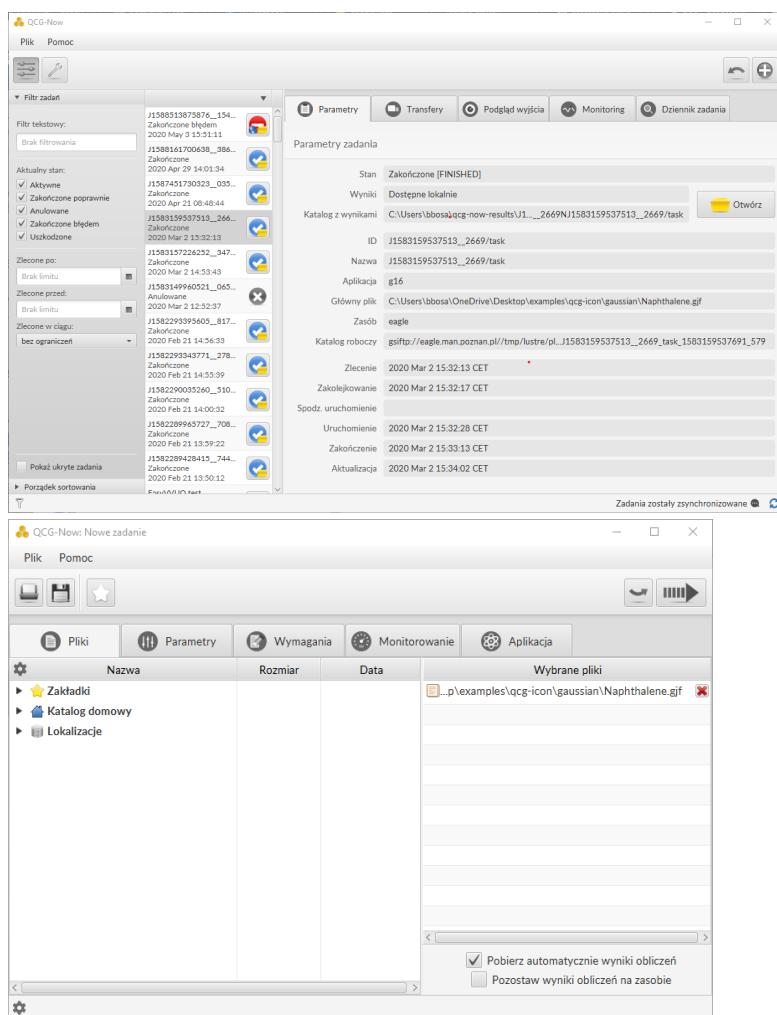


QCG-Now (klient graficzny)

QCG-Now jest prostą w użyciu aplikacją "desktopową" umożliwiającą zlecanie zadań obliczeniowych na zasoby PL-Grid wprost z komputerów osobistych. Poprzez QCG-Now możliwe jest zlecanie zadań obliczeniowych wykorzystujących popularne pakiety oprogramowania dostępne w infrastrukturze PLGrid, w tym Gaussian, MATLAB, NAMD, R, Abinit, Abaqus. QCG-Now umożliwi także uruchamianie skryptów stworzonych w BASH'u lub Python'ie. Aplikacja dostępna jest na systemy operacyjne Windows, Linux oraz MacOS.

(Aplikacja QCG-Now rozwijana jest w ramach prac własnych przez Poznańskie Centrum Superkomputerowo-Sieciowe).

Więcej informacji dostępne jest na [stronie domowej oprogramowania](#).



Portale dziedzinowe

Nanotechnology-Gateway

Środowisko portalowe dla naukowców z dziedziny nanotechnologii – Nanotechnology Gateway. Aktualna wersja zintegrowana jest z aplikacjami ABINIT, Quantum Espresso oraz NAMD i NW-Chem a jej podstawową funkcjonalnością jest przygotowywanie danych wejściowych, zlecanie zadań do rozproszonych systemów komputerowych, monitorowanie stanu i kontrolowanie symulacji, przetwarzanie i analiza rezultatów, przechowywanie i archiwizacja danych. Oprócz tego dostępne są w pełni zautomatyzowane operacje na danych, jak ich przenoszenie, konwersja, przetwarzanie oraz wizualizacja. Najbardziej zaawansowaną częścią portalu jest klient aplikacji ABINIT. Pakiet oprogramowania do symulacji ABINIT pozwala między innymi na rozwiązywanie następujących problemów: wyznaczanie energii całkowitej, gęstości ładunkowych oraz struktury elektronowej układów kwantowo-mechanicznych (elektrony, jądra atomowe) w oparciu o założenia teorii funkcjonału gęstości (pseudopotencjały oraz bazę fal płaskich).

vt NanoClient

Nanotechnology

ORMS3

Monitoring

Abinit

Case: Total energy and DOS charts

<< Back to case list

Advanced mode

Parameter set description: 4 parameter set

Number of processes: 4

The unit cell (a_{cell}): Bohr(a.u.) 10.18 10.18 10.18

The primitive vectors (p_{prim}): 0.0 0.5 0.5
0.5 0.0 0.5

The atom types (n_{type}): 1

The atomic number (z_{nucl}): 14

Troulier-Martins psp (potentials files): 14sl.pspnc Upload/Assign...

Definition of the atoms - number of atoms (n_{atom}): 2

Atoms types (t_{type}): 1 1

The location of atoms (x_{red}) - Fractional (atomic) coordinates, one triplet for each atom: 0.0 0.0 0.0
0.25 0.25 0.25

Maximal kinetic energy cut-off, in Hartree (e_{cut}): 8.0

Definition of the k-point grid (k_{pt}): Automatic

Grid based on the primitive vectors of the reciprocal space (n_{gkpt}): 5 5 5

Maximal number of SCF cycles (n_{step}): 10

Cut-off difference between evaluations of total energy (tol_{de}): 1.0d-6

Visualization chart

Save chart as...

Print chart...

Curves

Shadow

DOS chart for Set 1

DOS chart for Set 2

DOS chart for Set 3

DOS chart for Set 4

Energy (eV)

Energy (eV)

Selected set results:

Download results/visualization files...

Show visualization chart...

Case search...

Case keywords:

Parameter Set keywords:

Relative difference of total energy (current set)

Step (no.)

Print chart...

Total energy chart (all parameter sets)

Set (no.)

Add set

Update set

Parallelization

Submit case

Submit case to QE

Cancel case

Parameter sets and results

Minimum total energy: -8.8726097094126

Set	Description	Action	Total energy	Progress	Vis
1	1 parameter set	Show Cancel	-8.8662238959759	FINISHED	✓
2	2 parameter set	Show Cancel	-8.8718529095013	FINISHED	✓
3	3 parameter set	Show Cancel	-8.8724909739094	FINISHED	✓
4	4 parameter set	Show Cancel	-8.8725723302567	FINISHED	✓
5	5 parameter set	Show Cancel	-8.8726017431746	FINISHED	✓
6	6 parameter set	Show Cancel	-8.8725999848763	FINISHED	✓

UNIA EUROPEJSKA
EUROPEJSKI FUNDUSZ
ROZWOJU REGIONALNEGO

INNOWACYJNA
GOSPODARKA
NAKŁADOWA STRATEGIA SPÓJNOŚCI