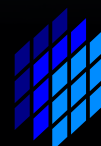


# hpc focus

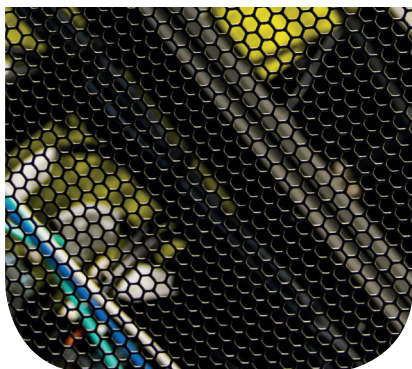
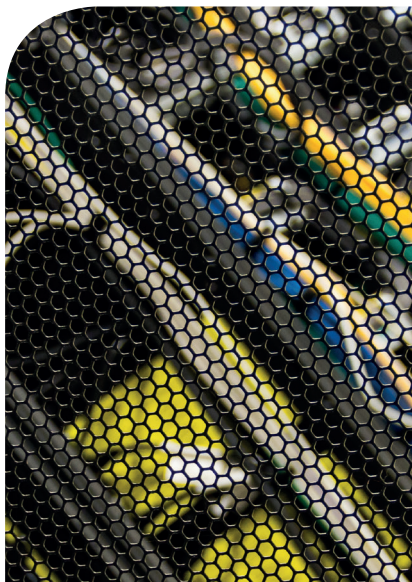






# Power775supercomputer

# OBSAH



Strana 04 - 15

## **SUPERPOČÍTAČ AUREL**

Článok o superpočítači Aurel, jeho úlohe v rámci slovenskej vedy a názory vedcov - užívateľov na jeho význam.

Strana 16 - 41

## **APLIKÁCIE V PRAXI**

Články a rozhovory s oslovenými užívateľmi Aurela: prof. Ing. Ivanom Štichom, DrSc., prof. Ing. Romanom Martoňákom, DrSc., doc. Ing. Tomášom Bučkom, PhD., RNDr. Ľubomírom Smrčkom, CSc. a RNDr. Dušanom Senkom, PhD.

Strana 42 - 60

## **ŠPECIFIKÁCIE A NÁVODY**

Technické špecifikácie superpočítača Aurel a vysokovýkonného klastra v Žiline; praktické návody a postupy pri zriaďovaní užívateľského konta pre vedecké projekty.



Ing. Tomáš Lacko  
*Riaditeľ VS SAV*

## Úvodné slovo riaditeľa

Milí čitatelia,

dostáva sa Vám do rúk prvé číslo časopisu, ktorým chceme prezentovať výsledky z používania vysokovýkonnej výpočtovej techniky širokej verejnosti. Pozornosť upriamime samozrejme predovšetkým na superpočítač Aurel, ktorý je dnes najvýkonnejším výpočtovým systémom v Slovenskej infraštruktúre pre vysokovýkonné počítanie a svojou konfiguráciou poskytuje našim významným používateľom dostatočný výpočtový výkon k tomu, aby mohli tvoriť medzinárodne akceptovateľné výsledky svojej vedeckej práce.

Pre progresívneho vedeckého pracovníka je v súčasnosti superpočítač svetom virtuálneho experimentu. Jeho využitím je schopný s vyso-

kou mierou pravdepodobnosti predpokladať výsledok finančne veľmi náročného alebo ťažko realizovateľného reálneho experimentu.

Svojim obsahom v jednotlivých číslach časopisu sa chceme, okrem dosiahnutých výsledkov pri využívaní superpočítača, dotknúť aj tém a otázok týkajúcich sa našej medzinárodnej spolupráce, možného ďalšieho rozvoja nášho prvého superpočítača. Radi by sme Vám touto cestou poskytli aj rozhovory a názory našich významných používateľov z radov vedeckých pracovníkov, ako aj priemyslu na problematiku využívania vysokovýkonnej výpočtovej techniky vo vede a výskume.

Budeme veľmi radi, keď sa Vám naše prvé číslo nášho časopisu bude páčiť.

RIADITEĽ VS SAV  
Tomáš Lacko

EDITOR A KOORDINÁTOR  
Gabriela Obadalová

AUTORI ČLÁNKOV  
Ivan Štich  
Roman Martoňák  
Tomáš Bučko  
Lubomír Smrčok  
Dušan Senko

AUTORI MANUÁLOV  
Lukáš Demovič  
Miloslav Valčo  
Jozef Federič

FOTOGRAFI  
Pavol Novák

GRAFIKA A DTP  
Rastislav Maršálek  
Gabriela Obadalová

DESIGN TITULKY  
Rastislav Maršálek

TLAČ  
FO ART s.r.o.  
Prešovská 45  
821 02 Bratislava  
foart@foart.sk  
www.foart.sk

ADRESA  
Výpočtové stredisko  
Slovenskej akadémie vied  
Dúbravská cesta 5  
845 35 Bratislava  
Slovenská republika

[www.vs.sav.sk](http://www.vs.sav.sk)

ISBN 978-80-89871-00-1

Texty neprešli jazykovou korektúrou.



TOP

46 Terabit/sec  
Optical Backplane

01

# SUPERPOČÍTAČ AUREL

**hpc focus**



# Zrod superpočítača Aurel



## Kompletnú genézu zrodu a praktického nasadenia superpočítača Aurel - prvého superpočítača na Slovensku, nám objasnil vedúci projektu SIVVP a riaditeľ Výpočtového strediska Slovenskej akadémie vied, pán Ing. Tomáš Lacko.

V rokoch tesne pred začiatkom prvého programového obdobia pre čerpanie prostriedkov zo štrukturálnych fondov sa v tzv. zásobníku projektov nachádzali dva návrhy – jeden bol orientovaný na vybudovanie infraštruktúry pre gridové počítanie a druhý na vytvorenie výpočtových centier s vysokovýkonnou výpočtovou technikou – superpočítačmi rôznych architektúr. Na Slovensku v tom čase už dlhé roky absentovala infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie, ktorá bola vo vyspelých krajinách bez prerušenia využívaná v oblasti základného, ako aj aplikovaného výskumu, vývoja v rôznych segmentoch priemyslu. Nasadenie superpočítačov do výskumu a vývoja významnejšou mierou výrazne prispelo k rýchlejšiemu dosahovaniu cieľov.

Pre objasnenie dôvodov, prečo sa tak stalo, je potrebné uviesť, že vo výpočtovom prostredí vysokovýkonného výpočtového systému – superpočítača, je možné modelovať a simulovať rôzne situácie, správanie sa, vlastnosti, apod. daného skúmaného objektu alebo predmetu výskumu. Z ekonomického pohľadu sa prenesením reálneho experimentu do virtuálneho získava ohromná finančná a časová úspora. Pomerne dobre sa dokumentuje napr. pri dizajne liečiv - k reálnemu experimentu sa pristupuje až vtedy, keď výsledky práce výskumných pracovníkov na superpočítači ukážu, aké by mohlo byť optimálne zloženie lieku. Superpočítače sú využívané okrem základného a aplikovaného výskumu aj v iných oblastiach – napr. v stavebníctve pri simulovaní rôznych poveternostných vplyvov na mostové konštrukcie, stavby, ďalej v energetike, ekonomike, pri stanovovaní predpovede počasia, atď.

Aby európska infraštruktúra poskytujúca výpočtové prostriedky pre výskum a vývoj v ekonomicky rozvinutých krajinách pozdvihla svoju konkurencieschopnosť voči svetu, predovšetkým voči USA, bolo rozhodnuté vybudovať v rámci organizácie PRACE šesť superpočítačových centier – vo Francúzsku, Španielsku, Taliansku a tri v Nemecku s komplementárnou architektúrou a celkovým výpočtovým výkonom viac ako 15 PFLOPS. Na úrovni Tier-0 tak tieto systémy tvoria vrcholnú úroveň HPC ekosystému. PRACE výskumnú infraštruktúru však tvorí aj 16 národných superpočítačových centier na úrovni Tier-1. Ak sme sa chceli priblížiť k tomuto progresívnemu trendu vo vede a výskume aj tu u nás na Slovensku, museli sme sa pustiť do aktivít, ktoré smerovali k aktualizácii analýzy požiadaviek a potrieb budúcich našich používateľov – vedec-kých pracovníkov vo vzťahu k očakávaným výpočtovým výkonom vybraných technológií, potrebných periférnych zariadení a softvérového vybavenia.

Dlhoročná snaha získať prostriedky na zakúpenie superpočítačového systému, ako aj vysokovýkonných klastrov, ktoré by boli prepojené do výpočtového gridu nakoniec vyústili do prvého stretnutia na pôde MŠ SR, ktoré sa uskutočnilo v apríli 2008. Té-

mou k rokovaniu boli predložené analýzy orientované na využitie superpočítačov a vysokovýkonných klastrov v oblasti vedy a výskumu na celom území Slovenska. Analýzy boli vypracované na základe výzvy MŠ SR z konca mesiaca februára 2008. Výsledkom prvého stretnutia bolo vytvorenie dvoch pracovných skupín, ktorých úlohou bolo vytvoriť a predložiť návrh konceptu na vybudovanie centier/centra vysokovýkonnej výpočtovej techniky na Slovensku v rámci národných projektov európskych štrukturálnych fondov. Po vyhodnotení oboch predložených analýz pracovníkmi MŠ SR a Riadiaceho orgánu MŠ SR, sa v septembri 2008 uskutočnilo druhé rokovanie na pôde MŠ SR. Boli prerokované oba predložené návrhy národných projektov – Národné superpočítačové centrum a Slovak Grid. Výsledkom stretnutia bolo rozhodnutie pripraviť jeden návrh projektu pre vybudovanie infraštruktúry vysokovýkonnej výpočtovej techniky, ktorá bude obsahovať gridovú a superpočítačovú infraštruktúru. Zlúčením oboch cieľov – vybudovať Národné superpočítačové centrum ako aj Národnú gridovú infraštruktúru (Slovak Grid), vznikol spoločný návrh projektu Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie (SIVVP), ktorý bol na pracovnom stretnutí v KC Smolenice v dňoch 9. a 10. marca 2009

prerokovávaný a schválený. V marci 2009 bol návrh projektu SIVVP odovzdaný na MŠ SR ako podklad pre vypísanie výzvy na národný projekt v rámci Operačného programu výskum a vývoj. Zverejneniu výzvy predchádzala ešte oponentúra návrhu projektu pred Radou pre informatiku a informatizáciu v školstve v apríli 2009, ktorá návrh projektu jednohlasne schválila a odporučila ministrom školstva, aby na projekt bola vypísaná výzva. Uzavretá výzva na národný projekt SIVVP pod kódom OPVaV/K/RKZ/NP/2009-1 bola zverejnená v máji 2009. Žiadosť o pridelenie prostriedkov z ŠF ako odpoveď na uzavretú výzvu, ktorá bola vypracovaná delegovanými zástupcami z troch pracovísk SAV a štyroch univerzít, sme odovzdali dňa 31. augusta 2009. Národný projekt (NP) Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie bol schválený ministrom školstva dňa 1. decembra 2009 ako infraštruktúrny projekt v rámci OPVaV s celkovým rozpočtom 25 965 000 EUR so strategickým cieľom: „Vybudovať počítačovú infraštruktúru, ktorá umožní realizáciu vysokovýkonných výpočtov pre vedu, výskum a vývoj a akademickú sféru na európskej úrovni.“ Podpisom Zmluvy o NFP v januári 2010 sa rozhodlo o tom, že aj slovenskí vedci dostanú pre svoju výskumnú činnosť k dispozícii superpočítač na národnej úrovni s očakávaným výpočtovým výkonom desiatky TFLOPS.

Národný projekt SIVVP je rozdelený do dvoch zrkadlových projektov. Hlavným partnerom v projekte je **Výpočtové stredisko SAV**, partnermi projektu v celi Konvergencia sú **Žilinská univerzita v Žiline**, **Univerzita Mateja Bela v Banskej Bystrici**, **Technická univerzita v Košiciach** a **Ústav experimentálnej fyziky SAV v Košiciach**. Partnermi projektu v celi Regionálna konkurencieschopnosť a zamestnanosť sú **Slovenská technická univerzita v Bratislave** a **Ústav informatiky SAV v Bratislave**. Otvorením aktivít národného projektu SIVVP orientovaných na vybudovanie infraštruktúry v I. etape a ich realizáciou, sme mohli v októbri 2012 uviesť do štandardnej prevádzky **prvý superpočítač na Slovensku**, ktorý dostal podľa výsledku z verejnej ankety pomenovanie po našom významnom vedcovi Aurelovi Stodolovi.

Superpočítač **AUREL** bol od prvého dňa spustenia obsadený používateľmi, ktorí dlhé roky na túto príležitosť čakali. Vo Výpočtovom stredisku SAV tak získali k dispozícii superpočítač s teoretickým výpočtovým výkonom 96 TFLOPS, 24TB operačnej pamäte a 600 TB externej diskovej kapacity. V troch tzv. supernódoch sa nachádzalo 3072 výpočtových jadier. Významnou charakteristickou črtou superpočítača je aj vysoká

hustota integrácie komponentov. Stratové teplo, ktoré pri prevádzke vzniká, je preto potrebné odvádzať chladiacou vodou.

Približne jeden rok prevádzky ukázal, že beh niektorých aplikácií by mohol byť omnoho rýchlejší, keby systém disponoval aj interným diskovým poľom. Vykázaná využiteľnosť poukázala aj na potrebu povýšenia výpočtového výkonu.

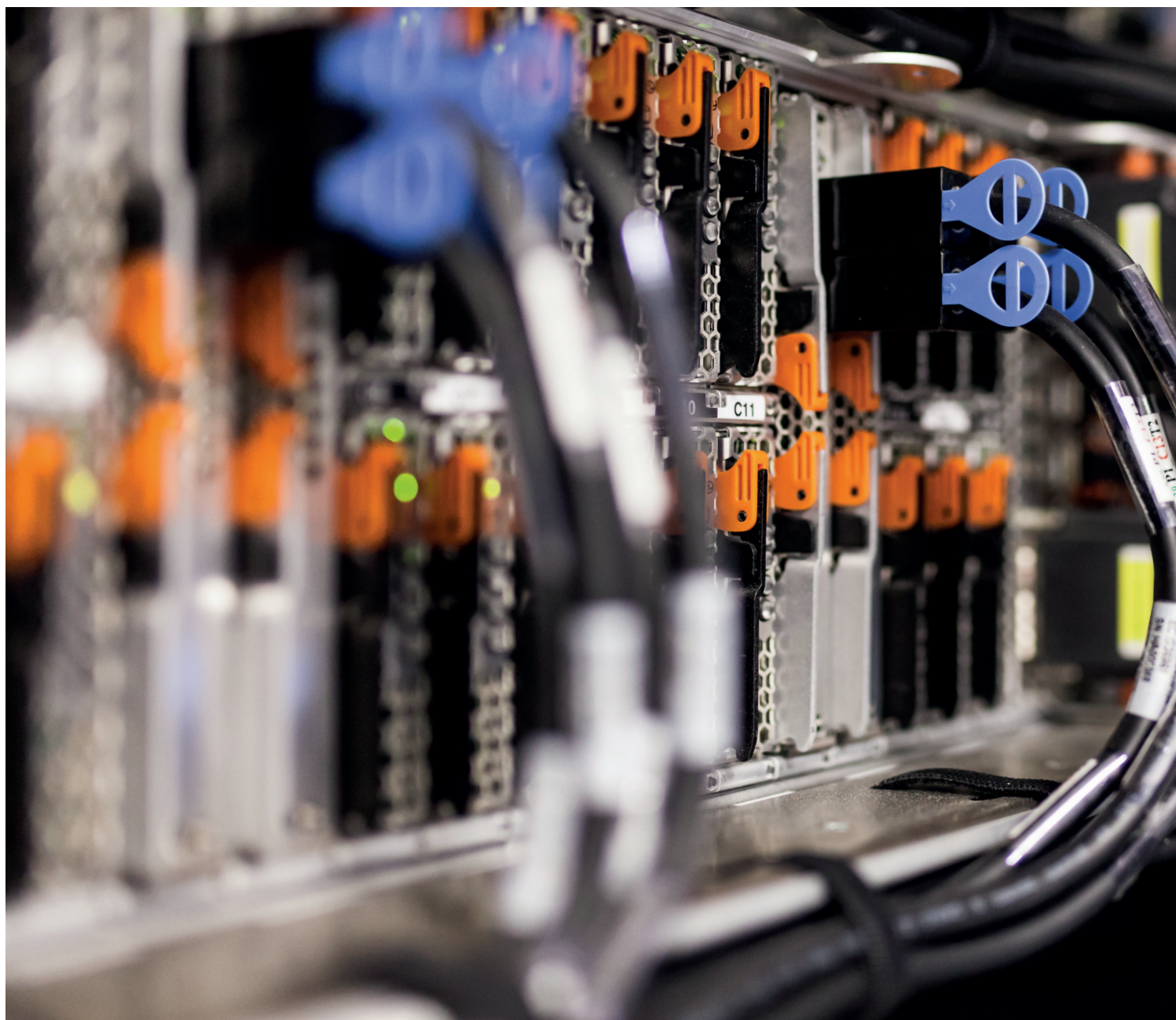
Výsledkom úspešnej realizácie druhej etapy je superpočítač s teoretickým výpočtovým výkonom 128 TFLOPS, s 4096 výpočtovými jadrami,

32 TB operačnej pamäte, 225 TB internej diskovej kapacity a nezmenených 600 TB externej diskovej kapacity. Posilnený AUREL sa v týchto dňoch po cca dvojmesačnej prestávke opäť dostáva k svojim používateľom.

Dnes, keď sa v našej spoločnosti veľmi často opakuje otázka, či investícia do takejto infraštruktúry, do superpočítača, bola taká nutná, je potrebné povedať – áno, a bol to najvyšší čas. V európskych a vo svetových merítkach sa podpora výskumu v oblasti využívania superpočítačov veľmi posilňuje. A sú na to reálne dôvody.



**Z ekonomického pohľadu sa prenesením reálneho experimentu do virtuálneho získava ohromná finančná a časová úspora.**



# VYJADRENIA

používateľov Aurela



01

## RNDr. Ľubomír Smrčok, CSc.

Ústav anorganickej chémie SAV

„V septembri nainštalovali vo Výpočtovom stredisku SAV v Bratislave ďalšiu časť superpočítača Aurel, pomenovaného po veľkom slovenskom vedcovi, Aurelovi Stodolovi. Inštalácia spomínanej časti zvýši výpočtový výkon približne o tretinu a otvorí cestu k využitiu najmodernejšej technológii firmy IBM ďalším užívateľom z radov hlavne domácich vedcov a študentov. Počítač Aurel bol zakúpený z prostriedkov štrukturálnych fondov a stal sa tak prvým krokom k zmenšeniu dlhodobého zaostávania Slovenska vo využívaní výkonnej výpočtovej techniky. Pre porovnanie uvedme, že do superpočítačov investujú nemalé položky nielen krajiny, ktoré sú dlhodobo na čele vedeckého pokroku ako USA či Japonsko, ale aj krajiny ešte donedávna označované za rozvojové ako napríklad Čína, či India. Zo skúseností získaných vo vedecky rozvinutejších krajinách vyplýva, že využitie superpočítačov vo vede a technike síce na jednej strane otvára úplne nové možnosti pre rozvoj spoločnosti, ale zároveň ho musíme chápať v širšom a hlavne v dlhodobejšom kontexte, nehládajúc pritom výhradne na krátkodobý prospech.

V prvej etape sa medzi užívateľmi superpočítača Aurel etablovali hlavne vedecké odbory s dlhodobou tradíciou vo využívaní výpočtovej techniky presahujúcej svojim výkonom bežné stolné počítače, a to výpočtová fyzika a chémia. Možno ale očakávať, že po prekonaní prvotných prekážok vyplývajúcich hlavne z neexistujúch, alebo len sporadických kontaktov s týmto druhom techniky, sa postupne pridajú aj užívatelia z ďalších vedných odborov. Cieľom musí byť, aby superpočítač nebol vedeckou komunitou vnímaný len ako



Projekt prvého slovenského superpočítača bol zrealizovaný v rámci programu čerpania prostriedkov zo štrukturálnych fondov Európskej únie, konkrétne Európskeho fondu regionálneho rozvoja EU, ako súčasť Operačného programu Výskum a vývoj.

**Superpočítač Aurel bol zakúpený z prostriedkov štrukturálnych fondov a stal sa tak prvým krokom k zmenšeniu dlhodobého zaostávania Slovenska vo využívaní výkonnej výpočtovej techniky.**

investícia v prospech jednej skupiny, ale ako nástroj pre čo najširšie spoločstvo.

Rastúci záujem možno očakávať v oblasti molekulárnej biológie a medicíny a to najmä s ohľadom na skutočnosť, že mnohé veľmi výkonné superpočítače sa vo svete inštalujú hlavne s ohľadom na využitie práve v týchto oblastiach. Práve superpočítač môže byť miestom, kde sa pri výskume nových liečiv, či analýz pochodov v organizme, stretnú molekulárna biológia, chémia a fyzika. Výskum DNA je len jednou z ukážok takejto symbiózy.

Ďalším významným poľom pôsobnosti superpočítačov je výskum nových materiálov. Vývoj nového a hlavne prakticky využiteľného materiálu je dlhodobá záležitosť ťahajúca sa niekedy desaťročia, vyžadujúc pritom nemalé investície. Technika zvaná počítačový návrh materiálov otvára nové cesty, pričom idea v pozadí je jednoduchá: superpočítače môžu metódami vychádzajúcimi z kvantovej mechaniky odrazu efektívne testovať tisíce zlúčením a hľadať tak potenciálne stavebné jednotky nových materiálov oveľa rýchlejšie, než by sa to mohlo udiť v laboratóriu.“

02

**Doc. Ing. Tomáš Bučko, PhD.**

Ústav anorganickej chémie SAV

„Zeolity sú trieda materiálov s poróznou štruktúrou, ktorá obsahuje dutiny dostatočne veľké na to, aby sa do nich zmestili molekuly alebo ich časti. Okrem toho, zeolity môžu byť chemicky modifikované tak,



že v chemických reakciách pôsobia ako kyseliny. Tieto ich vlastnosti ich predurčujú na využitie v heterogénnej katalýze, kde sprostredkávajú napr. transformácie uhľovodíkov. Na to, aby sa mohol optimalizovať výkon zeolitov ako katalyzátorov, je potrebné poznať množstvo chemických detailov – ideálne na úrovni jednotlivých atómov. Takéto vysoké rozlíšenie nie je bežne dostupné. Experimentálne a počítačové simulácie sú prakticky jediným dostupným nástrojom, umožňujúcim detailné informácie o chémii na úrovni atómov získať. Výskum, ktorým sa zaoberáme má za cieľ objasniť mechanizmy katalytických procesov prebiehajúcich v zeolitoch – pokúšame sa odpovedať na otázky typu „ako prebieha reakcia pri daných podmienkach?“ alebo „ktorá z možných reakcií prebieha rýchlejšie?“. Jednou z komplikácií, na ktoré narážame, je, že hmota na úrovni atómov podlieha zákonom kvantovej mechaniky a pri presných výpočtoch je nevyhnutné uvažovať elektróny a ich rozloženie v priestore. Výpočtová náročnosť takéhoto problému veľmi rýchlo narastá – a to prinajmenšom kubicky – s počtom častíc definujúcich systém. Dostupná výpočtová kapacita teda limituje veľkosť chemických modelov, ktoré sme schopní skúmať. Bežné výpočtové zariadenia umožňujú v súčasnosti realizovať



simulácie so systémami obsahujúcimi rádovo desiatky atómov, ale výpočtový výkon superpočítača Aurel posúva naše výskumné možnosti oveľa ďalej: pri spotrebovaní rovnakého výpočtového času môžeme skúmať systémy pozostávajúce až z niekoľkých tisícov atómov a to je posun, ktorý výrazne zvyšuje prediktívnu schopnosť našich počítačových simulácií.“

03

### Prof. Ing. Roman Martoňák, DrSc.

Katedra Experimentálnej fyziky Fakulty matematiky, fyziky a informatiky UK

„Inštaláciu superpočítača Aurel možno právom označiť za priekopnícky čin na poli slovenskej vedy. Metódy počítačových simulácií v súčasnosti už hrajú v mnohých oblastiach vedy fundamentálnu a nezastupiteľnú rolu. Okrem toho, že umožňujú riešiť matematicky veľmi komplikované problémy, poskytujú nám tzv. virtuálne laboratórium, kde môžeme realizovať „experimenty“ aj v situáciách, kde reálny experiment je drahý, nedostupný alebo nemožný. V oblasti materiálového výskumu je napr. možné použiť simulácie na návrh a skúmanie vlast-

ností materiálov, ktoré ešte neboli pripravené, a takto vopred poskytnúť experimentu cenné informácie. Zatiaľ čo vo vyspelom svete sú takéto simulácie už dávno bežnou realitou, na Slovensku ich bolo doposiaľ možné realizovať len v obmedzenom rozsahu na relatívne malých lokálnych zariadeniach, resp. s využitím zahraničných zdrojov. Vďaka Aurelovi dostala naša vedecká komunita adekvátny nástroj, ktorý má potenciál podstatnou mierou prispieť ku kvalitatívnemu zvýšeniu úrovne našej vedy.“

04

### RNDr. Dušan Senko, PhD.

Botanický ústav SAV

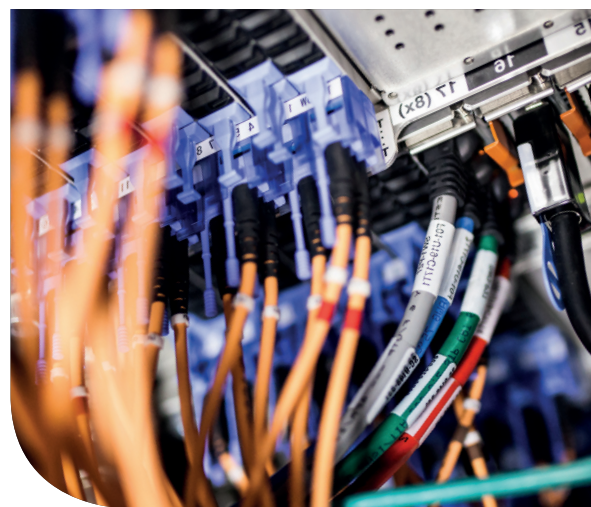
„Na superpočítači Aurel sa zameriavame na vyhodnocovanie molekulárno-biologických dát (sekvencie a iné DNA markery) v rámci štúdií zameraných na fylogénu a populačnú genetiku voľne rastúcich rastlín a lichenizovaných húb a na modelovanie ich distribúcie v priestore. Prostredníctvom spracovania dát z rôznych genetických markerov zisťujeme populačnú štruktúru, hybridizáciu, migráciu jedincov, či populácií a na základe sekvencií DNA vytvárame fylogenetické stromy, odhaľujeme príbuzenské vzťahy a evolúciu. Cieľom modelovania je nadviazanie na zmeny klímy cez hľadanie cyklov v minulosti a ich predpoveď do budúcnosti, rekonštrukcia vývoja areálov druhov, či druhových skupín, komparatívne štúdie koexistujúcich druhov, interpretácie zmien vo vegetácii, tvorbu prediktívnych vegetačných modelov, synantropizácie a hľadanie ekologických ník cez definovanie špecifických stanovištných podmienok (reliéf, mikroklima, geomorfológia, geológia), ktoré sú nevyhnutné pre existenciu jednotlivých druhov. Naše štúdie sú primárne zamerané na Karpaty a Panóniu, ale venujeme sa aj iným územiám, ktoré predstavujú „biodiversity hotspots“, t.j. sú bohaté na druhovú diverzitu a sú kľúčové z hľadiska pochopenia vývoja vegetácie v Európe. Realizácia uvedených výpočtov je vzhľadom na ich mimoriadnu náročnosť možná len na superpočítači.“

05

### Prof. Ing. Ivan Štich, DrSc.

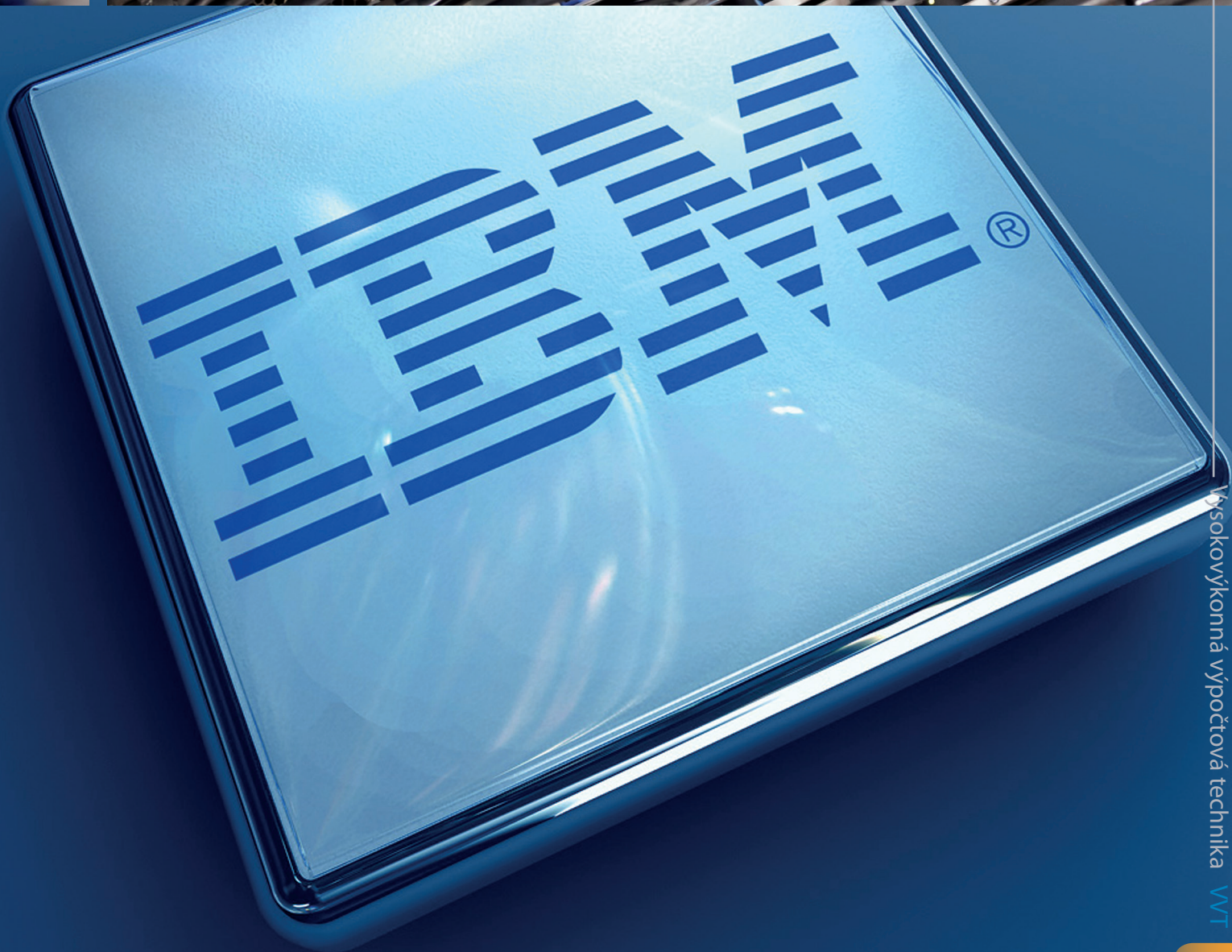
Fyzikálny ústav SAV

Počítačové modelovanie umožňuje pochopiť zobrazovanie a manipuláciu atómov na povrchoch alebo transport spinu elektrónu cez nanoklastre.



Skupina prof. Šticha používa superpočítač Aurel na large-scale modelovanie systémov na atomárnej/molekulovej škále s relevanciou pre fyziku, chémiu a vedu o materiáloch. Na superpočítači Aurel skupina prof. Šticha riešila projekty z oblasti zobrazovania a nano-manipulácie atómov pomocou SPM mikroskopie, nanotribológie, molekulárnych spínačov na báze foto-spínateľných molekúl a molekúl so spintronickými vlastnosťami. Tieto počítačové experimenty umožňujú napr. replikovať procesy, ktoré prebiehajú v SPM mikroskopii alebo pri transporte spinu cez nano-objekty. Tieto projekty vynikli v medzinárodnej spolupráci s Japonskom, U.K., U.S.A a Nemeckom a viaceré z nich boli priamo stimulované experimentálnymi výsledkami, ktoré naše simulácie umožňujú interpretovať na atomárnej úrovni.







02

# APLIKÁCIE V PRAXI

hpc focus



# Rozhovor s DUŠANOM SENKOM

**P**án Dr. Senko, aký je Váš momentálny predmet záujmu v oblasti geografie, botaniky či slnečnej aktivity a aké uplatnenie majú Vaše pozorovania v praxi?

Výsledky, ktoré sme dosiahli vďaka Aurelovi, znamenali mimoriadny posun najmä v hĺbke poznania formovania vegetačných spoločenstiev v závislosti od abiotickej časti prostredia. Prostredníctvom Aurela sme vedeli overovať platnosť hypotéz matematicky vyjadrenej koincidencie v podrobných mierkach. Počas posledného obdobia je trajektória a intenzita našej práce zameraná na dokončenie týchto extrapolačných rovníc. Toto je novým a významným prínosom, napríklad nami odvodené rovnice topoklimatickej diferenciácie teploty pôdy a vertikálnych atmosférických zrážok v detailných mierkach. Abiotické vlastnosti krajiny a ich bioenergetický potenciál sú určujúcim faktorom existencie. Primárnym článkom látkovo-energetického reťazca je slnečná energia, ktorej energetický príjem modifikujú klimatické, georeliéfové, substrátové, hydrologické a pôdne vlastnosti krajiny, pričom ide o ich synergický efekt. Topoklíma má z hľadiska takto postaveného problému kľúčovú úlohu. Jej výskumu zameranému na

tvorbu máp topoklimatických polí sa nevenuje v súčasnosti dostatočná pozornosť. Medzi ďalší významný výsledok patria algoritmy na priestorovú extrapoláciu potenciálnej prirodzenej vegetácie Slovenska. Podobné dielo bolo vytvorené začiatkom 80.-tych rokov minulého storočia. Jej vznik bol poznačený technických vybavením doby v ktorej vznikla, napr. v mnohých prípadoch išlo len o „odhad“. V súčasnosti sa snažíme na základe 51 181 fytocenologických zápisov z celého Slovenska, ktoré sú unikátnym vlastníctvom Botanického ústavu (na Slovensku nikto iný nemá databázu podobnej kvality a rozsahu), analyzovať vzťah medzi týmito zápsmi (rastlinné spoločenstvá, druhy), morfometrikou georeliéfu, topoklíomou a jeho oslnením. Výsledkom bude nová extrapolácia potenciálnej prirodzenej vegetácie Slovenska, ktorá je založená na striktných matematických pravidlách. Domnievame sa, že tieto naše inovatívne prístupy sa môžu aplikovať na množstvo environmentálnych štúdií, hodnotenie prírodných hrozieb, rizík a ďalších krajino-ekologických vlastností (ekologickej stability, únosnosti, citlivosti, zraniteľnosti).

S akými problémami sa musíte vysporiadať pri riešení úloh na Aurelovi?

Slabinou Aurela je jeho operačný systém AIX. Ten je vo všeobecnosti veľmi zriedkavý a preto samotné kompilácie programov sú tou najnáročnejšou vecou.

Môžete nás bližšie oboznámiť so softvérom GRASS, ktorý využívate na analýzu dát?

GRASS GIS v 7.1 je uvoľnený pod GNU/GPL licenciou. Ide o otvorený geografický informačný systém (GIS) s rastrovou, topologickou vektorovou a grafickou funkčnosťou ktorý pracuje na rôznych platformách (primárne na linuxe) prostredníctvom užívateľského grafického prostredia a shell-u. Používa sa pre riadenie a analýzu údajov, ich spracovanie, či územné modelovanie a vizualizáciu. Podporuje množstvo rastrových a vektorových formátov a údajov. Je vyvíjaný poprednými univerzitnými a komerčnými pracovníkmi.

Na vysvetlenie rozdielností v diverzite jednotlivých lokalít sme použili viaceré environmentálne premenné, ktoré boli buď priamo namerané v teréne, alebo odvodené z dátových vrstiev v prostredí geografických informačných systémov (GIS).



**RNDr. Dušan  
Senko, PhD.  
pôsobí ako  
vedecký pracovník  
v Botanickom  
ústave SAV.**

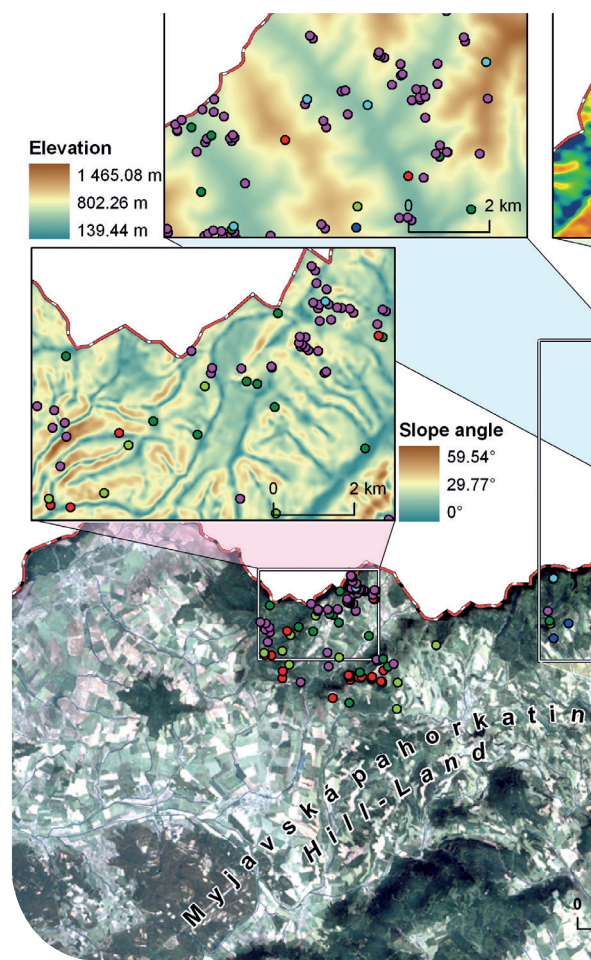
Parametre slnečného žiarenia (priame, difúzne, odrazené slnečné žiarenie a dĺžka trvania priameho slnečného žiarenia) sme vypočítali v upravenom module r.sun v prostredí GRASS GIS v 7.1, ktorý umožňoval paralelizovaný výpočet na superpočítači SAV Aurel. Rozlíšenie týchto rastrov sa odvíjalo z rozlíšenia digitálneho modelu georeliéfu úrovne 3 (DMR-3), ktorý bol základným dátovým podkladom výškových údajov k definovanému polohovému systému (poskytol Geodetický a kartografický ústav Bratislava). Základným zdrojom pre tvorbu DMR-3 boli tlačové podklady topografických máp v mierke 1:10 000 (t. j. 10 m). Časový prírastok výpočtu pre 365 dní bol zvolený po troch minútach. Rastre Linkeho koeficientu zákalu atmosféry a odrazivosti georeliéfu (albeda), ktoré vstupovali do výpočtu, predstavovali denné dlhodobé priemerné hodnoty. Jednotlivé zložky slnečného žiarenia sme spočítali do denných, mesačných a ročných súm, či priemerov.

Aké náročné sú výpočty vzhľadom na pamäť, jadrá, čas?

Výpočet rastrov všetkých zložiek slnečného žiarenia pre celé územie Slovenska v rozlíšení 10 m v neupravenej verzii modulu r.sun potrebuje približne 35GB RAM. Keďže jeden uzol na superpočítači Aurel má 256GB RAM a 32 jadier, mohli by sme potrebných 365 výpočtov rozdeliť po 7 na každý uzol. Išlo by však o veľké plytvania zdrojmi, keďže na každom uzle by pracovala len asi štvrtina jadier. Oveľa väčším problémom však bol samotný čas potrebný na zbehnutie úlohy, ten je v sériovej verzii kódu rovný približne 6 týždňom. Za takú dlhú dobu sa môže vyskytnúť veľa udalostí, ktoré dobehnutie úlohy znemožnia (hardvérové problémy, výpadky chladenia, napätia a pod.) - výpočty v neparalelizovanej verzii by teda boli nielen neefektívne, boli by prakticky len veľmi ťažko realizovateľné. Z tohto dôvodu sme sa rozhodli radšej nejakú dobu s výpočtami počkať a investovať čas do paralelizácie.

Dr. Lukáš Demovič participoval na spomínanej paralelizácii časti softvéru GRASS. Ako prebiehala?

Najprv sme museli analyzovať zdrojový kód modulu r.sun a zistiť, ktorá časť je výpočtovo najnáročnejšia, ukázalo sa, že samotný výpočet je rozdelený do dvoch nezávislých cyklov (ktoré bežia cez x a y súradnice). Takýto scenár je triviálne paralelizovateľný, a keďže sme vedeli, že budeme robiť minimálne 365 nezávislých výpočtov, rozhodli sme sa pre OMP (zdieľaná pamäť) paralelizáciu - jedinou skutočnou výzvou sa tak stalo len klasické ošetrenie zdieľaných a privát-



nych premenných programu. Výsledkom bolo skrátenie doby jedného výpočtu zo 6 týždňov na 53 hodín. Istotne by sa dalo dosiahnuť aj výraznejšie zrýchlenie, bolo by to však za cenu výrazne vyššieho programátorského úsilia, a pre náš účel by to nebolo veľmi efektívne.

Ako ste spokojný s podporou a prístupom Výpočtového strediska?

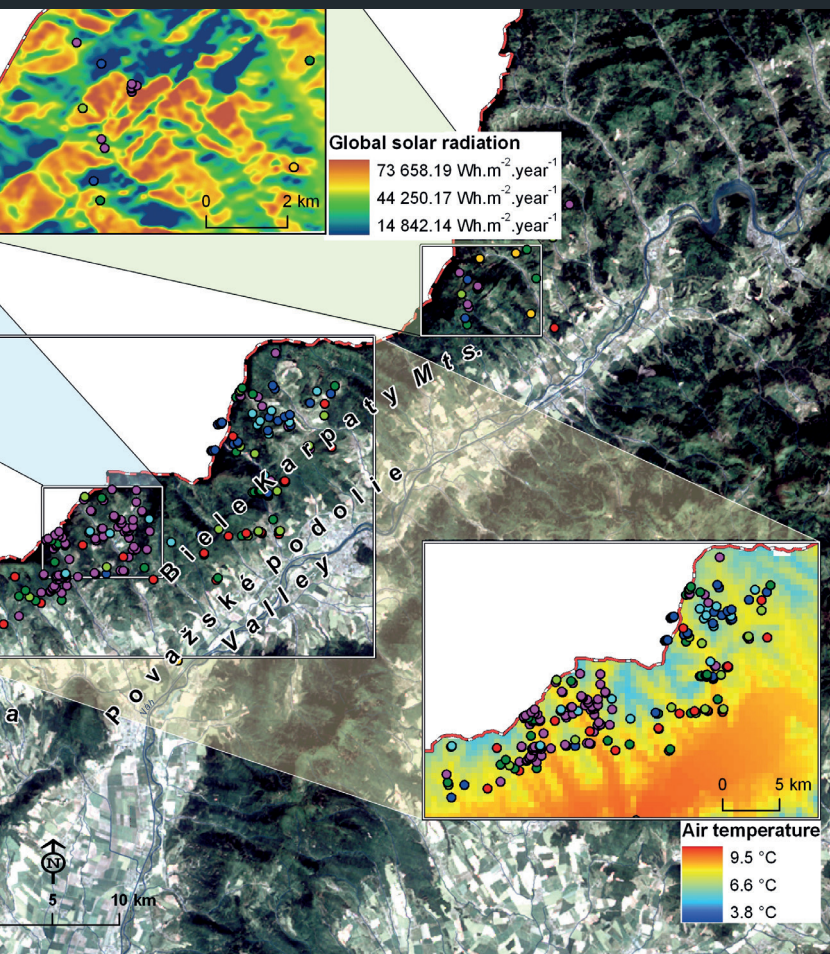
Za náš Botanický ústav som za prácu na Aurelovi zodpovedný a celkom čestne musím prehlásiť, že sme boli mimoriadne spokojní s vy-

## VYUŽITIE V RÁMCI GIS

*Krajinný potenciál úzko súvisí s vlastnosťami georeliéfu, ktorý patrí k najdôležitejším rozhraniom krajinskej sféry. V jeho okolí vzniká oblasť najintenzívnejšej interakcie jednotlivých prvkov krajiny. Je výslednicou procesov prebiehajúcich v krajine a sám na tieto procesy vplyva a priestorovo ich diferencuje. Georeliéf významne determinuje distribúciu a variabilitu slnečného žiarenia, ktorá je v tesnej korelácii s formovaním vegetácie v čase a priestore, reflektujúc na abiotický potenciál územia. V prostredí GIS-u je georeliéf reprezentovaný digitálnym model georeliéfu (DMR), ktorý sa tak stáva najzákladnejšou potrebou pre modelovanie procesov a javov prebiehajúcich na georeliéfe.*

*Väčšina GIS softvérov má implementovaný modul na jeho generovanie, avšak ich funkčnosť je rozdielna. Samotná konštrukcia DMR nie je triviálna, vyžaduje si relevantné odborné znalosti v oblasti geomorfometrie a geomatematiky. Pri hľadaní korelácií s distribúciou vegetácie je vo veľkých mierkach nesmierne dôležité to, aby DMR správne vystihoval lokálne trendy a situácie.*

*Vhodnou aplikáciou na poukázanie vplyvu presnosti vstupných dát a ich interpolácie do DMR je modelovanie slnečného žiarenia.*



soko profesionálnym a ľudským prístupom Vašich kolegov, menovite Mgr. Lukáša Demoviča, PhD. Som presvedčený, že bez neho by sa mnohé výpočty nezrealizovali tak bezproblémovo.

Mohli by ste nás bližšie oboznámiť i s ďalšími programami, ktoré využívate na analýzu dát?

Programy Structure a MrBayes využívame vo všetkých našich fylogenetických analýzach, to znamená, že sú bazálnou súčasťou všetkých našich článkov využívajúcich molekulárne prístupy. Programy Structure a MrBayes slúžia na vyhodnocovanie DNA dát. Structure je program využívaný najmä v oblasti populačnej genetiky (rastlín, živočíchov, aj človeka). Spracováva dáta z rôznych genetických markerov a slúži na zisťovanie populačnej štruktúry, hybridizácie, migrácie jedincov a populácií.

## VYUŽITIE V PRAXI

Superpočítač Aurel sa v praxi využíva napríklad pri štúdiu genetickej variability endemitov rôznych chránených rastlinných druhov na území Slovenska či celej Európy.



MrBayes je program, ktorý vyhodnocuje sekvencie DNA a na ich základe vytvára fylogenetické stromy, odhaľuje príbuzenské vzťahy a evolúciu organizmov.

**Mohli by ste uviesť konkrétny príklad?**

Napr. pri štúdiu genetickej variability slovenského endemitu cyklámena fatranského. Cyklámen rastie na malom území v rámci pohorí Veľkej Fatry, Nízkych Tatier a Poľany a nepochybne patrí k symbolom nielen tejto časti Slovenska. V Červenom zozname je zaradený do kategórie zraniteľných druhov, je zákonom chránený a zároveň je druhom zaradeným do CORINE Biotopes a the Habitats Directive (92/43/EEC). Morfológická odlišnosť v tvare listov a kresbe na listoch viedla k jeho druhovému vyčleneniu a dlhé desaťročia sa tento stav akceptoval. Vývojovo najbližším a najpodobnejším druhom je cyklámen purpurový, ktorý rastie v pomerne veľkej časti Európy (Alpách, Dinárskom pohorí v severozápadnej časti Balkánskeho polostrova). Štúdium genetickej variability oboch druhov cyklámenov:





údaje získané z DNA materiálu nám umožnili objasniť detaily vzniku a vývoja oboch druhov, zmenu areálu počas a po zaľadnení, ale tiež aj pozmeniť názor na taxonomické hodnotenie západokarpatských populácií. Táto práca bola časovo aj technicky náročná, keďže si vyžadovala štatisticky preukázaný počet vzoriek z celého areálu slovenských populácií nášho druhu a tiež z celého územia cyklámenu purpurového od Západných Álp vo Francúzsku až po Slovinsko a Chorvátsko. Celkovo sme hodnotili genetickú variabilitu 68 populácií. K najzaujímavejšími a najvýznamnejším výsledkom patrí zistenie, že oba druhy majú spoločný pôvod v území na južnej hranici súčasného areálu cyklámenu purpurového (na úpäť Álp v Taliansku, západnom Slovinsku a severozápadnom Chorvátsku). K oddeleniu cyklámenu fatranského od cyklámenu purpurového došlo niekedy v priebehu štvrtohôr, pravdepodobne ešte pred posledným zaľadnením. Ich súčasná genetická a morfológická separácia však ešte nie je úplná, proces vzniku druhu nie je zjavne dokončený, a preto navrhujeme

hodnotiť západokarpatské populácie len na úrovni poddruhu. Zistili sme, že prežívanie cyklámenu purpurového, ako aj západokarpatských populácií počas poslednej ľadovej doby a rozširovanie ich areálov do súčasnej podoby bolo značne naviazané na prežívanie a kolonizáciu stromov (najmä buka), ktoré dnes tvoria druhovú skladbu lesov, kde cyklámen rastie. Kým cyklámen purpurový prežíval posledné zaľadnenie v dvoch pomerne veľkých refugiálnych územiach na upäť južných Álp a krasového územia Istrie a juhozápadného Slovinska, západokarpatské populácie boli obmedzené na malé, izolované, tzv. mikrorefúgiá vo Veľkej Fatre.



Predpokladám, že sa s opísanými poznatkami plánujete podeliť. V akých karentovaných časopisoch plánujete publikovať Vaše články?

American Journal of Botany, Annals of Botany, Taxon, Preslia, Botanical Journal of the Linnean Society, Plant Systematics and Evolution, Folia Geobotanica, Lichenologist a ďalšie prestížne „karentové“ časopisy.

Môžete uvedené poznatky využiť v ďalších výskumoch?

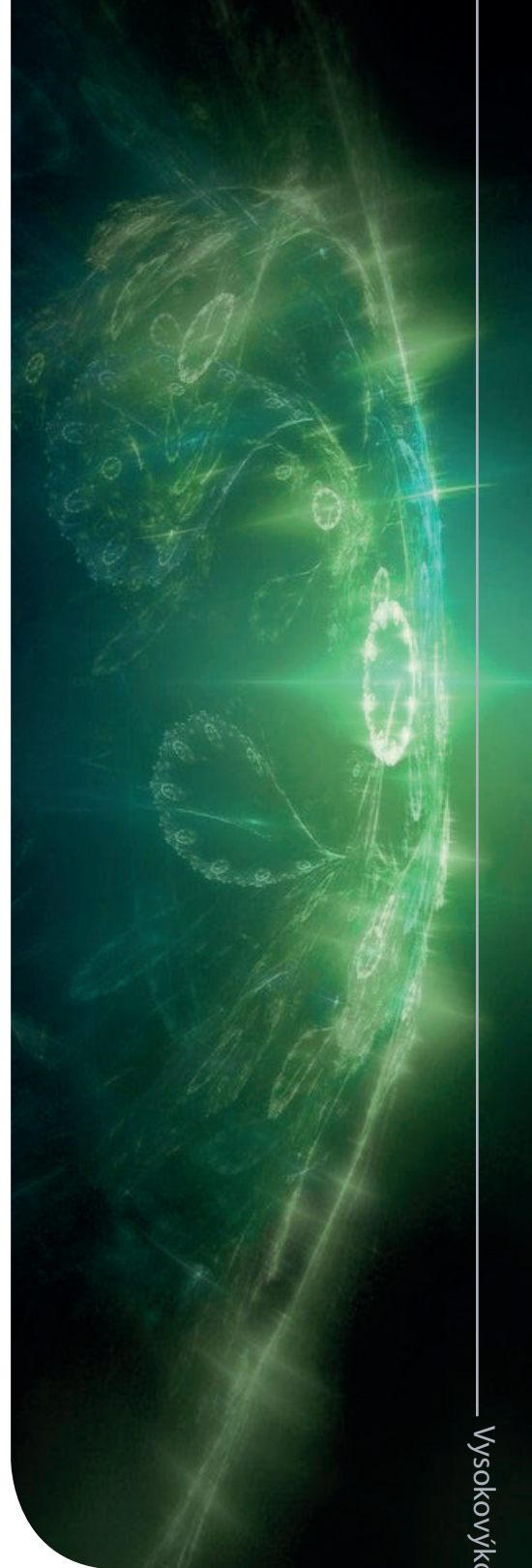
Získané poznatky plánujeme použiť pri výskume ekologických a klimatických nárokoch ďalších divo rastúcich rastlín a to najmä pri štúdiu ekologických ník polyploidov a ich diploidných príbuzných (predkov).

Takže predstavujú akýsi pomyselný základný kameň pre Váš ďalší výskum. Ako sa dajú Vaše poznatky využiť v praxi?

Poznatky využijeme na predikciu výskytu divorastúcich rastlín na určitom území. V praxi to bude možné využiť pri ich druhovej, ako aj územnej ochrane. Získané teoretické poznatky z postupov pri predikcii výskytu divorastúcich rastlín by sa dali potenciálne využiť pri posudzovaní toho, či je určité územie vhodné alebo nevhodné pre výskyt, prípadne pestovanie určitých rastlín.

Naše výstupy majú uplatnenie v Štátnej ochrane prírody v rámci rezortu Ministerstva životného prostredia. V súčasnosti na superpočítači hľadáme vzťahy v rámci dvoch druhov *Solenopsis candicans* a *S. cesatii*. Jeden z druhov je zaradený do Prílohy 4 k Vyhláske č. 24/2003 Z. z. – Zoznam druhov európskeho významu, druhov národného významu, druhov vtákov a prioritných druhov, na ktorých ochranu sa vyhlasujú chránené územia. Druh sa využil aj na definovanie území sústavy „Important plant areas“ (Plantlife). Model, ktorý spracovávame je významný tým, že nám pomáha identifikovať v rámci územia Slovenska lokality so špecifickými stanovištnými podmienkami (mikroklima, vegetácia, geomorfológia, geológia), ktoré sú nevyhnutne pre existenciu týchto druhov. Tieto miesta patria k „hot spots“ v rámci biodiverzity a sú kľúčovými z hľadiska tvorby ekologických sietí.

**REALIZÁCIA NAŠICH VÝPOČTOV JE  
VZHLADOM NA ICH VEĽKÚ NÁROČNOSŤ  
MOŽNÁ LEN NA SUPERPOČÍTAČI**



# Skupina profesora IVANA ŠTICHA

**PROF. ING. IVAN ŠTICH, DRSC. PÔSOBÍ  
VO FYZIKÁLNO M ÚSTAVE  
SLOVENSKEJ AKADEMIE VIED**

Mohli ste nás bližšie oboznámiť, čím sa zaoberá Vaša skupina?

„Modelujeme kondenzované systémy v 3D, povrchy tuhých látok, zhľuky atómov, molekuly, katalytické systémy, zobrazovanie a manipuláciu na atomárnej/molekulovej škále pomocou SPM (Scanning Probe Microscopy) mikroskopov, nanotribológiu, atď. Inými slovami, náš záujem je pomerne širokospektrálny. Mnohé výsledky vznikli v spolupráci so špičkovými európskymi (King's College London, Münster University, Basel University) a svetovými (Osaka University, North Carolina State University) laboratóriami, kde simulácie ktoré prevádza-

me na superpočítači Aurel často slúžia na teoretickú interpretáciu experimentálnych výsledkov.“

„Popis týchto systémov a procesov, kde sa často menia chemické väzby, vyžaduje okrem atómov, modelovať explicitne aj elektróny. Práve popis systému korelovaných elektrónov je najväčšia a aj najťažšia úloha v našom modelovaní. Na tento účel používame v zásade dva typy modelovania: 1) metódy teórie hustotového funkcionálu (density functional theory - DFT), 2) ultra presné metódy kvantového Monte Carla (QMC). DFT metódy, za vývoj ktorých bola v r. 1998 udelená Nobelová cena za chémiu (W. Kohn a J. A. Pople), sú jednočasticové metódy strednej presnosti, ktoré umožňujú počítanie pomerne veľkých systémov (stovky až tisícky elektrónov). Metódy QMC sú korelované mnohočasticové metódy dosahujúce o 1-2



rády vyššiu presnosť pri zvýšení numerickej náročnosti o  $\approx 3$  rády v porovnaní s DFT metódami stredového poľa, ktoré umožňujú výpočty s rádovo stovkami explicitne korelovaných elektrónov. Tieto metódy používame na optimalizácie atomárnych štruktúr, štúdiu ich evolúcie v čase, štúdiu povrchov potenciálnej energie, atď. Aplikácia týchto metód pre systémy, ktoré nás zaujímajú, vyžaduje prístup k superpočítačovým platformám, akou je aj Aurel vo VS SAV. Väčšie systémy, ktoré študujeme

majú  $\approx 10^{10}$  optimalizačných parametrov, ktoré v prípade štúdia dynamiky systému musíme opakovať po každom kroku molekulárnej dynamiky, t.j.  $\approx 10^4 - 10^6$ -krát. Napriek tomu, že všetky naše aplikácie bežia v masívne paralelnej móde, tieto simulácie bežia týždne až mesiace kontinuálne typicky na stovkách jadier na platforme Aurel. Algoritmy, ktoré používame, najmä metódy QMC, pritom umožňujú efektívne využívať až tisícky jadier.“

Prof. Štich sa taktiež podieľal na vývoji nových optimalizačných techník v metódach DFT modelovania, spolupodieľal sa na portovaní prvých DFT programov na paralelné počítače a bol spoluautorom prvých masívne paralelných aplikácií DFT techník. Profesionálne sa jeho záujem posúval od štruktúrne neusporiadaných systémov, kvapalín, kvantových zhlukov, a povrchov k štúdiu interakcií atómov a molekúl s povrchmi, k štúdiu zobrazovania a nanomanipulácie pomocou SPM mikroskopov, štúdiu molekulárnych spínačov, molekulárnej elektronike a nanoelektronike, nanotribológii

Skupina prof. Ivana Šticha z Center for Computational Materials Science (CCMS) na Fyzikálnom ústave SAV, je 5-členný kolektív zaoberajúci sa počítačovými simuláciami na atomárnej, resp. molekulárnej škále.

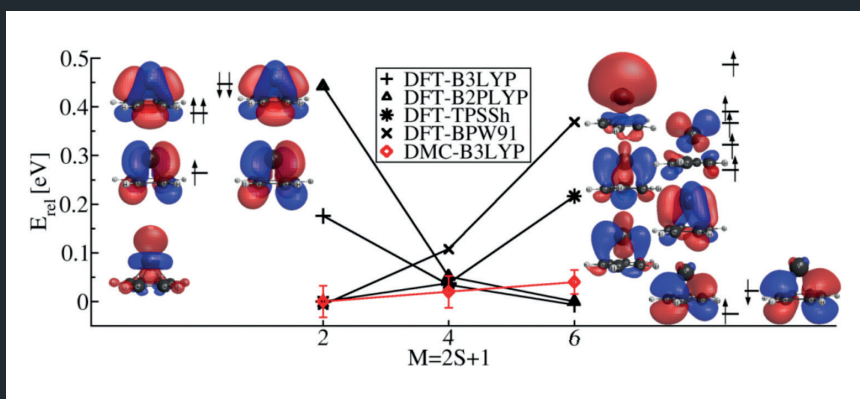
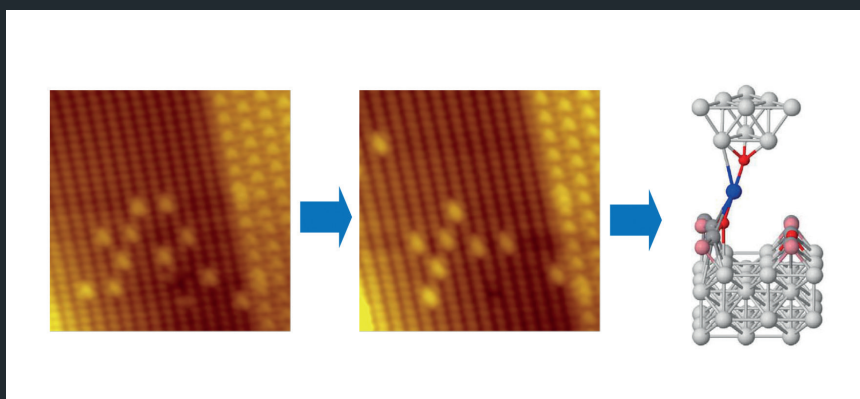
a materiálom pre spintroniku. V minulosti k DFT technikám pribudli aj oveľa presnejšie QMC techniky, ktoré majú status benchmarkov.

Ukážky dvoch nedávnych výsledkov získaných na superpočítači Aurel sú na obrázkoch 1 a 2. Obrázok 1 ukazuje výsledky experimentálnej manipulácie atómov medi na oxidovanom povrchu  $p(2\times 1)\text{Cu}(110):\text{O}$  a jej popis pomocou modelu založenom na počítačovom modelovaní. Výsledkom bolo vyvinutie kompletného a úplne obecného modelu bezkontaktného silového mikroskopu, ktorý, po namodelovaní interakcie hrotu so vzorkou umožnil spočítanie pravdepodobnosti depozície atómu medi z hrotu na povrch a jeho extrakcie z povrchu na hrot mikroskopu (J. Bamidele, S. H. Lee, Y. Kinoshita, R. Turanský, Y. Naitoh, Y. J. Li, Y. Sugawara, I. Štich, L. Kantorovich, *Nature Commun.* 5, 4476 (2014)).

Obrázok 2 ukazuje relatívne energie rôznych spinových multipletov polosendviča vanád-benzénu. 1D organometalické systémy boli donedávna považované za ideálnu realizáciu spinového filtra. Výpočty s rôznymi DFT funkcionálmi a mnohočasticovou metódou DMC (Diffusion Monte Carlo) ukazujú, že v tomto prípade majú DFT metódy obmedzenú prediktivitu a v závislosti od použitého funkcionálu predpovedajú buďto nízky spinový stav- dublet ( $B_3LZP$ ,  $B_2PLZP$ ), resp. vysoký spinový stav- sextet ( $BPW_{91}$ ,  $TPSSh$ ), kdežto presný QMC popis dáva quasi-degenerované energie pre všetky tri spinové multiplety (L. Horváthová, M. Dubecký, L. Mitás, I. Štich, *Phys. Rev. Lett.* 109, 053001 (2012) a *J. Chem. Theor. Comput.* 9, 390 (2013)). Naše výpočty tiež ukázali, že bez ďalšej funkcionálizácie je potenciál týchto materiálov v spintronike obmedzený.

Skupina prof. Šticha v súčasnosti rozbieha ďalšie ambiciózne projekty s európskymi a zámorskými partnermi. Plánujeme napr. projekt magnetických nanoštruktúr na graféne, štúdium zd fotonických materiálov s veľkými excitónmi, charge-transfer systémy organických molekúl na kovových povrchoch mincových kovov a nanoštruktury s neobvyklými atomárnymi štruktúrami a katalytickými vlastnosťami pripravené SPM mikroskopmi na rozhraniach  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{NiAl}$ . Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie a superpočítač Aurel obzvlášť, zohrávajú v našich plánoch kľúčovú úlohu.

**Počítačové modelovanie umožňuje pochopiť zobrazovanie a manipuláciu atómov na povrchoch, alebo transport spinu elektrónu cez nanoklastre.**



**Obrázok 1 (hore):** Vytvorenie písmena X bezkontaktným silovým mikroskopom na  $p(2\times 1)\text{Cu}(110):\text{O}$  terase sériou vertikálnych manipulácií. Vpravo je atomárny model kyslíkom terminovaného hrotu mikroskopu, ktorý manipuluje super-Cu atóm na  $p(2\times 1)\text{Cu}(110):\text{O}$  povrchu, ktorý znázorňuje počiatočný aktivovaný krok manipulácie.

**Obrázok 2 (dole):** Relatívne energie rôznych spinových multipletov polosendviča vanad-benzénu v DFT popise s rôznymi výmenno-korelačnými funkcionálmi a metódou QMC-DMC.



# Budúce zdroje ENERGIE

Medzi poslednými významnými publikovanými článkami Dr. Smrčka, na ktorých participoval Aurel je „Kryštálová a elektrónová štruktúra zmiešaných borohydridov alkalických kovov a lantanoidov.“ Práve táto publikácia sa stala hlavným námetom článku.

**B**udúce zdroje trvalo udržateľnej energie budú musieť spĺňať niekoľko základných predpokladov, medzi ktoré budú patriť nízka cena média, jeho ľahká dostupnosť a možnosť uschovávať energiu vo veľkých objemoch pri malých skladovacích nákladoch. Vodík spĺňa všetky tieto požiadavky a na jeho ukladanie sa javí ako vý-

hodné využitie jeho najjednoduchších zlúčenín, hydridov, v tuhej fáze. Ako najvýhodnejšie sa v súčasnosti ukazujú hydridy ľahkých kovov a to najmä kvôli ich výhodnému gravimetrickému a objemovému pomeru "užitočného" vodíka a ostatku zlúčeniny. Borohydridy ukladajú vodík do kovalentných B-H väzieb a jeho uvoľnenie sa deje pomocou ich termolýzy alebo hydrolýzy. Nevýhodou oboch spomínaných dejov je pomalý rozklad borohydridov, nevýhodná energetická bilancia a vysoká teplota, pri ktorej sa vodík uvoľňuje. Veľkou výhodou borohydridov naproti tomu je veľká variabilita ich štruktúr, počnúc dominantne iónovými zlúčeninami, cez trojrozmerné skelety až po otvorené skelety s nanopórmi. Zatiaľ len málo preskúmaným použitím borohydridov pri ukladaní energie je ich využitie ako tuhých elektrolytov predpokladajúc ich elektrochemickú stabilitu a výhodnú štruktúrnu dynamiku. Úplne novou oblasťou je využitie slabých väzieb vodík...vodík medzi borohydridom a ukladaným médiom.



Základnou otázkou pri štúdiu týchto látok je otázka ich štruktúry v tuhej fáze, pretože spomínané látky sa často vyskytujú len v zmesiach s podobnými látkami a sú spravidla zle kryštalické. Dôsledkom je, že klasické difrakčné metódy určovania štruktúry neposkytujú z principiálnych dôvodov úplné a správne informácie. Z tohto dôvodu sme študovali štruktúry borohydridov kombináciou experimentálnych metód, hlavne difrakčných, s teoretickými DFT výpočtami v tuhej fáze. Synergiou oboch druhov metód sme získali informácie o štruktúrach nových látok, ich polymorfizme a o ich fázových prechodoch pri zvýšených teplotách. Zatiaľ čo difrakčné experimenty za rôznych podmienok boli robené na synchrotrónoch v Grenobli (na obrázku), Harwelli, Villingene a Hamburgu, presné teoretické výpočty sme uskutočnili na počítači Aurel. Pretože úlohou teoretických výpočtov bolo hlavne odhalenie úlohy slabých interakcií vodík... vodík, boli robené s výpočtovo veľmi náročným hybridným funkcionálom PBE0. Vzhľadom na nároky (typicky 128 jadier, doba výpočtu do dvoch týždňov) spomínaných výpočtov možno skonštatovať, že bez počítača Aurel by ich v našich podmienkach vôbec nebolo možné uskutočniť.



Všetky publikované práce boli robené v spolupráci s Katedrou Fyziky Ženevskej univerzity (prof. R. Černý a P. Schouwink) a tvoria časť doktorandskej práce P. Schouwinka.

- Černý, R., Schouwink, P., Sadikin, Y., Stare, K., Smrčok, L., Richter, B. & Jensen, T. R. (2013). *Inorg. Chem.* 52, 9941-9947.
- Schouwink, P., Ley, M. B., Jensen, T. R., Smrčok, L. & Černý, R. (2014). *Dalton Trans.* 43, 7726-7733.
- Schouwink, P., Smrčok, L. & Černý, R. *Acta Cryst.* (2014). B70, 871-878.

**RNDR. ĽUBOMÍR SMRČOK, CSC.**

**PÔSOBÍ V ÚSTAVE ANORGANICKEJ**

**CHÉMIE SAV**

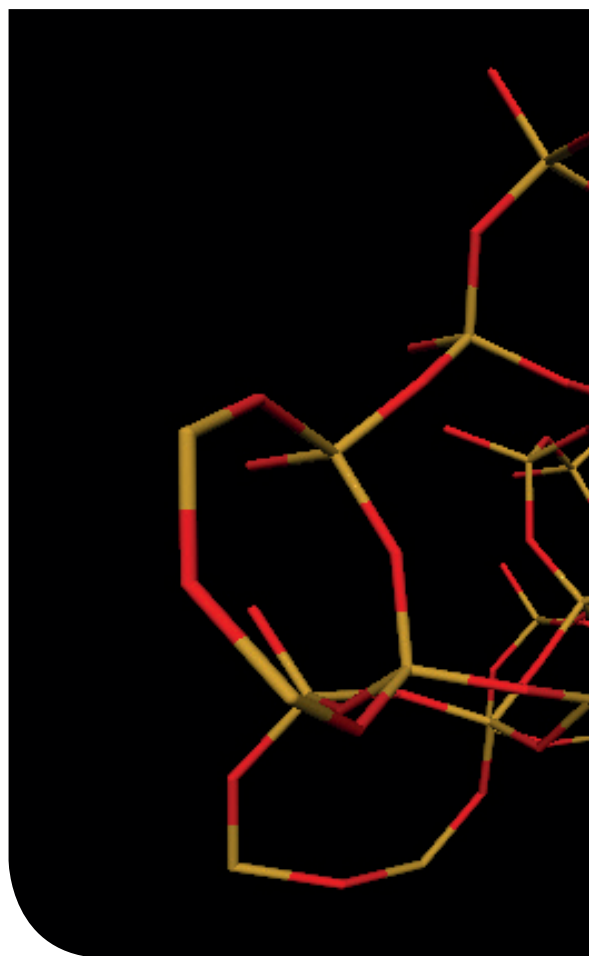
# Počítačové simulácie

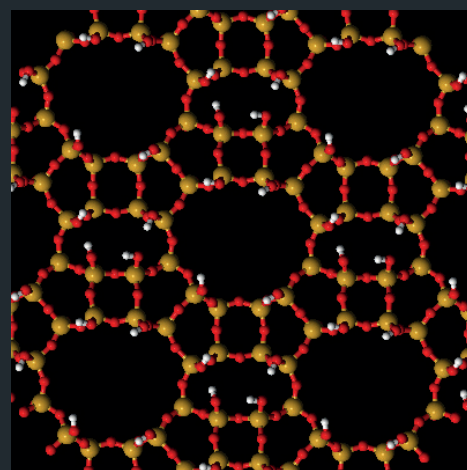
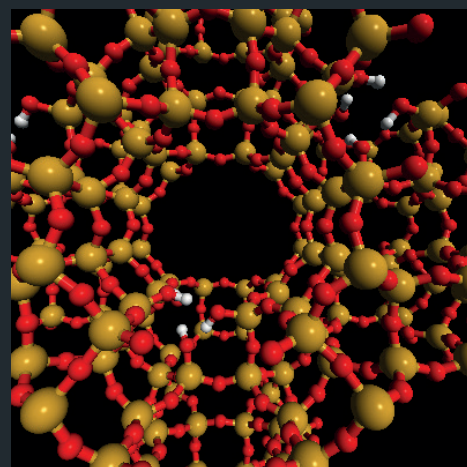
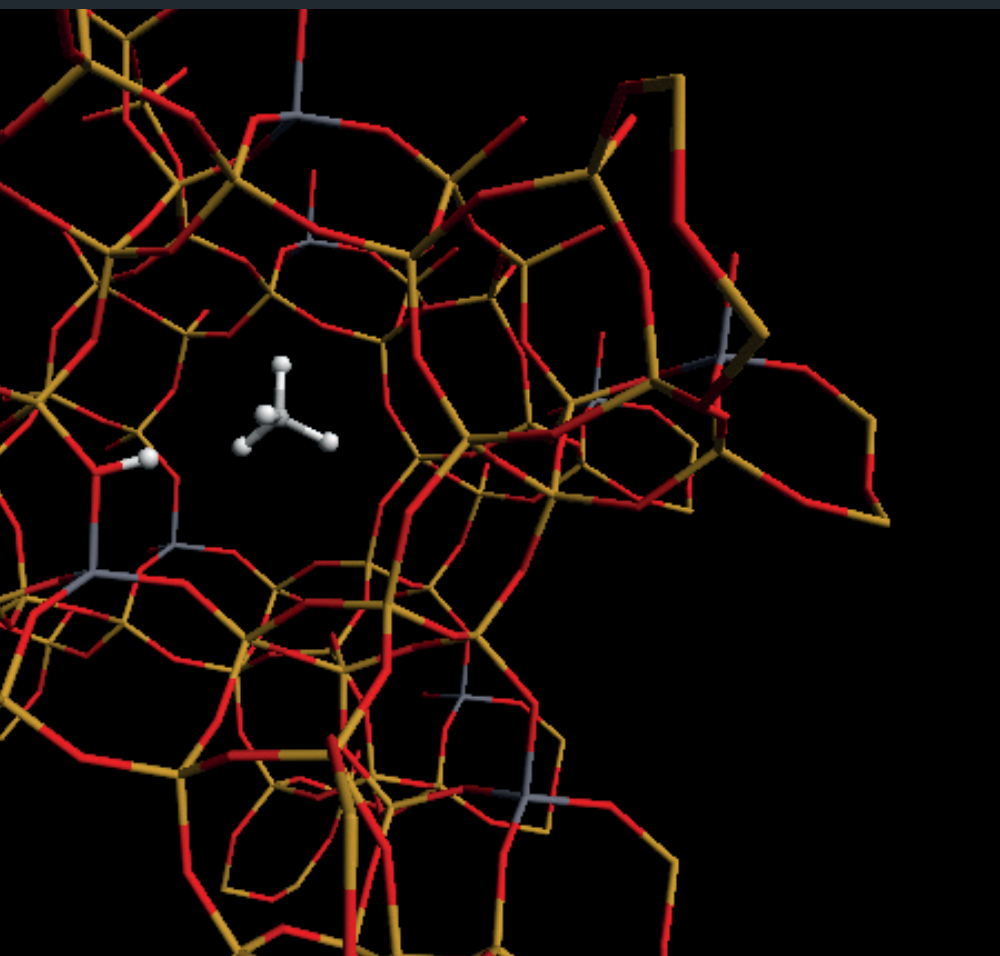
**DOC. ING. TOMÁŠ BUČKO, PHD. SA  
ZAOBERÁ POČÍTAČOVÝMI SIMULÁCIAMI  
V OBLASTI TEORETICKEJ CHÉMIE**

Pán doc. Bučko, na čo sa momentálne upriamuje Vaša pozornosť vo výskume?

Hlavným predmetom môjho výskumu je teoretická katalýza – pomocou počítačových simulácií sa pokúšam o realistický popis mechanizmov a kinetiky katalytických chemických reakcií a súvisiacich procesov ako sú napríklad adsorpcia a difúzia molekúl v katalyzátore. Študujem transformácie jednoduchých uhľovodíkov katalyzované kyslými zeolitmi. Zeolity sú minerály na báze aluminosilikátov s poróznou štruktúrou, ktorá umožňuje adsorp-

ciu malých a stredne veľkých molekúl (obrázky k článku) a jednoduché uhľovodíky sa v experimentoch používajú na štúdium aktivity rôznych zeolitov líšiacich sa štruktúrou a chemickým zložením. Podľa zloženia produktov je možné experimentálne zistiť, aké reakcie prebehli, ale reakčné mechanizmy sa dajú iba odhadnúť. V počítačových simuláciách dokážeme študovať jemné detaily chemických reakcií - dokážeme sa doslova pozrieť na to, ako reakcia prebieha. Okrem toho, máme celý reakčný proces úplne pod kontrolou v tom zmysle, že vieme presne nastaviť nielen





reakčné podmienky, ale aj rôzne jemnejšie faktory ovplyvňujúce reakciu, napríklad lokálnu distribúciu aktívnych centier a ich chemickú povahu. Čo sa reakčnej kinetiky týka, v zeolitoch sú veľmi zaujímavé jemné vzťahy medzi entalpickými a entropickými príspevkami k voľnej energii aktivácie. Výsledkom týchto vzťahov je netriviálna závislosť reakčnej rýchlosti od veľkosti a geometrie pórov a dutín prítomných v zeolitoch.

**Spomínané počítačové simulácie sú veľmi náročné na výpočet. Aké faktory ovplyvňujú náročnosť Vašich výpočtov?**

K celkovej numerickej náročnosti našich výpočtov prispievajú prinajmenšom tri faktory, ktoré musia byť starostlivo vyvážené tak, aby počítačové simulácie chemických procesov boli skutočne realistické. V prvom rade musíme byť schopní popísať všetky interakcie študovaného systému s rozumnou presnosťou, čo vo všeobecnosti znamená, že algoritmy, s ktorými pracujeme, musia byť založené na princípoch kvantovej mechaniky. Nanešťastie, výpočtové nároky takýchto simulácií dramaticky narastajú s počtom častíc v systéme, preto

v praxi musíme pristúpiť k istým zjednodušeniam, ktoré na jednej strane presnosť výpočtov čiastočne znižujú, na strane druhej, ale umožňujú študovať reálnejšie modely pozostávajúce z väčšieho počtu častíc. Práve kvalita modelu študovaného systému, je druhým zo spomenutých faktorov prispievajúcich k numerickej náročnosti simulácie. Okrem toho, experimentálne merané veličiny sú zvyčajne sumou príspevkov veľkého množstva konfigurácií prítomných v reálnom systéme, preto aj v počítačových simuláciách obvykle nestačí uvažovať len jednotlivé konfigurácie, ale skôr vhodný štatistický súbor reprezentujúci najpravdepodob-



nejšie realizácie skúmaného systému. Veľkosť a kvalita takéhoto súboru je tretím z faktorov, ktoré som zmienil.

Mohli by ste uviesť názov simulačného softvéru, ktorý používate?

Mojim hlavným pracovným nástrojom je simulačný balík Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP), ktorý je vyvíjaný na Viedenskej univerzite, kde som takmer desať rokov pôsobil. VASP je v súčasnosti jedným z najrozšírenejších simulačných programov, je licencovaný viac ako 600 rôznymi výskumnými pracoviskami na celom svete. Okrem toho, že VASP používam, podieľam sa aj na jeho vývoji – pracujem predovšetkým na implementácii pokročilých metód štatistickej mechaniky a približných metód zahrnutia Londonových disperzných interakcií v DFT výpočtoch.

Patrite medzi našich hlavných používateľov Aurela. Aké pozitívum predstavuje pre Vás a Váš výskum Aurel a naopak, aké negatívum z hľadiska implementácie?

Jednoznačným pozitívom pre moju prácu je vysoká výpočtová rýchlosť superpočítača Aurel, ktorá je dvojnásobná oproti iným výpočtovým zariadeniam, ktoré mám momentálne k dispozícii. Istým negatívom je pro-

prietárny operačný systém nainštalovaný na superpočítači – ten mi trochu komplikuje kompiláciu niektorých programov, ktoré využívam.

Zamýšľali ste na nad tým, akou cestou by ste sa chceli ďalej so svojim výskumom uberať?

Myslím, že pre výskum je dôležitá istá kontinuita a systematickosť. Nechystám teda žiadne radikálne zmeny – tak ako doposiaľ sa budem naďalej venovať teoretickej analýze, štúdiu materiálových vlastností a vývoju a implementácii výpočtových metód.

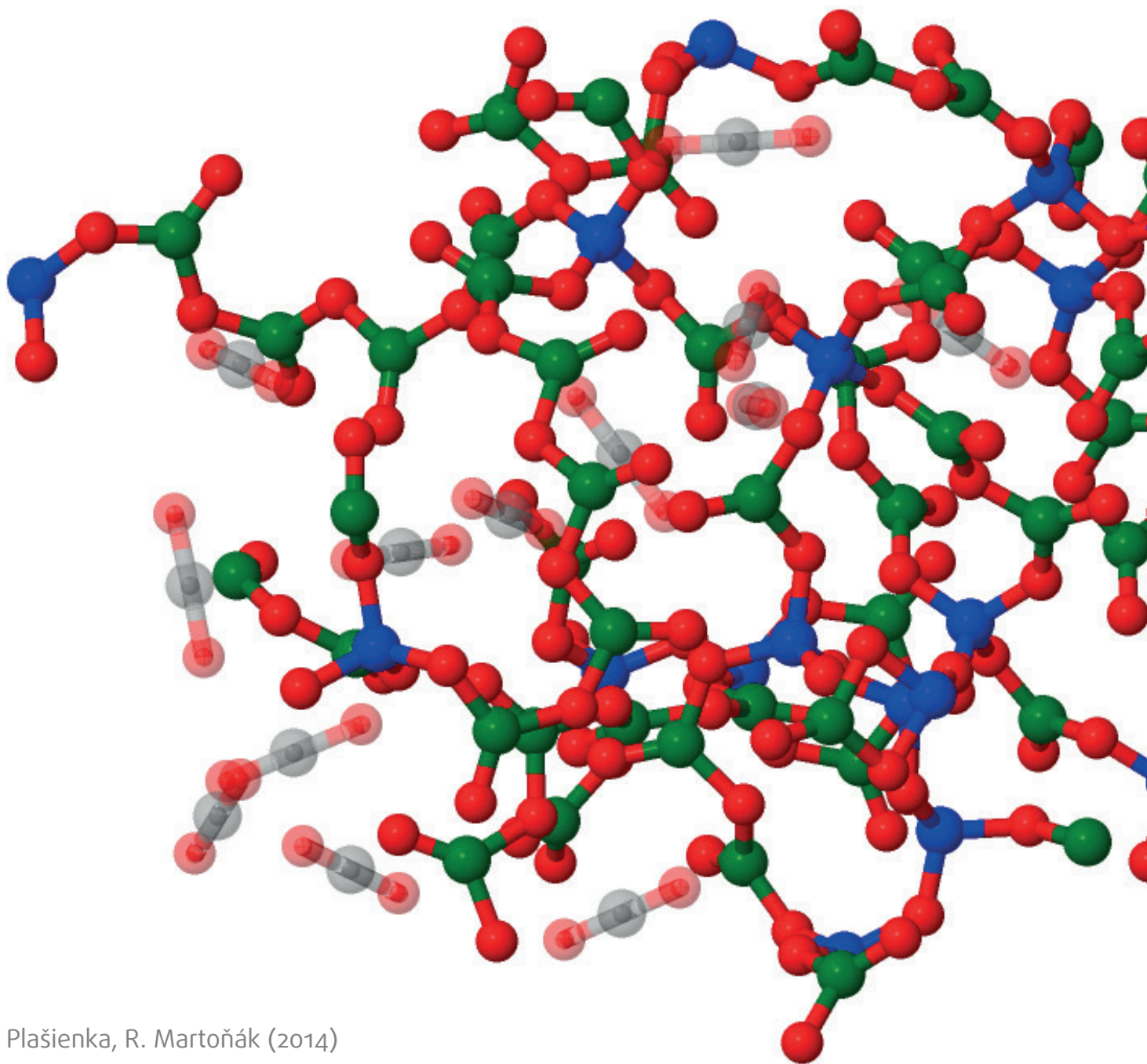
Takže Aurel bude i naďalej neodmysliteľnou súčasťou Vášho výskumu?

Ako som sa už zmienil, dostupná výpočtová kapacita je naprosto kľúčovým faktorom limitujúcim celkovú kvalitu počítačových simulácií. Výkon superpočítača Aurel ďaleko presahuje výkon zariadení bežne dostupných na našich a zahraničných výskumných pracoviskách a pokiaľ to bude možné, budem ho naďalej využívať vo svojom výskume.



**Doc. Ing. Tomáš Bučko, PhD.**  
pôsobí na Katedre teoretickej a fyzikálnej chémie Prírodovedeckej fakulty Univerzity Komenského ako vysokoškolský pedagóg a na Ústave anorganickej chémie Slovenskej akadémie vied ako výskumný pracovník.

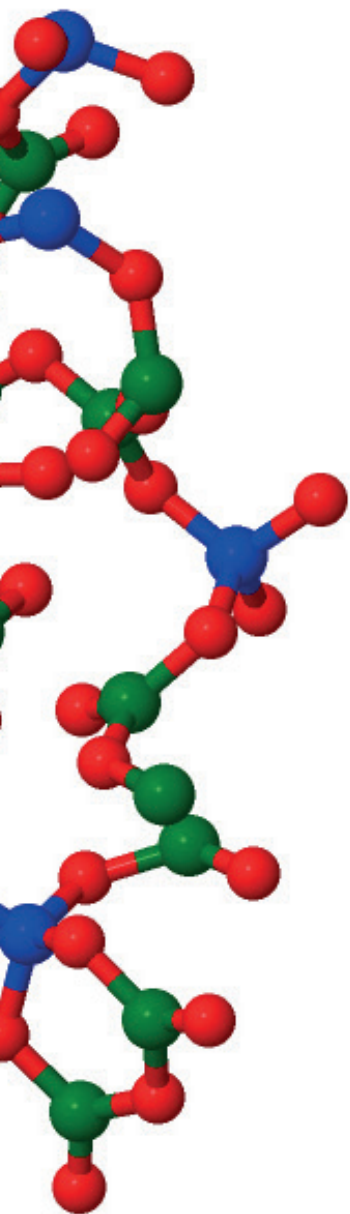
**VÝPOČTOVÝ VÝKON SUPERPOČÍTAČA  
AUREL VÝRAZNE ZLEPŠUJE NAŠE  
VÝPOČTOVÉ MOŽNOSTI**



D. Plašienka, R. Martoňák (2014)

# MD SIMULÁCIE

## na superpočítači



Jmol

**P**án prof. Martoňák, vo vedeckej komunite ste uznávaná osobnosť a bola by škoda nepodeliť sa s čitateľmi, užívateľmi Aurela, terajšími i možno budúcimi, o Vaše bohaté skúsenosti, poznatky z univerzít, na ktorých ste pôsobili, o Vaše najvýznamnejšie úspechy, výsledky, spolupráce...

Počas mojej vedeckej kariéry som pôsobil na viacerých pracoviskách v zahraničí. PhD som získal na International School for Advanced Studies v talianskom Terste, potom som pôsobil v Nemecku na Johannes-Gutenberg Universität Mainz, neskôr na Max-Planck Institut für Festkörperforschung Stuttgart a napokon vo Švajčiarsku na ETH Zürich. Počas týchto pobytov som sa zaoberal širokou triedou problémov, ktorých spoločným menovateľom boli počítačové simulácie. Na jednej strane išlo o aplikáciu existujúcich algoritmov na nové zaujímavé systémy, ako napr. feroelektriká, polyméry, klastre, atď, na druhej strane o vývoj nových simulačných algoritmov, ako napr. kvantové žihanie.

V posledných cca 15 rokoch som sa zameriaval najmä na simulácie vplyvu vysokého tlaku na tuhé látky, pri ktorých dochádza ku zmene štruktúry, tzv. štruktúrnym fázovým prechodom. Na konci 90-tych rokov takéto simulácie už existovali, avšak

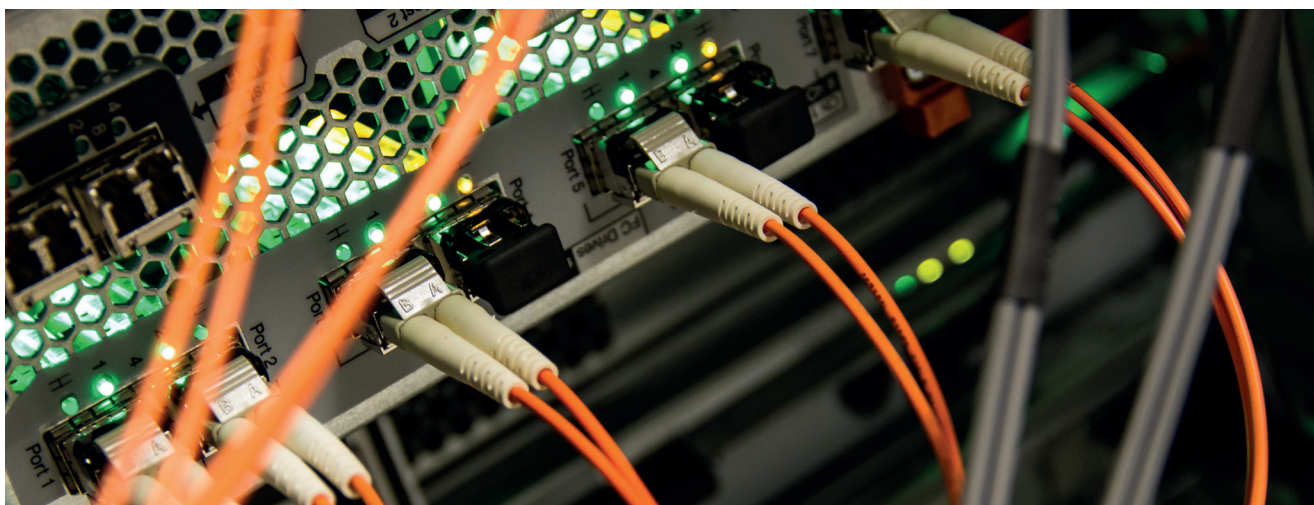
boli spojené s pomerne veľkými problémami, ktoré boli spôsobené prítomnosťou vysokých bariér brániacich prechodu z počiatočnej do konečnej štruktúry. Počas pobytu na ETH Zürich som pracoval v skupine prof. Parinella, v ktorej bol vyvinutý nový simulačný algoritmus – metadynamika, ktorý slúži práve na prekonávanie takýchto bariér. V krátkom čase sa nám podarilo tento algoritmus adaptovať na problém simulácie štruktúrnych transformácií v kryštáloch. Ukázalo sa, že metadynamika umožňuje vykonávať simulácie tlakom indukovaných transformácií za oveľa realistickejších podmienok, než predtým, čo prináša podstatné zlepšenie prediktívnej schopnosti. Nový algoritmus bol aplikovaný na viac než 20 materiálov a medzi najvýznamnejšie výsledky možno zaradiť predpoveď novej vysokotlakovej fázy vápnika so štruktúrou typu  $\beta$ -cínu (2009), ktorá bola



Prof. Ing. Roman Martoňák, DrSc. pôsobí na Katedre experimentálnej fyziky Fakulty matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského ako vysokoškolský pedagóg.

Prof. Ing. Roman Martoňák, DrSc.





experimentálne objavená v r. 2012. Výsledky som prezentoval v prednáškach na mnohých medzinárodných konferenciách, vrátane pozvaných prednášok na Gordon Conference on High Pressure Research, International Union of Crystallography Congress, atď.

V minulosti som spolupracoval s rôznymi pracoviskami zaoberajúcimi sa fyzikou vysokých tlakov, napr. Steacie Institute for Molecular Sciences, National Research Council of Canada, Ottawa, Max-Planck-Institut für Chemische Physik fester Stoffe, Dresden, KTH Stockholm, atď. V súčasnosti prebieha spolupráca s International School for Advanced Studies, Trieste. V mojej skupine na Katedre experimentálnej fyziky FMFI UK momentálne pôsobí jeden vedecký pracovník, dvaja doktorandi a dvaja diplomanti.

Váš výskum je veľmi náročný na výpočet, na akom vysoko-výkonnom počítači ste počítali, keď ešte donedávna SAV nedisponovala superpočítačom Aurel? Aké výhody to pre Vás predstavuje?

Na našej katedre sme pred cca 5 rokmi inštalovali dva výpočtové klastre s celkovou kapacitou 128 jadier a doposiaľ ich využívame na menšie výpočty. Predtým som využíval možnosti výpočtov v zahraničných výpočtových strediskách, napr. CINECA v Taliansku. Inštalácia Aurela predstavovala kvalitatívny skok, nakoľko ide o modernú a po každej stránke veľmi výkonnú výpočtovú kapacitu, či už ide o počet CPU, veľkosť pamäte a rýchlosť komunikácie aj I/O operácií. Aurel umožňuje po prvýkrát v histórii SR vysoko-výkonné masívne paralelné počítanie pre širokú vedeckú obec zo všetkých vedných a technických disciplín, v ktorých sú potrebné náročné výpočty. Ide pritom o počítanie na škále, ktorá rádovo prekonáva predchádzajúce možnosti. V neposlednom rade ako vysokoškolský pedagóg vidím veľký význam tejto inštalácie aj v tom, že umožňuje mladšej generácii študentov a doktorandov prakticky si osvojiť súčasné výpočtové metódy potrebné na riešenie zložitých problémov.

Ako ste spokojný so spoluprácou Výpočtového strediska ako poskytovateľa, t.j. s podporou užívateľa, výpočtových prostriedkov, či užívateľským prostredím?

Spolupráca s Výpočtovým strediskom SAV bola doposiaľ bezproblémová a na všetky problémy, ktoré sa vyskytli, som do-



“Aurel umožňuje po prvýkrát v histórii SR vysokovýkonné masívne paralelné počítanie pre širokú vedeckú obec zo všetkých vedných a technických disciplín, v ktorých sú potrebné náročné výpočty.”

stal rýchlu a kvalitnú podporu. Verím, že už sa podarilo vyriešiť počítačové problémy súvisiace s chladením počítača.

Prednedávnom ste publikovali články, v ktorých bol na výpočet využívaný Aurel. Upriamim pozornosť na jeden z nich a tým je sledovanie vývoja štruktúry amorfného  $\text{CO}_2$  v oblasti vysokého tlaku pomocou ab initio MD simulácií. Mohli by ste nás bližšie oboznámiť s danou problematikou?

Pri skúmaní vlastností amorfného  $\text{CO}_2$  išlo o skúmanie pomerne exotickú amorfnej látky.  $\text{CO}_2$  je chemicky podobné  $\text{SiO}_2$ , avšak analógia je dobre viditeľná až pri porovnaní štruktúry  $\text{SiO}_2$  pri normálnom tlaku so štruktúrou  $\text{CO}_2$  pri vysokom tlaku. Štruktúry  $\text{SiO}_2$  pri normálnom tlaku sú dobre známe minerály ako napr. kremeň alebo kristobalit. Na druhej strane  $\text{CO}_2$  pri normálnom tlaku je plyn, pri znížení teploty sa dá skvapalniť a potom vznikne dobre známa tuhá kryštalická forma – suchý ľad. Táto pozostáva z molekúl a predstavuje molekulárny kryštál, v ktorom sú atómy uhlíka a kyslíka navzájom viazané dvojitými väzbami. Pri zvýšení tlaku sa molekuly k sebe priblížia a v určitom bode nastane fázový prechod – dve dvojitý väzby uhlíka sa nahradia štyrmi jednoduchými, podobne, ako je to v  $\text{SiO}_2$ . Štruktúra so 4-násobne koordinovanými atómami uhlíka, ktorá takto vznikne, je analogická spomínaným štruktúram  $\text{SiO}_2$ . Tieto fázové prechody boli experimentálne aj teoreticky študované v posledných 10 rokoch, avšak stále existujú otvorené otázky. Vieme však, že  $\text{SiO}_2$  môže okrem kryštalickej formy existovať aj v amorfnej forme – poznáme ju z každodenného života ako okenné sklo. Vznikla preto otázka, či takáto forma môže na

základe spomínanej analógie existovať aj v  $\text{CO}_2$  pri vysokom tlaku. Pred niekoľkými rokmi sa ukázalo, že môže, a bola aj experimentálne pripravená, avšak nie je úplnou analógiou okenného skla. Nebolo známe, ako sa štruktúra tejto formy vyvíja pri dekompresii, teda pri uvoľnení tlaku. Preto sme sa rozhodli tento zvláštny amorfný systém preskúmať pomocou ab initio molekulovej dynamiky pri konštantnom tlaku, ktorú sme spustili na Aureli. Ukázalo sa, že v závislosti od tlaku existuje celé spektrum foriem (jedna je na titulnom obrázku článku), v ktorých sa nachádzajú atómy s rôznou koordináciou, od 2, čo sú molekuly, až po 4, čo je koordinácia podobná atómom Si v okennom skle. Predpokladáme, že naša predpoveď, publikovaná na jar 2014 v časopise Physical Review B, bude experimentálne otestovaná a sme zvedaví, ako to dopadne.

**Aké náročné sú Vaše výpočty na čas, pamäť, jadrá?**

Z časového hľadiska najnáročnejšie sú dynamické výpočty, ktoré typicky používajú 128 – 256 jadier a trvajú niekoľko dní až týždňov. Taktiež výpočty fonónových disperzných vzťahov a elektrón-fonónových interakcií pre určenie supravodivej kritickéj teploty môžu trvať až niekoľko dní na 256 jadrách.

POWER7

BUILT-IN



Power

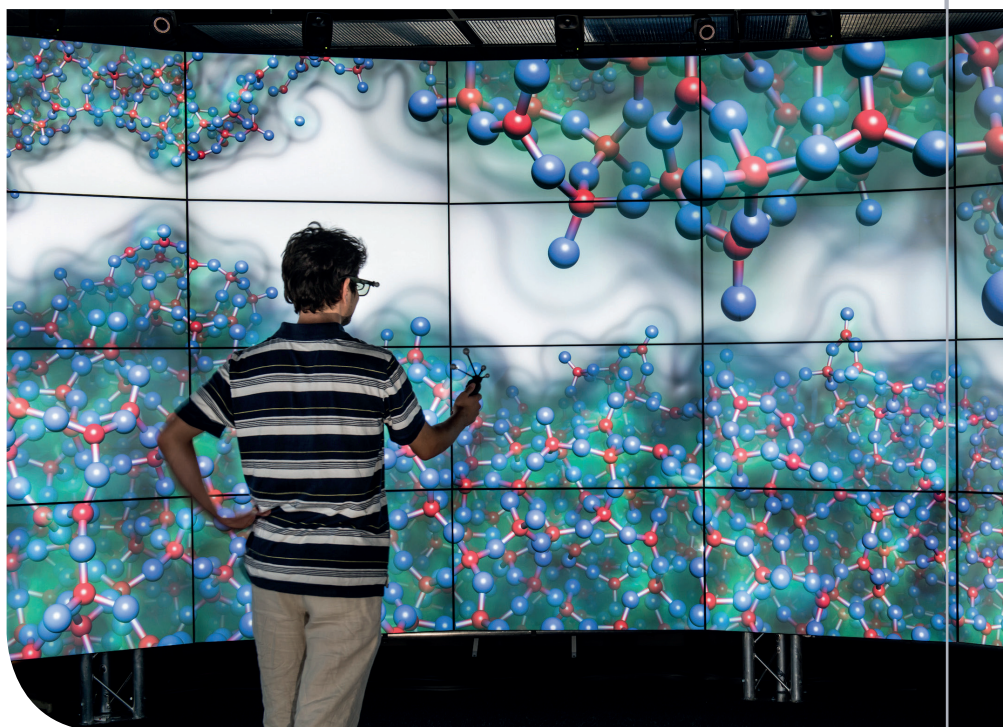
Aký softvér využívate na simulácie a na analýzu získaných dát?

Zaoberáme sa najmä ab initio simuláciami kondenzovaných systémov, kryštalických, amorfných aj kvapalných. Na statické výpočty používame balíky Quantum Espresso a VASP, na molekulovú dynamiku VASP. Na analýzu výsledkov používame vlastné programy, na vizualizáciu štruktúr a trajektórií programy Materials Studio, Diamond, Vesta, Jmol a iné.

Aký je Váš terajší predmet záujmu, resp. výskumu?

V súčasnosti ďalej pracujeme na skúmaní vlastností  $\text{MoS}_2$  pri vysokých tlakoch, pričom okrem identifikácie nových kovových kryštalových štruktúr chceme vypočítať aj teplotu ich fázového prechodu do supravodivého stavu. Tento výpočet je mimoriadne náročný okrem CPU výkonu a operačnej pamäti aj na I/O operácie a bez Aurela by bol pre nás momentálne ne realizovateľný.

Okrem toho na Aureli aktuálne skúmame vlastnosti kvapalnej polymerickej síry pri vysokej teplote a tlaku, čo bolo inšpirované nedávnymi novými experimentálnymi výsledkami. Tento výskum vyžadoval pomerne dlhé MD simulácie pri viacerých hodnotách tlaku a teploty na



systéme s 512 atómami a bez Aurela by na Slovensku taktiež nebol uskutočniteľný.

A Vaše plány do budúcnosti?

Okrem ďalšieho skúmania rôznych materiálov by som sa chcel venovať aj metodologickému vývoju a ďalšiemu zdokonaľovaniu algoritmov pre simuláciu štruktúrnych fázových prechodov. Experimenty v tejto oblasti v súčasnosti veľkou rýchlosťou posúvajú hranice možností a stavajú nás pred nové výzvy.

**INŠTALÁCIU SUPERPOČÍTAČA  
AUREL MOŽNO PRÁVOM OZNAČIŤ  
ZA PRIEKOPNÍCKY ČIN NA POLI  
SLOVENSKEJ VEDY**



  
>50° C

MOTOR DRIVE  
IBM

03

# ŠPECIFIKÁCIE A NÁVODY

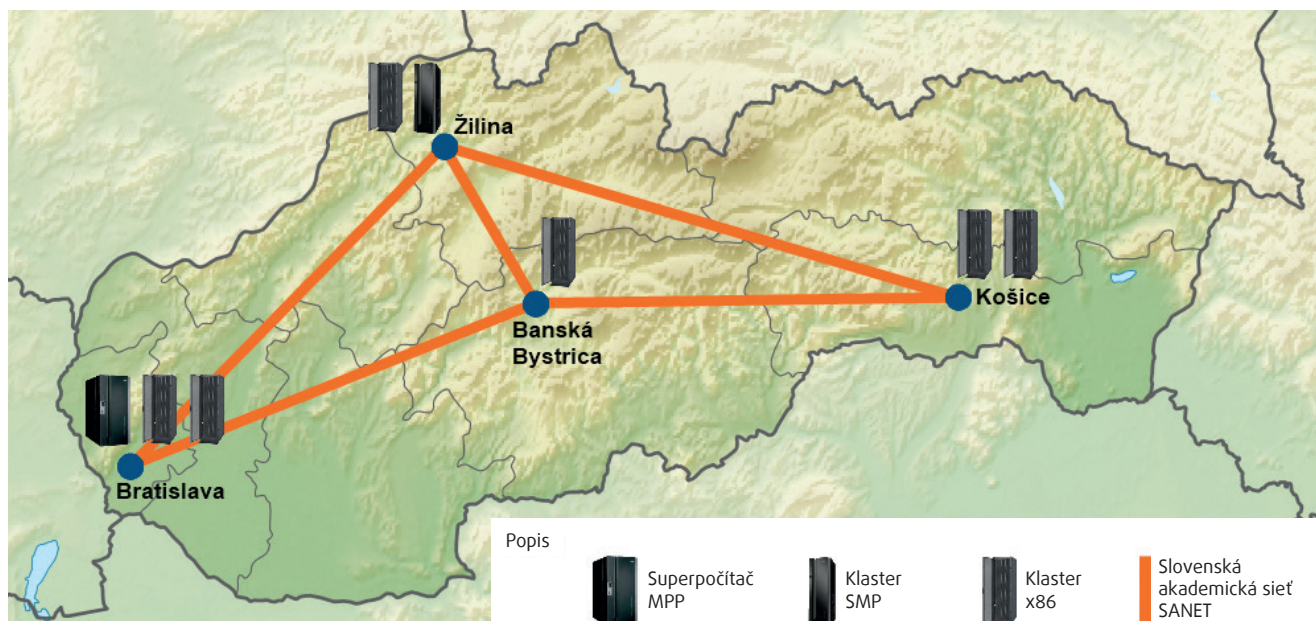
**hpc focus**

# Projekt SIVVP

## Popis projektu

Národný projekt Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie (SIVVP) bol vyhlásený Ministerstvom školstva, vedy, výskumu a športu SR v rámci operačného programu Výskum a vývoj z financií Európskeho fondu regionálneho rozvoja (ERDF).

Geografické rozloženie SIVVP:



Projekt SIVVP je unikátnou príležitosťou ako s pomocou financií zo štrukturálnych fondov Európskej únie zlepšiť technickú infraštruktúru pre veľké množstvo slovenských výskumno-vývojových inštitúcií, ktoré budú môcť výsledky projektu využívať vo forme vysokovýkonných výpočtov na európskej úrovni. Vybudovanie počítačovej infraštruktúry na báze superpočítačov a gridov znamená zabezpečenie realizácie veľmi zložitých numerických výpočtov pre oblasti výskumu a vývoja.

Hlavným cieľom SIVVP je zriadenie regionálnych superpočítačových a gridových centier na pracoviskách Slovenskej akadémie vied a slovenských univerzítach. Navrhnutá infraštruktúra

je modulárna a rozširiteľná funkcionalitou, výkonovo aj úložným priestorom. Všetky obstarávané technológie a jej navrhnuté riešenia sú využiteľné i pri plánovanom rozširovaní siete SIVVP.

Zmluva o nenávratný finančný prostriedok zo štrukturálnych fondov EÚ na realizáciu projektu, ktorý predložil kolektív autorov vedený riaditeľom Výpočtového strediska Slovenskej akadémie vied Ing. Tomášom Lackom spolu s ďalšími partnerskými organizáciami vo svojej žiadosti o NFP, bola podpísaná 15. 1. 2010. Projekt SIVVP zabezpečuje dodanie počítačovej infraštruktúry tak pre vysokovýkonné počítanie ako aj pre gridové resp. klastrové výpočty nielen pre sedem samosprávnych krajov Slovenska, ale aj pre Bratislavský samosprávny kraj.

Do prípravy a realizácie projektu SIVVP sa okrem Výpočtového strediska SAV (zodpovedný riešiteľ projektu Ing. Tomáš Lacko) zapojili ďalšie partnerské pracoviská Bratislavského kraja, Ústav Informatiky SAV (zodpovedný riešiteľ doc. Ing. Ladislav Hluchý, CSc.) a Slovenská technická univerzita v Bratislave (zodpovedný riešiteľ Ing. Peter Hermann). V zrkadlovom projekte realizovanom v ostatných krajoch Slovenska sú partnermi Výpočtové stredisko SAV (zodpovedný riešiteľ Ing. Tomáš Lacko), Ústav experimentálnej fyziky Slovenskej akadémie vied Košice (zodpovedný riešiteľ RNDr. Tibor Kožár, CSc.), Žilinská univerzita v Žiline (zodpovedná riešiteľka doc. Ing. Penka Martinová, PhD.), Univerzita Mateja Bela v Banskej Bystrici (zodpovedná riešiteľka Ing. Jarmila Škrinárová, PhD.) a Technická univerzita v Košiciach (zodpovedný riešiteľ doc. Ing. Milan Šujanský CSc.).

## Identifikačné údaje národného projektu SIVVP

### Ciel: **Konvergencia (K)**

Kód výzvy: OPVaV/K/RKZ/NP/2009-1

Číslo zmluvy: OPVaV/NP/1/2010

ITMS kód projektu: 26210120002

Celkové oprávnené výdavky: 13 280 750,00 EUR

NFP z ERDF: 11 288 637,50 EUR

zo ŠR: 1 992 112,50 EUR

Trvanie projektu: Január 2010 – December 2014

### Ciel: **Regionálna konkurencieschopnosť a zamestnanosť (RKZ)**

Kód výzvy: OPVaV/K/RKZ/NP/2009-1

Číslo zmluvy: OPVaV/NP/2/2010

ITMS kód projektu: 26230120002

Celkové oprávnené výdavky: 12 684 250,00 EUR

NFP z ERDF: 10 781 612,50 EUR

zo ŠR: 1 902 637,50 EUR

Trvanie projektu : Január 2010 – December 2014

# Hardvér

Výpočtové stredisko SAV spravuje superpočítač "Aurel" a počítačový klaster v Žiline.

## Superpočítač Aurel

IBM Power 775	
Konfigurácia	2 stojany, 16 políc, 128 fyzických nódov (130 logických nódov), 4 096 jadier 2 nódov na prístup k GPFS klastru 2 servisné nódov 2 nódov na prístup používateľov 126 výpočtových nódov
Operačná pamäť	256 GB na výpočtový nód
Teoretický výkon	128 TFLOP/s
Sietové pripojenie	Vysokorýchlostná optická výpočtová sieť s prenosovou rýchlosťou do 48 Gb/s Sieť na prístup k externému úložisku dát: Fiber Channel 8 GB/s
Dátové úložisko	IBM System Storage DS5300 s celkovou kapacitou 600 TB; vnútorná disková polica s celkovou kapacitou 320 TB
Operačný systém	AIX 7.1

## Počítačový klaster VS SAV v Žiline

Klaster IBM	Power 755/750	Power 780	Power 755
Počet výpoč. uzlov	18	1	2
Pamäť na výpočtový uzol	128 GB	1 024 GB	256 GB
Subsystém pevných diskov	6 x 600 GB	8 x 600 GB	6 x 600 GB
Výpočtová sieť (Infiniband)	40 Gb/s	40 Gb/s	40 Gb/s
Operačný systém	AIX	AIX	AIX



# Softvér

Knižnice	atlas, blas, gotoblas2, fftw3, lapack, libffi, libint, scalapack, xblas
Vývojárske nástroje	Xprofiler, dbx, gdb, pdb
Freeware programy	BEAST, aces3, block, cp2k, cpmd, dl-poly, espresso, espressoMD, fds6, gamess, gromacs, molden, mpqc, namd, qwalk
Kompilátory	IBM XL C/C++ v12.1 (5765-J02, 5725-C72) for AIX IBM XL Fortran v14.1 (5765-J04, 5725-C74) for AIX Python 2.6.2, gcc (GCC) 4.8.1, javac 1.5.0



# Návody

## Zriadenie užívateľského konta

Na registráciu a správu užívateľov slúži registračný portál [register.sivvp.sk](http://register.sivvp.sk). Užívateľia pochádzajúci z partnerských inštitúcií SIVVP sa musia registrovať vo svojich domovských inštitúciách. Registráciu ostatných užívateľov spravuje Výpočtové stredisko SAV prostredníctvom tejto stránky. Ak ste prvým žiadateľom o konto z organizácie, ktorá nepatrí medzi partnerov SIVVP, pred registráciou nás prosím kontaktujte na emailovej adrese [hpcregister@savba.sk](mailto:hpcregister@savba.sk).

## Proces schvaľovania nových užívateľov

1. Nový užívateľ si vytvorí konto na stránke [register.sivvp.sk/sk/user/register](http://register.sivvp.sk/sk/user/register)
2. Užívateľ emailom potvrdí pravosť svojej mailovej adresy
3. Na zvolený email bude užívateľovi poslaný mail s registračnými údajmi
4. Užívateľove registračné detaily budú overené, jeho konto na registračnom portáli bude schválené a bude mu vytvorené testovacie konto na výpočtových zdrojoch SIVVP. Potvrdenie schválenia spolu s ďalšími informáciami bude zaslané na užívateľov email.

**Používateľský účet**

Vytvorí nový účet | Prihlásenie | Požiadat o nové heslo

**Používateľské meno \***

Povolené sú len malé písmená bez mäkčeňov a dĺžokov a čísla; interpunkcia a medzery sú zakázané.

**E-mailová adresa \***

Zadajte platnú e-mailovú adresu. Na túto adresu budú posielané všetky e-maily. E-mailová adresa sa nezverejňuje a použije sa jedine, pokiaľ požiadate o zaslanie zabudnutého hesla alebo o upozornovanie na novinky.

**Meno \***

**Priezvisko \***

**Pracovisko \***

- Zvoľte -

Zvoľte skupinu podľa pracoviska, kde ste zamestnaný. Ak sa vaše pracovisko nenachádza na zozname, pridajte novú skupinu. Užívateľia pochádzajúci z partnerských inštitúcií SIVVP sa musia registrovať vo svojich domovských inštitúciách.

**Telefón \***

**Verejný RSA/DSA kľúč \***

Choose File | no file selected | Nahrať

Verejný RSA/DSA kľúč (public key) pomocou ktorého budeme overovať vašu totožnosť. Informácie o tom, ako vygenerovať kľúče sa nachádza tu. Subory musia mať menej ako 2 MB. Povolené typy súborov: pub.

**CAPTCHA**

This question is for testing whether or not you are a human visitor and to prevent automated spam submissions.

r e 6 2 W

**What code is in the image? \***

Enter the characters shown in the image.

Vytvorí nový účet

## Užívateľské projekty

Po úspešnom vytvorení konta môže užívateľ spúšťať len úlohy v triede "preempt". Táto trieda je určená len na testovanie a úlohy v tejto triede budú zabité ak sa fronta naplní. Pre sprístupnenie ďalších tried úloh musí nový užívateľ požiadať o vytvorenie projektu na stránke [www.register.sivvp.sk/node/add/projekt](http://www.register.sivvp.sk/node/add/projekt). Nové projekty prechádzajú podobným schvaľovacím procesom ako nový užívateľ. Užívatelia môžu tiež požiadať o pripojenie k existujúcemu projektu kontaktovaním zodpovedného riešiteľa. V blízkej budúcnosti bude umožnené užívateľom žiadať o výpočtové prostriedky aj u ostatných partnerov projektu SIVVP.

Registračný portál slúži tiež na zhromažďovanie výstupov (vedeckých publikácií) z užívateľských projektov.

## Moje projekty

### Vytvoriť nový projekt

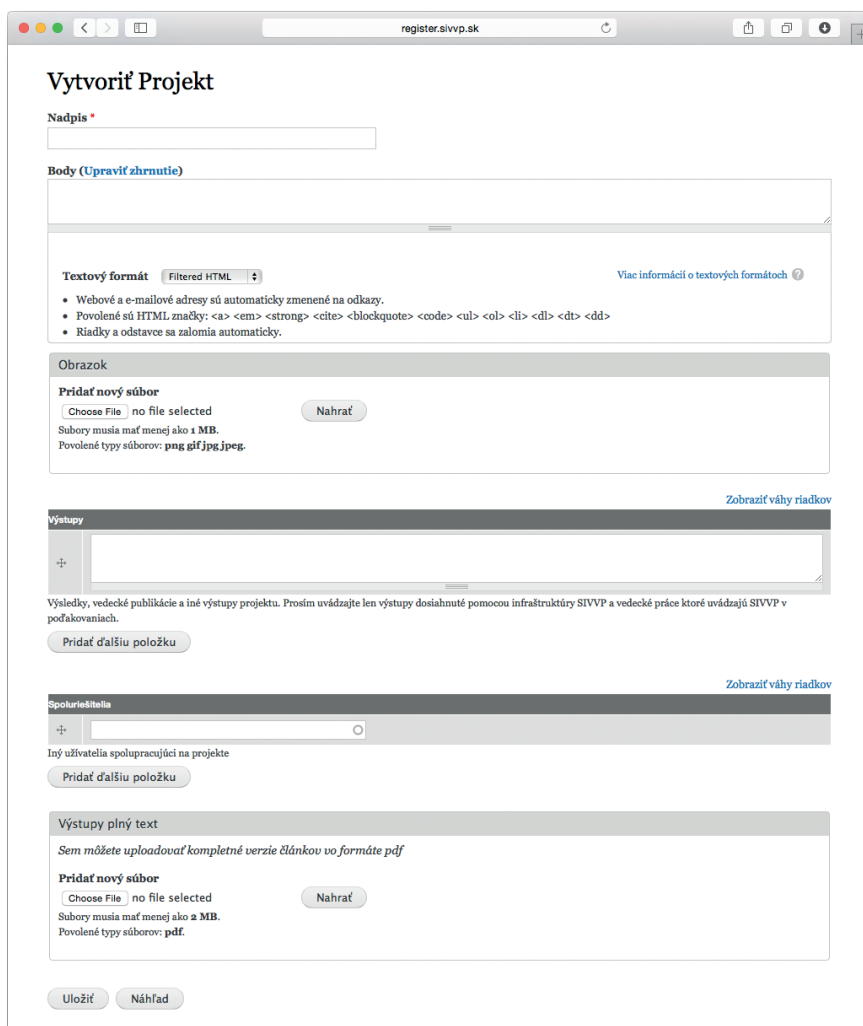
Projekty, kde som zodpovedným riešiteľom:

Projekty, kde som zodpovedným riešiteľom	Spoluriešitelia	Dátum zadania
Mathematical Formulations of Quantum Mechanics	Jozef Federič, Lukáš Demovič, Ján Dubovský	štvrtok, december 19, 2013 - 10:49

Projekty kde som spoluriešiteľom:

Názov projektu	Zodpovedný riešiteľ	Dátum zadania
Advanced neutrino interaction models	Ján Dubovský	štvrtok, január 9, 2014 - 10:54

V budúcnosti plánujeme produktívnych užívateľov odmeňovať väčšou prioritou vo fronte úloh.



## Moje výstupy

Výsledky, vedecké publikácie a iné výstupy projektu. Prosím uvádzajte len výstupy dosiahnute pomocou infraštruktúry SIVVP a vedecké práce ktoré uvádzajú SIVVP v poďakovaniach.

Názov projektu	Výstupy
Mathematical Formulations of Quantum Mechanics	<a href="#">Zobrazíť všetky riadky</a>
	<div style="border: 1px solid #ccc; padding: 5px;"> <p><b>Publications</b></p> <p>J. Dubovský, A. Zelina, "Subgroup Discovery in Quantum Monte Carlo Simulation", the Journal, 141, the Publisher (2014)</p> </div> <p>Results, scientific publications and other outputs of the project. Please only mention results achieved with the help of SIVVP infrastructure and only publications that acknowledge the support of SIVVP.</p> <p><a href="#">Pridať ďalšiu položku</a></p>

Uložiť

Čoskoro budú sprístupnené aj užívateľské fóra, ktoré umožnia jednoduchšiu podporu a výmenu poznatkov medzi užívateľmi.

## HPC Forum

	Téma	Odpovedí ▼	Posledná odpoveď
	Hardware Miloslav Valčo pred 3 mesiace 3 týždne	4	Miloslav Valčo pred 3 mesiace 3 týždne
	Software Miloslav Valčo pred 3 mesiace 3 týždne	3	Miloslav Valčo pred 3 mesiace 3 týždne
	<a href="#">Podpora užívateľov / User Support</a> Miloslav Valčo pred 3 mesiace 3 týždne	2	Miloslav Valčo pred 3 mesiace 2 týždne
	Všeobecná diskusia / General Discussion Miloslav Valčo pred 3 mesiace 3 týždne	1	Miloslav Valčo pred 2 mesiace 3 týždne
	Projekty / Projects Miloslav Valčo pred 3 mesiace 3 týždne	0	nie je
	Registrácia / Registration Miloslav Valčo pred 4 mesiace 1 deň	0	nie je

## Prihlasovanie sa

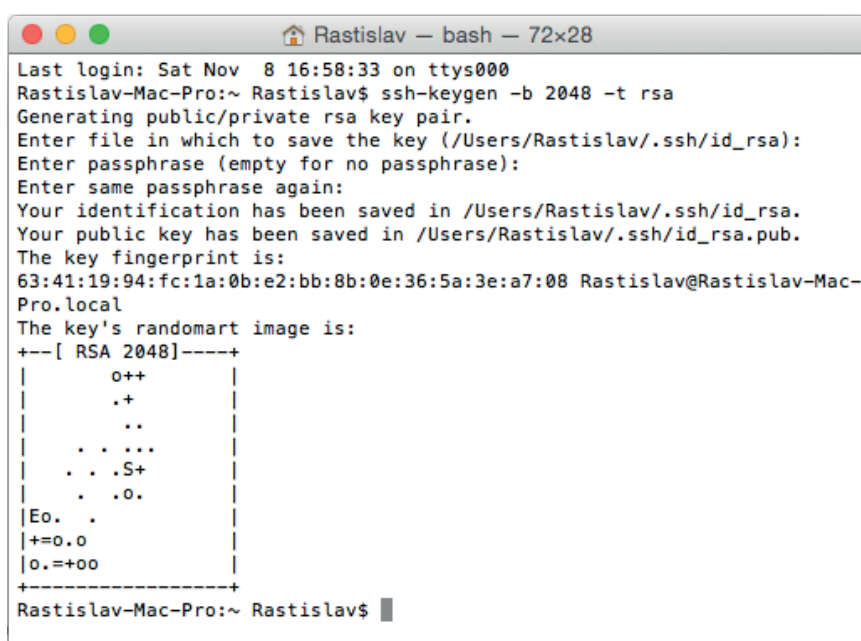
Prihlásenie na superpočítač je možné iba pomocou secure shell (ssh) na jeden z prihlasovacích nódov. Po prihlásení je možné kompilovať programy a púšťať joby. Prihlásenie je možné iba pomocou ssh kľúča.

### Výroba kľúča a prihlasovanie sa cez UNIX-like systémy

Spustíte v shelli nasledovný príkaz:

```
ssh-keygen -b 2048 -t  
rsa
```

ktorý vyrobí kľúče defaultne v adresári `~/.ssh`, na ochranu kľúča si prosím zvolte kvalitné heslo (aspoň 8 znakov, vrátane špeciálnych znakov). Verejný kľúč (`~/.ssh/id_rsa.pub`) mi zašlite. Pripomínam, že súbor `~/.ssh/id_rsa` je Váš súkromný kľúč, preto si naň treba dávať zvlášť pozor. V žiadnom prípade ho nešírte. Ak máte podozrenie, že by mohlo dôjsť k jeho kompromitovaniu, dajte nám okamžite vedieť - v prípade potreby si môžete vygenerovať nové kľúče.



```
Rastislav -- bash -- 72x28
Last login: Sat Nov  8 16:58:33 on ttys000
Rastislav-Mac-Pro:~ Rastislav$ ssh-keygen -b 2048 -t rsa
Generating public/private rsa key pair.
Enter file in which to save the key (/Users/Rastislav/.ssh/id_rsa):
Enter passphrase (empty for no passphrase):
Enter same passphrase again:
Your identification has been saved in /Users/Rastislav/.ssh/id_rsa.
Your public key has been saved in /Users/Rastislav/.ssh/id_rsa.pub.
The key fingerprint is:
63:41:19:94:fc:1a:0b:e2:bb:8b:0e:36:5a:3e:a7:08 Rastislav@Rastislav-Mac-Pro.local
The key's randomart image is:
+--[ RSA 2048 ]-----+
|          o++         |
|         .+          |
|          ..         |
|        . . . .     |
|       . . .S+      |
|        . .o.       |
|Eo. .              |
|+=o.o              |
|o.=+oo             |
+-----+
Rastislav-Mac-Pro:~ Rastislav$
```

Samotné prihlásenie (bude fungovať až po pridaní Vášho verejného kľúča na server, o čom Vás budeme informovať):

```
ssh vami_zvoleny_login@147.213.80.175
```

alebo

```
ssh vami_zvoleny_login@147.213.80.176
```

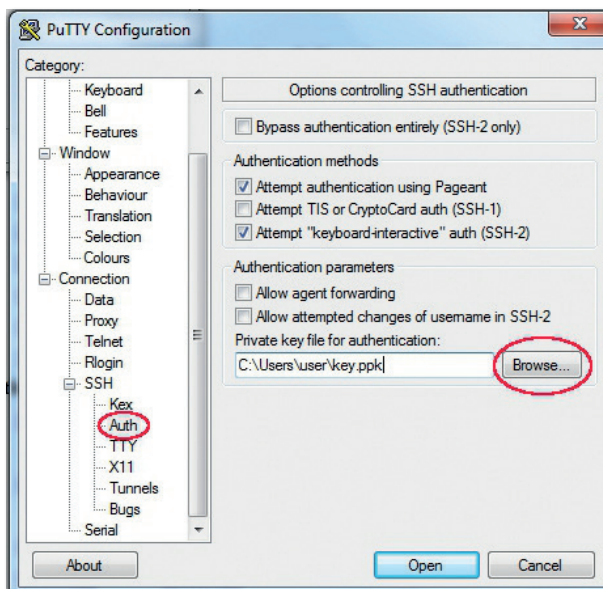
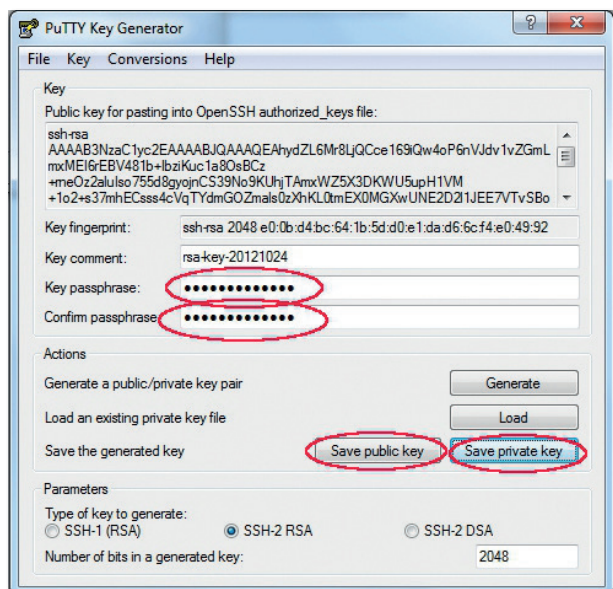
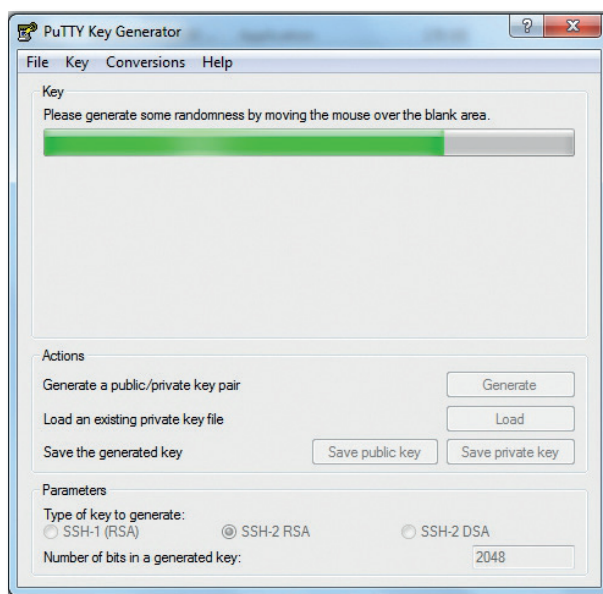
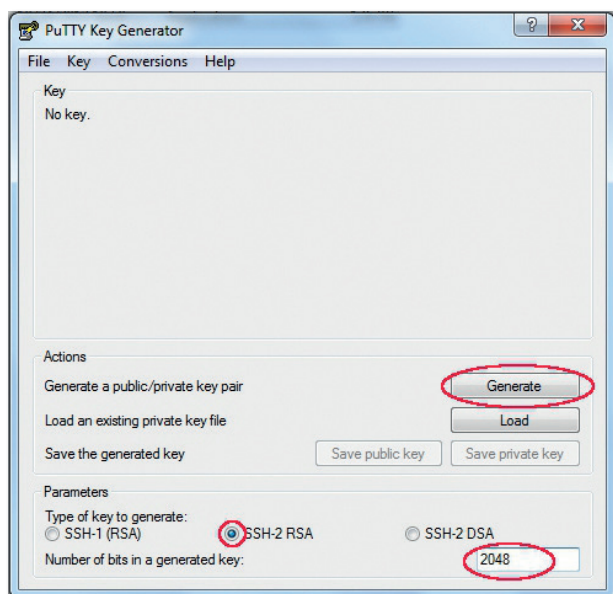
### Postup pre Windows

Malo by byť možné použiť ktorýkoľvek ssh klient podporujúci autentifikáciu pomocou ssh kľúčov. Uvádzame len postup pre PuTTY. Okrem samotného klienta si stiahnite aj program PuTTYgen zo stránky: [www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty/download.html](http://www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty/download.html)

Typ kľúča zvolte SSH-2 RSA a hodnotu „number of bits in the generated key“ nastavte na 2048. Kliknite na „generate“ a pohybujte myšou v šedom poličku, nezabudnite vytvorenému kľúču priradiť kvalitné heslo. Verejný kľúč mi pošlite, súkromný si dobre uchovajte (viď informácie vyššie).

Pre prihlásenie otvorte PuTTY, ako hostname nastavte 147.213.80.176 súkromný kľúč si do klienta importujte cez menu: **Connection > SSH > Auth**.

Majte prosím na pamäti, že systém je stále **v testovacom režime**, môžete síce púšťať dlhšie joby (dlhšie ako deň), ale vyhradujeme si právo ich ukončiť, ak to bude nutné. Spätná väzba a pripomienky sú vítané.



## Kompilácia programov

Pre vytvorenie optimalizovaného programu zo zdrojového kódu použite IBM kompilátory, ktoré sú na superpočítači nainštalované v nasledujúcich verziách:

- XL C/C++ (C/C++ compiler) version 11.1
- XLF Fortran version 13.1

V adresári `/opt/freeware/bin/` sa nachádzajú aj GNU kompilátory, tie však neodporúčame používať pre HPC aplikácie. Na kompiláciu pomocných programov však za istých okolností poslúžia dobre.

Pre používanie xlc kompileroch je nutné pridať `/usr/vacpp/bin` do premennej PATH:

```
export PATH=$PATH:/usr/vacpp/bin
```

## Kompilácia sériových programov

Príklad optimalizovanej kompilácie programov:

Pre jazyk C:

```
xlc_r -q64 -qarch=pwr7 -qtune=pwr7 -O3 -qhot  
myprog.c
```

Pre jazyk C++:

```
xlC_r -q64 -qarch=pwr7 -qtune=pwr7 -O3 -qhot  
myprog.c
```

Pre jazyk Fortran:

```
xlF_r -q64 -qarch=pwr7 -qtune=pwr7 -O3 -qhot  
myprog.f
```

Pre jazyk Fortran90:

```
xlF90_r -q64 -qarch=pwr7 -qtune=pwr7 -O3  
-qhot myprog.f90
```

Poznámka:

Prepínač „-q64“ umožní 64-bitové adresovanie.

## Kompilácia MPI programov

Príklad optimalizovanej kompilácie Message Passing Interface (MPI) programov:

Pre jazyk C:

```
mpcc_r -qarch=pwr7 -qtune=pwr7 -O3 -qhot  
myprog.c
```

Pre jazyk C++:

```
mpCC_r -qarch=pwr7 -qtune=pwr7 -O3 -qhot  
myprog.c
```

Pre jazyk Fortran:

```
mpxlf_r -qarch=pwr7 -qtune=pwr7 -O3 -qhot _  
myprog.f
```

Pre jazyk Fortran90:

```
mpxlf90_r -qarch=pwr7 -qtune=pwr7 -O3 -qhot  
myprog.f90
```

## Kompilácia OpenMP programov

Príklad optimalizovanej kompilácie Open Multi-Processing (OpenMP) programov:

Pre jazyk C:

```
xlc_r -q64 -qsmp=omp -qarch=pwr7 -qtune=pwr7  
-O3 -qhot myprog.c
```

Pre jazyk C++:

```
xlC_r -q64 -qsmp=omp -qarch=pwr7 -qtune=pwr7  
-O3 -qhot myprog.c
```

Pre jazyk Fortran:

```
xlf_r -q64 -qsmp=omp -qarch=pwr7 -qtune=pwr7  
-O3 -qhot myprog.f
```

Pre jazyk Fortran90:

```
xlf90_r -qsmp=omp -q64 -qarch=pwr7  
-qtune=pwr7 -O3 -qhot myprog.f90
```

## Spúšťanie programov

Každá výpočtová úloha musí byť spustená pomocou frontového systému IBM LoadLeveler.



## Základné príkazy

- `lsubmit script.ll` - zaradenie jobu do fronty
- `llq` - kontrolovanie stavu zadaných jobov
- `llstatus` - overenie dostupných zdrojov
- `llclass` - zobrazí dostupné triedy jobov a ich parametre
- `llcancel JOBID` - ukončenie úlohy s číslom JOBID

Popis jobu a požadované zdroje musia byť definované v špeciálnom skripte (textovom súbore) pre LoadLeveler. Vzorový skript nájdete v adresári `/gpfs/home/info/examples`.

## Syntax skriptu pre job

Skript sa skladá z kľúčových výrazov pre LoadLeveler (riadky začínajúce s `#@`) a príkazov, ktoré budú vyvolané.

Na začiatku skriptu je nutné špecifikovať zdroje pre job.

Riadky s kľúčovými slovami LoadLeveleru by nemali byť rozdelené riadkami bez kľúčových slov.

Po kľúčových slovách nasledujú príkazy pre vykonanie jobu. Väčšinou budete používať `mpiexec` alebo `poe` pre spustenie vášho paralelného programu. Takisto môžete využiť príkazy shellu vo vašom skripte.

Príklad skriptu:

```
#@ job_type = parallel
#@ job_name = My_job
#@ class = My_class
#@ error = job.err
#@ output = job.out
#@ network.MPI = sn_all,not_shared,US
#@ node = 2
#@ tasks_per_node = 32
#@ queue
```

```
mpiexec /path/to/your/app -flags...
```

Riadky začínajúce s „#@“ sú interpretované Loadlevelerom. Najdôležitejšie kľúčové výrazy sú „total\_tasks“, ktorý určuje celkový počet MPI procesov a „node“, ktorého hodnota určuje počet nódov, na ktorých budú roz distribuované procesy. V našom príklade spúšťame celkovo 64 úloh na 2 nódoch. Dôležitý je tiež výber správnej triedy jobu, ich prehľad je uvedený v nasledovnej tabuľke

class	max. # of nodes	max. walltime	priority
short	92	12:00:00	100
medium	32	48:00:00	80
long	8	240:00:00	60
testing	2	01:00:00	undefined*

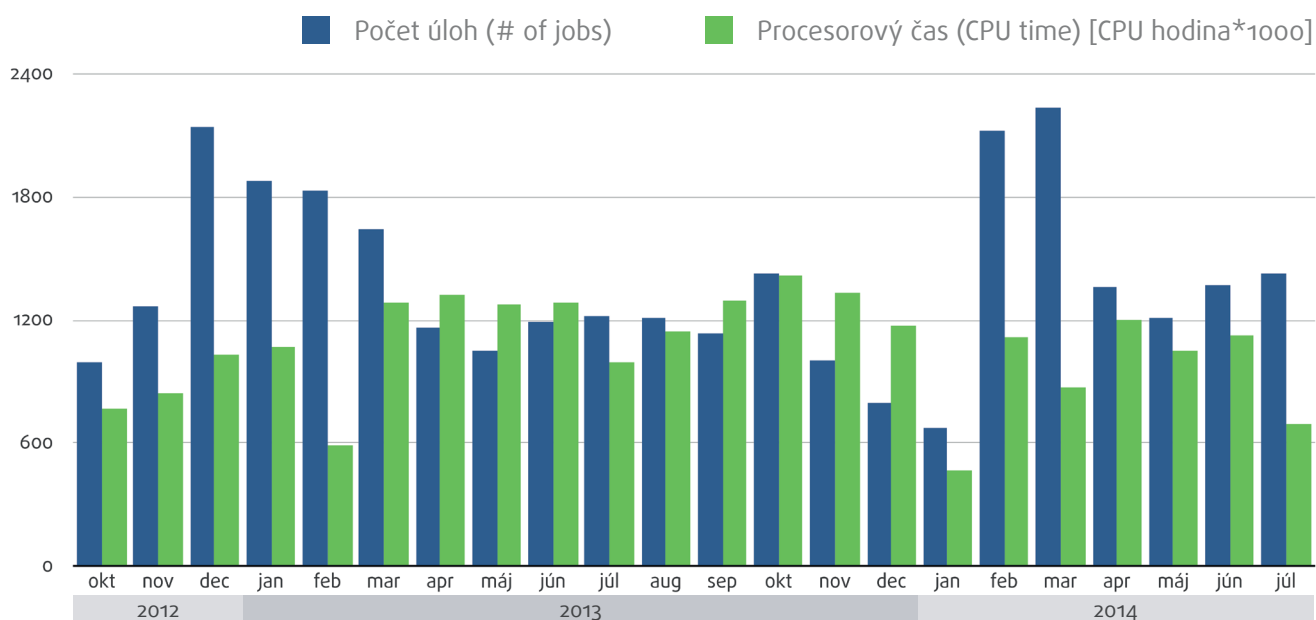
\* tejto triede sú vyhradené 2 uzly; slúži na testovanie a odlaďovanie aplikácií

### Pracovný adresár

Každý používateľ má v adresári [/gpfs/scratch/](#) svoj vlastný podadresár, ktorý je určený na ukladanie medzivýsledkov výpočtov. Tento adresár má nielen väčšiu kapacitu ako váš domovský adresár, je aj rýchlejší. Ak teda spúšťate úlohu, ktorá počas behu produkuje veľké množstvo dočasných dát, nastavte si ho ako svoj pracovný adresár.

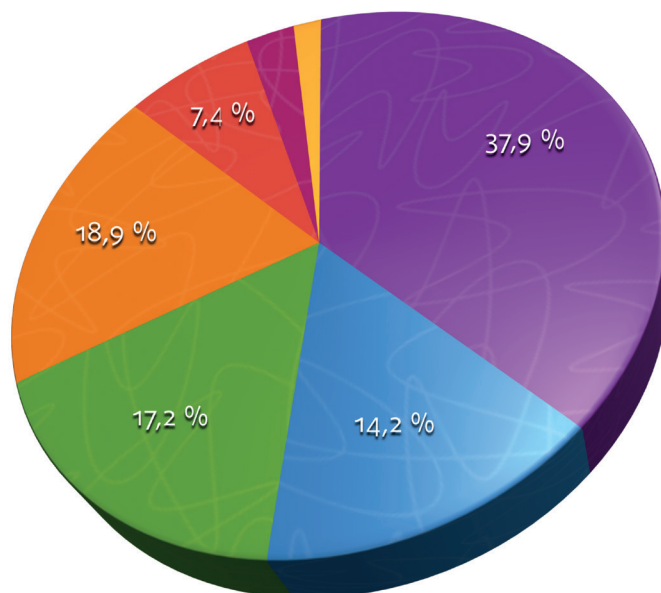
# Štatistiky

Štatistiky využívania superpočítača Aurel v CPU hodinách a množstve výpočtových úloh od začiatku jeho prevádzky



Percentuálne využívanie superpočítača Aurel rozdelené na skupiny užívateľov

- Geofyzikálny ústav SAV
- Výpočtové stredisko SAV
- Fyzikálny ústav SAV
- Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK
- Prírodovedecká fakulta UK
- Ústav anorganickej chémie SAV
- Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU



# Výstupy

Zoznam vedeckých článkov a publikácií, ktoré vznikli vďaka účasti Výpočtového strediska SAV na projekte SIVVP a uvádzajú ho v poďakovaniach. Kompletný zoznam publikácií je zverejnený na stránke [www.vs.sav.sk/?section=department-s&sub=vvt&sub2=publications](http://www.vs.sav.sk/?section=department-s&sub=vvt&sub2=publications).

J. Bamidele, Y. Kinoshita, R. Turanský, S. H. Lee, Y. Naitoh, Y. J. Li, Y. Sugawara, I. Štich, and L. Kantorovich, „Image formation and contrast inversion in noncontact atomic force microscopy imaging of oxidized Cu(110) surfaces“, Phys. Rev. B 90, 035410 (2014).

M. Dubecký, F. Dubecký, „The work functions of Au/Mg decorated Au(100), Mg(001), and AuMg alloy surfaces: A theoretical study“, the Journal of Chemical Physics, 141, AIP Publishing LLC (2014)

D. Plašienka, R. Martoňák, „Structural evolution in high-pressure amorphous CO<sub>2</sub> from ab initio molecular dynamics“, Physical Review B 89, 134105 (2014)

P. Schouwink, M. B. Ley, T. R. Jensen, L. Smrčok, R. Černý, „Borohydrides: from sheet to framework topologies“, In Dalton Transactions, 2014, vol. 43, no. 21, p. 7726-7733. (4.097 - IF2013). ISSN 1477-9226.

M. Krajčí, J. Hafner, „Selective semi-hydrogenation of acetylene: Atomistic scenario for reactions on the polar threefold surfaces of GaPd“, Journal of Catalysis, 312, 232-248 (2014)

M. Rifliková, R. Martoňák, E. Tosatti, „Pressure-induced gap closing and metallization of MoSe<sub>2</sub> and MoTe<sub>2</sub>“, DOI: 10.1103/PhysRevB.90.035108 P (2014)

P. Moczo, J. Kristek, M. Galis, „The Finite-Difference Modeling of Earthquake Motions: Waves and Ruptures“, Cambridge University Press, ISBN 978 1 107 02881 4 (2014)

L. Hromadová, R. Martoňák, E. Tosatti, „Structure change, layer sliding, and metallization in high-pressure MoS<sub>2</sub>“, PHYSICAL REVIEW B 87, 144105 (2013)

Ismail, A. M. Ibrahim, Z. Lenčeš, L. Benco, M. Hrabalova, P. Šajgalik, „Samarium-Doped Lanthanum Silicon Nitride: Synthesis, Computed Electronic structure and Band Gaps”, Journal of the American Ceramic Society, Accepted (2014)

M. Zemanová Diešková, I. Štich, P. Bokes, „Rigidity of the conductance of an anchored dithioazobenzene optomechanical switch”, Phys. Rev. B 87, 245418 (2013)

J. Bamidele, J. Brndiar, A. Gulans, L. Kantorovich, I. Štich, „Critical Importance of van der Waals Stabilization in Strongly Chemically Bonded Surfaces: Cu(110):O”, J. Chem. Theor. Comput. 9, 5578 (2013)

M. Dubecky, P. Jurecka, R. Derian, P. Hobza, M. Otyepka, L. Mitas, „Quantum Monte Carlo Methods Describe Noncovalent Interactions with Subchemical Accuracy”, J. Chem. Theor. Comput. 9, 4287 (2013)

T. Bucko, S. Lebegue, J. Hafner, J. G. Angyan, „Tkatchenko-Scheffler van der Waals correction method with and without self-consistent screening applied to solids”, Phys. Rev. B 87, 064110 (2013)

T. Bucko, S. Lebegue, J. Hafner, J. G. Angyan, „Improved density dependent correction for the description of London dispersion forces”, J. Chem. Theory Comput. 9, 4293 (2013)

M. Šimuneková, P. Schwendt, J. Chrappová, L. Smrčok, R. Černý, W. van Beek, „The first transition metal iodato peroxido complex: the synthesis, vibrational spectra and crystal structure from powder diffraction data of  $K_3[V_2O_2(O_2)_4(IO_3)] \cdot H_2O$ ”, In Central European Journal of Chemistry, vol. 11, no. 8, p. 1352-1359. (1.167 - IF2012). ISSN 1895-1066. (2013)

R. Černý, P. Schouwink, Y. Sadikin, K. Stare, L. Smrčok, B. Richter, T. R. Jensen, „Trimetallic borohydride  $Li_3MZn_5(BH_4)_{15}$  (M=Mg, Mn) containing two weakly interconnected frameworks”, In Inorganic Chemistry, vol. 52, p. 9941-9947. (4.593 - IF2012). ISSN 0020-1669. (2013)

M. Macák, K. Mikula, „Comparison between solutions of the geodetic boundary-value problem with the Neumann and the oblique boundary condition in the area of Himalaya region. Advances in Architectural, Civil and Environmental Engineering”, 23<sup>rd</sup> Annual PhD student conference, Bratislava, SR, 30.10.2013, Bratislava: Nakladateľstvo STU, ISBN 978-80-227-4102-6, s. 45-50 (2013)

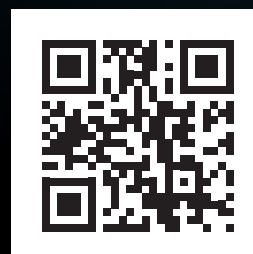


# Power775 supercomputer



Výpočtové stredisko  
Slovenskej akadémie vied  
Dúbravská cesta 5  
845 35 Bratislava  
Slovenská republika

[www.vs.sav.sk](http://www.vs.sav.sk)



ISBN 978-80-89871-00-1