



BOLETÍN DE PRÁCTICAS 1:

USO DEL SUPERCOMPUTADOR BEN ARABÍ

Versión: 1.0

Fecha: 11 de Marzo de 2011



"Una manera de hacer Europa"



SECCIÓN 1

1. ACCESO AL SISTEMA

1.1.- Acceda al cluster del Supercomputador y cambie la contraseña. Recuerde que la contraseña debe de cumplir ciertos requisitos.

1.2.- ¿Cómo podemos saber en qué nodo de login estamos logueados?

2. ESPACIO DE ALMACENAMIENTO PERMANENTE

2.1.- Compruebe el espacio ocupado en su espacio personal.

3. ENTORNO DE EJECUCIÓN

3.1.- Consulta las aplicaciones instaladas en el cluster

3.2.- Carga una aplicación y consulta las variables de entorno que modifica

3.3.- Liste los entornos que tiene cargados

3.4.- Borre todos los entornos y compruebe que ya no están disponibles

4. SISTEMA DE COLAS LSF

4.1.- Consulta las colas disponibles en el cluster

4.2.- Mande el script prueba para su ejecución en el cluster

4.3.- Consulte el estado del trabajo.

4.4.- Consulte la salida del trabajo. ¿Ha acabado correctamente?

5. TRANSFERENCIA DE FICHEROS

5.1.- Transferir el fichero de salida a nuestro equipo local

SECCIÓN 2

La segunda parte de la práctica consiste en enviar un script de trabajo Gromacs al supercomputador y visualizar el resultado. Para ello puede tomar como referencia el ejemplo usado en la sección anterior

Gromacs es un software para cálculos de dinámica molecular capaz de simular ecuaciones de Newton del movimiento para sistemas de cientos de millones de partículas. Está diseñado principalmente para moléculas bioquímicas como proteínas o lípidos que tienen varias interacciones complicadas de relacionar. En este ejercicio vamos a representar la lisozima, también llamada muramidasa.

Notas:

- El script debe ejecutarse en 32 cores.
- Debe utilizarse la cola arabi_32x144h
- Las instrucciones de Gromacs que se ejecutan son las siguientes:

```
# Creamos la topología de GROMACS a partir del fichero pbd
pdb2gmx_d -f 1LYD.pdb -water tip3p -ff oplsaa
```

```
# Añadimos agua alrededor de la proteína con el fin de disminuir el tiempo de simulación
editconf_d -bt dodecahedron -f conf.gro -o box.gro -d 0.5
genbox_d -cp box.gro -cs spc216.gro -p topol.top -o solvated.gro
```

```
# Ejecutamos 3 simulaciones: una con el fin de minimizar las energías, otra con el fin de
equilibrar el agua alrededor de la proteína y la última es la simulación en sí.
```

```
grompp_d -f em.mdp -p topol.top -c solvated.gro -o em.tpr
mpirun.lsf mdrun_d -v -deffnm em
grompp_d -f pr.mdp -p topol.top -c em.gro -o pr.tpr
mpirun.lsf mdrun_d -v -deffnm pr
grompp_d -f run.mdp -p topol.top -c pr.gro -o run.tpr
mpirun.lsf mdrun_d -v -deffnm run
```

Comprobamos si se ha ejecutado correctamente el script y a continuación con el siguiente comando generamos un video de nuestra proteína (movie.pbd):

```
$ module load gromacs
$ trjconv_d -s run.gro -f run.xtc -e 2500 -o movie.pbd
```

Se nos pedirá que seleccionemos un grupo. Elegimos el 1.

Finalmente solo queda transferir el archivo movie.pdb a nuestro PC y visualizarlo con el programa PyMOL.