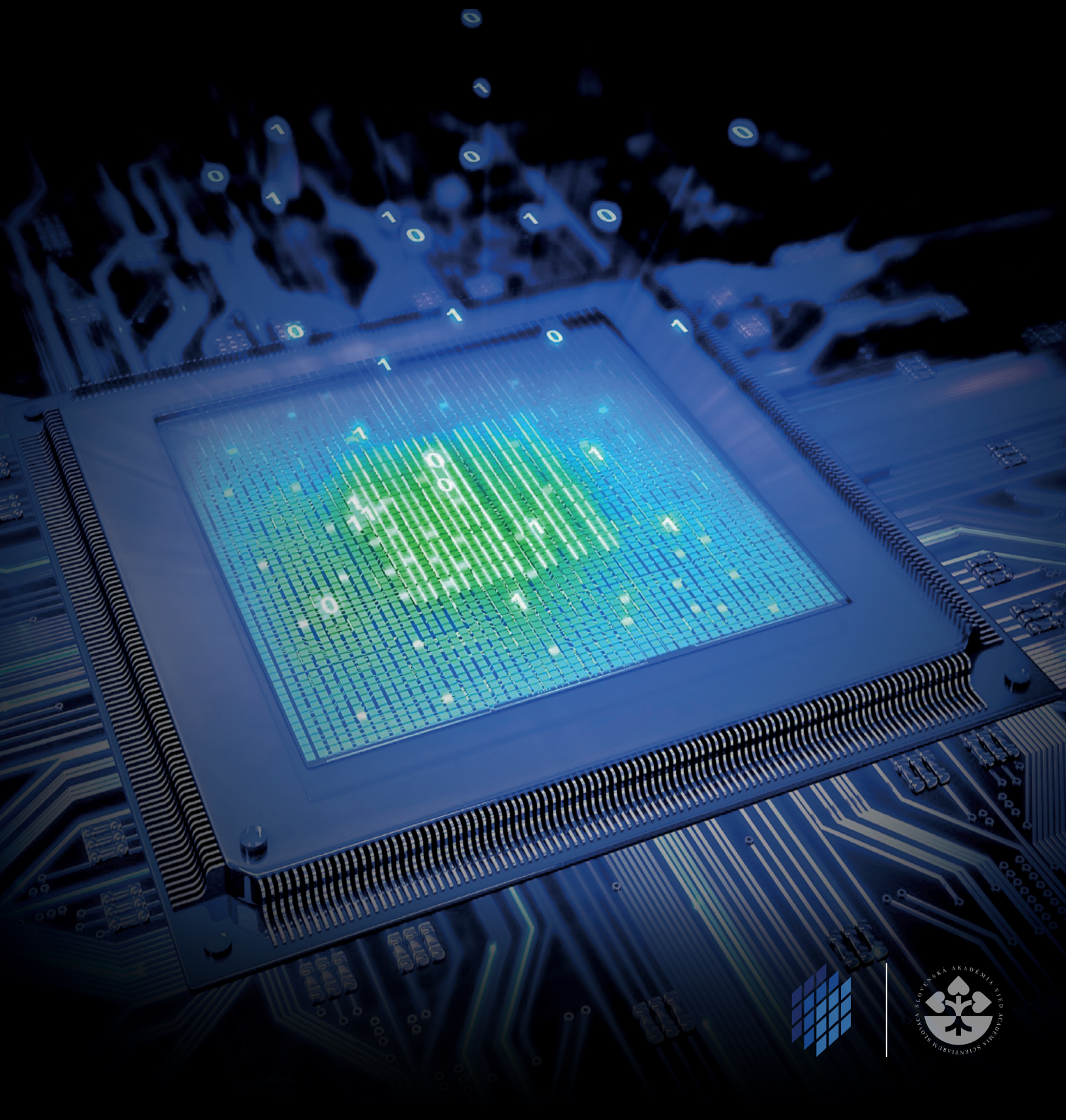
Časopis Výpočtového strediska Slovenskej akadémie vied

2015

hpc focus



ISBN 978-80-89871-02-5

Ing. Tomáš Lacko
Riaditeľ VS SAV

Úvodné slovo riaditeľa

Milí čitatelia,

dostáva sa Vám do rúk druhé číslo časopisu, ktorý má za cieľ prezentovanie výsledkov z používania vysokovýkonnej výpočtovej techniky širokej verejnosti. V prvom čísle sme pozornosť upriamili predovšetkým na superpočítač Aurel, ktorý je najvýkonnejším výpočtovým systémom, v dnes už môžme povedať, vybudovanej Slovenskej infraštruktúre pre vysokovýkonné počítanie. V dnešných dňoch dobiehajú posledné nákupy a inštalácie softvérových balíkov, čím skončí implementačná fáza tohoto národného projektu. Už v tomto krátkom dvojročnom období sa ukázalo, aké kvalitné výsledky sa dajú dosiahnuť využívaním vybudovanej infraštruktúry pre vysokovýkonné počítanie, ktoré je prehľadne a transparetne zdokumentované pri jej najvýkonnejšom prvku – superpočítači AUREL. Ukázalo sa, že svojou konfiguráciou dokáže poskytnúť našim významným používateľom dostatočný výpočtový výkon k tomu, aby mohli tvoriť medzinárodne akceptovateľné výsledky svojej vedeckej práce. Pre záujemcov o bližšie informácie o dosiahnutých výsledkoch v infraštruktúre SIVVP sme pripravili web-stránku na adrese *www.sivvp.sk* a pre verejnosť zaujímajúcu sa o superpočítač AUREL sú informácie dostupné na web-stránke Výpočtového strediska SAV *www.vs.sav.sk* v sekcii Odbor pre vysokovýkonné počítanie.

V druhom vydaní nášho časopisu HPC fokus, ktorý práve držíte v rukách, sa dozviete viac o našich partneroch v projekte, o ich

výpočtových systémoch, orientácii na výpočty a dosiahnutých výsledkoch.

Ako som už spomínal, implementačná fáza národneho projektu Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie – SIVVP sa 31. decembra 2015 skončí a prejde do päťročného monitorovacieho obdobia udržateľnosti. Využívam preto aj túto príležitosť, aby som sa poďakoval všetkým štatutárom našich partnerov v projekte, nimi delegovaným zástupcom a koordinátorom projektu a všetkým zúčastneným za otvorenú, priamu a ústretovú spoluprácu pri realizácii projektu, ktorý otvára dvere do segmentu vedy a výskumu, ktorý dosiaľ na Slovensku nebolo možné v domácich podmienkach realizovať.

Prajem všetkým našim čitateľom a priaznivcom veľa úspechov a príjemné čítanie.

Tomáš Lacko

OBSAH

Strana 04 - 11

SIVVP

Predstavenie jednolivých vysokovýkonných klastrov univerzít a ústavov SAV zapojených do jedinečného národného projektu “Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie”.

Strana 100 - 109

PRACE

16. októbra uplynul práve jeden rok od prijatia Výpočtového strediska SAV do organizácie paneurópskeho významu s názvom PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe).

Strana 110 - 119

HISTÓRIA

Ohliadnutie do nedávnej minulosti očami užívateľa Aurela RNDr. Mariána Krajčího, DrSc.

Európska únia
Európsky fond regionálneho rozvoja

Operačný program VÝSKUM a VÝVOJ

Agentúra Ministerstva školstva, vedy, výskumu a športu SR pre štrukturálne fondy EÚ

Podporujeme výskumné aktivity na Slovensku
Projekt je spolufinancovaný zo zdrojov ES

46 Terabit/sec
Optical Backplane

01

SIWP

hpc focus

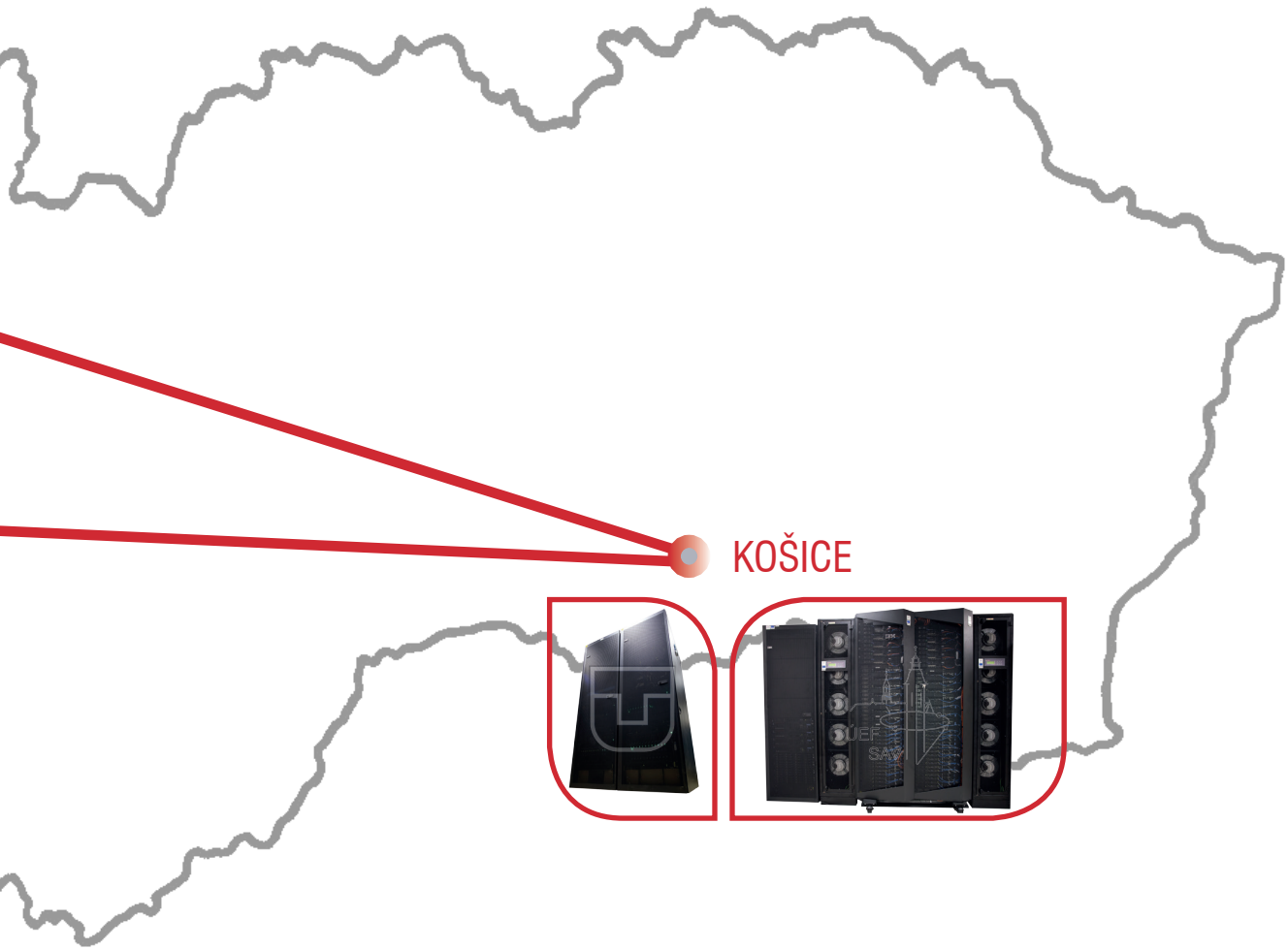
SIWP

ŽILINA

BANSKÁ
BYSTRICA

BRATISLAVA

Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie



Vznik projektu SIVVP

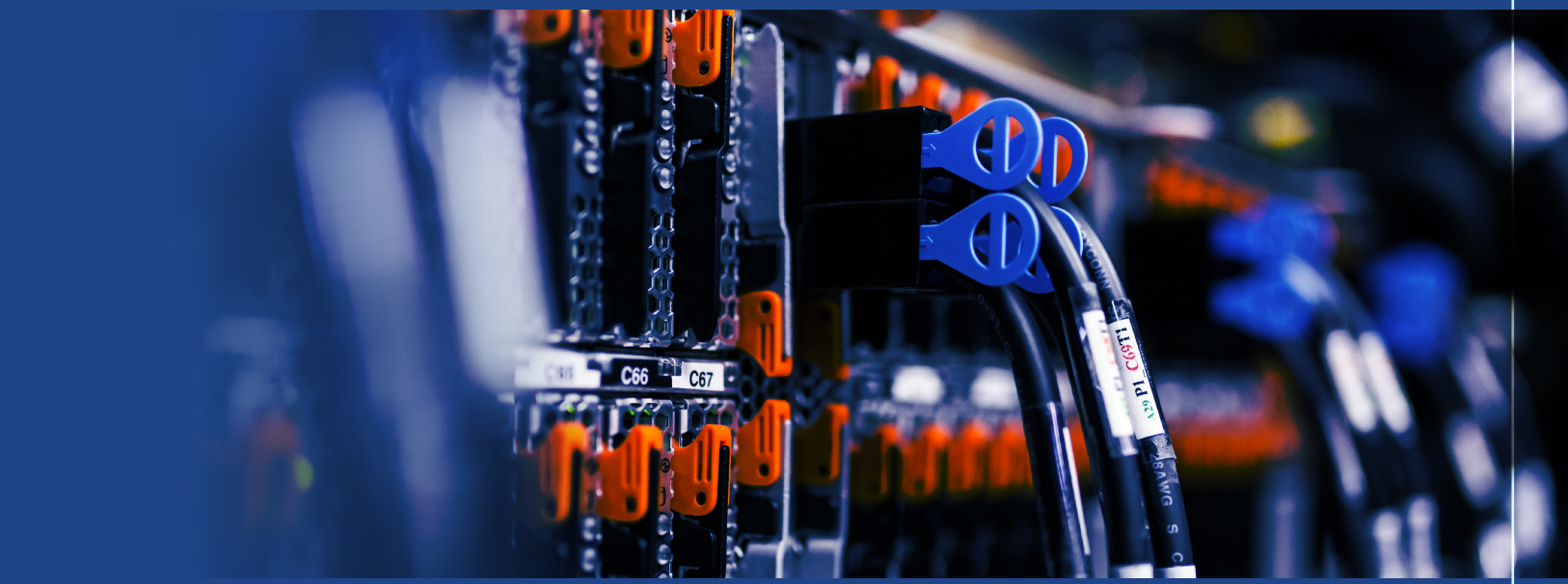
Tomáš Lacko

V prvom čísle nášho časopisu HPC focus sme sa v krátkom príspevku „Zrod AURELA – prvého superpočítača na Slovensku“ venovali stručnému výpočtu udalostí, ktoré k nemu viedli. V tomto čísle sa venujeme tématicky celému projektu SIVVP s príspevkami aj od našich partnerov v projekte. Keďže mnohým našim čitateľom genéza vzniku projektu nie je príliš známa, alebo nie je známa vôbec, cieľom tohto príspevku je ozrejmiť aktivíty a stretnutia z tohoto obdobia, ktoré dokreslia celkový rámec našich snažení na samom začiatku projektu. Projekt vznikal na základe požiadaviek našich budúcich používateľov, bol verejne diskutovaný a obhajovaný.

Prvými formulovanými predstavami v oblasti IKT vo vede a výskume orientované na vysokovýkonné počítanie (HPC) boli dva navrhované národné projekty, ktoré sa nachádzali už v roku 2006 v tzv. zásobníku projektov na Ministerstve školstva SR. Jeden z nich „Národné superpočítačové centrum“ v odhadovanom objeme 500 mil. Sk na investície, 20 mil. Sk/ročne na prevádzku a 10 mil. Sk/ročne na údržbu a podporu. Tento návrh bol sformulovaný v súlade so zriaďovacou listinou Výpočtového strediska SAV, kde sa medzi spoločnými činnosťami a centrálne poskytovanými službami uvádza:

„Výpočtové stredisko zabezpečuje prevádzku superpočítačových systémov pre vedecko-technické výpočty a poskytuje strojový čas pre potreby organizátcii SAV a vysokých škôl.“

A ďalej: „Výpočtové stredisko koordinuje rozvoj počítačovej



siete a superpočítačov v SAV na celoštátnej úrovni.“

To boli hlavné motivačné dôvody, prečo sa Výpočtové stredisko angažovalo v získaní superpočítačového systému, ktorý by bol základom pre vznik a rozvoj Národného superpočítačového centra na Slovensku.

Druhým projektom bol navrhovaný SlovakGrid, za ktorým stál Ústav informatiky SAV. Prípravy a analýzy prebiehali veľmi intenzívne v priebehu rokov 2005 až 2007 výsledkom čoho bol veľmi dobrý prehľad o požiadavkách na počítanie v oblasti HPC na slovenských univerzitách a v Slovenskej akadémii vied.

O plánovanom vytvorení Národného superpočítačového centra s celoslovenskou pôsobnosťou informoval vtedajší minister školstva SR Ján Mikolaj podpredsedu vlády SR Dušana Čaploviča a túto informáciu potvrdil listom v novembri 2007 vtedajšiemu predsedovi SAV prof. Lubymu.

Všetko bolo pripravené na prvé stretnutie reprezentantov univerzít a vysokých škôl ako aj zainteresovaných organizácií SAV, predovšetkým Ústavu informatiky SAV a Výpočtového strediska SAV na pôde Ministerstva školstva SR v marci 2008. Na tomto pracovnom stretnutí sa rozhodlo o príprave dvoch koncepčných návrhov národných projektov, a to SlovakGrid a Národné superpočítačové centrum – NSC. Podporu vypracovania oboch návrhov vyjadril aj vtedajší prezident Slovenskej rektorskej konferencie prof. Báleš.

V jarných mesiacoch roku 2008 sme zorganizovali spoločne s CVT na STU v Bratislave dva dni prezentácií HPC technológií, ktoré boli prostredníctvom vysielania multicast šírené do siete SANET pre širokú verejnosť.

V letných mesiacoch 2008 boli oba návrhy národných projektov predložené na Ministerstvo školstva SR a na septembrovom opätovnom stretnutí zástupcov univerzít, vysokých škôl a SAV, bolo rozhodnuté - ako je už asi známe, zlúčiť obidva projekty do jedného. Názov Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie – SIVVP bol prijatý na jesennom prvom pracovnom stretnutí riešiteľov zlúčeného projektu za prítomnosti budúcich používateľov, zástupcov predsedníctva SAV a pracovníkov Riadiaceho orgánu MŠ SR. Na tomto stretnutí sa zúčastnil aj prof. Sitár, v tom čase viceprezident Európskej organizácie pre jadrový výskum - CERN, ktorý zdôraznil požiadavku zabezpečiť pre používateľov neobmedzený prístup k navrhovanej infraštruktúre.

Príprava spoločného návrhu národného projektu SIVVP trvala približne šesť mesiacov a vyvrcholila jeho spoločným schválením na pracovnom stretnutí v Konferenčnom centre SAV v Smoleniciach. Návrh projektu bol prerokovávaný aj na Predsedníctve SAV a na decembrovom zasadaní mu bola vyslovená podpora a uložená povinnosť projekt odovzdať. Vypracovaný návrh projektu bol spolu s deklarovaným súhlasom partnerských organizácií predložený na Ministerstvo školstva SR. V apríli 2009 prebehla oponentúra návrhu národného projektu pred Radou pre informatiku a informatizáciu v školstve

a prizvanými hosťami. Po prezentácii projektu prebehla živá diskusia o zmysle a poslaní prezentovaného projektu, ktorá vyústila do zhody názorov o nevyhnutnosti vybudovať HPC, infraštruktúru na Slovensku, ktorá bude prístupná pre celú vedeckú obec z univerzít, vysokých škôl a SAV. Všetci zúčastnení hlasovali za realizáciu projektu SIVVP, nikto sa nezdržal hlasovania a nikto nebol proti. Na záver oponentúry zaznel celou sálou potlesk, ktorý zavŕšil rokovanie a nezabudnuteľne doplnil atmosféru eufórie a radosti z toho, že aj na Slovensku budeme mať konečne HPC infraštruktúru, ktorá dá našim vedeckým pracovníkom priestor na tvorbu konkurencie schopných výsledkov vo svojom segmente výskumu. Áno, boli to chvíle, na ktoré sa tak skoro nezabudne, chvíle, ktoré otvorili dvere k vyhláseniu uzavretej výzvy na vypracovanie Žiadosti o pridelenie NFP (nenávratného finančného príspevku). Naša žiadosť bola úspešná a dňa 1. decembra 2009 ministrom školstva, pánom Mikolajom, schválená. Zmluva o poskytnutí NFP na národný projekt SIVVP medzi Ministerstvom školstva SR a Výpočtovým strediskom SAV bola podpísaná 10. januára 2010. Týmto aktom boli odštartované prvé aktivity v rámci projektu SIVVP, ktorý bude v decembri tohto roku končiť.

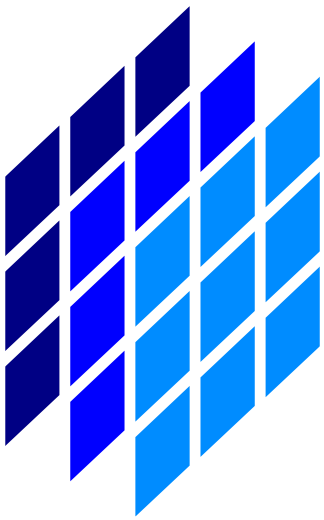
Zrealizovaním cieľov projektu získala slovenská vedecká obec infraštruktúru, na ktorú môže byť právom hrdá. Významným spôsobom sa mnohí jej súčasní používatelia pričinili o úspech pri vzniku projektu ako aj počas jeho realizácie.

Prajem všetkým súčasným, ako aj budúcim používateľom vybudovanej HPC infraštruktúry veľa úspechov pri jej využívaní.

BRATISLAVA
VÝPOČTOVÉ STREDISKO SAV

VS SAV SIVVP

superpočítačové centrum



Filip Holka

01 SUPERPOČÍTAČ IBM 775 AUREL

Superpočítač IBM Power 775 Aurel patrí do skupiny serverov s vysokou škálovatelnosťou (až do 2048 CEC jednotiek/ 524288 jadier), modulovatelnosťou, hustotou (3072 jadier a 24 TB operačnej pamäte v 1 stojane) a extrémnym paralelným výkonom. Je postavený na architektúre IBM Power7. Jeho aktuálna konfigurácia predstavuje 2 stojany obsahujúce 16 jednotiek CEC, interné diskové pole (320 TB úložného dátového priestoru) a obslužné napájacie a chladiace zariadenia. K superpočítaču patrí externé diskové pole IBM System Storage DS5300 s celkovou kapacitou 600 TB. Server IBM Power 775 je organizovaný do menších logických celkov – supernódov. Jeden supernód pozostáva zo štyroch CEC-ov. Každá CEC jednotka je rozdelená na 8 tzv. oktantov, pričom oktant predstavuje jeden fyzický uzol. Okrem výpočtového subsystému, ktorý zahŕňa 122 výpočtových uzlov (s mapovaním 1:1 na fyzický uzol) patrí k superpočítaču aj dátový subsystém – 4 I/O uzly (s mapovaním 1:1 na fyzický uzol) – obsluhujúci prístup k diskovým poliam a servisný subsystém – 2 prihlasovacie a 2 servisné uzly (s mapovaním 3:4 a 1:4 na fyzický uzol).

Všeobecná konfigurácia:

Počet uzlov:	128 fyzických uzlov 130 logických uzlov
Počet jadier:	4096 jadier
Celková pamäť:	32 TB
Celková disková kapacita:	600 + 320 TB
Výpočtový výkon:	130 TFLOP/s
Energetický výkon:	200 kW
Operačný systém:	AIX 7.1

Výpočtový uzol:

Procesor:	4x 8-jadrový Power7 3.83 GHz
Pamäť:	256 GB
Pripojenie:	-vysokorýchlostná optická sieť 5-48 Gb/s (medziuzlová komunikácia) -metalická sieť 10 Gb/s (prístup k internému úložisku dát) -metalická sieť 8 Gb/s (prístup k externému úložisku dát)

I/O uzol:

Procesor:	4x 8-jadrový Power7 3.83 GHz
Pamäť:	256 GB
Služby:	prístup na paralelný súborový systém (GPFS) pre ostatné uzly

Servisný uzol:

Procesor:	1x 8-jadrový Power7 3.83 GHz
Pamäť:	64 GB
Služby:	obrazy operačného systému pre výpočtové uzly, xCAT

Prihlasovací uzol:

Procesor:	3x 8-jadrový Power7 3.83 GHz
Pamäť:	192 GB
Služby:	-centralizované prihlasovanie na superpočítač -správa výpočtových front a organizácia výpočtových úloh

Aplikačné vybavenie

Superpočítač IBM 775 Aurel

» ACES

(Advanced Concepts in Electronic Structure)

- program pre paralelné výpočty molekúl s uzavretou a otvorenou elektrónovou štruktúrou

(*http://www.qtp.ufl.edu/aces/docs.shtml*)

» BEAST

(Bayesian Evolutionary Analysis Sampling Trees)

- program na Bayesovskú štatistickú analýzu molekulových sekvencií použitím metódy MCMC

(*http://beast.bio.ed.ac.uk*)

» BLOCK

- implementácia algoritmu renormalizačnej grupy matice hustoty (DMRG). DMRG je variačná metóda používaná v kvantovej chémii

(*http://www.princeton.edu/chemistry/chan/software/dmrg/*)

» CP2K

- program určený na molekulové simulácie tuhej a kvapalnej fázy a molekulárnych a biologických systémov

(*http://www.cp2k.org*)

Mgr. Filip Holka, PhD. pôsobí ako vedúci oddelenia admistrácie VVT na VS SAV.

» CPMD

- paralelizovaná implementácia teórie funkcionálu hustoty pre ab-initio molekulovú dynamiku

(*http://www.cpmd.org*)

» DL_CLASSIC a DL_POLY

- balíky programov slúžiacich na simulácie molekulovej dynamiky makromolekúl, polymérov, iónových systémov, roztokov a iných molekulových systémov

(*http://www.ccp5.ac.uk/DL_POLY CLASSIC/*)

» QUANTUM ESPRESSO

- integrovaný balík voľne dostupných programov pre výpočty elektrónovej štruktúry látok a materiálov na úrovni nanoškálovej veľkosti. Je založený na teórii funkcionálu hustoty, rovinných vĺn a pseudopotenciálov

(*http://www.quantum-espresso.org/project/manifesto/*)

» FDS-SMV

(**F**ire **D**ynamics **S**imulator)

- program na modelovanie toku kvapalín, špecificky na teplotne indukované pomalé toky, s dôrazom na dym a rozširovanie tepla z ohňov. SMV (Smokeview) je vizualizačný program používaný na zobrazenie výstupu FDS a CFAST simulácií

(*https://code.google.com/p/fds-smv/*)

» GAMESS

(**G**eneral **A**tomic and **M**olecular **E**lectronic **S**tructure **S**ystem)

- softvér pre výpočtovú chémiu s implementovanými všeobecnými chemickými metódami ako Hartree–Fock, teória funkcionálu hustoty (DFT), teória valenčných väzieb valenčná väzba (GVB), a viac-konfiguračného samosúhlasného poľa (MCSCF)

(*http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html*)

» GROMACS

- programový balík na výpočet molekulárnej dynamiky, t.j. simulovanie Newtonovských rovníc pohybu pre systémy s miliónmy častíc

(*http://www.gromacs.org*)

» MOLDEN

- program slúžiaci na zobrazovanie molekúl, štruktúr, elektrónovej hustoty, atď. pre GAMESS, GAUSSIAN a Mopac/Ampac; tiež podporuje niekoľko ďalších programov pomocou formátu Molden

(*http://www.cmbi.ru.nl/molden/*)

» MPQC

(Massively Parallel Quantum Chemistry Program)

- používa sa na výpočty vlastnosti atómov a molekúl z prvých princípov

(*http://www.mpqc.org*)

» NAMD

- paralelný kód na simulácie molekulovej dynamiky vytvorený pre vysoko-výkonné simulácie veľkých molekulových systémov

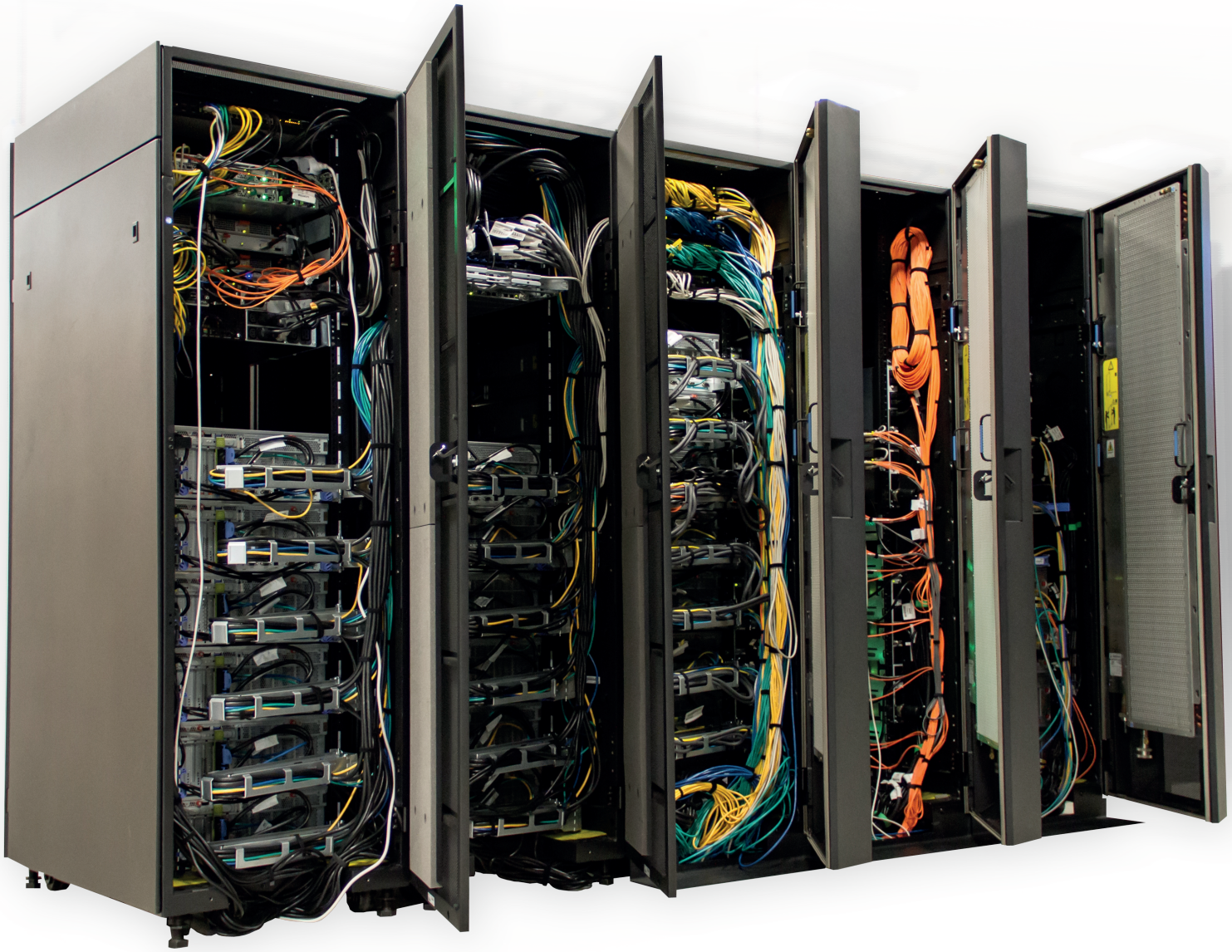
(*http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/*)

» QWALK

- program na vykonávanie veľmi presných kvantových Monte Carlo simulácií elektrónových štruktúr v molekulách a pevných látkach

(*https://code.google.com/p/qwalk/*)

ŽILINA
DETAŠOVANÉ PRACOVISKO
VÝPOČTOVÉHO STREDISKA SAV



02 HPC KLASTRE IBM POWER 750/755/780

Výpočtové uzly **IBM Power 750/755** HPC klastra sú dizajnované na vysoký paralelný výkon. V porovnaní so superpočítačom IBM 755 sa vyznačujú nižšou triedou komunikačnej medziuzlovej vrstvy (sieť typu Infiniband v porovnaní s proprietárnou optickou sieťou superpočítača) a nižšou hustotou výpočtového výkonu. Typickým príkladom použitia uzlov 750/755 sú HPC aplikácie ako napr. modelovanie počasia a klímy, biomedicínske aplikácie, výpočtová chémia, fyzika a inžinierstvo. **IBM Power 780** je samostatný klaster s SMP (Symmetric Multiprocessing) architektúrou, pre ktorú je charakteristické zdieľanie operačnej pamäte všetkými procesormi a ich priamy prístup ku všetkým I/O zariadeniam. Takýto klaster je riadený jedným operačným systémom. SMP má optimálne využitie v masívne paralelných aplikáciách s vysokými nárokmi na operačnú pamäť.

Všeobecná konfigurácia:

Počet uzlov:	20 uzlov typu 750/755 / 1 uzol typu 780
Počet jadier:	704 jadier
Celková pamäť:	3,82 TB
Celková disková kapacita:	82 + 80 TB
Výpočtový výkon:	19 TFLOP/s
Operačný systém:	Suse 11.3 Linux/AIX 7.1

Výpočtový uzol IBM Power 750/755:

Procesor:	4x 8-jadrový Power7 3.3 GHz
Pamäť:	28/256 GB (18/2 uzly)
Kapacita diskov	6x 600 GB (lokálne diskové pole)
Pripojenie:	-výkonná metalická sieť Infiniband 40 Gb/s (medziuzlová komunikácia) - metalická sieť 1 Gb/s (prístup k externému úložisku dát)

Výpočtový uzol IBM Power 780:

Procesor:	8x 8-jadrový Power7 3.3 GHz
Pamäť:	1024 GB
Kapacita diskov	6x 600 GB (lokálne diskové pole)
Pripojenie:	-výkonná metalická sieť Infiniband 8 Gb/s (medziuzlová komunikácia) - metalická sieť 1 Gb/s (prístup k externému úložisku dát)

Aplikačné vybavenie

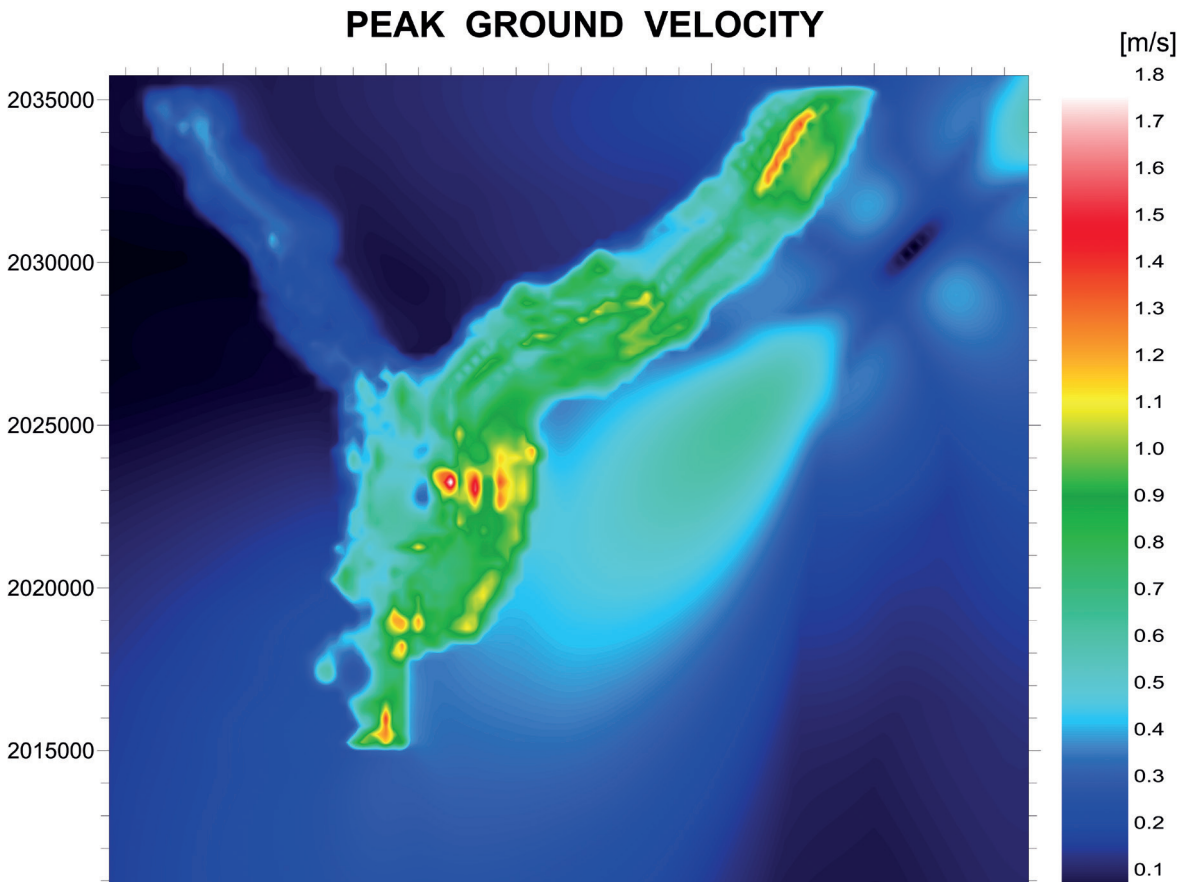
HPC klastre IBM Power 750/755/780

- CFOUR
  (Coupled-Cluster techniques for Computational Chemistry)
  - programový balík obsahujúci pokročilé veľmi presné kvantovo-chemické metódy slúžiace na výpočty fyzikálno-chemických vlastností atómov a molekúl a chemickej reaktivity
  (*http://www.cfour.de/*)
- CPMD
- HMMER
  - program na prehľadávanie a prácu so sekvenčnými databázami pre homológy proteínových sekvencií
  (*http://hmmer.janelia.org/*)
- DL_CLASSIC
- GAMESS
  - implementácia algoritmu renormalizačnej grupy matice hustoty (DMRG). DMRG je variačná metóda používaná v kvantovej chémii
  (*http://www.princeton.edu/chemistry/chan/software/dmrg/*)
- NWCHEM
  - poskytuje mnoho metód pre výpočty vlastností molekulových a periodických systémov použitím štandardného kvantovo-mechanického popisu elektrónovej vlnovej funkcie alebo hustoty
  (*http://www.nwchem-sw.org/index.php/Main_Page*)
- STRUCTURE
  - softvérový balík využívajúci multi-lokálne genotypové dáta pre skúmanie štruktúry populácií
  (*http://pritchardlab.stanford.edu/structure.html*)

Numerické modelovanie
seizmických vlnových polí v 3D nehomogénnych štruktúrach

Jozef Kristek a Peter Moczo

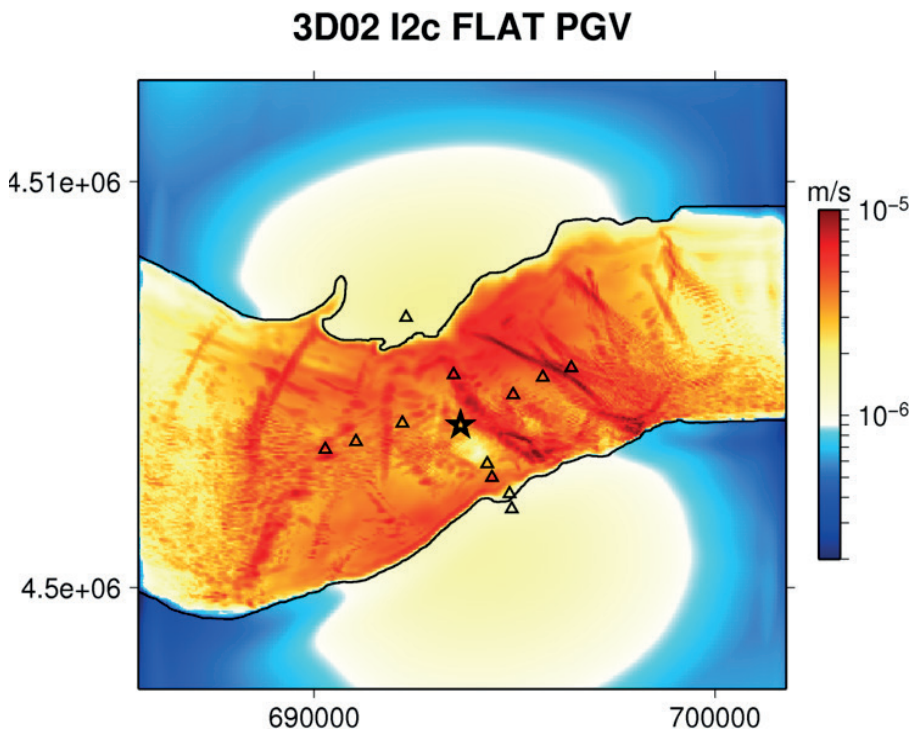
Povrchové lokálne sedimentárne štruktúry (najmä sedimentárne bazény a sedimentmi vyplnené údolia) sú pri väčšine ničivých zemetrasení zodpovedné za najväčšie škody počas zemetrasení. Je to dôsledok frekvenčne selektívnych a priestorovo variabilných prenosových vlastností sedimentárnych štruktúr. Zložité interferenčné javy môžu viesť až k rezonančnému zosilneniu seizmického pohybu na povrchu štruktúr. Jednou z najdôležitejších úloh seizmológie vo vzťahu k spoločnosti je predpovedať seizmický pohyb na husto osídlených a iných dôležitých lokalitách počas budúcich zemetrasení. Úloha je o to naliehavejšia, že práve oblasti povrchu Zeme, ktoré sú v dôsledku lokálnych anomálií seizmického pohybu najzraniteľnejšie, sú aj najhustejšie osídlené.



Medzinárodný benchmark metód numerického simulovania seizmického pohybu v povrchových sedimentárnych štruktúrach organizovaný v súvislosti so štvrtou medzinárodnou konferenciou o efektoch povrchových štruktúr na seizmický pohyb (ESG 2006, Grenoble, Francúzsko) viedol k nepríjemnému zisteniu, že z 18 zúčastnených tímov z celého sveta boli len 4 tímy (medzi nimi aj náš) schopné dosiahnuť pre definovaný štrukturálny model údolia Grenoblu spoľahlivé a blízke riešenia. Táto skúsenosť viedla francúzsku atómovú komisiu (CEA Francúzsko) k rozhodnutiu zorganizovať v spolupráci s Université Joseph Fourier Grenoble, Aristotle University Thessaloniki a Institute Laue-Langevin medzinárodný projekt E2VP (Euroseistest Verification and Validation Project) zameraný na Mygdónsky bazén pri meste Thessaloniki v Grécku. Náš tím bol pozvaný k účasti v projekte. Účasť bola dobrovoľná a finančné náklady pokrývali mobilitu. Napriek tomu sa do projektu prihlásilo vo vlastnom záujme pôvodne 17 tímov.

Cieľom projektu bolo detailne porovnať najlepšie existujúce numerické metódy pomocou série kanonických a realistických modelov Mygdónskeho bazénu. Na začiatku riešenia projektu sme mohli

Prof. RNDr. Peter Moczo, DrSc. a doc. Mgr. Jozef Kristek, PhD. pôsobia ako vedeckí pracovníci na Ústave vied o Zemi SAV a zároveň ako vysokoškolskí pedagógovia na Fakulte matematiky, fyziky a informatiky UK v Bratislave.



vďaka počítaču Aurel vypočítať riešenie, ktoré organizátori považovali za východiskové referenčné riešenie. V priebehu dvoch etáp verifikačného a validačného projektu sme mohli preukázať presnosť a výpočtovú efektívnosť našej metódy numerickej simulácie seizmického pohybu, ktorá je založená na metóde konečných diferencií. Presnosťou nám mohli konkurovať len tímy, ktoré používajú metódu spektrálnych elementov a nespojitú Galerkinovu metódu. Nemôžu však dosiahnuť našu výpočtovú efektívnosť.

Výsledky dosiahnuté pomocou počítača Aurel sme dosiaľ použili v týchto publikáciách:

Peter Moczo, Jozef Kristek, Martin Galis, 2014. *The Finite-Difference Modelling of Earthquake Motions: Waves and Ruptures, Cambridge University Press*

Galis, M., Pelties, C., Kristek, J., Moczo, P., Ampuero, J.-P., Mai, P. M., 2015. *On the initiation of sustained slip-weakening ruptures by localized stresses.* Geophys. J. Int., 200, 888-907

Chaljub, E., Maufroy, E., Moczo, P., Kristek, J., Hollender, F., Bard, P.-Y., Priolo, E., Klin, P., De Martin, F., Zhang, Z., Zhang, W., Chen, X. 2015. *3-D numerical simulations of earthquake ground motion in sedimentary basins: testing accuracy through stringent models.* Geophysical Journal International 201, 90-111

Maufroy, E., Chaljub, E., Hollender, F., Kristek, J., Moczo, P., Klin, P., Priolo, E., Iwaki, A., Iwata, T., Etienne, V., De Martin, F., Theodoulidis, N. P., Manakou, M., Guyonnet-Benaize, C., Pitilakis, K., Bard, P.-Y., 2015. *Earthquake Ground Motion in the Mygdonian Basin, Greece: The E2VP Verification and Validation of 3D Numerical Simulation up to 4 Hz.* Bulletin of the Seismological Society of America, 105, 1398-1418

NA ZAČIATKU RIEŠENIA PROJEKTU SME MOHLI VĎAKA POČÍTAČU AUREL VYPOČÍTAŤ RIEŠENIE, KTORÉ ORGANIZÁTORI POVAŽOVALI ZA VÝCHODISKOVÉ REFERENČNÉ RIEŠENIE

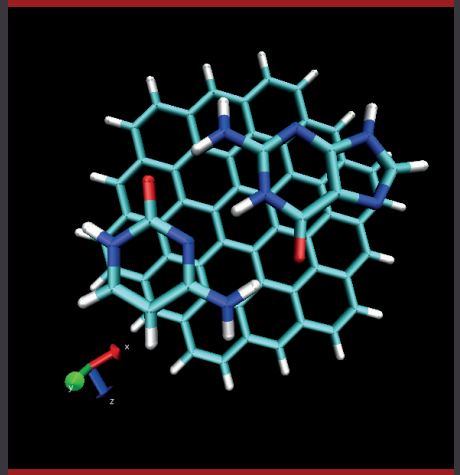
Presné kvantovo-chemické štúdium nekovalentných interakcií na superpočítači Aurel

Michal Pitoňák

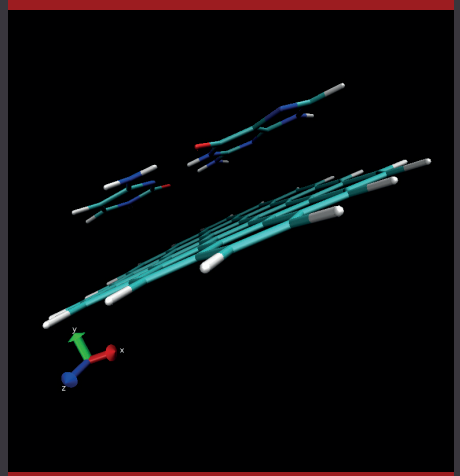
Kvantová chémia je vedný odbor, ktorého vývoj ide ruka v ruke s vývojom výpočtovej techniky. Teoretický popis elektrónov v atómoch a molekulách je (s istým nadľahčením) koncepčne jednoduchý, problematické je však riešenie príslušných rovníc. Analyticky sú riešiteľné iba tie najjednoduchšie, napr. dvojčasticové systémy, akými sú atóm vodíka alebo katión molekuly vodíka (pri zanedbaní pohybu jadier), čo zďaleka neuspokojuje požiadavky chemikov a fyzikov túžiacich po štúdiu rozsiahlych systémov akými sú proteíny, DNA, materiály atď. Nájsť riešenie pre zložitejšie systémy je možné iba numericky, aj to iba s nemalými nárokmi na výpočtový výkon, operačnú pamäť alebo diskový priestor. Kvantová chémia patrí už od počiatku rozvoja výpočtovej techniky (cca koncom 50-tych rokov) medzi jej hlavných "zákazníkov" a neexistuje (ani tak skoro existovať nebude) dostatočne výkonný výpočtový systém, ktorý by jej nároky naplno uspokojil.

Vzťah medzi napredovaním kvantovo-chemických metód a výpočtovej techniky je nepopierateľný. Vývoj nových aproximatívnych metód je hnaný dosiahnutím čo najlepšieho kompromisu medzi presnosťou riešenia a výpočtovými nárokmi. Takzvaným "zlatým štandardom" v kvantovej chémii je už od 80-tych rokov (samozrejme, pre istý typ chemických aplikácií a študovaných molekúl) metóda spriahnutých klastrov so zahrnutím triexcitácií. Počet matematických operácií, ktoré musí procesor počítača vykonať rastie zhruba so siedmou mocninou veľkosti študovaného systému. To znamená, že ak je našim cieľom výpočet energie napríklad molekuly butánu (uhľovodík so štyrmi atómami uhlíkami), musíme vynaložit 27, t.j. 128-krát väčšie výpočtové úsilie ako pri výpočte etánu (dva atómy

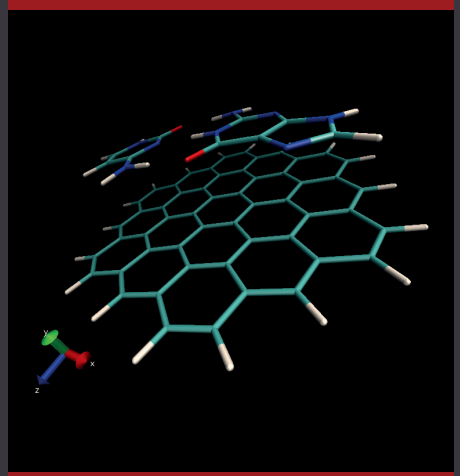
uhlíka). Na moderných superpočítačoch je v súčasnoti možné touto metódou študovať molekuly zhruba so sto atómami, čo je však stále málo na realistické modelovanie napríklad biologických systémov. Takéto výsledky sú napriek tomu cenné, nakoľko nám umožňujú testovať presnosť iných, koncepčne jednoduchších a teda menej presných kvantovo-chemických metód, aplikovateľných však na systémy so stovkami až tisícmi atómov.



Vo svojej práci sa venujem práve takýmto "benchmark" štúdiám, pričom objektom nášho záujmu sú nekovalentné interakcie medzi biologicky významnými molekulami, akými sú napríklad bázy nukleotidov DNA alebo aminokyseliny. Nekovalentné interakcie je možné interpretovať ako superpozíciu síl rôzneho fyzikálneho charakteru, ako sú elektrostatická, indukčná alebo disperzná. Posledná z nich, disperzná interakcia (známa aj ako Londonova alebo van der Waalsova) má z pohľadu kvantovej chémie špecifické postavenie. Na rozdiel od napríklad elektrostatickej interakcie je čisto kvantovým javom (dôsledkom tzv. elektrónovej korelácie) a na jej presný popis je nutné použiť tie najsofistikovanejšie kvantovo-chemické metódy. Disperzné sily sú zodpovedné za množstvo významných fenoménov, akými sú stabilita DNA (vďaka atrakčným interakciám "medzi poschodiami" vodíkovou väzbou viazaných párov nukleotidov), stabilita hydrofóbnych jadier proteínov, štruktúra molekulových kryštálov a pod.

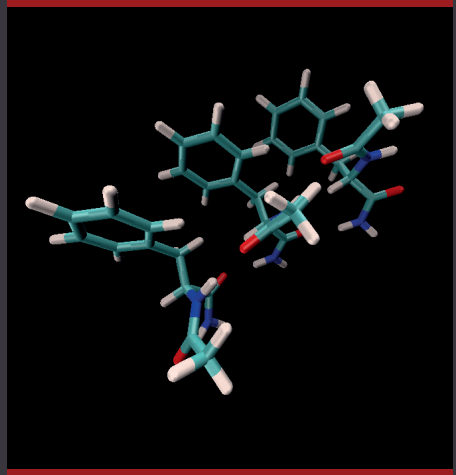


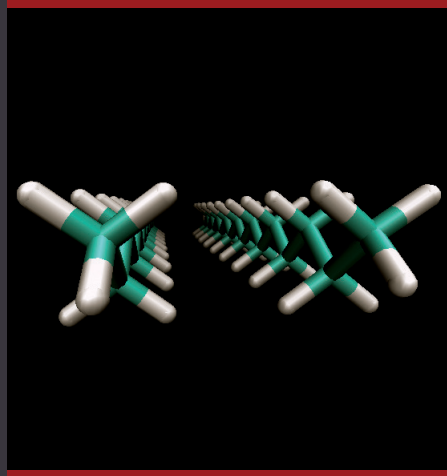
Výpočtové prostriedky získané v rámci projektu SIVVP, obzvlášť tie, ktoré sú v správe Výpočtového strediska SAV – superpočítač Aurel a Power7 infinibandový klaster sú veľkým prínosom pre celú slovenskú vedeckú komunitu využívajúcu vysokovýkonné počitanie pri svojej práci. Väčšina takýchto výskumných skupín musela vynoložiť nemalé prostriedky a úsilie na nákup a správu vlastného výpočtového systému, uberajúc sa tým o čas a energiu použiteľnú na samotný výskum. Dostupnosť superpočítačových zrojov na národnej úrovni pre celú vedeckú komunitu je štandardom v krajinách Európskej únie. Na Slovensku je veľa vedeckých komunít, ktoré by bez výpočtových prostriedkov prakticky vôbec nedokázali realizovať svoj výskum a určite existuje množstvo skupín, ktoré by vedelo svoj výskum skvalitniť, obohatiť alebo zefektívniť, ak by si k vysokovýkonnému počítaniu našli cestu.

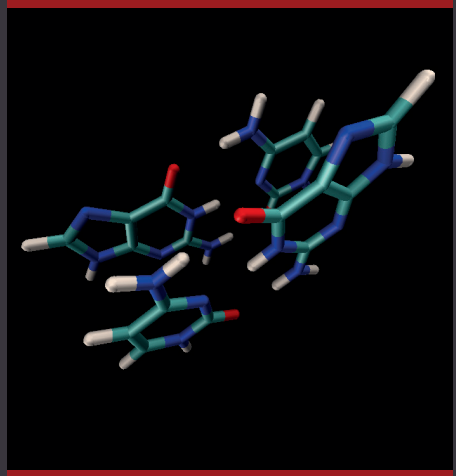


Práca na samotnom Aurelovi je pre mňa a mojich

spolupracovníkov zaujímavá ešte z iného, špecifickejšieho hľadiska. Výpočtové prostriedky, ktoré si my a aj iné výskumné skupin prevádzkujeme "vo vlastne réžii" sú zväčša obmedzené na komoditný harvér, t.j. klaster počítačov spojených (čo najrýchlejšou) dátovou sieťou, s jedným alebo zopár viacjadrovými procesormi na výpočtových uzloch s lokálnymi dátovými úložiskami. Je to bezosporu dobrý kompromis medzi výpočtovým výkonom a nákladmi, ale táto architektúra nesleduje trend vývoja vysokovýkonnej výpočtovej techniky vo svete. Súčasným trendom je masívna koncentrácia výpočtového výkonu, či už eliminációu lokálnych úložísk dát (v prospech zdieľaného, distribuovaného súborového systému), využitím zdieľanej pamäte so spoločným prístupom množstva výpočtových jadier, poprípade integrovaním akcelerátorov (výpočtové grafické karty alebo technológie "MIC" - Many Integrated Core). Vďaka superpočítaču Aurel máme možnosť prispôsobiť existujúce ako aj implementovať nové paralelné programy na modernej architektúre, ktoré sú jednak lepšie prenostiteľné na iné superpočítače vo svete, ako aj trochu "nadčasové", vzľadom na spomenutý trend.







DOC. MGR. MICHAL PITOŇÁK, PHD.
PÔSOBÍ NA KATEDRE
FYZIKÁLNEJ A TEORETICKEJ CHÉMIE
PRÍRODOVEDECKEJ FAKULTY
UNIVERZITY KOMENSKÉHO

BRATISLAVA
ÚSTAV INFORMATIKY SAV

ÚI SAV SIVVP klaster

Miroslav Dobrucký
Ján Astaloš

Národný projekt štrukturálnych fondov SIVVP (*www.sivvp.sk*) umožňuje realizáciu komplexných výpočtov pre výskum a vývoj a pripojenie do európskych vysokovýkonných výpočtových systémov. Prvým zo SIVVP klastrov zapojených do európskej gridovej a cloudovej infraštruktúry EGI (*www.egi.eu*) je výpočtový klaster umiestnený na **Ústave informatiky SAV.**

EGI slúži ako nástroj pre e-vedu, pomocou ktorého si vedci a výskumníci z Európy môžu uskutočniť svoje náročné výpočty, na ktoré im nepostačujú ich lokálne výpočtové zdroje a potrebujú naraz väčší výpočtový výkon, napríklad na realizovanie výpočtových kampaní, alebo potrebujú spolupracovať medzi sebou nad spoločnými dátovými zdrojmi. Popri už etablovanom gridovom midlvéri EMI (*www.eu-emi.eu*) sa čoraz viac začína využívať technológia výpočtového cloudu.

Technické vybavenie klastra:

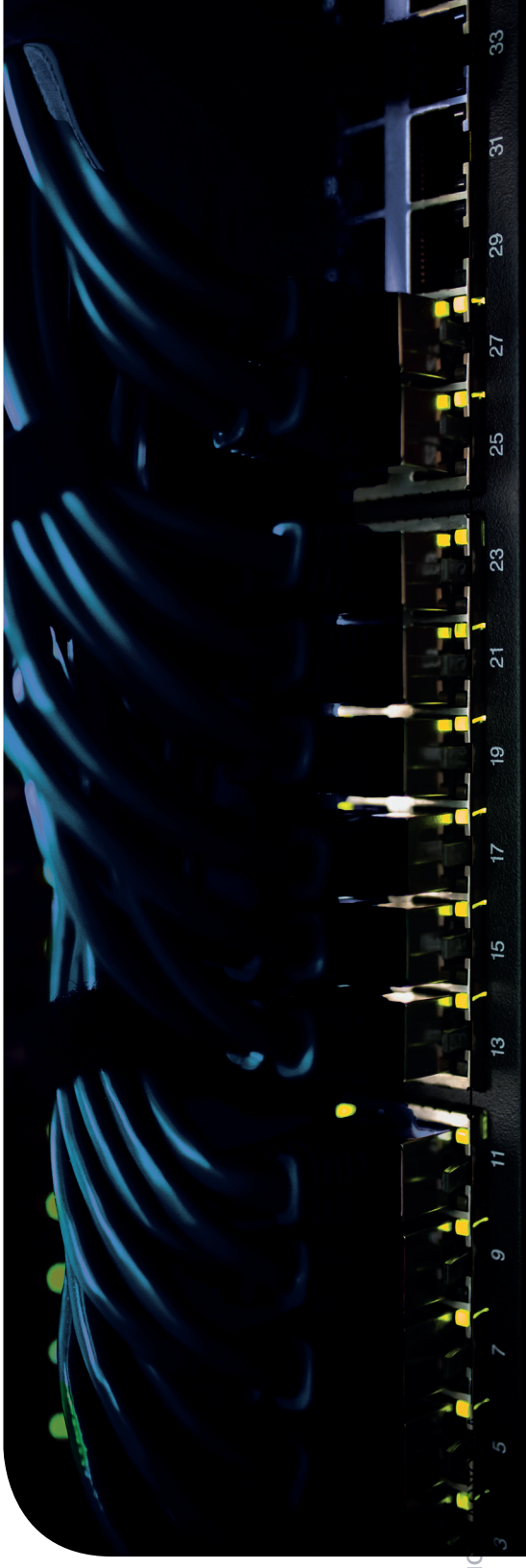
ÚI SAV zabezpečuje prevádzku vysokovýkonného klastra, ktorý pozostáva z 54 výpočtových uzlov IBM dx360 M3, z toho 2 sú osadené grafickými (GPGPU) akcelerátormi NVIDIA Tesla M2070 a z 8 výpočtových uzlov IBM dx360 M4, z ktorých každý má po 2 grafické akcelerátory NVIDIA Tesla K20.

Ing. Miroslav Dobrucký pôsobí na oddelení paralelného a distribuovaného spracovania informácii na ÚI SAV v Bratislave.

Celkový špičkový výpočtový výkon 28.5 Tflops pozostáva z 8.8 TFlops na 776 výpočtových jadrách Intel a z 19.7 TFlops na 40'832 CUDA jadrách.

Detailnejšie parametre sú nasledovné (*http://hpc.ui.savba.sk/*):

- 52x IBM dx360 M3:
  - 2x Intel E5645 @2.4GHz
  - 48 GB RAM
  - 2x 500 GB disk
- 2x IBM dx360 M3:
  - 2x Intel E5645 @2.4GHz
  - 48GB RAM
  - 2x 500 GB disk
  - NVIDIA Tesla M2070: 6 GB RAM + 448 CUDA jadier
- 8x IBM dx360 M4:
  - 2x Intel E5-2670 @2.6GHz
  - 64 GB RAM
  - 2x 500 GB disk
  - 2x NVIDIA Tesla K20: 5 GB RAM + 2496 CUDA jadier
- 2x DS3512 so 72TB diskového priestoru
- 2x x3650 M3 manažovací server:
  - 2x Intel E5645 @2.4GHz
  - 48 GB RAM
  - 6x 500 GB disk
- 4x x3650 M3 manažovací server sprístupňujúci údajové pole:
  - 2x Intel E5645 @2.4GHz
  - 48 GB RAM
  - 2x 500 GB disk
  - 2x 8 Gbps FC
- 1x x3550 M4 server:
  - 1x Intel E5-2640 @2.5GHz
  - 8 GB RAM
  - 2x 500 GB disk



- InfiniBand 2x 40 Gbps (v 52+2+2+4 uzloch) alebo 10Gpbs Ethernet (v 8 uzloch)

Softvérová konfigurácia klastra

Na klastri je nainštalovaný operačný systém Scientific Linux 6.7 a podpora pre paralelné výpočty typu MPI, OpenMP a ich kombináciu. Jedna InfiniBand (IB) sieť je venovaná komunikácii medzi výpočtovými uzlami pre MPI, druhá IB sieť slúži na rýchle pripojenie zdieľaného sieťového diskového priestoru (NFS over IB with RDMA).

Novších 8 výpočtových uzlov s novšími GPGPU (K20) je prepojených rýchlou ethernetovou sieťou 10 Gbps, pretože sa primárne neplánujú používať na MPI výpočty, ale plán je poskytovať ich cez cloud.

Používateľom je k dispozícii viacero výpočtových front, do ktorých môžu zaraďovať svoje výpočtové úlohy, ktoré budú dávkovo spracované na základe ich požiadaviek a podľa dostupnosti výpočtových zdrojov softvérom PBS-Torque.

K dispozícii sú nasledovné fronty:

- short - pre krátke 1-jadrové (sériové) úlohy
- mpi - pre krátke viac-jadrové (paralelné) úlohy
- long - pre dlhé úlohy
- gpu - pre úlohy vyžadujúce GPGPU akcelerátor
- oldgpu - pre úlohy vyžadujúce GPGPU akcelerátor (starší typ)
- sivvp - pre gridové úlohy

Používatelia sa prihlasujú na stroj „login-sivvp“, na ktorom majú svoj domovský diskový priestor slúžiaci na odkladanie výsledkov a iný spoločný pracovný priestor prístupný pre všetky výpočtové uzly. Výpočtové uzly majú aj svoje samostatné pracovné priestory (scratch, tmp).

Pre gridových používateľov je nainštalovaný UI uzol (user interface), z ktorého môžu predkladať svoje úlohy do EGI gridu, sledovať ich stav, zisťovať dostupnosť aj ostatných gridových uzlov, nakladať so súbormi v gridovom dátovom priestore s možnosťou vytvárania replík a podobne.

Popri bežných vývojárskych nástrojoch a knižniciach (GNU C/C++/Fortran, OpenMPI, PETSC, ...) sú k dispozícii kompilátory Intel a PGI (obsahuje CUDA kompilátor) a doinštalovanie iných softvérových nástrojov je možné realizovať na základe požiadaviek od používateľov a po dohode s ÚISAV HPC tímom.

Aplikačný softvér

Popri možnosti si nainštalovať vlastné používateľské aplikácie len pre seba boli niektoré voľne dostupné aplikácie nainštalované pre všetkých používateľov. Sú to napríklad:

» FDS (Fire Dynamics Simulator), ktorý predstavuje CFD (Computational Fluid Dynamics) model, ktorý numericky rieši systém Navier-Stokes rovníc pre pomalé teplom riadené prúdenie s dôrazom na transport dymu a tepla z horiaceho objektu

» WRF (Weather Research and Forecasting) model reprezentuje voľne dostupný systém pre numerické predpovedanie počasia používaný mnohými meteorologickými službami. Jadro WRF systému tvoria komponenty ARW (Advanced Research WRF) a NMM (Nonhydrostatic Mesoscale Model), ktoré zahrňujú inicializačné programy pre vykonanie simulácie buď na idealizovaných alebo na reálnych dátach a program pre numerickú integráciu.

» EPANET je svetový štandard (US Environmental Protection Agency), voľne dostupný výpočtový model pre simulovanie tlakového prúdenia, ktorý je matematickým jadrom viacerých komerčných softvérových produktov. Jadro systému používa gradientovú metódu navrhnutú autormi Todini a Pilati, ktorá je variantom Newton-Raphsonovej metódy.

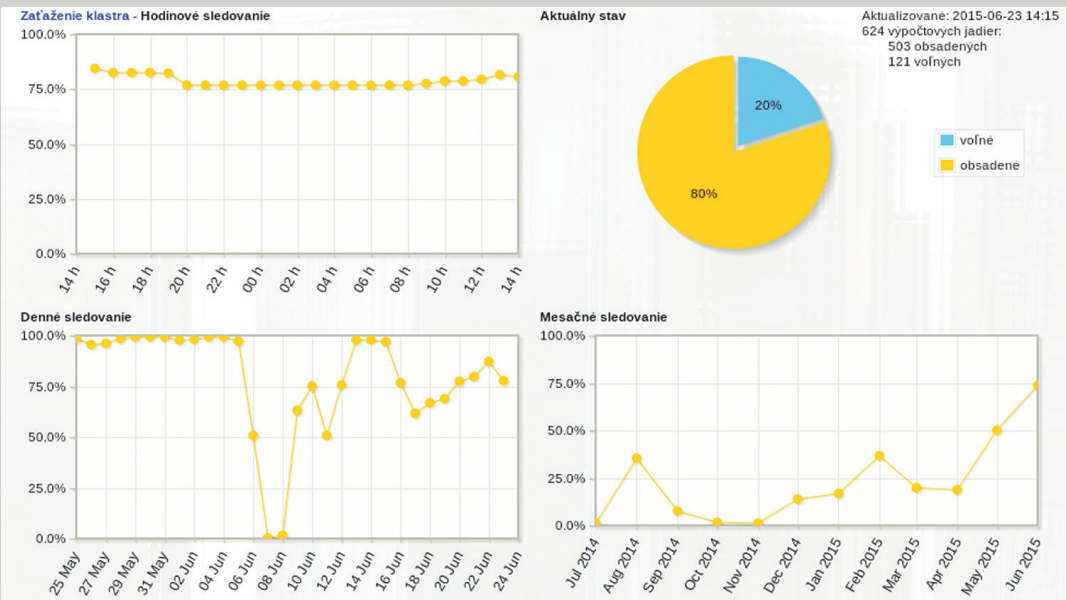
» Projekt OOMMF (Object Oriented MicroMagnetic Framework) je zameraný na vývoj verejného, prenositeľného a rozšíriteľného softvérového systému a pridružených

nástrojov pre mikromagnetizmus. Pôvodné výpočtové jadro systému (mmsolve2D) tvorí kód, ktorý na relaxáciu 3-dimenzionálnych spinov na 2-dimenzionálnej štvorcovej mriežke aplikuje Landau-Lifshitz ODE riešenie, pričom na výpočet vlastného magnetostatického poľa (demag) je použitá transformácia FFT.

» Repast for High Performance Computing (Repast HPC) je jedným z agentových modelovacích systémov určený pre rozsiahle distribuované výpočtové platformy. Implementuje základné koncepty z „Repast Simphony" (napríklad kontexty a projekcie) a je modifikovaný tak, aby mohli byť vykonávané v paralelnom distribuovanom prostredí.

Monitorovanie klastra

Používatelia majú možnosť zistiť aktuálnu obsadenosť klastra nielen príkazmi PBS (qstat, qnodes) ale aj cez web na stránke *http://hpc.ui.savba.sk/index.php?page=statistiky*



a podľa toho sa napríklad rozhodnúť, koľko svojich úloh a v akom poradí budú na našom klastri vykonávať a prípadne ak je klaster veľmi obsadený, tak skúsiť použiť iný SIVVP klaster alebo skúsiť šťastie v gride, ktorý vie zadanú úlohu sám predložiť iným klastrom bez nutnosti mať zriadené používateľské konto na nich.

Do konca roku 2014 sa na SIVVP klastri ÚI SAV počítali nasledovné úlohy (http://hpc.ui.savba.sk/index.php?page=projekty):

Strojový čas [h]	Téma projektu (sw)
1'659'840	Simulácie ohňa (FDS)
541'838	Astrofyzikálne simulácie (vlastný)
377'526	Výpočty proteín-ligand interakcií (AutoDock Vina)
86'197	Nanotechnologické simulácie (QWALK)
81'688	Rozpoznávanie reči (SDTW)
30'864	Rozpoznávanie reči (HERest)
23'192	Simulácie vývoja počasia (WRF)
10'955	Simulácie nízkofrekvenčného elektromagnetizmu supravodivých cievok (vlastný)
8'453	Simulácie ovzdušia (HYSPLIT)
8'196	Simulácie v nanomagnetizme (OOMMF)
3'531	cez grid
2'827	Simulácie v kvantovej relativistickej chémii (DIRAC)
940	Simulácie agentových systémov (REPAST)
2'047	ostatné

V tomto roku k nim pribudli úlohy z oblasti „Aplikácia kvantovej teórie poľa v stochastickej dynamike", ktoré využili podstatnú časť strojového času klastra.

Plány do budúcnosti

Novších 8 výpočtových uzlov s novšími GPGPU (K20) plánujeme poskytovať cez cloud a pracujeme na ich začlenení do FedCloud v infraštruktúre EGI, ktorá pre cloudy prevažne používa midlvér OpenStack.

EGI SLÚŽI AKO NÁSTROJ PRE E-VEDU, POMOCOU KTORÉHO SI VEDCI A VÝSKUMNÍCI Z EURÓPY MÔŽU USKUTOČNIŤ SVOJE NÁROČNÉ VÝPOČTY

Storage
REMIND
SP
BRD

PETER WEISENPACHER

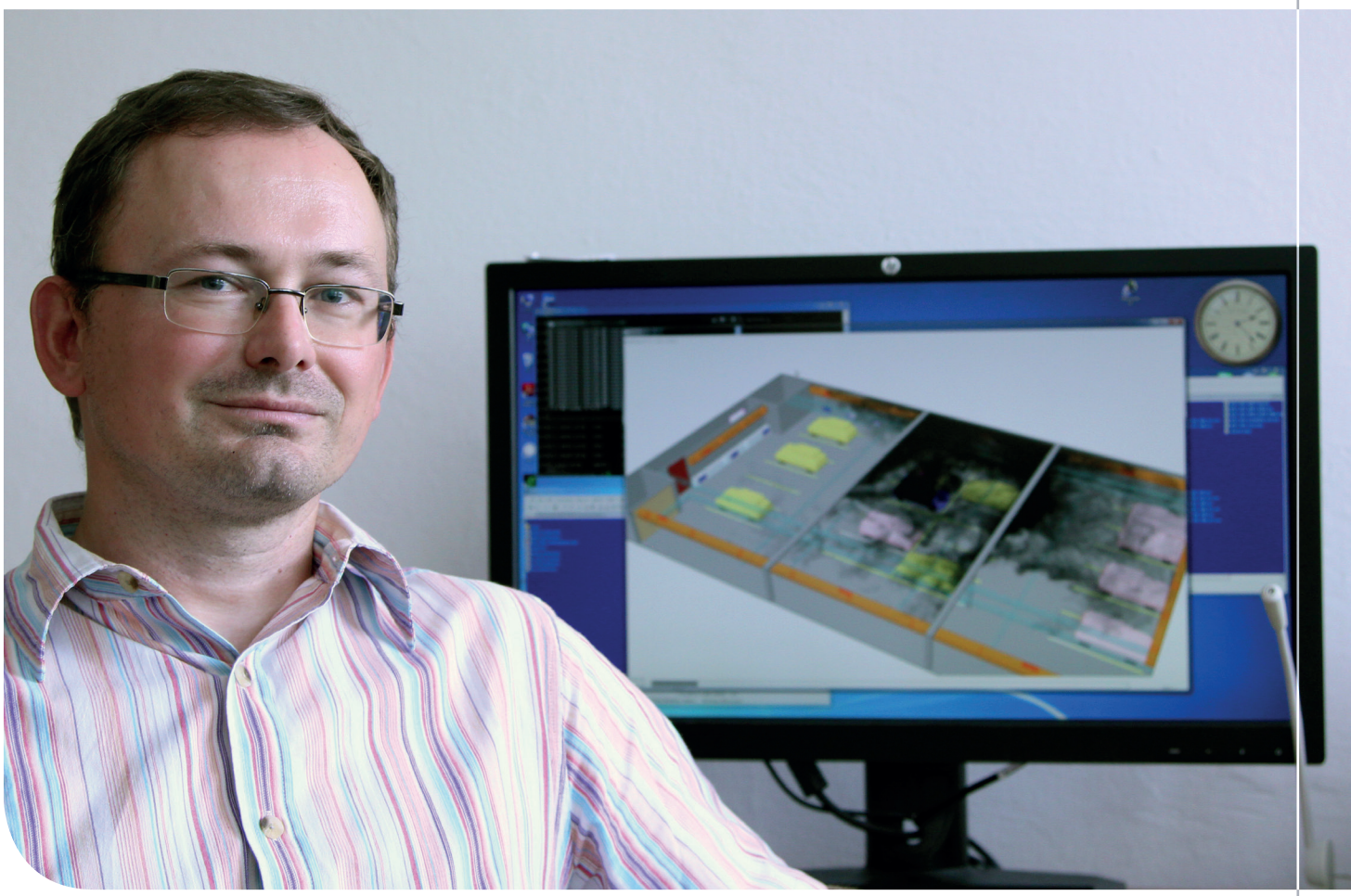
Počítačová simulácia požiarov a šírenia dymu

MGR. PETER WEISENPACHER, PHD. PÔSOBÍ NA ÚSTAVE INFORMATIKY SLOVENSKEJ AKADÉMIE VIED

Náplňou práce našej výskumnej skupiny je simulácia priebehu požiarov a šírenia dymu v rozsiahlych priestoroch, obzvlášť v objektoch dopravnej infraštruktúry, akými sú cestné tunely a veľkokapacitné podzemné garáže. Na simulácie využívame systém Fire Dynamics Simulator (FDS) vyvinutý v National Institute of Standards and Technology (NIST) v USA. Tento systém umožňuje simulovať nízkorýchlostné prúdenie plynov a dymu počas požiaru riešením zákonov zachovania hmotnosti, hybnosti, energie a zložky. FDS obsahuje taktiež výpočtové moduly na simuláciu ďalších fyzikálnych a chemických procesov prebiehajúcich pri požiari, akými sú tepelné žiarenie, pyrolýza, spaľovanie plynných produktov pyrolýzy, vedenie tepla a podobne. Množstvo, zložitosť a vzájomná previazanosť týchto procesov prispievajú ku komplexnosti problému simulácie požiaru.

Najväčšie výpočtové nároky kladie simulácia zákonov zachovania. Systém využíva explicitnú schému prediktor-korektor s presnosťou druhého rádu, pričom v každom časovom kroku je potrebné riešiť Poissonovu rovnicu. Požiarny scenár zahrňuje spravidla veľké priestory, požiar ale môžu výrazne ovplyvniť aj pomerne malé geometrické detaily objektov v danom priestore. Preto je potrebné použiť relatívne jemnú výpočtovú mriežku a celkový počet buniek simulácie dosahuje typicky milióny až desiatky miliónov. Sekvenčný výpočet by v takom prípade trval niekoľko týždňov až mesiacov a pre praktické potreby je nevyhnutné použiť paralelný výpočet na počítačovom klastri.

Špecifickým problémom paralelizácie prostredníctvom MPI je riešenie Poissonovej rovnice. Paralelizácia vyžaduje rozdelenie výpočtovej oblasti na viaceré podoblasti, z ktorých každá je pridelená jednému MPI procesu. Tieto MPI procesy sú vykonávané nezávisle, pričom v každom časovom kroku je potrebné zosúladiť hodnoty na hraniciach podoblastí, aby sa zachovala stabilita riešenia. Tento spôsob paralelizácie vnáša do výpočtu istú mieru nepresnosti, štúdium ktorej je dôležitým predmetom nášho výskumu. Pre praktické účely je potrebné maximalizovať výkon simulácie bez toho, aby jej nepresnosť prekročila únosnú mieru. V mnohých prípadoch je možné dosiahnuť až niekoľko desaťnásobné zvý-



šenie výkonu pri efektivite paralelizácie okolo 50%.

Jednou z oblastí nášho výskumu je simulácia šírenia dymu počas požiarov v cestných tuneloch. Práve dym je najväčšou hrozbou pre zdravie a životy ľudí v prípade takýchto požiarov. Na príklade požiaru v krátkom cestnom tuneli sme skúmali rozličné spôsoby delenia výpočtovej oblasti a ich vplyv na rýchlosť a presnosť výpočtu, ako aj rozličné javy vznikajúce v dôsledku tohto rozdelenia. Jedným z nich je časové oneskorenie nárastu hodnôt veličín (napr. teploty a zadymenia) v dôsledku rozdelenia na viaceré podoblasti. Práca sa zaoberala aj modelovaním evakuácie osôb. V tomto výskume spolupracujeme s inštitúciami zodpovednými za požiarnu bezpečnosť cestných tunelov.

V rokoch 2008-2009 sme sa podieľali na realizácii série požiarnych experimentov na otvorenom priestranstve v testovacích zariadeniach Strednej školy požiarnej ochrany Ministerstva vnútra Slovenskej republiky v Považskom Chlmci. Výsledky experimentov sme použili na vytvorene a overenie spoľahlivosti geometrických modelov reprezentujúcich motorový a sedadlový priestor automobilu v FDS simuláciách. Naše simulácie požiaru jednotlivých častí automobilu sa veľmi dobre zhodovali s údajmi nameranými počas spomínaných experimentov. Keďže v odbornej literatúre sa zriedkavo uvádzajú fyzikálne parametre materiálov z ktorých automobil pozostáva, vykonali sme na klastri veľký počet parametrických štúdií, ktoré umožnili ich stanovenie. Prínosom takto získaných modelov je možnosť modelovať vzájomnú interakciu medzi požiarom a prúdením

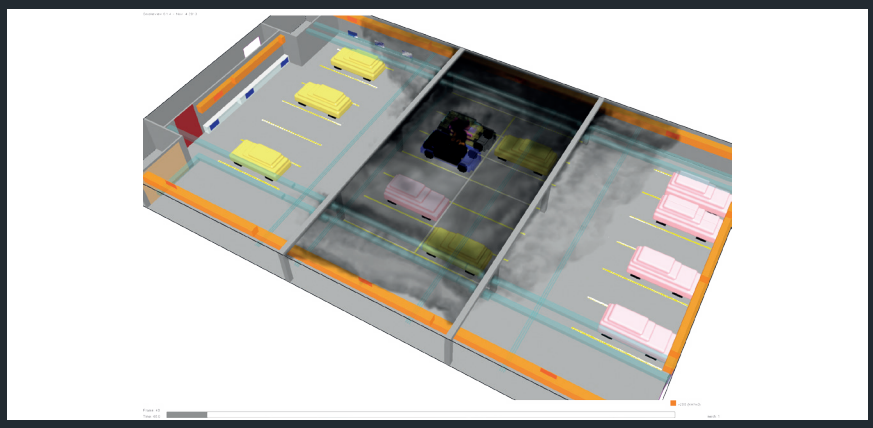
Náplňou práce našej výskumnej skupiny je simulácia priebehu požiarov a šírenia dymu v rozsiahlych priestoroch obzvlášť v objektoch dopravnej infraštruktúry, akými sú cestné tunely a veľkokapacitné podzemné garáže.

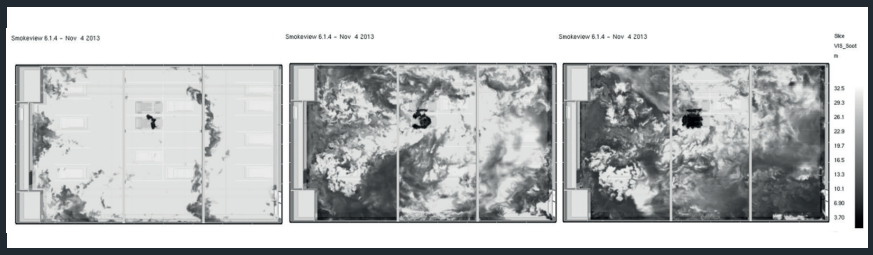
vzduchu v danom priestore realistickejšie ako keď sa zdroj požiaru reprezentuje ako požiar s vopred predpísanou intenzitou, čo je prístup prevládajúci v odbornej literatúre. Simulácia požiaru v sedadlovom priestore automobilu a jeho preskoku na susedný automobil si vyžadovala použitie výpočtovej mriežky s takmer 2.5 miliónom buniek, pričom sekvenčný výpočet trval 679 hodín. Použitie 48 CPU jadier klastra skrátilo čas výpočtu na 28 hodín, pričom za cenu mierne vyššej nepresnosti je možné pri použití niekoľko sto jadier dosiahnuť až stonásobné zvýšenie výkonu.

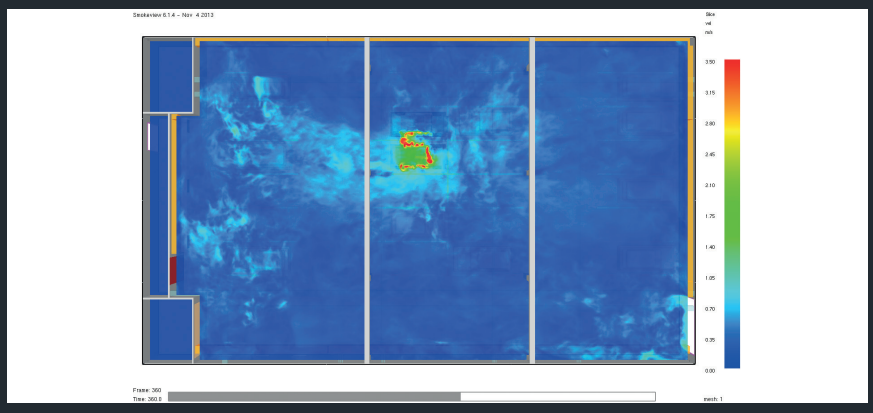
Uvedený model horenia dvojice osobných automobilov sme použili na reprezentáciu požiaru pri skúmaní zadymenia podzemnej garáže s plochou cca 900 m^2 zahŕňajúcou 24 parkovacích miest a vplyvu činnosti ventilácie a zaparkovaných automobilov na priebeh požiaru. Nájdenie efektívnej konfigurácie ventilácie v garáži je obzvlášť dôležité, pretože vzhľadom na nelineárnu povahu požiaru by nevhodná ventilácia mohla viesť k nezamýšľaným dôsledkom a problém zadymenia dokonca zhoršiť. Cieľom simulácie bolo vyhodnotenie podmienok udržateľnosti pre ľudský život v priebehu požiaru a účinnosti ventilácie pri dosahovaní tohto cieľa. Pomocou počítačovej simulácie na klastri boli nájdené optimálne hodnoty pre rýchlosti ventilácie, ktoré predĺžia podmienky udržateľnosti života o 4 až 6 minút. Pri simuláciách sme výpočtovú oblasť rozdelili na 144 podoblastí a výpočet trval približne deň.

Doterajší výskum počítačovej simulácie požiarov realizovanej na vysokovýkonnom počítačovom klastri naznačuje veľký potenciál vysokovýkonnej výpočtovej infraštruktúry pre výskum, ale aj pre riešenie praktických

úloh požiarnej bezpečnosti v priestoroch ohrozených požiarom. Takýto výskum má vysokú spoločenskú hodnotu.







Obrázok 1 (hore): Simulácia požiaru dvoch automobilov a šírenia dymu v podzemnej garáži

Obrázok 2 (stred): Pokles viditeľnosti v podzemnej garáži v 160., 270. a 360. sekunde požiaru: horizontálny rez vedený vo výške ľudskej hlavy

Obrázok 3 (dole): Prúdenie v podzemnej garáži vytvorené interakciou požiaru a požiarnej ventilácie: horizontálny rez vedený vo výške ľudskej hlavy

Sekvenčný výpočet by trval niekoľko týždňov až mesiacov a pre praktické potreby je nevyhnutné použiť paralelný výpočet na počítačovom klastri.

BRATISLAVA
SLOVENSKÁ TECHNICKÁ UNIVERZITA

STUBA SIVVP klaster - IBM iDataPlex

Peter Hermann
Róbert Jaroška

Ako už bolo uvedené v časopise HPC FOCUS 01/2014, Národný projekt Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie (**SIVVP**) je rozdelený do dvoch zrkadlových projektov. Dnešný príspevok je venovaný cieľu Regionálna konkurencieschopnosť a zamestnanosť, v ktorom sú jedným z partnerov projektu Slovenská technická univerzita v Bratislave so svojim vysokovýkonným výpočtovým klastrom IBM iDataPlex.

Súpis výpočtových zdrojov klastra:

Klaster pozostáva z 52 výpočtových uzlov IBM iDataPlex dx360 M3, z toho 4 sú osadené dvoma GPU akcelerátormi NVIDIA Tesla.

K dispozícii je 624 cpu + 3584 cuda jadier, 2,5TB RAM, disková raw kapacita zdieľaného úložiska dát 115TB (GPFS) a ďalších 104TB na lokálnych diskoch.

Jeho výpočtový výkon cpu je 6,76 TFLOPS (Linpack benchmark), čo je 92% teoretického výkonu.

Maximálny príkon spolu s dátovým úložiskom a obslužnými zariadeniami vrátane chladenia je 40kW.

Ing. Peter Hermann pôsobí ako vedúci pracovník výpočtovej techniky na STUBA

Výpočtový uzol

- 2x 6 jadrový Intel Xeon X5670 2.93GHz
- 48GB (24GB na procesor/socket, NUMA architektúra)
- 1x 2TB 7200rpm SATA /lokal. disk/
- 2x NVIDIA Tesla M2050 448 cuda jadier
- 3 GB ECC RAM
- Scientific Linux 6.4 (kernel 2.6.32-358.el6)
- 2x10Gb/s Ethernet (RoCE)

Vysokorýchlostné prepojenie (Interconnect)

- 2x10Gb/s Ethernet (RoCE alebo inak IBoE) v dvoch oddelených sieťach s celkovou priepustnosťou 2x640Gb/s

Výpočtové fronty úloh

- softvér PBS Torque/Moab

Aplikačné programové vybavenie

- Kvantová chémia / Molekulové modelovanie
- Technologické a materialové simulácie
- Matematické a štatistické modelovanie
- Vývojárske nástroje, matematické a MPI knižnice

Vývojárske nástroje, matematické a MPI knižnice

- GNU C/C++/Fortran kompilátor 4.4.7 - 5.1
- Intel C/C++/Fortran kompilátor 2013 SP1 (14.0.1) + MKL
- PGI C/C++/Fortran/CUDA kompilátor 2013 (13.10)
- Python 2.6.6
- FFTW3 3.3.3
- OpenBLAS 0.2.8 (blas+lapack)
- MVAPICH 1.9, 2.0
- gcc 4.4.7 - 5.2
- OpenMPI 1.4.5 - 1.10.0

www.hpc.stuba.sk je špecializovaná stránka pre vysokovýkonné počítanie celouniverzitného pracoviska Slovenskej technickej univerzity v Bratislave, Centra výpočtovej techniky STU (CVT) s aktuálnymi informáciami o prevádzke klastra. CVT zabezpečuje prevádzku výpočtového klastra IBM iDataplex od 2. júla 2012 v nepretržitej prevádzke, 365 dní v roku, 24 hodín denne. Pre problematiku vysokovýkonného počítania je na STU zriadená Rada STU pre vysokovýkonné počítanie (RVVP), ktorá iniciatívne posudzuje, prerokováva a predkladá rektorovi návrhy na rozhodnutia v oblasti vysokovýkonného počítania.

CVT je súčasne aj pracoviskom zabezpečujúcim kooperovaný prístup na ďalšie superpočítače v rámci projektu SIVVP na Slovensku. *Všeobecné podmienky používania produktov SIVVP* sú nasledovné:

a) Produkty projektu SIVVP (technické prostriedky a aplikačné programové vybavenie) sú k dispozícii všetkým VŠ a univerzitám a vedeckovýskumným inštitúciám na Slovensku, v zmysle opisu projektu SIVVP a licenčných podmienok dodávateľa programového vybavenia.

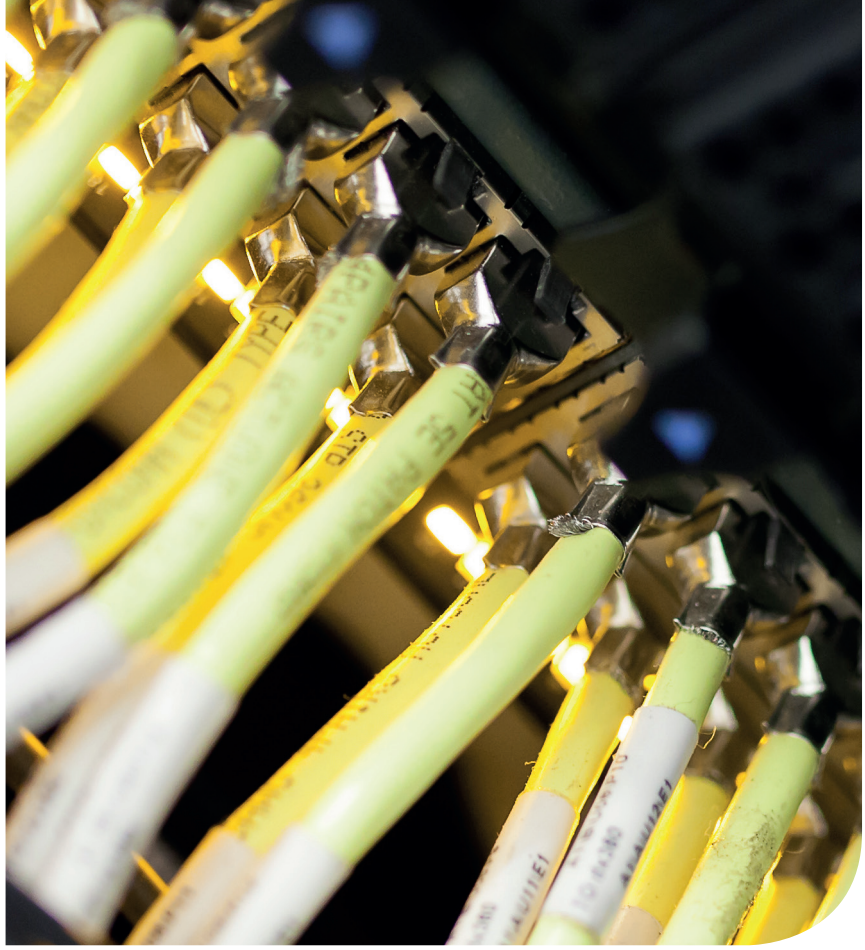
b) Nárok na využívanie produktov projektu SIVVP majú pracovníci pracujúci na výskumných úlohách nekomerčného charakteru (v ďalšom len Používateľ, Používatelia) s možnosťou publikovania výsledkov výpočtov vo vedeckých publikáciách.

c) Počas trvania projektu (2010-2015) a jeho udržateľnosti (2015-2019) je prístup k výpočtovým systémom na riešenie konkrétnych úloh vedy a výskumu bezplatný, čo je v súlade so znením národného projektu SIVVP.

d) Na výpočtových systémoch je možné prevádzkovať len aplikačné programové vybavenie s platnou licenciou, voľne dostupné aplikačné programové vybavenie, alebo vlastné aplikačné programové vybavenie.

e) Aplikačné programové vybavenie zakúpené z prostriedkov projektu SIVVP je prístupné celej akademickej komunite a pracovníkom vedeckovýskumných inštitúcií na Slovensku v zmysle licenčných podmienok.

Ing. Róbert Jaroška pôsobí ako vedúci pracovník výpočtovej techniky na STUBA



f) Prostriedky získané z komerčného používania výpočtových systémov SIVVP je možné použiť len na prevádzku produktov zakúpených v rámci projektu SIVVP.

g) Používateľ má plnú zodpovednosť za svoje aktivity v počítačových systémoch SIVVP, v počítačových sieťach, do ktorých má prístup prostredníctvom počítačových sietí. Používateľ je zodpovedný za zneužitie vlastného účtu, príp. neoprávnené sprístupnenie účtu inej osobe.

h) Používateľ plne zodpovedá za škody, ku ktorým došlo v dôsledku zneužitia jeho účtu pre nedbalú manipuláciu s prístupom (heslom atď.) tohto účtu.

i) Používateľ sa nesmie žiadnymi prostriedkami pokúsiť o získanie prístupových práv alebo privilegovaného stavu, ktorý mu nebol pridelený. Pokiaľ používateľ akýmkoľvek spôsobom (napr. v dôsledku chyby technických alebo programových prostriedkov) získa privilegovaný stav alebo prístupové práva, ktoré mu neboli pridelené, je povinný túto skutočnosť bezodkladne oznámiť príslušnému správcovi. Používateľ sa nesmie pokúsiť o získanie prístupu k chráneným dátam iných používateľov.

j) Používateľ nesmie vo využívaných počítačových sieťach vykonávať takú činnosť, ktorá by ostatným používateľom bránila v riadnom používaní siete, napr. nadmerným preťažovaním prvkov siete, šírením počítačových vírusov alebo pokusmi o neoprávnený prístup k prvkom siete. Používateľ nesmie používať výpočtové systémy a počítačové

siete na politickú a náboženskú agitáciu. Je zakázané používať vulgárne a znevažujúce výrazy v komunikácii, ktorá je určená pre väčší okruh ľudí (napr. elektronické konferencie, diskusné kluby, news). Nesmie vyvíjať činnosť alebo šíriť informácie, ktoré sú v rozpore so zákonom a mohli by viesť k trestnému stíhaniu (napr. šírenie reklamy, informácie o komerčných produktoch firiem, psychický teror, pornografia, ...) alebo informácií, ktoré nesúvisia s aktivitami projektu SIVVP.

k) Používateľ nesmie používať a šíriť nelegálne programové vybavenie. Používateľ nesmie kopírovať a distribuovať časti operačného systému a inštalovaných programov.

Informácia o aplikačnom programovom vybavení zakúpenom v rámci projektu SIVVP je vždy aktuálne na stránke *www.hpc.stuba.sk*. V súčasnosti je stav realizácie nákupu aplikačného programového vybavenia:

NÁZOV	STAV NÁKUPU	POZNÁMKA
Prekladač PGI C/C++/FORTRAN/CUDA	Zakúpený	implementovaný
Prekladač INTEL C/C++/FORTRAN	Zakúpený	implementovaný
Riadenie úloh (PBS)	Zakúpený	implementovaný
ANSYS	Zakúpený	implementovaný
MATEMATIKA	Zakúpený	implementovaný
SYSWELD	Prebieha verejné obstarávanie	Podpísaná PZ na VO
PAM-STAMP 2G	Prebieha verejné obstarávanie	Podpísaná PZ na VO
ProCAST	Prebieha verejné obstarávanie	Podpísaná PZ na VO
MATLAB	Prebieha verejné obstarávanie	Podpísaná PZ na VO
TURBOMOLE	Prebieha príprava VO	Príprava PZ k podpisu
Gaussian 09 + LINDA	Prebieha príprava VO	Príprava PZ k podpisu
MOLCAS	Prebieha príprava VO	Príprava PZ k podpisu
MOLPRO	Prebieha príprava VO	Príprava PZ k podpisu

Projekt SIVVP umožňuje realizáciu veľmi zložitých numerických výpočtov pre oblasť výskumu a vývoja a poskytuje rovnocenné pripojenie do existujúcich európskych vysokovýkonných výpočtových systémov.

Doterajšie výsledky výpočtov na klastri STU v Bratislave budú predmetom nasledujúceho článku.

Čo robíme vďaka SIVVP na ÚFCHaCHF FCHPT STU

STANISLAV BISKUPIČ[a]
MARTIN BREZA[a]
LUKÁŠ BUČINSKÝ[a]
SANDRA DOROTÍKOVÁ[a]
ANTON GATIAL[a]
LENKA KUCKOVÁ[a]
MICHAL MALČEK[a]
VLADIMÍR LUKEŠ[a]
VLADIMÍR SLÁDEK[a,b]

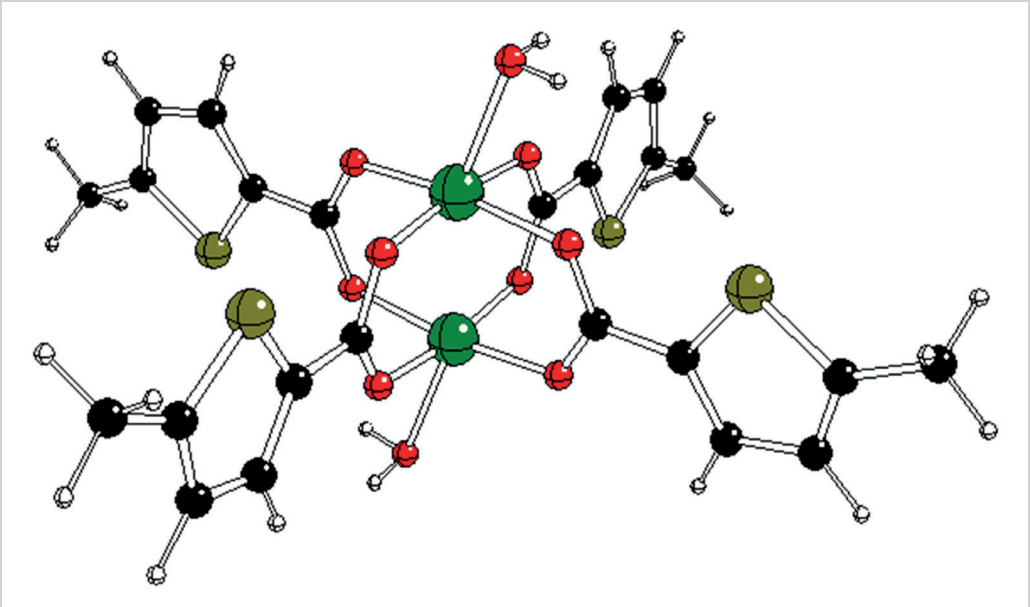
[a] Ústav fyzikálnej chémie a chemickej fyziky FCHPT STU
Radlinského 9
812 37 Bratislava

[b] Chemický ústav SAV
Dúbravská cesta 9
845 38 Bratislava

Počítačová alebo kvantová chémia má veľmi široké spektrum aplikácií a smerov. Opis elektrónovej štruktúry (či už z pohľadu geometrie molekuly alebo samotnej distribúcie elektrónového oblaku v molekule) a jej vzťahu k reaktivite, spektroskopickým, magnetickým, či iným prakticky využiteľným fyzikálno-chemickým vlastnostiam študovaných látok je jeden z cieľov kvantovej chémie. Vlnovú funkciu tanku síce ešte (ak niekedy vôbec) získať nevieme, ale vieme urobiť veľmi užitočný popis molekúl, ktorý priamo súvisí s ich vlastnosťami, chemickým chovaním alebo s predstavou, ako sú jednotlivé atómy na seba naviazané. My pre stručnosť nebudeme pojednávať o detailoch kvantovej chémie, ani o postupoch, aké sa dajú použiť pri výpočtoch, ale zameriame sa na priame aplikácie a zhrnutie vybraných výsledkov, ktoré sme riešili pomocou výpočtových prostriedkov SIVVP v roku 2014.

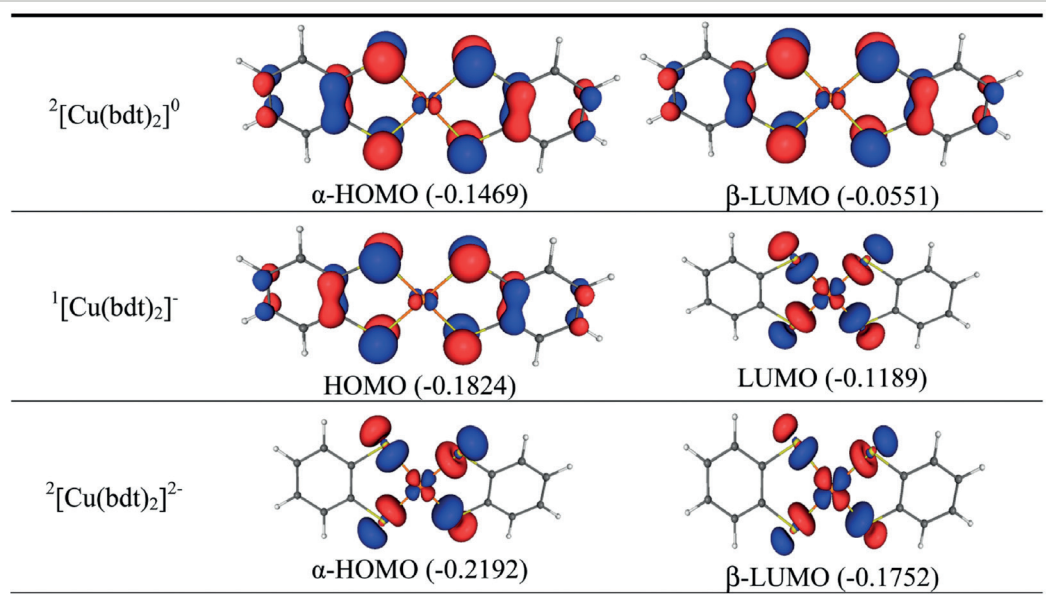
01 Modelové systémy aktívnych centier enzýmov

Komplexy medi a iných prechodných kovov (obrázok 1 a 2) sú zaujímavé ako nízkomolekulové modely aktívnych centier enzýmov a majú aj schopnosť inhibície niektorých enzýmov, čo sa prejavuje v ich výraznej biologickej aktivite. Študovali sme komplexy medi (Cu) s biologicky aktívnymi ligandami [1,2]. Pomocou DFT (tzv. Density Functional Theory) výpočtov sme študovali štruktúru komplexov a interpretovali vibračné spektrá. Potvrdili sme slabú antiferomagnetickú interakciu medzi centrami Cu(II) v dvojjadrových komplexoch, ktorej veľkosť sa môže významne líšiť v prípade niekoľkých pozorovaných konformérov v čiastočne neusporiadaných kryštáloch.



OBRÁZOK 1:
DFT optimalizovaná štruktúra $Cu_2(5\text{-Me-2-tpc})_4(H2O)_2]_2$ [2]

Študovali sme komplexy Cu s 1,5-bis(2-hydroxybenzaldehyd) karbohydrazónom a jeho tioanalógom [3]. Výsledky pH-potenciometrických a UV/vis spektrofotometrických meraní (UV/vis alebo ultrafialová/viditeľná časť optického spektra) sa interpretovali pomocou DFT výpočtov. Potvrdil sa vplyv protiiónov a rozpúšťadiel na priestorovú štruktúru študovaných Cu komplexov (vodíkové väzby, π-π interakcie, „crystal packing“ a nukleárnitu).

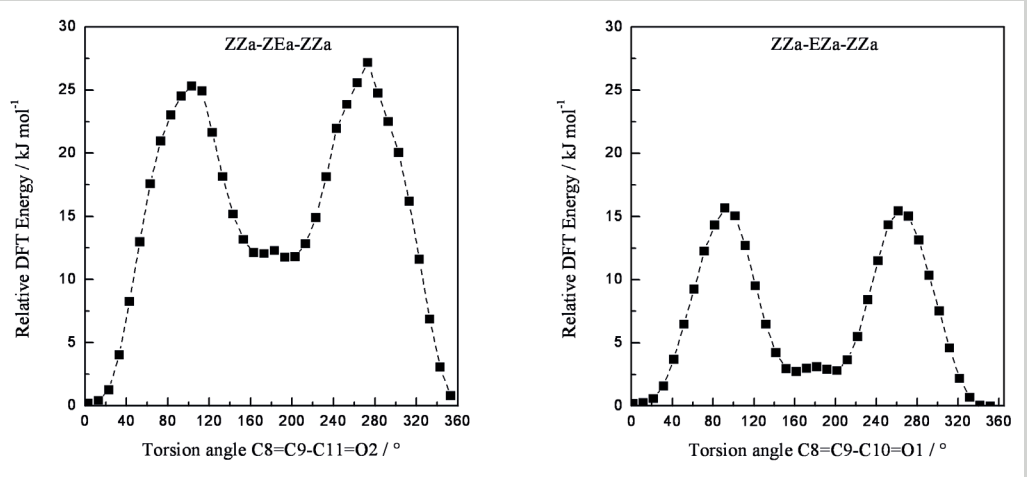


OBRÁZOK 2:
Hraničné molekulové orbitály komplexov $[Cu(bdt)_2]^q$ (v zátvorkách sú hodnoty orbitálnych energií v jednotkách hartree) [4]

Pomerne veľa úsilia sme venovali komplexom zloženia $(MePh_3P)[M(bdtCl_2)_2]$ (M = Cu^{III}, Ni^{III}, Co^{III}) s 3,6 dichlórobenzén-1,2-ditiolátovým ligandom [4-6] $(bdtCl_2)^{2-}$ a tiež $(MePh_3P)_2[M(bdtCl_2)_2]$ s dimetylsulfoxidom, (M = Cu^{II}, Ni^{II}). Získal sa veľmi zaujímavý výsledok - náboj na centrálnych atómoch, ktorých formálne náboje sú +3 a +2, je skoro neutrálny a koordinačné väzby kov-síra sú len o málo silnejšie pre formálny náboj centrálneho atómu +3. Koordinačná sféra centrálneho atómu je rovnaká a komplexy sa líšia iba zložením [5]. Keďže sa podarilo pripraviť kryštál veľmi dobrej kvality o veľkosti okolo 20 mm^3 pre látku s centrálnym atómom Ni(III), rozhodli sme sa študovať rozdelenie spinovej hustoty, ktoré nám prinesie detailnejší obraz o elektrónovej štruktúre. Následným porovnaním s teoretickými výsledkami budeme schopní odhaliť systematické chyby, resp. vybrať vhodnú metódu pre teoretické výpočty. Taktiež sme študovali súvislosti medzi elektrónovou štruktúrou a chemicko-fyzikálnymi charakteristikami komplexov s tzv. non-innocent ligandami na báze ditiolátov [4-6]. Porovnali sme UV/vis spektrá a oxidačno-redukčné chovanie s teoretickými výpočtami a interpretáciou elektrónovej štruktúry na základe hraničných (obrázok 2) a lokalizovaných orbitálov, Fermiho dier spriemernených cez atómové domény, analýzy atómov v molekulách a Mullikenových d-elektrónových populácií.

02 Teoretické štúdium elektrónovej štruktúry látok

Študovala sa elektrónová štruktúra a chemicko-fyzikálna charakterizácia organických molekúl fluórochinolónov [7-9], ktoré je možné použiť následne ako ligandy v komplexoch prechodných kovov [10,11]. V práci sa detailne spracovala konformačná analýza (obrázok 3) študovaných

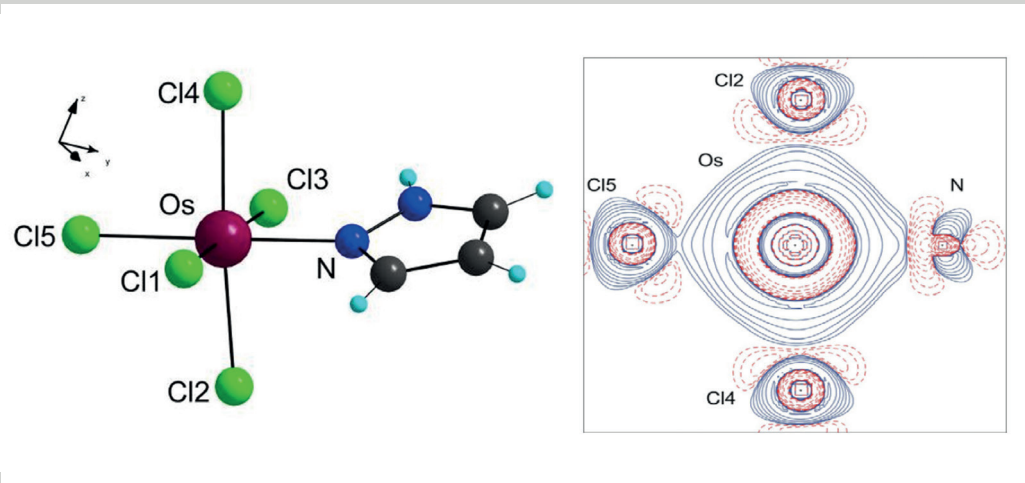


OBRÁZOK 3: Závislosť energie molekuly od torzného uhla pri konformačnej analýze študovaného fluórochinolónu [7]

systémov na DFT úrovni, ktorá zahrňovala aj simulácie konformačného správania sa molekulovou dynamikou. Práca bola ďalej zameraná na presné porovnanie teoretických a experimentálne nameraných infračervených a UV/vis prechodov a NMR (Nuclear Magnetic Resonance) posunov vybraných atómov a ich súvis s jednotlivými konformérmi.

Teoretická štúdia topológie elektrónovej hustoty (elektrónová hustota, spinová hustota, laplacián elektrónovej hustoty, väzbové kritické body) v komplexoch ruténia a osmia [12,13] bola zameraná na rozsah relativistických efektov (obrázok 4). Práca bola z veľkej časti metodická a zahŕňala implementáciu samotných prístupov do kvantovo-chemického balíka Tonto [14].

Štúdia van der waalsovských interakcií v modelových systémoch s potrebou zahrnutia relativistických efektov [15] mala na zreteli výpočet energetických interakčných kriviek atómov olova s atómami vzácnych plynov (He, Ne, Ar). Z relativistických CCSD(T) (veľmi presná a výpočtovo veľmi

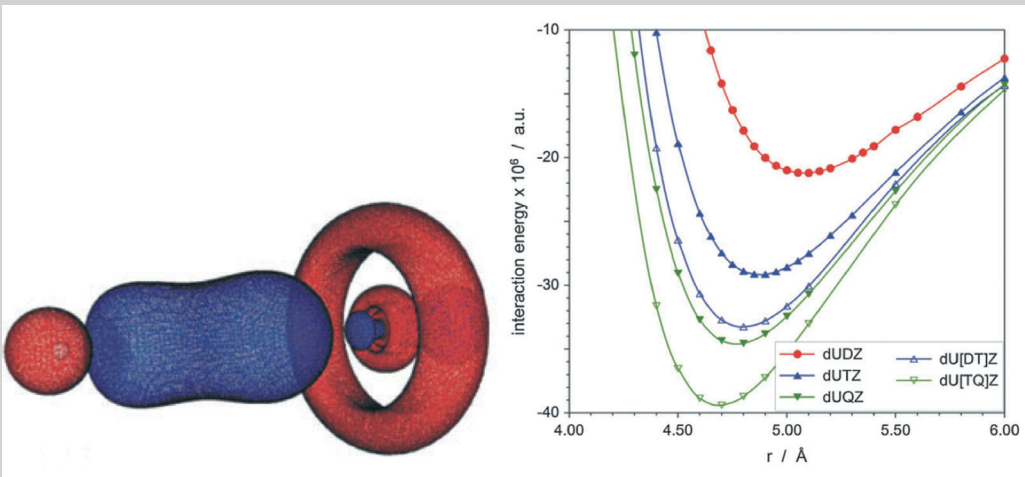


OBRÁZOK 4:

Komplex osmia (vľavo) v štúdii vplyvu relativistických efektov na topológiu elektrónovej hustoty (vpravo) [12,13]

náročná kvantovochemická metóda) energetických kriviek (obrázok 5), ktoré zahŕňali spinovo-orbitálnu interakciu, sme následne vypočítali difúzne koeficienty zmesí tromi rozličnými prístupmi.

Vykonali sme výpočty spektrálneho správania sa systémov so zreteľom na hyperjemnú interakciu EPR (Electron Paramagnetic Resonance) spektier [16,17]. Dané štúdie v sebe zahŕňali



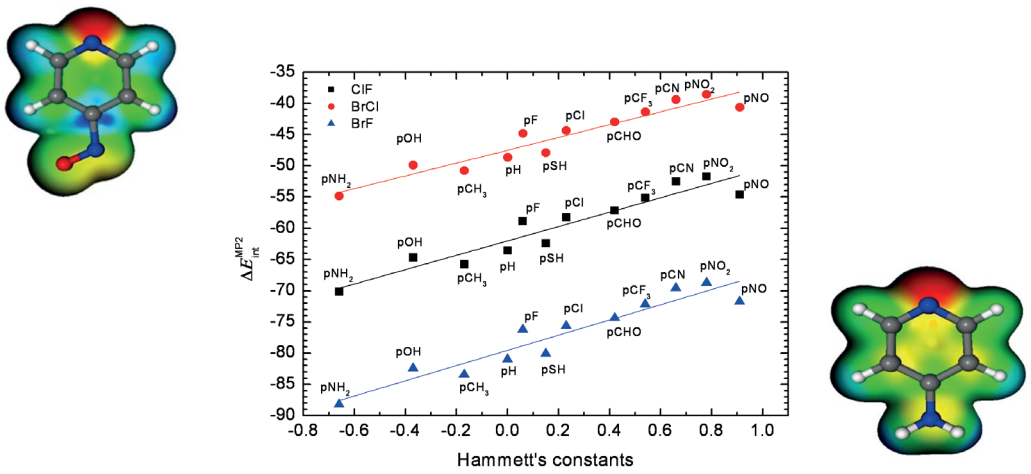
OBRÁZOK 5:

Rozdiel medzi elektrónovou hustotou systému olova s héliom a samotných atómov olova a hélia (červená je kladná hodnota a modrá záporná) (vľavo). Interakčné krivky vypočítané na úrovni spriahnutých klastrov zahrňujúce skalárne („kinetické“) aj spinovo- orbitálne relativistické efekty (vpravo).

výpočty na báze molekulovej dynamiky, ako aj charakterizáciu spektrálneho správania a elektrónovej štruktúry študovaných systémov.

03 Výpočty halogénových a vodíkových väzieb stabilizujúcich σ-viazané para-substituované komplexy pyridínu·(X2/XY/HX)

Optimálne geometrie a interakčné energie jednoduchých modelových para-substituovaných komplexov pyridínu·X_2/XY/HX (X_2 = F_2, Cl_2, Br_2; XY= ClF, BrF, BrCl a HX=HF, HCl, HBr) sa študovali na ab initio MP2 (poruchová metóda Möllera-Plesseta do druhého rádu) teoretickej úrovni [18]. V porovnaní so systémami, ktoré sú viazané typickými vodíkovými väzbami, sa interakčné energie systémov, ktoré sú viazané halogénovými väzbami, zväčšujú s nárastom veľkosti atómu interagujúcich dvojatómových molekúl. Interakčné energie sa korelovali s Hammettovými konštantami pre uvažované substituenty (obrázok 6), čo umožňuje lepšie

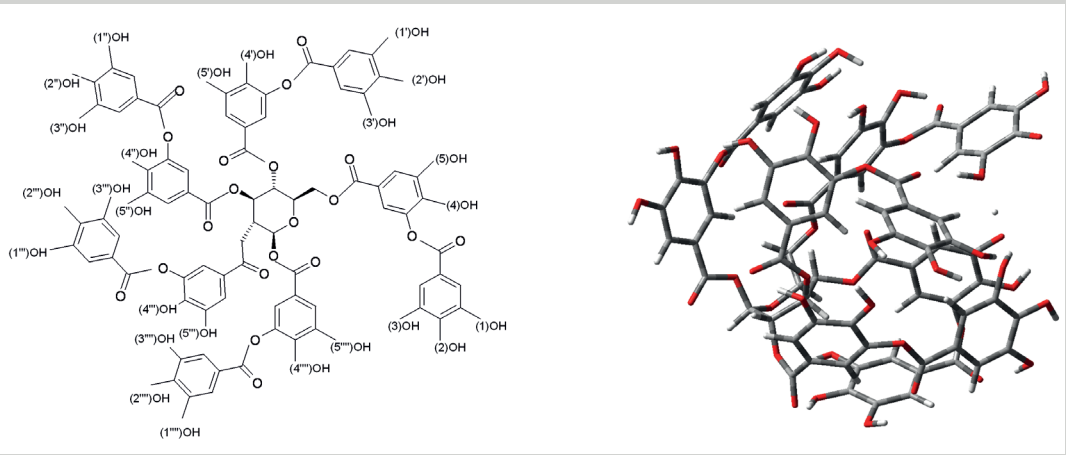


OBRÁZOK 6: Závislosť MP2 interakčných energií pre para-substituované pyridíny od Hammettových konštánt

pochopenie chemických vlastností pyridínu, ako aj procesov prebiehajúcich v atmosfére našej planéty. Závislosť frekvencií vibračných módov (infračervená spektrometria) σ-viazaných komplexov sa predikovala na podobných pyridínových systémoch v závislosti od miesta substitúcie na molekule pyridínu [19]. Kvalitatívna a kvantitatívna analýza stabilizujúcich a destabilizujúcich efektov sa vykonala pomocou metódy SAPT (metóda umožňujúca fyzikálnu interpretáciu nekovalentných interakcií).

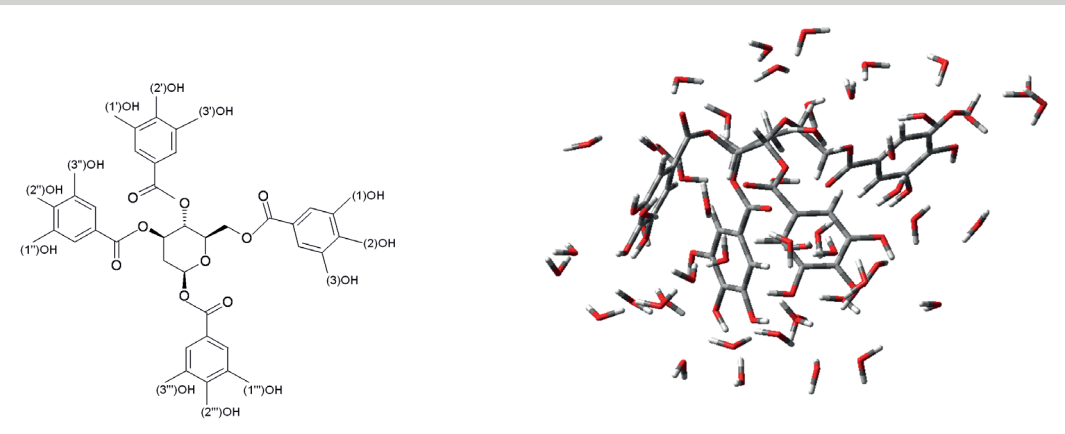
04 DFT výpočty modelových molekúl tanínových kyselín v elektricky neutrálnych a elektricky nabitých stavoch

Kvantovochemické výpočty rôznych modelových molekúl tanínových kyselín obsahujúcich štyri až desať gaolylových jednotiek (obrázok 7) sa použili na opis priestorovo



OBRÁZOK 7: Schematická štruktúra a optimálna DFT geometria najväčšej modelovej štruktúry tanínovej kyseliny

orientovaných vodíkových väzieb a výpočty protónových afinít [20]. Teoretické výpočty, ktoré sa uskutočnili aj pre modelový vodný roztok (obrázok 8), umožnili interpretovať



OBRÁZOK 8: Schematická štruktúra a optimálna DFT geometria najväčšej modelovej štruktúry tanínovej kyseliny obklopenej 20 molekulami vody, ktoré tvoria prvú solvatačnú vrstvu.

spektroelektrochemické experimenty, ako aj pochopiť antioxidačné vlastnosti prírodných tanínových zlúčenín.

LITERATÚRA

[1] Gatial A., Múdra M., Moncoľ J., Danková M., Lönnecke P., Breza M.: Structure and vibrational spectra of copper(II) 2-pyridylmethanolate tetrahydrate. Chem. Papers 68 (7), 940–949 (2014).

[2] Švorec J., Polakovičová P., Moncol J., Kuchtanin V., Breza M., Šoralová S., Padělková Z., Mrozinski J., Lis T., Segľa P.: Structural, Magnetic and DFT study of dinuclear copper(II) thiophenecarboxylate and furancarboxylate complexes, Polyhedron 81, 216-226 (2014).

[3] Dragancea D., Shova S., Enyedy E.A., Breza M., Rapta P., Carrella L.M., Rentschler E., Dobrov A., Arion V.B.: Copper(II) complexes with 1,5-bis(2-hydroxybenzaldehyde) carbohydrazone. Polyhedron 80, 180-192 (2014).

[4] Machata P., Herich P., Lušpai K., Bucinsky L., Šoralová S., Breza M., Kozisek J., Rapta P.: Redox Reactions of Nickel, Copper, and Cobalt Complexes with "Noninnocent" Dithiolate Ligands: Combined in Situ Spectroelectrochemical and Theoretical Study, Organometallics, 33, 4846–4859 (2014).

[5] Herich P., Fronc M., Bucinsky L., Breza M., Kozisek J.: IUCr-XXIII, Montreal (Canada), Acta Cryst. A70, C1553 (2014).

[6] Bučinský L., Malček M., Biskupič S., Kucková L., Kožíšek J., Jayatilaka D., Grabowsky S., Arion V. B., Buechel G. E. : Nickel, Copper and Cobalt Complexes with Dithiolate Ligands; 50th Symposium on Theoretical Chemistry (STC) Quantum Chemistry and Chemical Dynamics, 14-18 Sept. 2014, Vienna, Austria.

[7] Dorotíková S., Plevová K., Bučinský L., Malček M., Herich P., Kucková L., Bobeničová M., Šoralová S., Kožíšek J., Fronc M., Milata V., Dvoranová D.: Conformational, Spectroscopic, and Molecular Dynamics DFT Study of Precursors for New Potential Antibacterial Fluoroquinolone Drugs, J. Phys. Chem. A 118, 9540 (2014).

[8] Dorotíková S., Malček M., Bučinský L., Dvoranová D.: Conformational and Molecular Dynamics DFT Study of 3-fluorophenylamino Derivatives; CESTC 2014, Central European Symposium on Theoretical Chemistry, 21-25 September 2014, Nagybörzsöny, Hungary.

[9] Dorotíková S., Gatial A., Plevová K., Milata V., Prónayová N., Matějka P.: Isomerizational and Conformational Study of 3-fluorophenylamino-2-acetyl propenenitrile (FPAAPN); EUCMOS 2014, 32nd European Congress on Molecular Spectroscopy, 24-29 August 2014, Düsseldorf, Germany.

[10] Dorotíková S., Kožíšková J., Herich P., Fronc M., Bučinský L., Dvoranová D.: Copper(II) Complexes with Quinolone: Structure and Spectroscopic Characterization; EUCMOS 2014, 32nd European Congress on Molecular Spectroscopy, 24-29 August 2014, Düsseldorf, Germany.

[11] Dorotíková S., Kožíšková J., Herich P., Fronc M., Bučinský L., Dvoranová D.: Structure and Spectroscopic Characterization of Copper(II) Complexes with Fluoroquinolones; XIV. Pracovní setkání fyzikálních chemiků a elektrochemiků, 3-4 June 2014, Brno, Czech Republic.

[12] Bučinský L., Kucková L., Malček M., Kožíšek J., Biskupič S., Jayatilaka D. , Büchel G. E., Arion V. B.: Picture change error in quasirelativistic electron/spin density, Laplacian and bond critical points, Chem. Phys. 438, 37–47 (2014).

[13] Bučinský L., Machata P., Herich P., Lušpai K., Šoralová S., Breza M., Kožíšek J., Rapta P.: Topology of electron density and the Fourier transform of electron density. Impact of picture change error and relativistic effects; REHE 2014: 11th

International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics, 20-24 Sept 2014, Smolenice, Slovakia.

[14] Jayatilaka D., Grimwood D.J.: Comput. Sci. – ICCS 4, 142 (2003).

[15] Sládek V., Bučinský L., Matuška J., Ilčin M., Lukeš V., Laurinc V.: Ab initio X^{10+} ground state potential curves of Pb....RG dimers (RG = He, Ne, Ar) including spin–orbit effects. Simulation of diffusion coefficients, Phys. Chem. Chem. Phys.16, 18519 (2014).

[16] Malček M., Dorotíková S., Rišpanová L., Barbieriková Z., Bučinský L., Dvoranová D., Brezová V., Staško A., Biskupič S.: Calculations of EPR and UV/Vis parameters of intermediates in the redox processes of 2,6-dichlorophenolindophenol; 50th Symposium on Theoretical Chemistry (STC) Quantum Chemistry and Chemical Dynamics, 14-18 sept 2014, Vienna, Austria

[17] Malček M., Bučinský L., Valko M., Biskupič S.: Molecular dynamics of $[Cu(H_2O)_{30}]^{2+}$ clusters including calculations of hyperfine coupling constants/Fermi contact terms; REHE 2014: 11th International Conference on Relativistic Effects in, Heavy-Element Chemistry and Physics, 20-24 Sept 2014, Smolenice, Slovakia.

[18] Sladek V., Škorňa P., Poliak P., Lukes V.: The ab initio study of halogen and hydrogen σN-bonded para-substituted pyridine (X_2/XY/HX) complexes, Chem. Phys. Lett., 619, 7 (2015).

[19] Sladek V., Punyain K., Ilcin M., Lukes V.: Substitution Effect on the Intermolecular Halogen and Hydrogen Bonds of the σ-Bonded Fluorinated Pyridine·XY/HX Complexes (XY = F2, Cl2, ClF; HX = HF, HCl), Int. J. Quant. Chem. 14, 869 (2014).

[20] Lukeš V., Darvasiová D., Furdíková K., Hubertová I., Rapta P.: Solvent effect on the anodic oxidation of tannic acids: EPR/UV – Vis spectroelectrochemical and DFT theoretical study, J. Solid State Electrochem., (DOI 10.1007/s10008-015-2921-9).

ŽILINA
ŽILINSKÁ UNIVERZITA

UNIZA SIVVP klaster

Penka Martincová
Ľuboš Kojdjak
Marián Handrík

Národný projekt štrukturálnych fondov SIVVP (*www.sivvp.sk*) umožňuje realizáciu komplexných výpočtov pre výskum a vývoj a poskytuje aj pripojenie do európskych vysokovýkonných výpočtových systémov.

Technické vybavenie klastra:

ŽU zabezpečuje prevádzku vysokovýkonného klastra, ktorý pozostáva zo 46 výpočtových uzlov IBM dx360 M3, z toho 2 sú osadené grafickými (GPGPU) akcelerátormi NVIDIA Tesla M2070 a z 2 výpočtových uzlov IBM System x3850 X5 / x3950 X5.

Celkový špičkový výpočtový výkon z 4,39 TFlops na 552 výpočtových jadrách Intel.

K dispozícii je dátové úložisko o veľkosti 192 TB a niekoľko manažovacích serverov, pomocou ktorých je toto úložisko poskytované výpočtovým uzlom ako aj prihlasovaciemu stroju pre používateľov, na ktorom si pripravujú, kompilujú a predkladajú na vykonanie svoje výpočtové úlohy.

Detailnejšie parametre sú nasledovné (*http://nic.uniza.sk/hpc/*):

Výpočtové uzoly / **46x**

- 2x 6 jadrový Intel(R) Xeon(R) CPU L5640 @ 2.27GHz
- 96GB RAM
- 2 x 500GB HDD
- OS Scientific Linux 6.3
- Ethernet, InfiniBand
- v 2 nodoch je grafická karta NVIDIA GF100 (Tesla M2070)

Výpočtové uzoly / **2x**

- 2x 10 jadrový Intel(R) Xeon(R) CPU E7- 8860 @ 2.27GHz
- 256GB RAM
- 2 x 300GB HDD
- OS Scientific Linux 6.3
- Ethernet, InfiniBand

Celkový počet jadier je 552.

Súborový systém

- /home/$USER - xfs
- /work/$USER - xfs
- /apps - xfs
- /localscratch/$PBS_JOBID ($TMPDIR) - ext4

Celková kapacita 192TB.

Fronty úloh

- debug - walltime=30min, max 2 úlohy per user
- serial - walltime=240 hod, mem=4gb
- parallel - walltime=240 hod, max nodes=10, max ncpus=120
- parallel20 - walltime=480 hod, max nodes=10, max ncpus=120

Softvérová konfigurácia klastra

Na klastri je nainštalovaný operačný systém Scientific Linux 6.3 a podpora pre paralelné výpočty typu MPI, OpenMP a ich kombináciu. InfiniBand (IB) sieť je venovaná komunikácii medzi výpočtovými uzlami pre MPI a pre rýchle pripojenie zdieľaného sieťového diskového priestoru.

Používateľom je k dispozícii viacero výpočtových front, do ktorých môžu zaraďovať svoje výpočtové úlohy, ktoré budú dávkovo spracované na základe ich požiadaviek a podľa dostupnosti výpočtových zdrojov softvérom PBS-Torque. K dispozícii sú nasledovné fronty:

- serial - pre krátke 1-jadrové (sériové) úlohy
- parallel - pre krátke viac-jadrové (paralelné) úlohy
- parallel20 - pre paralelné dlhé úlohy
- debag - pre krátke úlohy na ladenie

Používatelia sa prihlasujú na stroj „login.hpc, mgmt1“, z ktorého môžu spúšťať svoje úlohy do gridu, sledovať ich stav, zisťovať dostupnosť aj ostatných gridových uzlov, nakladať so súbormi v gridovom dátového priestore. Výpočtové uzly majú aj svoje samostatné pracovné priestory (tmp).

Popri bežných vývojárskych nástrojoch a knižniciach (GNU C/C++/Fortran, OpenMPI, ...) sú k dispozícii kompilátory Intel a PGI (obsahuje CUDA kompilátor) a doinštalovanie iných softvérových nástrojov je možné realizovať na základe požiadaviek od používateľov.

Prekladače

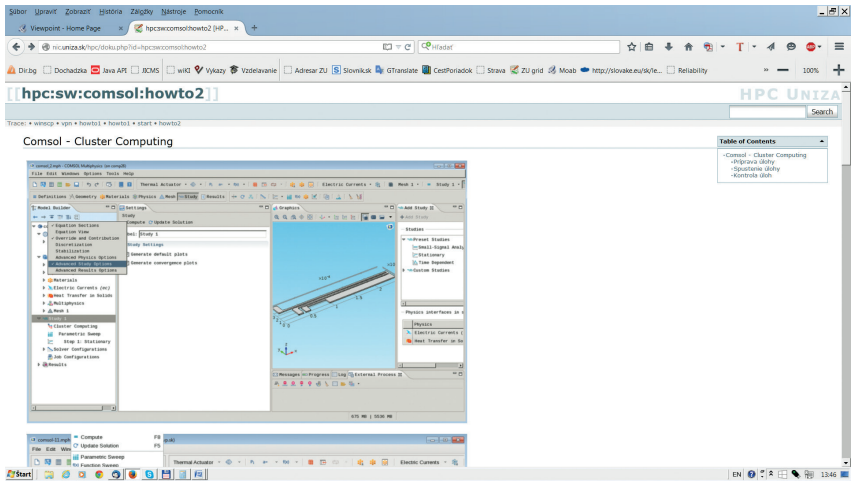
Pre vývoj vlastného softvéru majú používatelia k dispozícii bežné nástroje ako prekladače GNU C/C++/Fortran atď. Okrem toho môžu používať aj komerčné prekladače a knižnice od firiem Intel a PGI:

- Intel® Fortran Professional Edition For Linux
- Intel® C++ Compiler Professional Edition For Linux
- PGI® C, C++ & Fortran Compilers & Tools For Multi-core x64+GPU Workstations and Clusters
- Intel® Math Kernel Library
- MPI Inštalácia GPGPU knižníc na uzly s grafickými kartami

- Java
- Python

Komerčný softvér

- ADINA
  - softvér pre riešenie úloh mechaniky kontinua metódou konečných prvkov Octave
- ANSYS Academic Multiphysics Campus Solution
  – softvér pre riešenie úloh z oblasti mechaniky kontinua metódou konečných prvkovDalton
- COMSOL Multiphysics
  – softvér obsahujúci moduly pre riešenie úloh mechaniky, elektrotechniky, prúdenia tekutín, chémie a ďalšie (obrázok 1)



OBRÁZOK 1:
Ukážka práce so systémom COMSOL

- SIMPACK
  – softvér, určený na simuláciu a dynamickú analýzu viactelesových mechanických alebo mechatronických systémov
- OCTAVE
  – softvér pre riešenie matematických úloh metódami numerickej matematiky, softvér podobný programu Matlab
- MOAB
  – softvér pre monitorovanie úloh na klastri

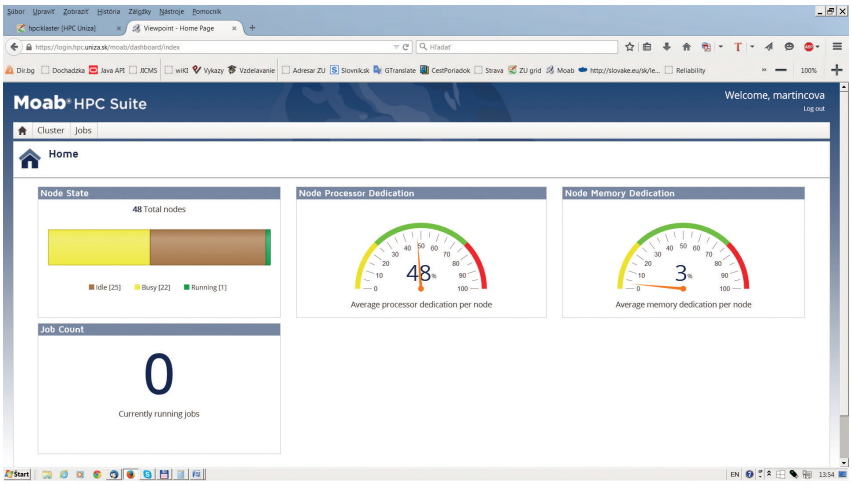
» GENOME TRAX
– databáza génových mutácií

» MATLAB
- v blízkej budúcnosti budú zakúpené moduly pre podporu paralelných výpočtov Parallel Toolobox a MATLAB Distributed Computing Server, pričom používatelia budú môcť dopĺňať ďalšie moduly podľa potrieb

V budúcnosti sa počíta s inštaláciou ďalších softvérových balíkov, ktoré budú obstarávané pre riešenie novovzniknutých výskumných úloh na univerzite a regiónu.

Monitorovanie klastra

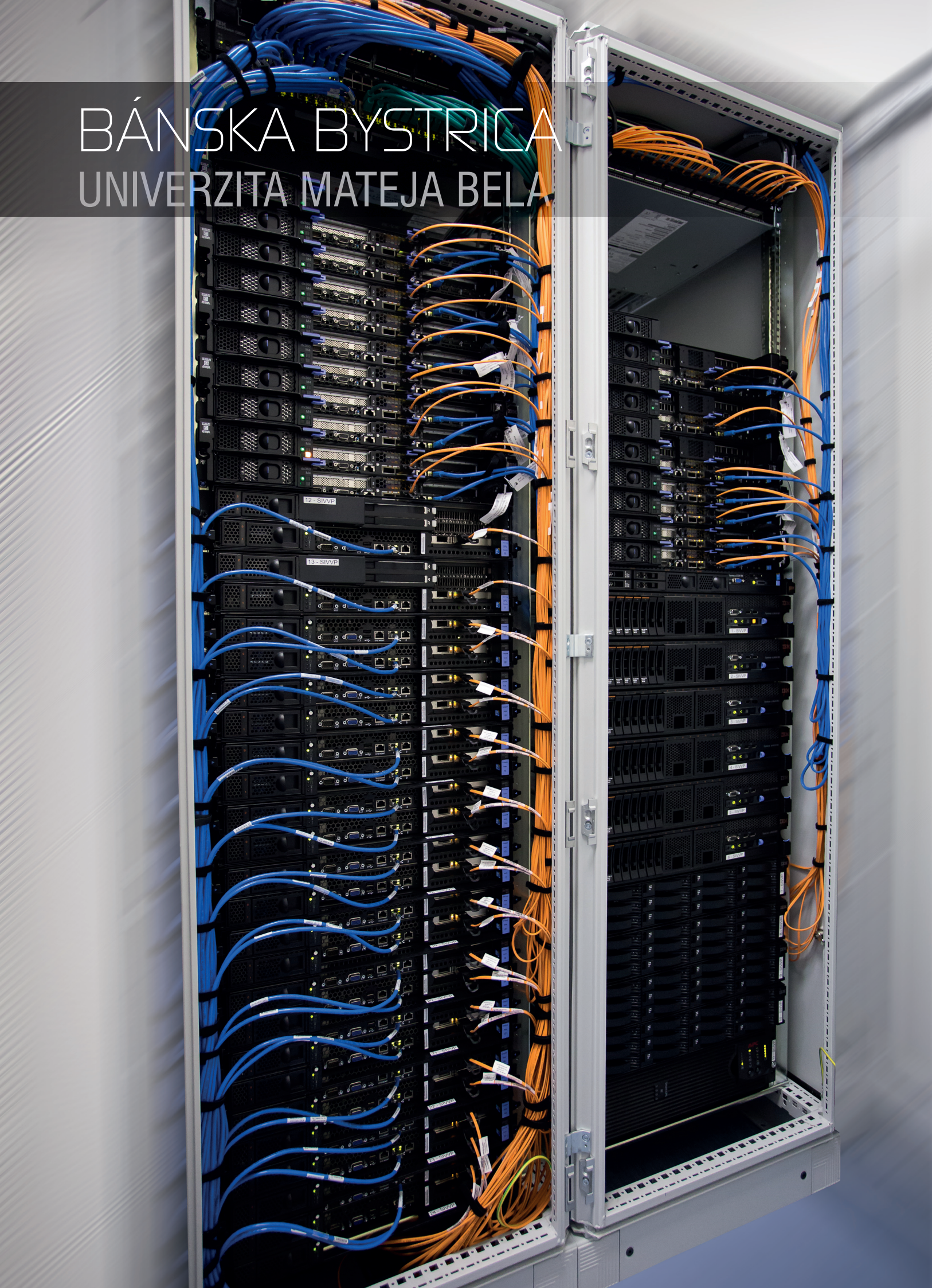
Používatelia majú možnosť zistiť aktuálnu obsadenosť klastra



OBRÁZOK 2: Zaťaženie CPU a RAM výpočtových serverov

príkazmi PBS (qstat, qnodes), keď sú prihlásení do systému alebo použitím aplikácie MOAB (https://login.hpc.uniza.sk/moab/dashboard/index), ktorá poskytuje informáciu o obsadenosti klastra a tiež o stave úloh, ktoré daný používateľ spustil (obrázok 2).

BÁNSKA BYSTRICA
UNIVERZITA MATEJA BELA



Klaster SIVVP HPCC UMB

Jozef Siláči
Jarmila Škrinárová
Miroslav Melicherčík

Univerzita Mateja Bela je zapojená v národnom projekte štrukturálnych fondov SIVVP - Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie, ktorého cieľom je vytvorenie slovenskej gridovej a superpočítačovej infraštruktúry, v rámci ktorej boli vybudované špecializované strediská disponujúce modernou vysokovýkonnou výpočtovou technikou, superpočítačmi a vysokokapacitnými úložiskami dát vo vybraných pracoviskách univerzít a SAV.

Správu klastra zabezpečuje Centrum pre vysokovýkonné počítanie (High Performance Computig Center - **HPCC UMB**), ktoré vzniklo pre tento účel 1. 6. 2012. Hlavným cieľom tohto pracoviska je poskytovať služby vedcom, ktorí vo svojich výskumoch potrebujú realizovať výpočty na infraštruktúre SIVVP. Klaster na UMB zapojený aj do európskej gridovej infraštruktúry (EGI), čo ponúka používateľom ďalšie možnosti a prístup k ďalším zdrojom.

Technické vybavenie klastra:

V rámci projektu SIVVP prevádzkuje Univerzita Mateja Bela klaster, ktorý pozostáva zo 41 výpočtových uzlov IBM dx360M3 a IBM dx360M4. Dva uzly sú osadené GPGPU

Mgr. Jozef Siláči pôsobí ako vedúci oddelenia infraštruktúry IT na Ústave automatizácie a komunikácie UMB v Banskej Bystrici.

nVIDIA Tesla M2070 a 3 uzly sú osadené dvojicami GPGPU nVIDIA Tesla K20. Klaster má celkovo 560 fyzických CPU jadier s podporou technológie HT, ktorá je ale kvôli zvýšeniu výkonu na väčšine výpočtových uzlov vypnutá. Okrem CPU poskytujú ďalší výpočtový výkon GPGPU, ktoré majú celkovo 15 872 CUDA jadier.

Podrobnejšie parametre výpočtových uzlov:

- 22x IBM System x iDataPlex dx360 M3:
  - 2x Intel Xeon X5670
  - 48 GB RAM
  - 2x 500 GB disk, 10 000rpm, RAID 0
- 2x IBM System x iDataPlex dx360 M3:
  - 2x Intel Xeon X5670
  - 48 GB RAM
  - 2x 500 GB disk, 10 000rpm, RAID 1
  - 1x nVidia Tesla M2070, 448 CUDA jadier, 6GB RAM
- 8x IBM System x iDataplex dx360 M4:
  - 2x Intel Xeon E5-2670
  - 64 GB RAM
  - 2x 500 GB disk
  - 2x 900GB, 7200rpm, RAID 0
- 6x IBM System x iDataplex dx360 M4:
  - 2x Intel Xeon E5-2670
  - 128GB RAM
  - 2x 900GB, 7200rpm, RAID 0
- 3x IBM System x iDataplex dx360 M4:
  - 2x Intel Xeon E5-2670
  - 64GB RAM
  - 2x 900GB, 7200rpm, RAID 1
  - 2x 8 nVidia Tesla K20, 2496 CUDA jadier, 5GB RAM

Súčasťou klastra je aj ďalších 6 serverov IBM System x3650M3, ktoré primárne neslúžia na výpočty ale prevádzku podporných systémov ako prístup k diskovým poliam, virtualizačná platforma KVM, DNS, manažovací systém xCAT atď. Okrem fyzických serverov sú niektoré služby zabezpečované aj pomocou 8 virtuálnych strojov, ktoré slúžia na prihlasovanie

používateľov na klaster, riadenie úloh, zapojenie časti klastra do gridovej infraštruktúry EGI atď.

Úložisko je tvorené dvomi diskovými poľami IBM System Storage DS3512 s celkovou kapacitou 96TB. Diskové polia slúžia na domovské priečinky používateľov, zálohy, zdieľané systémové priečinky a úložisko pre používateľov z EGI.

Dočasné dáta, ktoré vznikajú pri výpočtoch sa ukladajú na lokálne disky výpočtových uzlov. Tieto disky sú zapojené kvôli zvýšeniu výkonu v RAID 0.

Výpočtové uzly sú navzájom prepojené sieťou 40Gbps InfiniBand. Klaster je do internetu pripojený pomocou zariadenia Cisco ASA 5540. Zariadenie okrem iného umožňuje prístup používateľov cez VPN s priepustnosťou 650 Mbps.

Softvérová konfigurácia klastra

Na klastri je nainštalovaný operačný systém Scientific Linux 6. Výpočtové uzly sú manažované nástrojom xCAT a beh virtuálnych strojov je zabezpečený pomocou riešenia KVM. Prideľovanie zdrojov výpočtovým úlohám riadi PBS Torque. Používateľ má k dispozícii niekoľko front pre spúšťanie úloh, z ktorých si môže vybrať podľa potreby:

- debug - ladenie úloh alebo veľmi krátke úlohy.
  - maximálny čas výpočtu je 30 minút
- batch - bežné úlohy počítané na CPU
- gpu - úlohy využívajúce GPGPU

Používatelia môžu pri výpočtoch používať softvér, ktorý si vyvinuli sami, alebo môžu používať niektorý z nainštalovaných softvérov.

Pre vývoj vlastného softvéru majú používatelia k dispozícii bežné nástroje ako prekladače GNU C/C++/Fortran atď. Okrem toho môžu používať aj komerčné prekladače a knižnice od firiem Intel a PGI:

- Intel® Fortran Professional Edition For Linux
- Intel® C++ Compiler Professional Edition For Linux
- PGI® C, C++ & Fortran Compilers & Tools For Multi-core x64+GPU Workstations and Clusters
- Intel® Math Kernel Library

- ULA Dense, CULA Sparse
- MPI Inštalácia GPGPU knižníc na uzly s grafickými kartami

Aplikačný softvér

Okrem nástrojov pre vývoj je na klastri možné používať aj ďalší softvér pre vedecké výpočty. Popri vlastnom softvéri majú používatelia momentálne na UMB klastri k dispozícií:

- GridMathematica server
- Octave
- Gamess
- Dalton
- Orca
- Dirac

ďalší softvér, ktorý bude postupne zakúpený a sprístupnený používateľom:

- MATLAB Distributed Computing Server
- Gaussian09
- CRYSTAL
- MOLCAS
- MOLPRO
- QCHEM
- ADF
- ROOT a ďalší softvér z CERN-u
- GIS Grass
- R
- Turbo Mole

Aktuálny zoznam inštalovaného softvéru spolu so zodpovednou osobou je možné nájsť na webovej stránke *http://hpcc.umb.sk/sk/aplikacny-softver.html*.

Monitorovanie klastra

Všetky komponenty klastra sú monitorované systémom Zabbix (viď obrázok). Informácie získané monitoringom možno okrem predchádzania problémovým situáciám, ako napríklad nedostatok miesta na lokálnom disku niektorého z výpočtových serverov, použiť aj pre analýzu využívania jednotlivých serverov a komponentov v čase.

OBRÁZOK: Zaťaženie CPU a RAM výpočtových serverov (compo1 – compo3) v priebehu celého roka 2014

Okrem monitorovania technických parametrov klastra, prebieha aj monitoring úloh a využívania strojového času pre jednotlivé projekty. Infraštruktúra SIVVP na UMB bola využitá aj pri riešení nasledujúcich vedecko-výskumných projektov z oblasti informatiky, teoretickej chémie a fyziky:

- Dynamické vyrovnávanie záťaže vo vysoko-výkonných počítačových systémoch.
- Interakcie v bio a nanosystémoch.
- Presný a výpočtovo efektívny kvantovo chemický popis nekovalentných interakcií.
- Silno interagujúca hmota v jadrových zrážkach a kompaktných hviezdach.
- Silno interagujúca hmota v extrémnych podmienkach.
- Dynamika doménovej steny v tenkých magnetických drôtoch.

Dynamické vyrovnávanie záťaže vo vysokovýkonných počítačových systémoch rieši úlohu optimalizácie rozvrhovania úloh, resp. virtuálnych strojov, bežiacich na vysokovýkonných počítačových systémoch. Cieľom je minimalizovať dobu obehu úlohy v systéme, zabezpečiť vysokú priepustnosť systému a tzv. elasticitu systému, čo má za následok zníženie spotreby elektrickej energie systému. V súvislosti s výskumom Dynamické vyrovnávanie záťaže vo vysokovýkonných počítačových systémoch bola v roku 2013 nominovaná do súťaže ACM – SPY diplomová práca Mgr. Michala Krnáča pod vedením doc. Ing. Jarmily Škrinárovej, PhD. na tému „Algoritmy vyvažovania záťaže v gridovom prostredí". Táto práca sa umiestnila vo finále medzinárodnej súťaže o najlepšiu diplomovú prácu z informatiky.

APVV-0059-10:
Interakcie v bio a nanosystémoch

Infraštruktúra SIVVP bola využívaná na kvantovochemické výpočty lineárnych a nelineárnych elektrických a optických vlastností organických oligomérov s asymetrickou monomérnou jednotkou, na výpočty vibračných a elektrónových spektier komplexov s prenosom náboja, na štúdium indukovaných vlastností slabo viazaných komplexov a na vývoj programu DIRAC pre výpočty v gridovom prostredí.

VEGA 1/0092/14:
Presný a výpočtovo efektívny kvantovo-chemický popis nekovalentných interakcií

Tento projekt je zameraný na rozvoj efektívnych výpočtových ab initio metód určených na presný popis nekovalentných interakcií "veľkých" molekulárnych systémov. Zvýšiť efektivitu výpočtov je možné v zásade dvoma spôsobmi: navrhnutím nových, menej výpočtovo náročných metód so zachovaním presnosti a spoľahlivosti výsledkov a zlepšením konvergencie k CBS s veľkosťou použitej atómovej bázy. V súčasnosti sa naďalej pracuje vylepšení publikovaného prístupu systematicky navrhnutej mriežky bázových funkcií centrovaných mimo atómy.

ITMS26110230082:
Mobility – podpora vedy, výskumu a vzdelávania na UMB

Cieľom projektu boli kvantovochemické výpočty elektrónových a vibračných príspevkov ku nelineárnym optickým vlastnostiam molekúl a molekulových komplexov,

na výpočty elektrónových (absorpčných a fluorescenčných) spektier a multifotónovej absorpcie rôznych organických zlúčenín a komplexov s prenosom náboja, na relativistické výpočty spektroskopických, elektrických a magnetických vlastností vybraných atómových a molekulových systémov so zohľadnením spin-orbitálneho štiepenia. Na uvedené výpočty boli predovšetkým využívané programové balíky Gamess, Dalton, Orca a Dirac.

APVV-0027-11:
Dynamika doménovej steny v tenkých magnetických drôtoch

Projekt je zameraný na lepšie pochopenie statiky a dynamiky nelineárnych excitácií (doménových stien) solitonovej mriežky v chirálnych antiferromagnetoch. V tomto prípade je doménová stena prechodom medzi 2 degenerovanými priestorovo modulovanými vákuami, pričom tie samotné (vákua) sú tvorené periodickým usporiadaním doménových stien. Ďalším zámerom bol pre chiralne antiferromagnety výskum možnosti spontánnej formácie základného stavu vo forme tzv. skyrmionovej mriežky - t.j., základným stavom by mohla byť mriežka akýchsi "magnetických vírov".

Tiež boli simulované spektrá v priečnej hybnosti hadrónov produkovaných v jadrových zrážkach pri energii urýchľovača LHC. Simulované výsledky boli porovnávané s experimentálnymi dátami a tak bol získaný stav rozpínajúcej sa horúcej hmoty v momente jej rozpadu. Na simuláciu bol použitý vlastný balík DRAGON, napísaný v C++.

FENOMÉNY KVANTOVEJ MECHANIKY A TEÓRIE RELATIVITY V CHÉMII

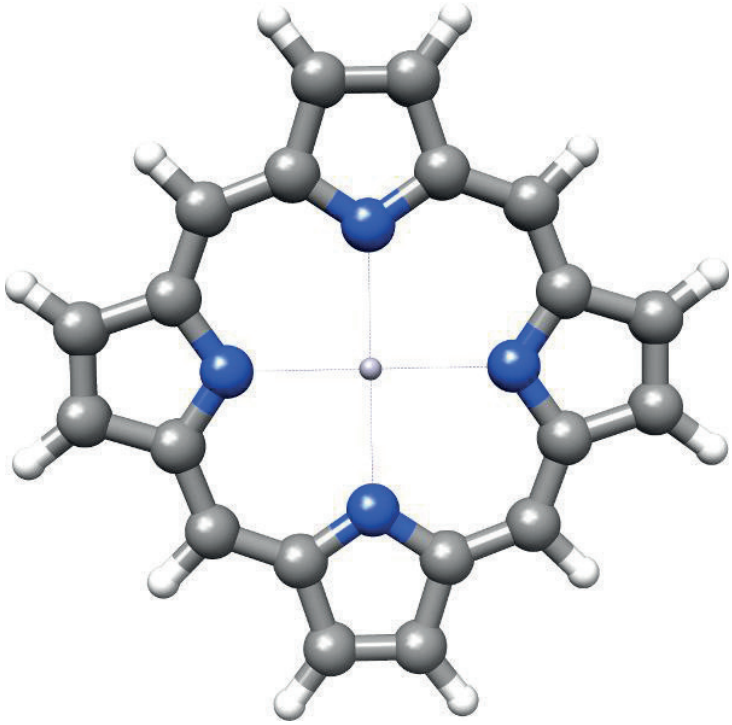
DOC. RNDR. MIROSLAV ILIAŠ, PHD.
SA ZAOBERÁ POČÍTAČOVÝMI SIMULÁCIAMI V OBLASTI TEORETICKEJ CHÉMIE

V kvantovej chémii - prírodovednom a zároveň teoretickom vednom odbore - je prítomná kvantová mechanika i Einsteinova teória relativity. Vďaka rozširujúcim sa výpočtovým kapacitám, združeným i v rámci Slovenskej infraštruktúry pre vysokovýkonné počítanie - SIVVP, dokážeme i na našej Univerzite Mateja Bela v Banskej Bystrici (v rámci alokovaných výpočtových zdrojov - *http://hpcc.umb.sk*, *http://www.sivvp.sk/*) študovať väčšie a väčšie chemické systémy.

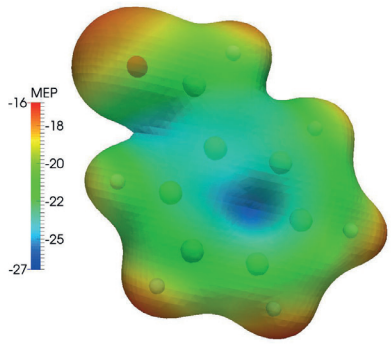
OD „KUCHÁRČINY" KU KVANTOVEJ MECHANIKE

Keď sa povie chémia, čitateľovi prebehnú mysľou stredoškolské laboratóriá (dúfam, že ich súčasní študenti ešte poznajú), iní, viac do praxe orientovaní, si môžu predstaviť chemickú továreň. Pravdou je, že klasickou náplňou chémie je hlavne to „varenie", akým sa vyrábajú rôzne užitočné chemikálie, ako čistiace prostriedky, farbivá, plasty. Lenže v minulom storočí - v našom konkrétnejšom prípade najmä vďaka objavom kvantovej fyziky začiatkom 20. storočia - postúpili chemické vedy značne dopredu. Už nestačilo empiricky popisovať javy typu „zmiešame nejaké chemikálie a reakčnú zmes trocha zohrejeme", ale prešlo sa najskôr v kvalitatívnej a neskôr u i v kvantitatívnej oblasti až na úroveň atómov a molekúl. Výborným nástrojom na popis fyzikálneho mikrosveta chemických prvkov a zlúčenín sa stala kvantová mechanika.

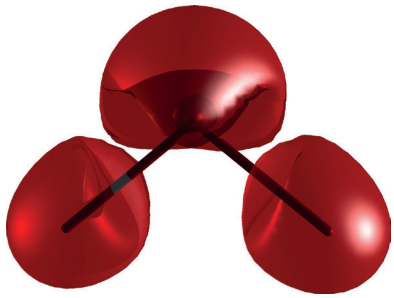
Slávna Schrödingerova rovnica (1925), inak vyučovaná v



Molekula heterocyklickej molekuly porfyrínu s ťažkým atómom ortuti v strede. Aj pre takéhto molekuly dokážeme získať skonvergované relativistické molekulové orbitály.



Molekulový elektrostatický potenciál benzaldehydu, získaný kvantovo-chemickým softvérom DIRAC



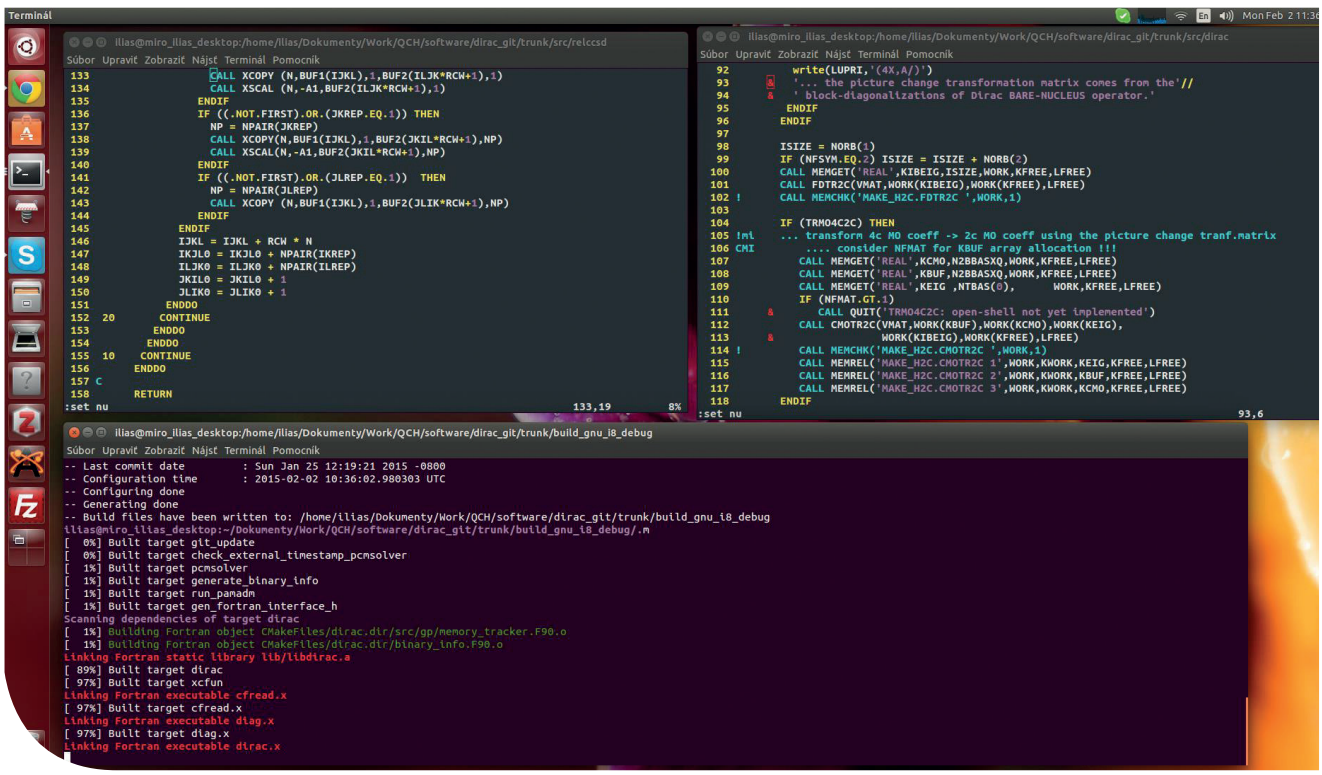
Hustota magnetizovateľnosti molekuly vody, získaná kvantvo-chemickým softvérom DIRAC

rámci základných prednášok fyziky na vysokých školách, otvorila nový, zaujímavý výskumu aj pre chemické vedy. Zjednodušene podané, uvedená rovnica popisuje mikročastice vlnovými funkciami a dáva ich do súvisu s celkovou energiou tohoto systému pomocou tzv. operátora celkovej energie - Hamiltoniánu. Pre kvantovo-chemický popis systému sa jadrá atómov považujú za stacionárne body s počítajú sa vlnové funkcie elektrónov, pohybujúcich sa v elektrostatickom poli jadier (tento prístup sa nazýva Born-Oppenheimerova aproximácia). Schrödingerova rovnica je neoddeliteľnou súčasťou fyziky. Na základných kurzoch sa študenti stretnú s jej analytickými riešeniami pre rôzne učebnicové príklady, napr. harmonický oscilátor, či nabitá častica v nekonečne hlbokej potenciálovej jame. Chemicky zaujímavé a matematicky viac komplikovanejšie je analytické riešenie Schrödingerovej rovnice pre atóm vodíka. Riešenia tejto diferenciálnej rovnice poskytnú vlnové funkcie elektrónu, nazývané aj atómové orbitály, ako aj ich energetické poradie elektrónových stavov. Z rozdielov energií elektrónových hladín možno vypočítať tzv. excitačné energie, čiže energie potrebné k tomu, aby elektrón v atóme „poskočil" na vyššie energetické hladiny. Pri jeho „návrate" na základnú hladinu sa príslušná energia vyžiari v podobe svetelných fotónov, a možno ju odmerať. Ako by sme charakterizovali vlnovú funkcia elektrónu? Je to miesto výskytu elektrónu (všeobecne mikročastice) s najväčšou pravdepodobnosťou. Môžeme si to napríklad predstaviť ako včelí roj. Rôzna „hustota" lietajúcich včielok v závislosti od vzdialenosti od „centra" roja (s kráľovnou sťaby jadrom

atómu) zhruba koreluje s tzv. elektrónovou hustotou. Každá vlnová funkcia (orbitál) atómu vodíka ma svoj špecifický tvar a charakterizujú ju tzv. kvantové čísla. Napr. orbitály typu s sú guľovo symetrické, p majú zhruba tvar činky, na sledujú d, f, o ktorých sa čitatelia môžu dozvedieť z učebníc kvantovej mechaniky.

O MOLEKULOVÝCH ORBITÁLOCH

Reálne chemické systémy majú obvykle viac ako jeden elektrón (najjednoduchšia stabilná molekula vodíka, H_2, má dva elektróny). Analyticky riešiť Schrödingerova rovnicu pre viac ako jeden elektrón u nie je možné. Na pomoc u musia prísť aproximatívne (t.j. približné) metódy. Otcovia - zakladatelia - kvantovej chémie preto vymysleli pre popis mnohoelektrónových systémov teóriu molekulových orbitálov. Molekulový orbitál je vlnovou funkciou pre elektrón v chemickom systéme a obvykle býva obsadený dvoma elektrónni s opačnými spinmi (elektronový spin je ďalšie kvantové číslo, zavedene fyzikom W. Paulim v roku 1924). Teória molekulových orbitálov je stavebným kameňom moderných kvantovo-chemických metód, keďže pomocou nich môžeme dobre vysvetliť chemickú väzbu. Ako sa získavajú molekulové orbitály? V päťdesiatych rokoch 20. storočia sa uviedla do vedeckej komunity tzv. Hartee-Fok-Roothanova metóda, ktorá je aj (počítačovo-programovateľným) algoritmom pre výpočet molekulových orbitálov. Jej výstupom sú molekulové orbitály, ich energie a celková energia počítaného chemického systému. Orbitály sa obsadzujú elektrónmi podľa stúpajúcej energie. A tu stredoškolák, ktorý mal chémiu, si (možno) spomenie na tzv. výstavbový princíp. Je to pravidlo, akým sa obsadzujú elektrónové hladiny prvkov periodickej sústavy. Napríklad hélium ma dva elektróny v 1s orbitále, čo je konfigurácia 1s(2), lítium, majúce o jeden elektrón viac, má zase konfiguráciu 1s(2) 2s(1) atď. Takto možno pokračovať po celej periodickej tabuľke, kde sa postupne obsadzujú elektrónové hladiny typu p, d a f.



TREBA PRIMIEŠAŤ
TEÓRIU RELATIVITY

Ako vývoj v kvantovej chémii pokračoval, ukázalo sa, že dobrý vlnový popis elektrónov nie je iba vecou Schrödingerovej rovnice. Francúzsky fyzik Paul Dirac v tridsiatych rokoch 20. storočia odvodil rovnicu, ktorá lepšie popisuje atóm vodíkového typu ako predchodkyňa - Schrödingerova rovnica. Dirac skĺbil kvantovú mechaniku s teóriou relativity, ktorú - aby boli splnené jej univerzálne postuláty platné aj v mikrosvete - treba aplikovať v kvantovej mechanike. Diracova rovnica je analyticky riešiteľná pre jednoelektrónové systémy vodíkového typu. Jej črtou je, že vlnové funkcie sú stĺpcové vektory so štyrmi komponentami (volajú sa štvor-komponentné spinory), a ďalej spinové kvantové číslo je už priamo zahrnuté v jej riešeniach. V čom spočívajú relativistické efekty, ktoré sa najvýraznejšie prejavujú v ťažkých atómoch (ako napríklad zlato, ortuť, olovo, urán...)? Napríklad pri veľkých rýchlostiach elektrónov pri atómových jadrách ich hmotnosť narastá podľa známeho Einsteinovho vzťahu pre relativistickú hmotnosti častice. Čím rýchlejšie sa častica pohybuje, tým vyššia jej jej hmotnosť. Zároveň dochádza - vďaka relativistickým efektom - aj tvarovo-energetickej modifikácii molekulových orbitálov. Napríklad orbitály typu s sa zvyknú kontrahovať, „scvrkávať", „p-ka" sa vplyvom spinovo-orbitálnych efektov zasa štiepia na tvarovo odlišné p12 a p32. Aplikácia Diracovej rovnice pre mnohoelektrónové systémy na báze molekulových orbitálov sa zvykne nazýva Dirac-Fock-Roothanova metóda. Z nej získané molekulové orbitály lepšie vystihujú elektrónovú štruktúru ťažkých prvkov, a zároveň rovnako dobre popisujú aj ľahké prvky, pri ktorých vystačia metódy nerelativistické.

Pre praktické kvantovo-chemické výpočty platí jednoduché pravidlo: ak máme chemický systém zložený z ľahkých prvkov, vystačíme si s nerelativistickým prístupom; akonáhle sa objavia ťažké prvky, treba použiť zodpovedajúce metódy, zahrňujúce relativistické efekty.

KVANTOVKA
V PRAXI CHEMIKOV

Jedným z najdôležitejších výstupov z kvantovo-chemického výpočtu je celková energia systému. Z rozdielov energií sa dajú získať chemicky zaujímavé údaje. Napríklad rovnovážnu medzijadrovú vzdialenosť molekuly AB. Napočíta sa séria energií v rôznych vzdialenostiach A-B (tzv. potenciálová krivka) a tá medzijadrová vzdialenosť, v ktorej má krivka minimum, rovnovážna vzdialenosť. Chceme disociačnú energiu? Sčítame energie atómov A a B, odpočítame ich od energie molekuly AB v rovnovážnej geometrii. Alebo výpočet ionizačnej energie atómu: vypočítajú sa energie neutrálneho atómu, ako aj ionizovaného atómu (katiónu), a z ich rozdielu sa určí (teoretická) ionizačná energia daného prvku. Vypočítané dáta môžeme porovnávať s experimentálne nameranými hodnotami a na základe toho kalibrovať kvalitu tej-onej teoretickej metódy.

Iný zaujímavý vedecký problém, kde by kvantová chémia mohla prispieť svojou troškou do mlyna, sú tzv. opticky aktívne zlúčeniny. To znamená, že tá istá chemická zlúčenina sa môže vyskytovať (podľa počtu tzv. opticky aktívnych centier) v minimálne dvoch odlišných priestorových konfiguráciách.

Kvantovo-chemické výpočty ukázali, že medzi dvoma stereo-izomérmi existujú nepatrné energetické rozdiely, ktoré sú - zatiaľ - spektroskopickými meraniami nezachytiteľné. No ako ukazujú výpočty so zahrnutím relativistických efektov, pre opticky aktívne zlúčeniny s ťažkými prvkami v molekule sa energetické rozdiely medzi stereo-izomérmi značne zvyšujú.

Doc. RNDr. Miroslav Iliaš, PhD. pôsobí na Katedre chémie Fakulty prírodných vied Univerzity Mateja Bela ako vysokoškolský pedagóg.

Trpezlivým hľadaním (spojeným s príslušnými výpočtami) opticky aktívnych molekúl, ktoré obsahujú ťažké atómy, sa raz nájde stabilná chemická zlúčenina, u ktorej by bolo možné experimentálne rozlíšiť obidva opticky aktívne stereo-izoméry.

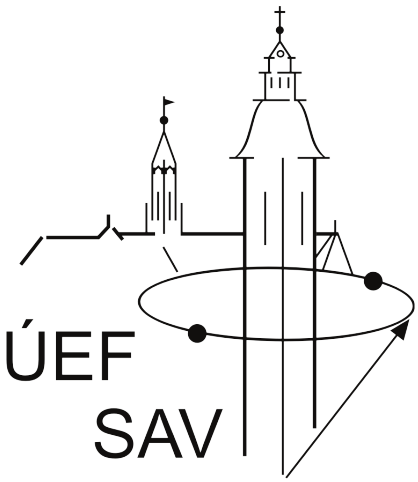
Pre výber kvantovo-chemickej metódy zhruba platí, že čím je metóda dokonalejšia, teda aj presnejšia, tým je aj výpočtovo náročnejšia. Tie z „presnejších" zahrňujú aj tzv. elektrónovú koreláciu, o ktorej spomínaná Fok-Roothanova metóda neuvažuje. Daň, ktorú platíme za metodickú rigoróznosť, je vyššia výpočtová náročnosť. Ale s tým s týmto problémom lepšie a lepšie zápasia zvyšujúce sa výpočtové kapacity.

Ako vyzerá moderná kvantová chémia? Pre začiatok záujemcom, nadšeným študentom, ukážeme, ako pracujú často používané kvantovo-chemické programy. Obrázky farebných a tvarovo pestrých molekulových orbitálov chemických systémov potešia nejedno vedychtivé oko. Srdce programovania-chtivých mladých ľudí zrejme poteší farebne zvýraznený a učesaný zdrojový kód (písaného prevažne v jazyku FORTRAN), a fungujúceho hlavne v prostredí operačného systému Linux. (Aby sme nekrivdili, aj Windows a iné operačné systémy dokážu hosťovať niektoré programy.)

A v čom je výhoda tohoto teoretického odboru? Mnohokrát je namáhavé (a zdraviu i životnému prostrediu škodlivé), a vecne i nemožné získavať experimentálne údaje z fyzikálno-chemických experimentov. Preto vyváženou, navyše i ekologicky čistou a zdravotne nezávadnou alternatívou k získavaniu poznatkov je (počítačovo-)teoretický prístup. Niekedy je lepšie namiesto náročných experimentov dávať „zabrať" počítačovému hardvéru a simulovať elektrónovú štruktúru. Pri správnom zvolení výpočtovej metódy možno získať celkom dôveryhodný teoretický údaj porovnateľný s experimentálne určenou veličinou. Samozrejme, že každá kvantovo-chemická metóda má svoje plusy a mínusy. Ale to u patrí ku kráse tejto (i každej podobnej) teoretickej vednej disciplíny - hľadať, skúmať a ďalej posúvať hranice výpočtových možností. Verte, milí čitatelia, že tie postupujú dopredu - ruka v ruke s rozvojom počítačov — veľkými krokmi. Priestor na bádanie je takmer nekonečný – rôznorodých molekúl ako „kandidátov" pre kvantovo-chemické skúmanie je takmer nevyčerpateľné. Podobne je to i s pribúdajúcimi nápadmi na vylepšovanie jednak teoretickej podstaty, jednak aj samotného naprogramovania kvantovo-chemických metód.

IMM2
12 - SIVVP

KOŠICE
ÚSTAV EXPERIMENTÁLNEJ FYZIKY SAV



ÚEF SAV SIVVP klaster v Košiciach

Viktor Kočan

ÚEF SAV /Ústav experimentálnej fyziky Slovenskej akadémie vied/ SIVVP klaster pozostáva z 2 rackov, ktoré sú chladené bočnými chladiacimi jednotkami umiestnenými medzi rackmi. Princíp chladenia spočíva v nasávaní teplého vzduchu zo zadnej časti, ktorý bol vyprodukovaný servermi. Následne sa vo výmenníku ochladzuje a z prednej časti ventilátormi vyfukuje. Servermi je tento studený vzduch nasávaný z predu, prechádza cez všetky komponenty a odoberá z nich teplo. Teplý vzduch vychádza zo zadnej časti serverov a je opätovne nasávaný bočnými chladiacimi jednotkami.

Technické parametre klimatizačného systému:

Vonkajšie klimatizačné jednotky:	2ks
Počet ventilátorov / na jednotku:	2
Spotreba / na ventilator:	0,64 kW
Vnútorné /bočné/ jednotky:	2ks
Počet ventilátorov / na jednotku:	5
Chladiaci výkon / na jednotku:	22 kW
Spotreba / na jednotku:	7,6 kW
Prietok vzduchu / na jednotku:	4300 m^3/hodinu

Samotný klaster sa skladá zo záložného zdroja (UPS), do ktorého sú pripojené management nódy (1 a 2) a storage nódy (1 a 2). Výpočtové nódy spolu s management a storage nódmi sú medzi sebou prepojené 40Gbit infiniband switchmi, ktoré slúžia na vysokorýchlostný prenos dát. Zároveň sú všetky tieto komponenty pripojené ďalším rozhraním do manažovacej 1 Gbit siete.

Technická špecifikácia klastra:

UPS APC 5000:	1x
IB switch Qlogic 36 port 40Gb:	2x
Blade switch 48 port 1Gb:	2x
Výpočtový nód IBM dx360M3:	30x
Výpočtový nód s GPU IBM dx360M3 /nvidia Tesla M7020:	16x
Výpočtový nód s GPU IBM dx360M4 /nvidia Tesla K20:	10x
Management nód IBM x3650	2x
Storage nód IBM x3650:	2x
Externá rozšírovacia jednotka EXP 3512:	3x
Licenčný server IBM x3550	1x

Ing. Viktor Kočan pôsobí ako vedúci oddelenia CITKE (Centrum SAV pre informačné a komunikačné technológie v Košiciach).

Výpočtová špecifikácia klastra:

Počet výpočtových jadier bez GPU:	360
Počet výpočtových jadier s GPU:	352
Pamäť na výpočtové jadro:	4 GB
ECC pamäť grafického výpočtového akcelerátora:	6 GB
Kapacita externého úložiska:	96 TB

Klaster obsahuje 48 TB diskového zdieľaného priestoru a to pomocou NFS (Network File System) a EOS (*http://eos.cern.ch/*)technológii vyvíjanej v CERN. Klaster používa authentifikačný systém FreeIPA (*https://www.freeipa.org*) s technológiamy Kerberos a LDAP. Na distribúciu úloh je použitý dávkovací systém SLURM (*http://slurm.schedmd.com/*).

Na klastri je nainštalovaný operačný systém **Scientific Linux 6** a štandardné balíky:

- OpenMP
- OpenMPI
- OpenCL
- CUDA

Výkonnosť klastra sa zlepšila nákupom komerčných kompilátorov od firiem Intel a PGI: *https://software.intel.com/en-us/intel-compilers* a *http://www.pgroup.com/*

Hodnota klastra bola navýšená aj inštaláciou komerčných softvérových produktov, ktoré sa nakúpili z iných štrukturálnych fondov (ITMS 26210120012), pričom sa licencovanie týchto produktov zabezpečilo celoplošne pre Ústav experimentálnej fyziky SAV v Košiciach.

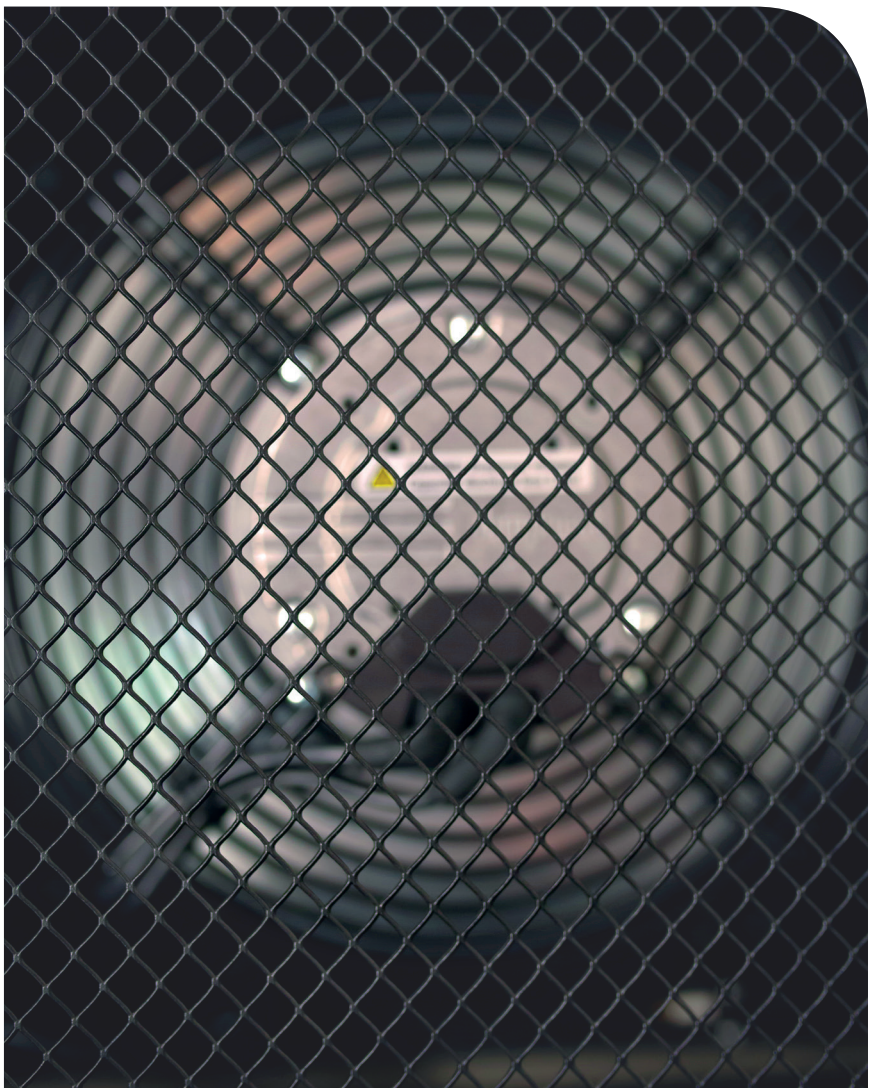
Ide o softvérové produkty:

- GAUSSIAN *http://www.gaussian.com/*
- TeraChem *http://www.petachem.com/products.html*
- ACEMD *https://www.acellera.com/products/molecular-dynamics-software-GPU-acemd/*

Prvé dva programy umožňujú kvantovo-chemické výpočty molekulárnej a elektrónovej štruktúry komplexných

systémov. Program ACEMD umožňuje výpočty molekulárnej dynamiky. Zaujímavosťou a unikátnosťou TeraChem a ACEMD je najmä to, že ide o jedinečné GPGPU programy, ktoré boli písané priamo pre NVIDIA cuda karty, čo umožňuje extrémné zvýšenie časovej efektívnosti výpočtov v porovnaní s využitím len štandarných procesorov.

Okrem týchto komerčných programov na klastri sú dostupné aj ďalšie programy z oblasti molekulárneho modelovania, napríklad program NAMD (*http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/*) či programy ESPRESSO (*http://espressomd.org*, *http://www.espresso-pp.de*), ktoré umožňujú simulácie veľkých, biologicky významných molekulárnych systémov, akými sú nukleové kyseliny, proteíny a ich komplexy. V súčasnosti prebiehajú aj inštalácie a testovanie najnovších "state-of-the-art" coarse-grained simulačných systémov, ktoré umožnia simulácie biomakromolekúl, nanočastích a ich intermolekulárnych komplexov.

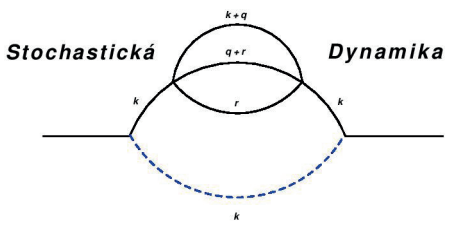


Využitie klastra v oblasti teoretickej fyziky

Neodmysliteľnou súčasťou moderného teoretického výskumu v oblasti fyziky je využitie symbolických a numerických algoritmov prostredníctvom výkonnej výpočtovej techniky. Mnohé jemné efekty, ktoré je možné v súčasnosti merať, ako aj čoraz precíznejšia experimentálna technika, umožňujúca merať reprezentatívne veličiny a riadiace parametre z rôznych oblasti fyziky s vysokou presnosťou, vyžadujú výpočty realizované vo vyšších radoch vybranej poruchovej schémy. Tieto výpočty je možné uskutočniť len s využitím robustnej výpočtovej techniky typu grid a clouds využívajúcich algoritmy paralelného programovania. K úlohám, kde sú výpočty úplne závislé na využití paralelného programovania, patrí výskum perkolačných procesov, chemických reakcií, správanie sa hélia v okolí bodu fázového prechodu do supratekutého stavu ako aj skúmanie vplyvu hydrodynamických fluktuácií na uvedené javy.

Pre výpočet kritických indexov určujúcich škálovacie správanie sa mnohých reprezentatívnych veličín (hustoty interagujúcich agentov, viskozity a pod.) je potrebný výpočet viacslučkových Feynmanových integrálov, ktoré sú grafickým vyjadrením viacnásobných integ-

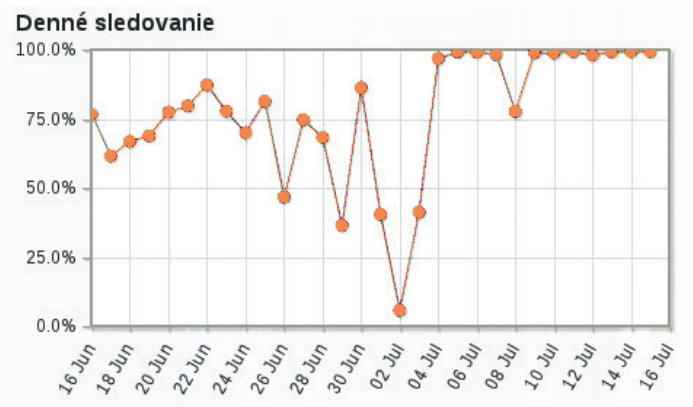
rálov. Na ich výpočet sme použili klastre projektu SIVVP. Na danej etape máme rozpracované algoritmy pre výpočet trojslučkových Feynmanových grafov. Konkrétne, zatiaľ bolo spočítaných 150 takýchto grafov so zadanou presnosťou. Použitie klastra na ÚEF SAV umožnilo rádovo skrátiť výpočtový čas, oproti času, ktorý bol potrebný pri použití bežných počítačov.



OBRÁZOK 1:
Schéma trojslučkového Feynmanového grafu

Výpočty prebiehajú aj v súčasnosti. V najbližšej, ale aj vzdialenejšej budúcnosti chceme aj naďalej využívať možnosti klastra, keďže počet úloh z oblasti teoretickej fyziky, na riešenie ktorých je nevyhnutné využitie moderných výkonných počítačových architektúr, neustále rastie.

Na výpočet Feynmanových diagramov bol použitý vlastne implementovaný program Numcal (*https://gitlab.saske.sk/saske-theor/numcal/*). Numcal obsahuje generátor integrandov získaných použitím Nickelovych indexov.

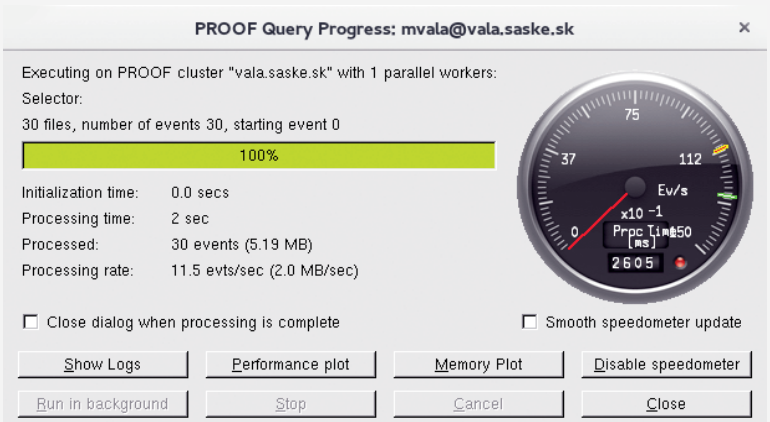


OBRÁZOK 2:
Využite SIVVP klastra

Použitím balíka GiNaC (*http://www.ginac.de/*) Numcal prekonvertuje integrand do jazyka C++ a ten je následne pomocou balíka Cuba (*http://www.feynarts.de/cuba/*)

RNDr. Martin Vaľa, PhD. pôsobí ako vedecký pracovník na Ústave experimentálnej fyziky SAV v Košiciach.

použití na výpočet integrálu (jeden príspevok do Greenovej funkcie). Dĺžka úlohy, výpočet jedného integrálu, trvá približne 20 minút. Pre výpočet dostatočne presnej hodnoty Feynmanovho grafu je potrebné tento 20 minútový výpočet opakovať pre rôzne inicializačné hodnoty generátora náhodných čísel (seed-ov). Na SIVVP klastroch bolo vypočítaných viac ako 500 000 takých to úloh. Na jednom počítači by tento výpočet trval viac než 19 rokov, avšak nám reálne trval okolo 11 dní. Využite SIVVP klastra je zobrazené na obrázku 2. S narástajúcim počtom úloh je potrebné tieto výsledky rýchlo a efektívne spracovať. Numcal obsahuje analyzačný program NcAnalysis, ktorý využíva prostredie ROOT. ROOT je veľmi známy v HEP (High Energy Physics) komunite a je hlavným analyzačným nástrojom v CERN-ovských experimentoch. Obrázok 3 zobrazuje informácie

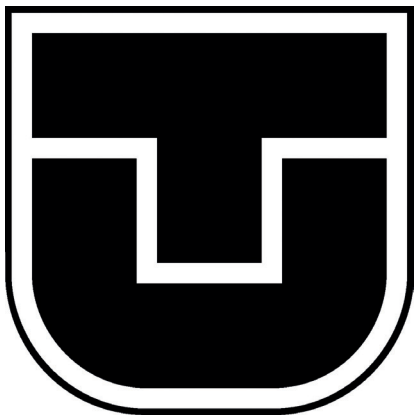


OBRÁZOK 3: Zobrazenie výpočtu 30-tich častí jedného z 150 Feynmanových diagramov

o procese analýzy. Na danom obrázku je vidieť výpočet 30-tich častí jedného z 150 Feynmanových diagramov, kde každá časť obsahuje približne 10 tisíc hodnôt (1 úloha na klastri jedna hodnota). Z obrázka je vidieť, že analýza daného počtu čísel je rádovo v sekundách.

KOŠICE
TECHNICKÁ UNIVERZITA

PROJEKT SIVVP na TUKE



Milan Šujanský

01 Ciele projektu

Cieľom projektu SIVVP je vybudovanie základne vo forme vysokovýkonných výpočtových systémoch (hardvér a softvér) pre podporu vedy a výskumu na Slovensku. Technická univerzita v Košiciach (TUKE) je do projektu SIVVP zapojená ako jeden z partnerov projektu. Riešiteľské pracovisko projektu je VS SAV Bratislava (zodp. riešiteľ Ing. Tomáš Lacko). Finančné krytie projektu je zo štrukturálnych fondov Európskej únie s možnosťou nákupu hardvéru a softvéru:

Názov projektu:	Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie (SIVVP)
Prioritná os:	1. Infraštruktúra výskumu a vývoja
Opatrenie:	1.1 Obnova a budovanie technickej infraštruktúry výskumu a vývoja
ITMS kód:	26210120002

02 Hardvérové prostriedky zakúpené na TUKE

K výpočtom sú k dispozícií nasledovné druhy výpočtových uzlov:

A. Výpočtový uzol IBM Blade System x HS22 (v ďalšom H22) o konfigurácii:

dva šesťjadrové procesory Intel Xeon L5640 (2.27GHz), operačná pamäť 48GB, lokálny diskový priestor 500GB.

B. Výpočtový uzol uzol IBM Blade System x HS23 (v ďalšom H23) o konfigurácii:

dva osemjadrové procesory Intel Xeon E5-2650 (2.60GHz), 64GB RAM, lokálny diskový priestor 500GB, operačný systém: Scientific Linux 6.

C. 3 ks výpočtové uzly s GPU akcelerátormi (popis v ďalšom).

Výpočtové uzly sú k dispozícií vo forme dvoch vetiev:

1. Vetva HPC klastra

Je určená na výpočty v dávkovom režime. Výpočtové uzly sú prepojené vysokorýchlostnou sieťou Infiniband s kapacitou 40Gb/s. Výpočtové uzly klastra sú spravované dávkovým systémom Torque s plánovačom Moab. Klaster pozostáva z:

» 21 ks výpočtových uzlov H22, operačný systém Scientific Linux 6

» 2 ks výpočtových uzlov IBM iDataPlex dx360 M3 o konfigurácii:

- dva šesťjadrové procesory Intel Xeon L5640 (2.27GHz), operačná pamäť 24GB, lokálny diskový priestor 2x500GB, kde každý výpočtových uzlov je doplnený jedným GPU akcelerátorom Nvidia Tesla M2070 – 6GB RAM, 448 CUDA jadier, operačný systém Scientific Linux 6

» 1 ks výpočtový uzol IBM iDataPlex dx360 M4 o konfigurácii:

- dva osemjadrové procesory Intel Xeon E5-2650 (2.60GHz), operačná pamäť 64GB, lokálny diskový priestor 2x500GB, kde každý procesor je rozšírený o GPU akcelerátor Nvidia Tesla K20m – 5GB RAM, 2496 CUDA jadier, operačný systém Scientific Linux 6

2. Vetva CLOUD

Výpočtové uzly sú prepojené sieťou typu Ethernet s kapacitou 10Gb/s.Vetva je určená pre výpočty realizované v rôznych prostrediach operačných systémov včítane možnosti interaktívneho vzdialeného prístupu. Vetva pozostáva z:

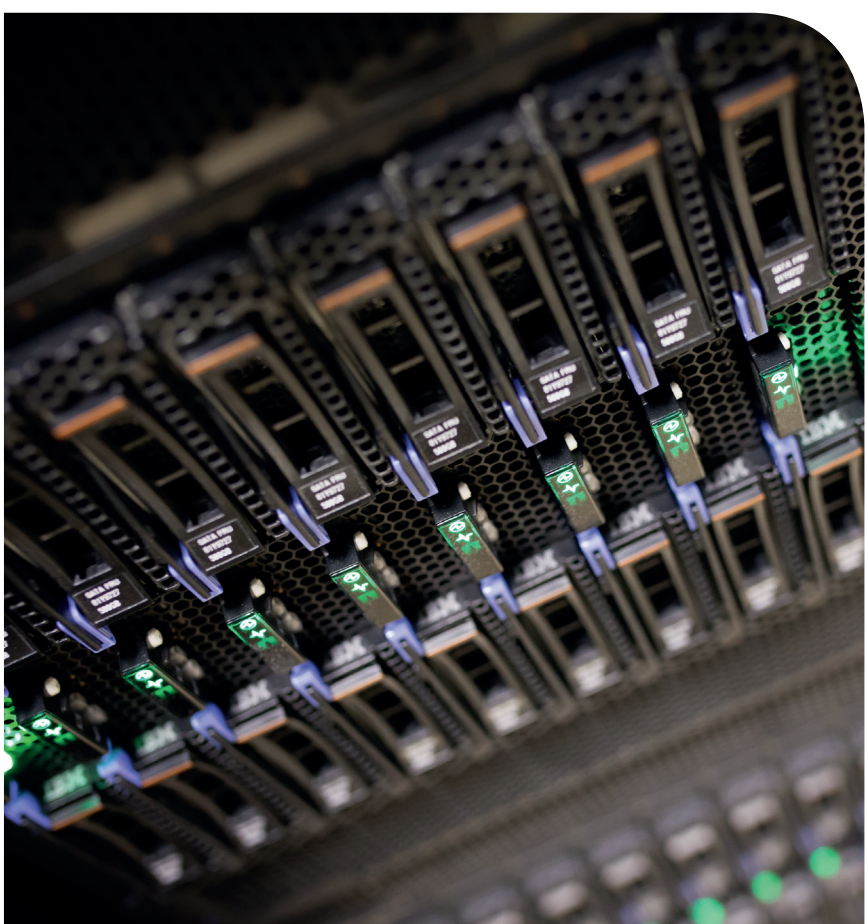
» 3 ks výpočtových uzlov H22

» 19 ks výpočtových uzlov H23

K výpočtom je k dispozícii úložný priestor:

Kapacita externého úložiska dát: 48TB

Technické prostriedky sú uložené v dvoch stojanoch, čo je dokumentované fotografiami.



03 Softvérové prostriedky zakúpené na TUKE

V rámci projektu SIVVP je venovaná značná pozornosť aplikačnému softvérovému zabezpečeniu (SW).

Celkove je možné SW rozdeliť do nasledovných skupín:

- komerčný SW zakúpený zo zdrojov projektu SIVVP
- komerčný vlastný SW
- voľný SW
- vlastný SW

Komerčný softvér zakupovaný v rámci projektu SIVVP je rozdelený do nasledovných skupín:

- Systémový SW:
  - Kompilátory jazyka Fortran /C++
  - MOAB
  - VMware vCloud Standard Suite
- Technický SW:
  - Welding solution (SYSWELD-zváranie, tepelné spracovanie)
  - PAM-STAMP 2GSTU – tvárnenie
  - ProCAST – zlievanie
  - ABAQUS
  - Matlab
  - Comsol
  - ANSYS
  - Matematica
  - EPLAN
- Prírodovedný SW:
  - TURBOMOLE
  - Gaussian 09 + LINDA
  - Molcas
  - Molca

- Columbus
- Orca
- MOLPRO
- LABVIEW
- ADF

V porovnaní so zahraničnými analogickými strediskami ponuka aplikačného SW nie je rozsiahla. Obmedzením boli finančné limity, pri prieskume využitia boli požiadavky 2,5 x väčšie ako boli finančné možnosti. Je predpoklad z hľadiska budúcnosti jeho ďalšie rozširovanie.

Na TUKE je zakúpený a už inštalovaný nasledovný SW:

- **ANSYS** - sada softvérových nástrojov na návrh, analýzu a optimalizáciu z rôznych inžinierskych oblastí:
  - štrukturálne a termodynamické analýzy (Ansys Mechanical)
  - prúdenie (Fluent, CFX)
  - elektromagnetizmus (Maxwell, HFSS)
- **Vývojové nástroje:**
  - Intel Parallel Studio XE Composer Edition 2015
  - PGI Accelerator Fortran/C/C++ s podporou pre použitie GPU akcelerátorov
  - OpenMPI - A High Performance Message Passing Library
  - PETSc - Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation
  - ďalšie nástroje dostupné v rámci operačného systému Scientific Linux 6

Vo fáze nákupu je SW, z ktorého na TUKE bude inštalovaný nasledovný SW:

- ANSYS – rozšírenie licencií a modulov
- PAM STAMP
- ABAQUS
- EPLAN
- MATLAB - čiastočne
- VMware vCloud Standard Suite

Je potrebné poznamenať, že nákup niektorých SW bol nemožný, nakoľko licenčné podmienky daného výrobcu SW sú v protiklade s podmienkami danými opisom projektu. Napr. obmedzenia v skladbe používateľských organizácií, trvalosť licencií a pod. Z uvedeného dôvodu napr. systém MENTOR GRAPHICS bol vylúčený z nákupu v rámci projektu SIVVP (bol zakúpený z financií FEI, pre ktorú je k dispozícií).

04 Prínosy v oblasti vedecko-technických výpočtov na TUKE

Pri nákupe aplikačného SW bola dodržaná zásada, že pred vlastnou kúpou bol SW odskúšaný na danej HW platforme. Už pri týchto skúškach a pri počiatočnom využívaní systému ANSYS sa potvrdila oprávnenosť projektu SIVVP. Boli riešené rôzne typy úloh. Podstatné skrátenie výpočtov sa prejavilo najmä pri riešení technických systémov s rozloženými parametrami.

Už zakúpený programový systém ANSYS bol používaný napr. v rámci nasledovných projektov:

VEGA 1/0121/15:
Elektrický pohon s vysokofrekvenčným dvojfázovým asynchrónnym motorom

VEGA 1/0464/15:
Výskum nových princípov a metód pre návrh elektrotechnických systémov

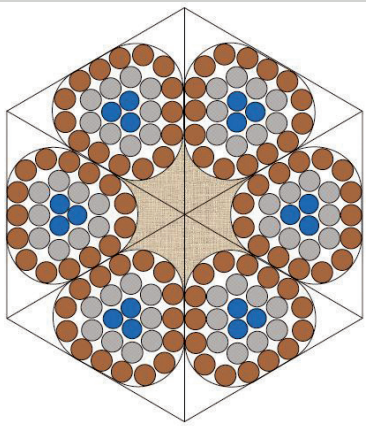
Bilaterálny projekt:
Multifyzikálne výpočty v elektrických pohonoch SK-CZ2013-0065

KEGA 011TUKE-4/2013:
E-MLAB súbor originálnych laboratórnych pracovísk pre podporu a rozšírenie možností výskumno-výučbových laboratórií v odbore Mechatronika

APVV-0138-10:
Výskum a vývoj pohonov malého výkonu s dvojfázovými motormi

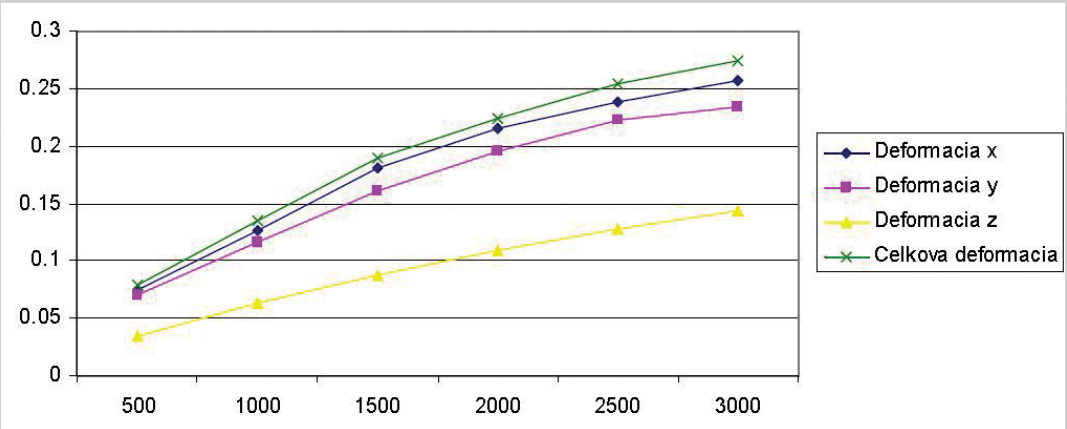
Náročnosť niektorých výpočtov potvrdzuje aj to, že jeden beh výpočtu trval aj niekoľko dní.

Výhodnosť paralelných výpočtov potvrdila tiež úloha z oblasti výpočtu pevnosti lán. Jednalo sa o výpočet lana s trojuholníkovým prierezom zobrazenoho na obrázku 1.



OBRÁZOK 1: Schematická štruktúra lana s trojuholníkovým prierezom

Fragment výsledkov dokumentuje obrázok 2, kde je priebeh deformácie výpočtovej vzorky oceľového lana v závislosti na zaťažení. Výpočet na klasickej technike trval 7 dní, v



OBRÁZOK 2: Priebeh deformácie výpočtovej vzorky oceľového lana v závislosti na zaťažení

paralelnom prostredí klástra doba výpočtu sa skrátila na necelé 3 hod. Autormi výpočtu sú: Gabriel Fedorko, Eva Stanová, Vieroslav Molnár, Nikoleta Husáková.

05 Vysokovýkonné počítanie na vysokých školách a SAV z pohľadu budúcnosti

Projekt SIVVP končí v roku 2015. Vzniká otázka, čo ďalej

v oblasti zabezpečenia vedecko-technických výpočtov? Táto otázka je časťou z celkového problému ako ďalej s IKT na vysokých školách a SAV do roku 2020 a čo je ešte podstatnejšie po roku 2020. Vzhľadom na uvedené časové rozsahy problematika zasahuje do tzv. strategického plánovania.

Konkretizujme niektoré problémy z oblasti vedecko-technických výpočtov vo väzbe na udržateľnosť a ďalší rozvoj výsledkov projektu SIVVP s cieľom zabezpečenia vedecko-technických výpočtov ako služby pre výskum.

1. Finančné náklady na inovácie hardvéru a jeho ďalšieho rozvoja

Pri nadobúdacej cene hardvéru z projektu SIVVP cca 21.5 mil EUR a pri morálnom zastaraní niekedy v rokoch 2017 až 2018 bude potreba cca 15 mil EUR na inováciu. Pri zohľadnení ďalšieho rozvoja počítajme aspoň s celkovou sumou 20 mil EUR. V tomto období ešte je možné počítať s finančnými zdrojmi z EU. Po 2020 roku inováciu a ďalší rozvoj sa bude musieť zabezpečovať z vlastných zdrojov.

2. Finančné náklady na inovácie softvéru a nákup ďalších softvérových balíkov

Pokiaľ ročné udržiavacie poplatky budeme predpokladať 15% z celkovej nákupnej ceny softvéru v hodnote 2,2 mil EUR bude tých 15% predstavovať sumu cca 330 000.- EUR. Do nákupu ďalších programových balíkov by bolo vhodné v ďalších rokoch investovať aspoň 1.5 mil EUR. Pri prieskume potreby aplikačného softvéru požiadavky boli cca 2,5 násobne vyššie ako boli finančné možnosti. Stojí za porovnanie počet programových balíkov zakúpených v rámci projektu SIVVP – cca 20 so súčasným počtom poskytovaných aplikačných programových balíkov MetaCentrom v Českej republike – cca 200.

3. Finančné náklady na prevádzku

Finančné náklady na prevádzku v rámci projektu SIVVP sa zaviazali jednotliví partneri hradiť z vlastných zdrojov, pričom výsledky projektu (hardvér a softvér) majú právo využívať všetky vysoké školy a nekomerčné výskumné inštitúcie. Aby poskytovatelia vedecko-technických výpočtov ako služby pre výskum udržali na patričnej úrovni, bolo by vhodné, aby tieto aktivity boli aspoň čiastočne hradené aj z rozpočtových prostriedkov, napr. aspoň náklady na energiu a organizačné

zabezpečenie poskytovania služby v oblasti IKT.

Pre podporu už existujúcej a v dnešných dňoch rozširovanej infraštruktúry pre vysokovýkonné počítanie je po odbornom odhade potrebných na pokrytie nákladov na spotrebu elektrickej energie približne 127 tisíc EUR pre univerzity a 767 tisíc EUR pre SAV.

4. Zabezpečenie finančných zdrojov

Vzhľadom na finančnú náročnosť nie je reálne, aby finančné zabezpečenie bolo len z jedného zdroja. V ďalšom sú načrtnuté niektoré možnosti:

a) Štrukturálne fondy. Tieto sú reálne do roku 2020. Bolo by vhodné, aby sa pre nasledovné roky znovu pripravil projekt národného charakteru, ktorý by nadväzoval na projekt SIVVP.

b) Rozpočtové zdroje. Ako už bolo uvedené, bolo by vhodné, aby niektoré aktivity boli aspoň čiastočne hradené aj z rozpočtových prostriedkov, napr. aspoň náklady na energiu a organizačné zabezpečenie poskytovania služby v oblasti IKT.

c) Návratnosť investícií vložených do výskumu. Tento ukazovateľ u nás nie je moc zverejňovaný, ale vzhľadom na súčasný finančný stav v oblasti finančného zabezpečenia výskumu by mu bolo vhodné venovať viacej pozornosti. Asi by bolo vhodné uprednostňovať projekty s preukázateľnou návratnosťou investícií s prípadnými ďalšími organizačnými zmenami (príprava projektov, priebežná kontrola riešenia, integrácia do rozsiahlejších projektov,...) zabezpečujúcimi kladný výskumný výsledok. Dôležitou súčasťou je problematika duševného vlastníctva, kde mnohokrát sa mýlia majetkové a autorské vzťahy.

d) Spresnenie podmienok používania produktov napr. projektu SIVVP pre komerčné účely, kde by mala byť konkretizovaná možnosť úhrady niektorých prevádzkových nákladov z komerčnej aktivity.

5. Využitie vnútorných zdrojov

Mnohé programové balíky resp. moduly by bolo možné vytvárať v rámci napr. vysokoškolského prostredia, kde sa nachádza značný kvalifikovaný ľudský potenciál. Ďalšie

zdroje sú napr. na vysokých školách, kde existujú informatické odbory vo forme študentskej programátorskej kapacity.

V mnohých prípadoch sú títo študenti vyhľadávaní firmami vo forme lacnej pracovnej sily. Do tejto časti je možné zaradiť aj podporu zo strany ministerstva vo forme tzv. rozvojových projektov. Mnohé moduly v aplikačnom SW zakupovanom v rámci projektu SIVVP sú konečnými produktmi výskumu na univerzitách, čím vzniká aplikácia výskumných produktov do praxe a zároveň to predstavuje určitú návratnosť finančných prostriedkov vložených do výskumu. Dôležitým prvkom je tiež zainteresovanie pracovníkov na využívaní moderných výpočtových systémoch v hodnotiacich osobných kritériách.

Projekt SIVVP končí v roku 2015. Vzniká otázka, čo ďalej v oblasti zabezpečenia vedecko-technických výpočtov? Táto otázka je časťou z celkového problému ako ďalej s IKT na vysokých školách a SAV do roku 2020 a čo je ešte podstatnejšie po roku 2020.

6. Organizačné zabezpečenie

Zabezpečenie vedecko-technických výpočtov ako službu vo výskume po organizačnej stránke presahuje úroveň jednotlivých škôl. Uvedené si vyžaduje riešenie na národnej úrovni ako je tomu napr. v Čechách (*https://metavo.metacentrum.cz*).

DOC. ING. MILAN ŠUJANSKÝ, CSC. PÔSOBÍ NA TECHNICKEJ UNIVERZITE V KOŠICIACH AKO VYSOKOŠKOLSKÝ PEDAGÓG

02

PRACE

NORWAY
FINLAND
SWEDEN
UNITED KINGDOM
IRELAND
DENMARK
THE NETHERLANDS
GERMANY
POLAND
BELGIUM
CZECH REPUBLIC
AUSTRIA
SLOVAKIA
SWITZERLAND
HUNGARY
SLOVENIA
FRANCE
ITALY
PORTUGAL
BULGARIA
SPAIN
GREECE
TURKEY
CYPRUS
ISRAEL

SLOVENSKÁ REPUBLIKA UŽ rok V PRACE

Jozef Noga

16. **októbra** uplynul práve jeden rok od prijatia Výpočtového strediska SAV do organizácie paneurópskeho významu s názvom PRACE. VS SAV v nej zastupuje Slovenskú republiku. Za skráteným názvom **PRACE** sa skrýva Partnerstvo pre pokročilé počítanie v Európe (Partnership for Advanced Computing in Europe), ktorého cieľom je umožniť vysokovýkonné vedecké výpočty (High performance computing, HPC) na infraštruktúre najvyššej úrovne (TIER-0) pre široký okruh vedcov zo všetkých členských krajín organizácie. Medzi zakladateľov PRACE sa radia štyri členské štáty s najväčším HPC potenciálom - Francúzsko, Nemecko, Taliansko a Španielsko, ktoré začali presadzovať myšlienku užšej spolupráce v oblasti HPC už pred viac ako desiatimi rokmi. Koncom prvej dekády tohto storočia získava táto myšlienka i podporu Európskej komisie (EC). Pôvodne sa uvažovalo o PRACE v rámci Konzorcia európskej výskumnej infraštruktúry (European Research Infrastructure Consortium, ERIC), ako najvhodnejšej formy pre legálnu entitu zodpovednú za riadenie infraštruktúry vysokovýkonného počítania v EU. Vzhľadom na plánovaný časový rámec a neexistenciu funkčných orgánov ERIC, bola entita PRACE založená alternatívne rozhodnutím Správnej rady PRACE zo 14. júla 2009 v Lisabone. Neskôr, uznesením zo dňa 15. februára 2010 sa rozhodlo o zaregistrovaní PRACE ako medzinárodnej neziskovej organizácie (PRACE AISBL, association internationale sans but lucrative) so sídlom v Bruseli. 23. apríla 2010 bola táto organizácia oficiálne založená a odvtedy sa datuje jej činnosť. V prvej fáze bolo do PRACE zapojených 21 krajín, dnes tvorí PRACE 25 členských štátov (Belgicko, Bulharsko, Cyprus, Česká republika, Dánsko, Fínsko, Francúzsko, Grécko, Holansko, Írsko, Izrael, Maďarsko, Nemecko, Nórsko, Poľsko, Portugalsko, Rakúsko, Slovensko, Slovinsko, Španielsko, Švédsko, Švaj-

čiarsko, Taliansko, Turecko a Veľká Británia), pričom každý členský štát zastupuje jedna inštitúcia, ktorá je koordinátorom HPC v danej krajine. VS SAV táto úloha pripadla vďaka rozvoju HPC infraštruktúry v ostatných rokoch, podporenej národným projektom „Slovenská infraštruktúra pre vysokovýkonné počítanie" (OPVaV/NP/1/2010 a OPVaV/NP/2/2010).

Misia PRACE spočíva v umožňovaní špičkových výstupov s vysokým impaktom vo všetkých oblastiach výskumu a vývoja a tým v posilňovaní európskej konkurencieschopnosti. PRACE toto poslanie realizuje cez výberové poskytovanie zdrojov vysokovýkonného počítania a spravovania dát na najvyššej svetovej úrovni na základe prehľadného hodnotiaceho procesu. PRACE sa súčasne zasadzuje o zlepšovanie energetickej účinnosti výpočtových systémov ako i redukciu ich negatívnych enviromentálnych dopadov.

V práve sa končiacej prvej fáze fungovania PRACE boli pre spomenuté ciele poskytnuté výpočtové systémy BSC (Barcelona Supercomputing Center) v Španielsku, CINECA v Taliansku, GCS (Gauss Center for Supercomputing) v Nemecku, a GENCI (Grand Equipement National de Calcul Intensif) vo Francúzsku. Tieto inštitúcie sa zaviazali poskytnúť investície a výpočtový výkon v objeme 400 miliónov €. V súlade s potrebami vedeckých komunít, je HPC infraštruktúra alokovaná pre PRACE pravidelne obnovovaná tak, aby zodpovedala svetovej špičke technologického pokroku.

V prvých jedenástich výzvach na predkladanie projektov bolo poskytnutých zhruba 6 miliárd core hodín výpočtového času. Výpočtový čas prideľuje vedecká hodnotiaca komisia (SSC) na základe vyjadrení posudzovateľov. O náročnosti, ale i serióznosti výberového procesu svedčí miera úspešnosti,

Prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc. pôsobí ako vysokoškolský pedagóg na Prírodovedeckej fakulte UK v BA i ako vedúci vedecký pracovník na Ústave anorganickej chémie SAV. Je členom Učenej spoločnosti SAV, v súčasnosti jej predseda. Ako delegát SR v Rade PRACE AISBL zastupuje členskú organizáciu Výpočtové stredisko SAV.

ktorá v posledných výzvach dosahuje zhruba 20%.

Správa SSC konštatuje, že výsledky podporených zhruba 400 projektov sú vysoko kvalitné a impresívne. Neustále zlepšovanie numerických algoritmov a nástrojov počítačového modelovania, ako aj permanentne rastúci počítačový výkon prístupný pre vedecké analýzy, umožňuje bezprecedentné štúdie od nanotechnológií a nových materiálov až po letecký dizajn, či základný výskum zrodu galaxií. Simulácie a analýzy rozsiahlych súborov dát, ktoré sú závislé od dostupnosti HPC, umožňujú ľudstvu odpovedať na roky nezodpovedané otázky fyziky a posilňujú našu schopnosť navrhovať lepšie materiály, syntetizovať nové liečivá a riešiť i také spoločenské problémy ako sú zdravie a klimatické zmeny.

Vzhľadom na vynikajúce výsledky označila EC prvú fázu PRACE za "success story" a zaradila túto organizáciu s jej infraštruktúrou medzi míľniky ESFRI roadmap 2016.

Dostupnosť PRACE infraštruktúry je umožňovaná na dvoch úrovniach (*www.prace-project.eu*):

- krátkodobý prípravný prístup, ktorý umožní inštaláciu a testovanie softvéru pre potreby prípravy vlastného projektu. Žiadosti sa prijímajú priebežne a vyhodnocujú každé tri mesiace iba technickou komisiou
- projektový prístup udeľuje vedecká hodnotiaca komisia. Je určený pre jednotlivých výskumníkov, ale i výskumné skupiny vrátane skupín medzinárodnej spolupráce. Výpočtový čas sa spravidla prideľuje na jeden rok, v posledných výzvach sa však umožnili aj viacročné projekty

Okrem spomínaného základného cieľa, PRACE podporuje rozvoj HPC vo všetkých členských štátoch. Partneri PRACE boli od začiatku podporovaní cez viaceré programy FP7 v celkovej výške ca 67 mil € od EC a 43 mil € od konzorcia. V prvej výzve EINFRA-4-2014 v rámci H2020 bola organizácia PRACE opäť úspešná. Pre projekt PRACE-4IP, tentokrát aj s účasťou VS SAV, EC pridelila vyše 15 mil € na dva roky. Tieto prostriedky sú určené najmä na servisnú podporu, školenia a letné školy HPC, ale tiež rozvoj a prevádzku HPC na nižšej úrovni Tier-1, t. j. úrovni, ktorá je dostupná vo väčšine členských štátov a tvorí dôležitú súčasť globálnej výpočtovej pyramídy. Sme radi, že VS SAV tam patrí.

SUMMER of HPC

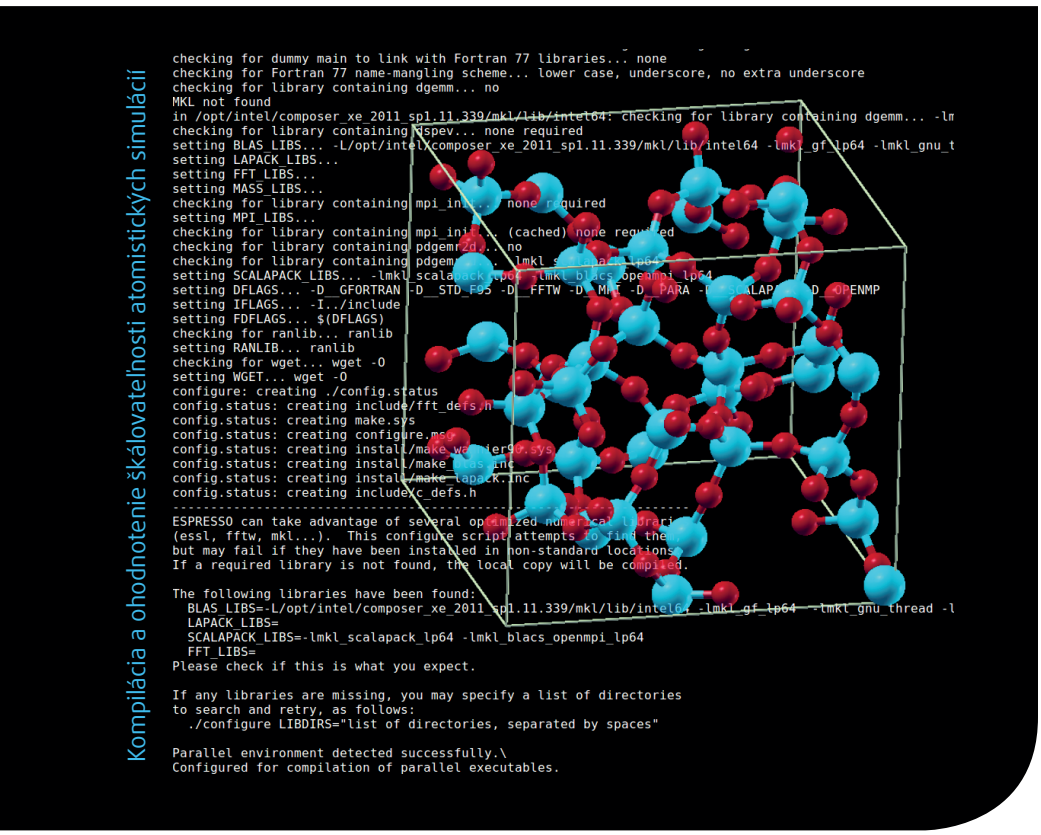
2-mesačná stáž v PRACE

Ján Hreha

Najprv začnime krátkym predstavením. Možete nám povedať, kde študujete a čomu sa venujete?

Pred týmto letným projektom som bol PhD študentom Fyziky tuhých látok na bratislavskom "matfyze" - Fakulte matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského. Skúmali sme tu mikroskopickú štruktúru a jej zmeny dobre známych bežných látok v neobvyklých fyzikálnych podmienkach, napríklad pri tlaku veľkom ako v najväčších hĺbkach zemského plášťa. Detailnejšie porozumenie v tejto oblasti môže poslúžiť na efektívnejšie procesy výroby nových materiálov so želanými vlastnosťami.

Hlavnou metódou nášho výskumu boli virtuálne experimenty založené na všestranných a presných kvantovo-mechanických modeloch interakcií atómov. V súčasnosti v tejto oblasti na pomedzí fyziky, chémie a materiálovej vedy pre simulácie držiace krok s najnovšími experimentami potrebujeme výpočtový výkon na úrovni klastrov až superpočítačov. Preto sme okrem vlastnej HPC infraštruktúry dlhodobo plodne využívali aj superpočítač Aurel. Okrem toho sa venujem popularizácii vedy a vzdelávania najmä stredoškolákov vrámci občianskeho združenia Trojsten.



Ako ste sa o akcii dozvedeli?

O akcií Summer of HPC /https://www.youtube.com/watch?v=ZNba2X1yL3s/ som sa dozvedel náhodou vďaka mailu od správcu Výpočtového strediska SAV v Bratislave, s ktorým sme dlhodobo spolupracovali pri využívaní superpočítača Aurel. Mail ma zastihol vo veľmi vhodnom čase, keď som si pripravoval program na leto. Zistil som, že Slovensko je členom medzinárodného partnerstva PRACE, ktoré realizuje medzinárodné programy na zdieľanie HPC infraštruktúry, ako aj poznatkov a skúseností cez vzdelávanie a stáže vrámci EÚ. Pre mladého vedca je to lákavá ponúka znejúca trochu ako sen. Takže moja reakcia bola jasná.

Bola účasť podmienená nejakými kritériami? Ak áno, v čom spočívali?

Podmienky sú nastavené profesionálne a predsa prívetivo. Ponúka platí pre všetkých študentov aj doktorandov. Je potrebné uviesť svoje údaje a motiváciu. Analytické myslenie a základné programátorské a matematické zručnosti sa overili riešením niekoľkých online úloh a samozrejme bolo treba dodať akademické referencie. Celý proces bol elektronický a bez zbytočných obštrukcií.

Zaujímavosťou boli otázky zamerané na ochotu a možnosti uchádzačov popularizácie akcie cez sociálne siete.

Ako prebiehal výber školiacich pracovísk? Mohli ho učastníci nejako ovplyvniť, alebo si vás "rozdelili"?

Dopredu boli známe detailnejšie popisy obsahu aj cieľov projektov spolu so zoznamom vyžadovaných nevyhnutných a vhodných znalostí. K tomu boli odkazy pre hlbšie naštudovanie si problematiky. Naviac tam bol aj kontakt na zodpovedných realizátorov.

Študent si môže podľa priority zvoliť tri projekty, o ktoré by mal záujem. Všetky projekty v rôznych krajinách prebiehajú v angličtine. Odborná komisia potom vyberie pre každý projekt vhodného uchádzača.

Ako prebiehala príprava na stáž?

Koncom júna sme boli pozvaní stráviť spoločný týždeň v Barcelone na miesnom partnerskom superpočítačovom centre BSC. Tam sme absolvovali od miestnych akademikov a technických expertov prednášky a workshopy ohľadom HPC technológií. Okrem toho malo toto stretnutie aj rozmer výmeny skúseností a neformálneho stretnutia sa študentov z vyše dvasiatich krajín. Popri tom ostal nejaký ten

čas aj na spoznanie nádhernej Katalánkej metropoly.

Kde ste pracovali na svojom projekte?

Môj projekt prebiehal po zbytok leta v blízkej rozhorúčenej Budapešti. Našim hostiteľom bol inštitút NIIFI /*http://www.niif.hu/en*/ zabezpečujúci národnú akademickú počítačovú sieť a infraštruktúru pre vysokovýkonné výpočty. Dostali sme možnosť vzdialene využívať 6 výkonných klasterov v rôznych maďarských mestách. Výnimočnou skúsenosťou bola možnosť vyskúšať superpočítač patriaci medzi aktuálnych 300 najvýkonnejších na svete počas jeho testovacej prevádzky. Skúsenosti s rôznymi HPC architektúrami sme pretavili do porovnania ich výkonnosti pre špecifické výpočty molekulovej dynamiky.

Môžete nám bližšie popísať priebeh projektu?

Ako stážisti sme mali dvoch odborných školiteľov, ktorí sa nám počas leta striedavo venovali, pripravili pre nás kurzy k využívaným technológiám a boli nám k dispozícii na konzultovanie a riešenie problémov. Predstavili nám tiež svojich kolegov, ktorých sme mohli osloviť v ich špecializáciách. Dostali sme však najmä priestor na samostatnú prácu, ktorej obsah sme si mohli prispôsobiť.

Po úvodnom štúdiu sme vypracovali konkrétny časový plán projektu a každý týždeň sme zdieľali naše napredovanie, ale

aj problémy a emócie prostredníctvom online konferencie spolu s ostatnými zapojenými študentmi v celej Európe. Popri tom sme pre okolitý svet zachytávali svoje zážitky písaním blogov - *https://summerofhpc.prace-ri.eu/summer-in-budapest/*. Na záver sme vypracovali správu a zhrnuli výsledky vo forme populárno-vedeckého článku do spoločného zborníku. K tomu sme tvorivo prezentovali svoje projekty cez krátke videá. Celkovo bol dôraz na popularizáciu a prezentovanie projektu a jeho obsahu aj tým, že porota po skončení hodnotila nielen odbornú stránku, ale udeľovala aj ceny za najlepšiu vizualizáciu a vplyv na sociálne médiá.

Táto stáž mi dala v prvom rade veľa nových skúseností. Dozvedel som sa z prvej ruky, ako funguje HPC v rôznych krajinách aj aké sú možnosti medzinárodnej spolupráce vrámci PRACE. Oslovila ma myšlienka z Barcelony, že postavenie HPC centra nie je len o budovaní technických prostriedkov, ale v prvom rade o kumulácií šikovných a nápaditých ľudí, ktorí získajú priestor na prácu a spoluprácu. Získal som mnoho kontaktov na expertov i rovesníkov, s ktorými si vieme pomôcť, navzájom sa učiť a inšpirovať. Práve tieto rozmery by som rád rozvíjal aj teraz po skončení akcie.

Chcel by som vyzvať mladých študentov aby sa nebáli vykročiť a skúšať nové možnosti, ktoré sa nám otvárajú doma i vo svete. Zároveň aby podobne šírili dobré skúsenosti ostatným a mladším. Netreba sa báť konkurencie, ale spolupracovať tak, že sa všetci rozvíjajú.

03

HISTÓRIA

hpc focus

OHLIADNUTIE DO NEDÁVNEJ MINULOSTI

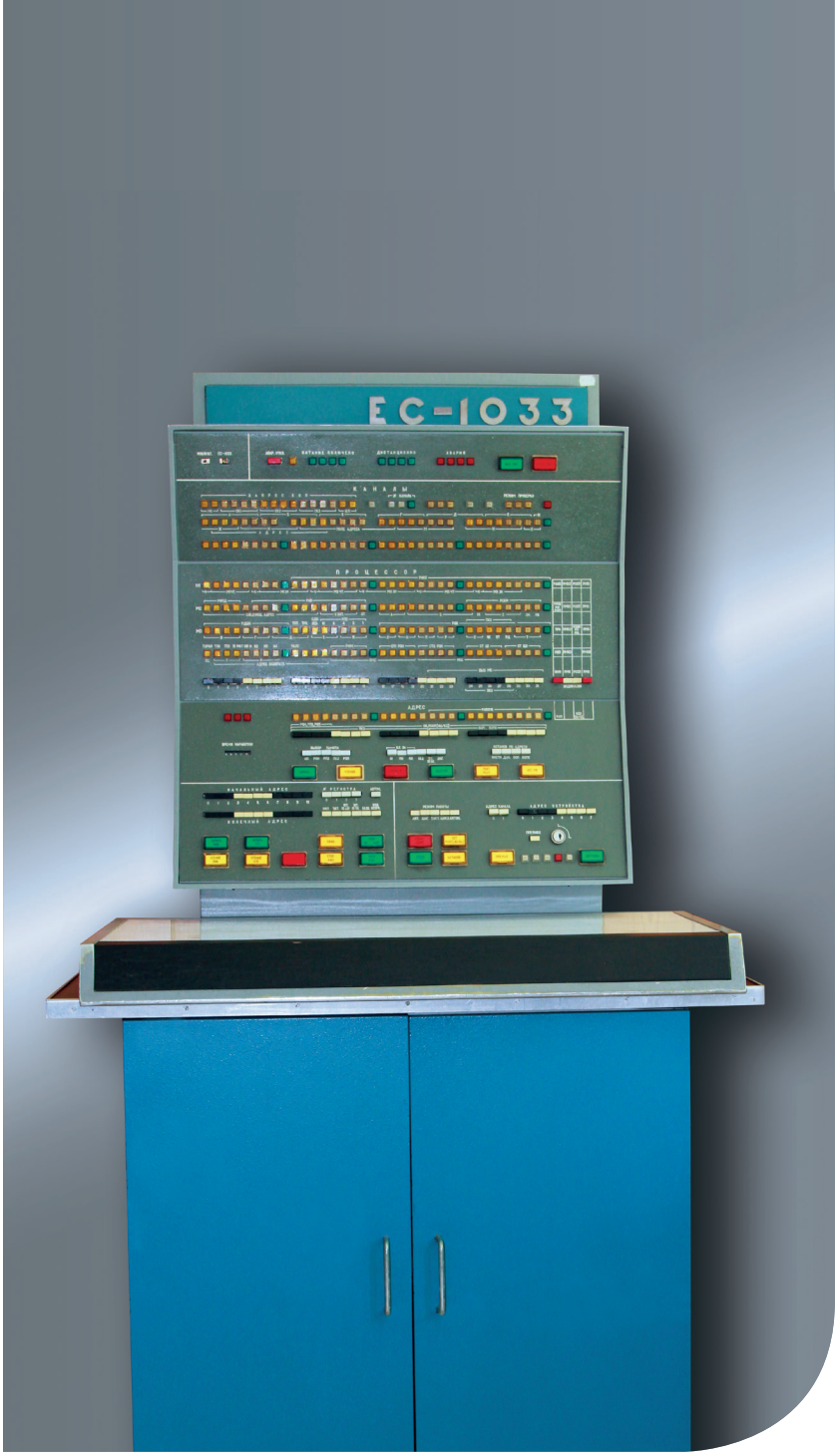
RNDr. Marián Krajčí, DrSc. pracuje na Fyzikálnom ústave SAV v oddelení Fyziky kovov. Publikoval viac ako 100 vedeckých prác. Podľa Web of Science alebo Google Scholar jeho Hirschov index charakterizujúci citačnú odozvu na jeho práce je h=25. Vo svojich prácach sa zaoberal sa štruktúrou a vlastnosťami komplexných kovových zliatin a kvázikryštálov. V posledných rokoch sa zaoberá využitím povrchov kovových zliatin na katalýzu chemických reakcií. Hlavnou metódou jeho výskumu sú prvoprincípové výpočty.

Vedeckým výpočtom sa M. Krajčí venuje viac ako 30 rokov. S výpočtami začínal r. 1977 ešte na sálových počítačoch akými boli Siemens 4004 v Mlynskej doline na UK alebo neskôr EC 1045 vo VS SAV. Dramatickou zmenou bol nástup osobných počítačov typu PC. Veľké výpočty sa na dlhší čas presunuli na ústavy SAV. Vďaka superpočítaču Aurel sa v posledných rokoch opäť vrátili do VS SAV. Zmena nastala aj vo využívaní softvéru. Kedysi si výpočtové programy užívateľ väčšinou písal sám, dnes sa prevažne používajú hotové licencované programové balíky. Nasledujúce riadky sú obzretím sa do nedávnej minulosti z pohľadu jedného užívateľa superpočítača Aurel a spomienky na

počiatky používania výpočtovej techniky. V závere sa zdôrazňuje význam výpočtových metód a výkonnej výpočtovej techniky pre vedecký výskum.

„S veľkým počítačom som sa prvýkrát stretol ako študent gymnázia v roku 1973. Boli sme s triedou na exkurzii vo Výpočtovom stredisku OSN na Dúbravskej ceste (dnes INFOSTAT). Išlo o sálový počítač CDC 3300 v Bratislave nainštalovaný od roku 1968. Bol to počítač druhej generácie postavený ešte na tranzistoroch. Moduly veľkosti asi pohľadnice osadené tranzistormi a ďalšími súčiastkami boli zoradené v roštoch vypĺňajúcich veľké kovové skrine rozmiestnené v sále. Najzaujímavejší bol pohľad zo zadnej časti skrine, kde bola hrubá vrstva farebných drôtikov krížom-krážom prepájajúca moduly. Tento pohľad zanechal na mňa dojem, aké veľmi zložité zariadenie je počítač. Hoci dnes polovodičové procesory obsahujú aj miliardu súčiastok o tento názorný dojem zložitosti výpočtovej techniky sme ukrátení. Zaujala ma aj konzola cez ktorú komunikoval s počítačom operátor, žiadny displej, iba elektrický písací stroj.

Užívateľom počítača som sa prvýkrát stal na vysokej škole v roku 1977. Ako študent fyziky na vtedajšej ešte Prírodovedeckej fakulte

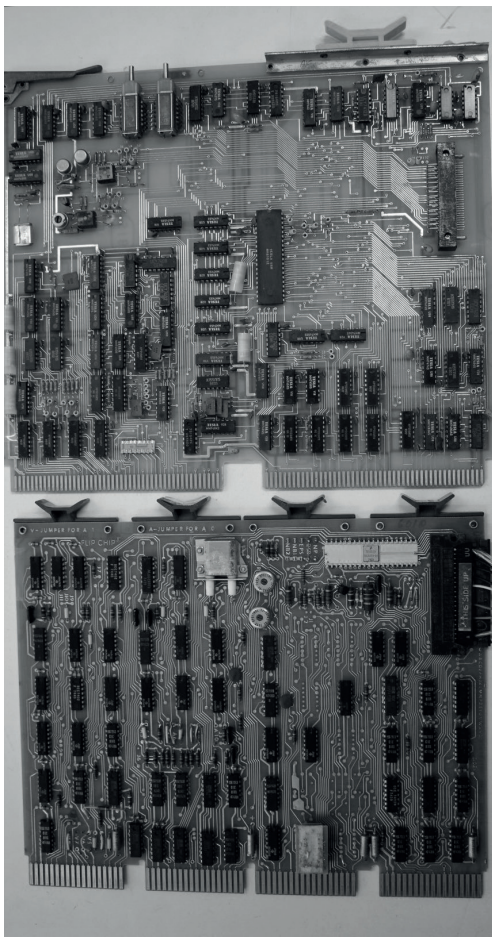


DIERNE ŠTÍTKY

REVERZNÉ INŽINIERSTVO

Slovenský počítač SMEP (vpravo), krorý vznikol podľa vzoru amerického PDP-11 (vľavo). Kedže neboli k dispozicií potrebné komponenty na vytvorenie totožnej dosky ako tej americkej (v strede dole), vývoj bol postavený prevažne na štúdiu používateľskej dokumentácie, takzvanom reverznom inžinierstve. Inými slovami, bolo to ako vyrobiť práčku podľa návodu na jej opravu.

Univerzity Komenského (dnes FMFI) sme v treťom ročníku mali kurz programovania. Vtedy som dostal príležitosť napísať svoje prvé riadky programu v jazyku FORTRAN IV pre počítač Siemens 4004. Išlo o sálový počítač tretej generácie umiestnený vo výpočtovom stredisku Univerzity Komenského (ÚVTVŠ). Po skončení štúdia na PF UK a ročnej vojenskej službe som r. 1980 nastúpil na FÚ SAV, kde pracujem dodnes. S výpočtami sme vtedy naďalej chodili na Siemens. Programy pre sálové počítače boli na diernych štítkoch. Jeden riadok programu – jeden dierny štítok. Dierovače boli stolné zariadenia umiestnené na chodbách či už vo VS SAV alebo na chodbách ústavov. Neskôr som mal vlastný dierovač aj v svojej kancelárii na FÚ SAV. Balíčky diernych štítkov boli previazané gumičkou. Obdivne sme pozerali na pokročilejších programátorov s rozsiahlejšími programami, ktoré prenášali v krabici od diernych štítkov s kapacitou až 2000 štítkov. Balíčky či balíky diernych štítkov sa odovzdali na recepcii VS SAV a na druhý deň sme si prišli pre výsledok. Výsledok mal formu skladaných listov papiera formátu asi A3. Nazýval sa trochu nesprávne "listing".



Listing obsahoval opis program a prípadné výsledky behu program. Nakoľko program si písal každý sám, dlhý proces bolo opravovanie chýb a ladenie programu než vôbec program začal niečo užitočné počítať. Často sa v balíku štítkov opravili iba 1-2 štítky a ten istý balík sa zase zaniesol na recepciu VS SAV a na druhý deň sa opäť vyzdvihol listing. Ladenie programu trvalo týždne niekomu aj mesiace. Ladenie a vývoj programu často trvalo dlhšie než samotný užitočný výpočet. Vedľajším produktom ladenia a aj jednoduchých výpočtov boli haldy listingov hromadiace sa v kancelárii každého užívateľa. Presnejšie údaje o výpočtovom výkone si nepamätám. Spomínam si však, že kapacita pamäte počítača bola 150 kB a užívateľské programy mohli mať pridelených max. 92 kB operačnej pamäte. Rýchlosť výpočtu nebola veľmi zaujímavá, nakoľko či výpočet bežal 10 sekúnd alebo hodinu, tak či tak sme výsledok na listingu dostali až na druhý deň a niekedy aj neskôr.

Okolo roku 1980 sa objavili sa prvé obrazovkové terminály. Neboli to však ploché obrazovky – ich hĺbka bola asi 80 cm a zmestili sa na väčší stôl. Programy sme mohli opravovať a ladiť a submitovať cez terminál. V roku 1982 bol vo VS SAV uvedený do prevádzky počítač EC 1045. Išlo o kópiu počítača IBM 370 a aj operačný systém bol kompatibilný s IBM. Užívatelia mali prístup cez terminály umiestnené vo VS SAV. Spomínam si že som tam stretával aj dnešných užívateľov Aurela ako napr. mladý kolega z FÚ SAV, dnes prof. I. Štich. Veľkou autoritou bol pre mňa aj L. Smrčok z ÚACh SAV, ktorý sa najviac vyznal v operačnom systéme. Počítač mal 4 MB pamäte sa ovládal príkazmi jazyka TSO (Time Sharing Option). Za-

tiaľ čo na počítači Siemens sa programy do pamäti nahrávali postupne jeden za druhým, v pamäti EC-čka mohlo byť viac programov súčasne a striedavo sa im prideľoval čas procesora. Rýchlosť výpočtu sa zvýšila a čas čakania na výsledky sa tak skrátil.

V roku 1987 som odišiel na 18 mesiacov do Japonska. Na Tokijskej Univerzite som mal prístup k počítaču Hitachi, ktorý bol asi stokrát výkonnejší ako naše EC-čko. Počítač mal svoj pokročilý operačný systém, avšak na moje prekvapenie reagoval aj na mne známe príkazy TSO. Zrejme ich operačný systém bol na hlbšej úrovni tiež kompatibilný s IBM. Spomínam si, že som urobil veľký dojem na japonských kolegov, keď som ovládal ich počítač im neznámym jazykom. Po návrate z Japonska som sa vrátil do socialistickej reality reprezentovanej EC-čkom. Ťažko som znášal ten dramatický rozdiel vo výkonnosti. Nastala však významná zmena – začala sa budovať počítačová sieť. Terminál k EC-čku sme mali aj na našom ústave, takže som už nemusel chodiť na terminál do budovy VS SAV.

Začiatkom 90-tych rokov sa na krátku dobu objavili minipočítače SMEP. Veľké sálové počítače, ktoré sa predtým inštalovali do haly ako menšia telocvičňa sa teraz dali umiestniť do bežnej (stále však klimatizovanej) kancelárskej miestnosti. Boli to kópie počítačov dnes už zaniknutej americkej firmy PDP. Vo VS SAV mali nainštalovaný SMEP 4, na našom ústave sme neskôr zakúpili menší model SMEP 3. Počítače sa rýchlym tempom ďalej zmenšovali. Do módy prišli pracovné stanice - workstation typu RISC. Dva takéto počítače (RISC IBM RS/6000 model 950 a model 550, 128 MB RAM) boli nainštalované aj vo VS SAV a s menami Albert a Vincent boli užívateľom prístupné cez sieť. Od roku 1992 som ich začal používať na vedecké výpočty miesto už odstaveného EC-čka.

Za zmienku stoja aj mikropočítače postavené na prvých mikroprocesoroch. Boli to počítače určené skôr na hranie ako známy Commodore, ZX-Spectrum, Atari či v domácej Tesle vyrobený počítač PMD-85. Programovali sa v jazyku BASIC. Na našom oddelení Fyziky kovov sme si zakúpili Commodore 128 i PMD-čko a pokúšali sa ich používať na jednoduché vedecké účely. Napríklad spojením PMD a malého televízora sa dal spraviť terminál na prístup k výkonnejším počítačom. Nakoľko mikropočítače sa výkonovo nevyrovnali počítačom typu RISC a na moje vedecké výpočty neboli použitľné, zaujímal som sa o ne iba okrajovo.

V roku 1991 som na 6 rokov odišiel pracovať na Technische Universität Wien do skupiny prof. Hafnera. Výpočty som robil na ich počítačoch typu RISC. Začal som používať e-mail a dnes už všade rozšírene internetové prehliadače. Prvý bol Mozilla, neskôr Netscape. Windows Explorer prišiel až s rozšírením PC-čiek.

V histórii výpočtovej techniky PC-čka iste zaujímajú samstatnú kapitolu. Ich príchod možno označiť za fenomenálny. Počítače pôvodne vyvinula firma IBM a hovorilo sa im IBM

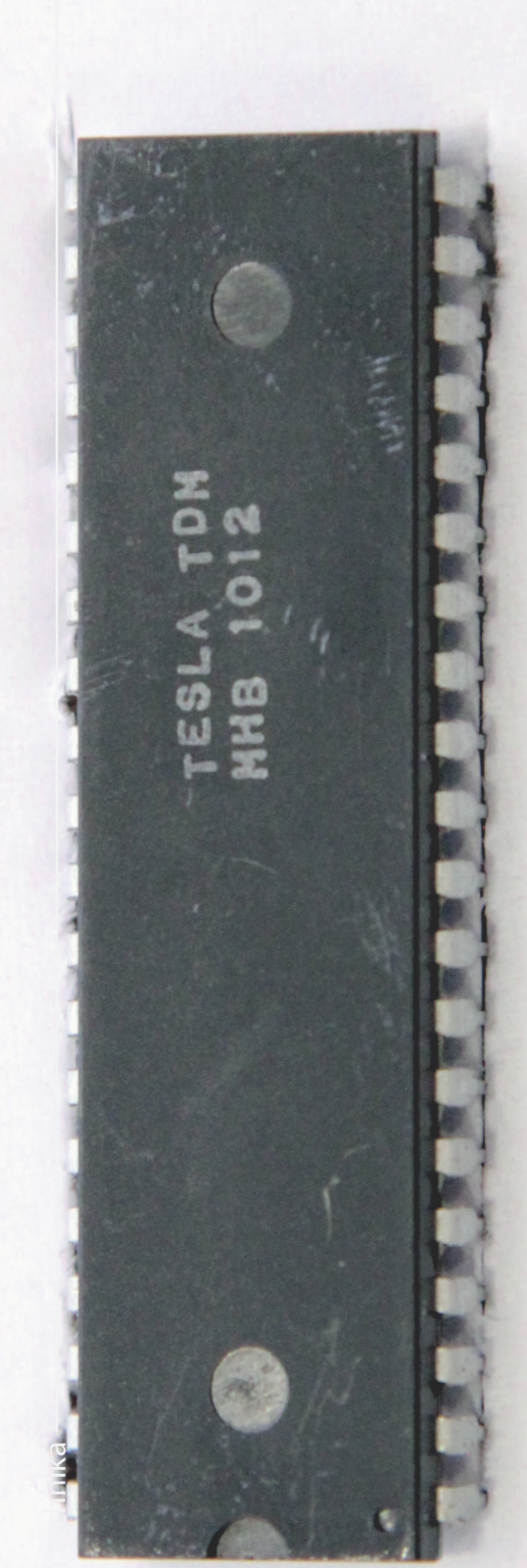
PC. Neskôr ich začal vyrábať celý rad firiem a výrazne zlacneli. Už od počiatku boli PC-čka veľmi žiadané. Prvé PC-čko na SAV som videl okolo roku 1985 v kancelárii susedného ústavu. Za prvé počítače boli ľudia ochotní platiť neuveriteľné peniaze. Spomínam si, že okolo roku 1989 jeden kolega si kúpil 286-ku (procesor Intel 80286) za 250 tis. Kčs, iný dal za nový model s procesorom 80386 okolo 900 tis Kčs. Pripomínam, že koncom 80-tych rokov priemerné platy boli asi 3000 Kčs, čo bolo vtedy asi 100 USD, 2-izbový byt v paneláku stál asi 220 tis. Kč. O deformácii cien elektroniky v socialistickom Československu svedčí aj drobná historka ešte z pobytu v Japonsku. Keď so svojmu profesorovi povedal, že som si doma kúpil farebný televízor za cenu sedem násobok svojho platu tak v prvom momente pokýval hlavou že u nich je to tiež podobné. Bolo to však nedorozumenie, v Japonsku cena farebného televízora bola asi sedminou platu. Keď sa toto nedorozumenie vysvetlilo, že rozdiel v cene televízora a priemerného platu u nás a v Japonsku je takmer 50 násobný zdalo sa mu to až šokujúce ťažko predstaviteľné ako môže fungovať spoločnosť, kde ľudia musia, či môžu si dovoliť dať za televízor toľko peňazí.

Na našom oddelení Fyziky kovov sme kupovali prvý počítač typu IBM PC XT (s procesorom 8086) v roku 1987. Išlo už o starší počítač z druhej ruky. Výkon PC-čiek a ich dostupnosť každoročne rýchlo narastali. Prvý PC počítač čo som mal na svojom pracovnom stole bola 486-ka. Procesory vyššie ako Intel 80486 sa začali nazývať Pentium. Od procesorov Pentium 4 som ich začal výlučne používať na vedecké výpočty. Zo služieb VS SAV sme v tom čase využívali rýchle sieťové pripojenie. Toto rýchle sieťové pripojenie poskytované VS SAV dodnes aj s kolegami veľmi oceňujeme.

Okolo roku 2000 sa objavilo paralelné počítanie podľa protokolu MPI. Z počítačov typu PC prepojených rýchlou sieťou sa zostavovali výpočtové klastre. Nakoľko moja spolupráca s Viedenskou univerzitou pokračovala aj po návrate z Viedne využíval som na výpočty ich výpočtové klastre.

Moje vlastné výpočtové programy však neboli písané pre paralelný kód, takže istú dobu som si ich využíval na súčasný beh viacerých úloh.

Rok 2000 bol však zmenou aj v oblasti používaného softvéru. Na výpočty som začal využívať ako hlavný program program VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package). Program bol vyvíjaný v skupine prof. Hafnera, ktorý bol aj držiteľom licencie. Pre mňa s tým skončilo obdobie keď všetky výpočtové programy som si písal sám. Dovtedy bol bežné, že fyzik bol zároveň programátor vo Fortrane či jazyku C. Hovorilo sa, že jeden programátor zvládne obsluhu kódu o rozsahu max 15-20 tis. riadkov. Veľké programy ako Gaussian pre chemikov alebo VASP boli vyvíjané kolektívom. VASP mal vtedy už asi 80 tis. riadkov kódu a bol vtedy už písaný aj pre paralelný kód. Hlavným vývojárom program VASP bol mladý doktorand prof. Hafnera, dnes už profesor Georg Kresse. Je



potešiteľné, že k vývoju neskôr prispel aj náš terajší užívateľ Aurela doc. Tomáš Bučko, ktorý tiež mnoho rokov pracoval v skupine prof. Hafnera. Program VASP dnes využíva po svete viac ako 600 výskumných skupín a inštitúcií.

Výkonnú výpočtovú techniku si výskumné skupiny kupovali do svojich oddelení na ústavoch. Išlo o výkonné pracovné stanice alebo výpočtové klastre. V roku 2005 sme dostali do nášho oddelenia Fyziky kovov vlastný paralelný výpočtový klaster pozostávajúci z 8 procesorov Pentium 4 a prepojených gigabitovou eternetovskou sieťou. Neskôr som si takéto výpočtové klastre začal stavať svojpomocne. Ako výkon procesorov rástol podľa Moorovho zákona, približne každé dva roky som si postavil novú generáciu. Počítače boli stavané z bežných súčiastok, takže to vyšlo oveľa lacnejšie, pričom rýchlosťou boli konkurencie schopné komerčným HPC klastrom, ktoré si na svoje ústavy zakúpili aj niektorí dnešní užívatelia Aurela. Užívateľom superočítača Aurel som sa stal na jeseň roku 2013. Vtedy už bol takmer rok v skúšobnej prevádzke. Keďže aj jeden výpočtový uzol (node) Aurela bol asi dva krát výkonnejší ako môj výpočtový klaster postupne som na Aurela presunul (aj s pomocou T. Bučka) všetky svoje vedecké výpočty.

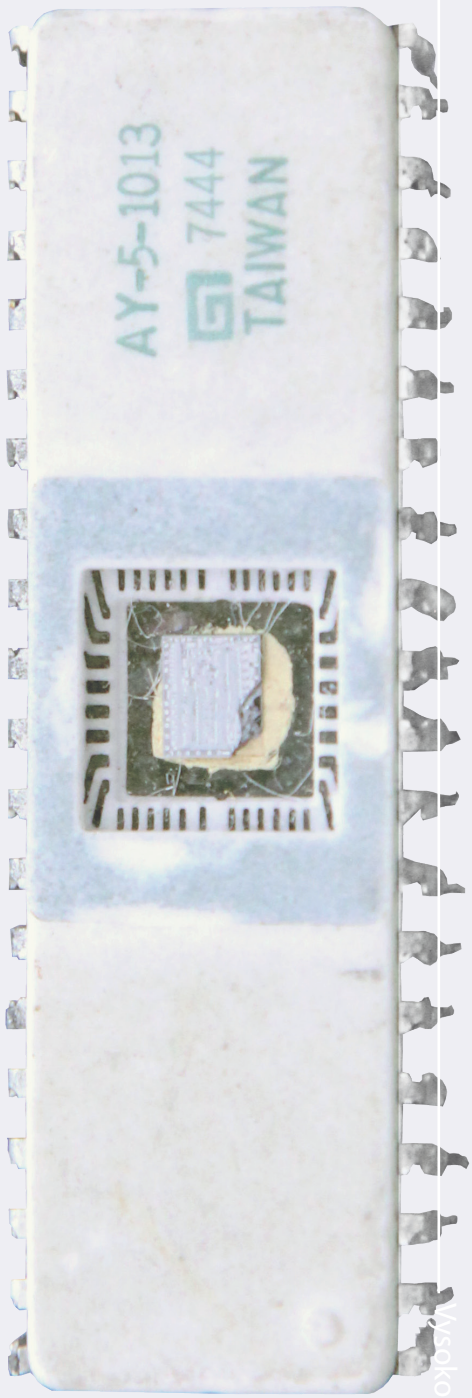
Záverom by som rád niekoľkými riadkami čitateľom priblížil, o čom je výpočtová fyzika. Počítač používa pri svojej práci každý fyzik, avšak nie každý robí výpočtovú fyziku. Vo výpočtovej fyzike (computational physics) ide v podstate o aproximatívne riešenie fundamentálnych rovníc, podľa ktorých funguje náš svet. Na každej dĺžkovej škále sa vychádza z iných rovníc. Môžu to byť Newtonove pohybové rovnice opisujúce pohyb planét alebo môže ísť o riešenie mnohočasticovej Schröedingerovej rovnice pre mnohoatómový systém akými sú molekuly alebo pevná látka. Hovoríme aj o počítačovej simulácii, nakoľko riešením rovníc napodobňujeme správanie sa sveta na danej dĺžkovej škále. Výpočtová fyzika, nazývaná aj počítačová fyzika, je v mnohých ohľadoch podobná experimentálnej fyzike, nakoľko sa robí „počítačový experiment“. Nakoľko v zásade ide o získanie užitočnej fyzikálnej informácie z riešenia fundamentálnych rovníc, takéto výpočty sa nazývajú aj prvoprincípové výpočty (ab-inito). Prvoprincípové výpočty sa používajú vo veľkom rozsahu v kvantovej chémii, ale aj vo fyzike

materiálov pod názvom Computational Materials Science (CMS). V prípade môjho výskumu ide o svet atómov, molekúl a pevných látok opisovaný Schröedingerovou rovnicou, ktorá je riešená v aproximácii nazývanej DFT (Density Functional Theory). Hlavným výpočtovým nástrojom je vyššie spomínaný program VASP.

Výpočtami možno určiť vypočítať stabilnú štruktúru i rôzne fyzikálne a chemické vlastnosti molekúl a materiálov. Možno získať aj informácie, ktoré sú iba ťažko experimentálne merateľné. Výpočtovú fyziku možno považovať za most medzi teóriou a experimentom. Porovnanie výsledkov výpočtov s experimentom je obojstranne prospešné a umožňuje hlboké porozumenie študovaného objektu.

Prvoprincípové výpočty majú veľkú interpretačnú a prediktívnu silu a stávajú sa čoraz významnejším partnerom experimentálnych štúdií sveta atómov. Už viackrát som sa presvedčil, že aj veľké exprimentálne skupiny bez prvoprincípových výpočtov často roky zotrvávajú v chybnej interpretácii svojich inak vynikajúcich experimentálnych výsledkov.

Význam výpočtových metód vo výskume neustále rastie. Cena výpočtového výkonu exponenciálne klesá s Moorovým zákonom, čo sa nedá povedať o cene experimentálnych zariadení. Ak sa význam vedeckých prác meria ich citovanosťou v svetových vedeckých časopisoch, potom práce z oblasti výpočtovej fyziky a chémie možno považovať vďaka ich vysokej priemernej citovanosti za veľmi významné. Je známe, že celosvetovo najcitovanejšie vedecké práce vôbec sú práce súvisiace s výpočtovými metódami. Aj niektorí užívatelia superpočítača Aurel patria k najcitovanešším slovenským vedcom. Z tohto hľadiska možno považovať podporu výpočtových metód vo vedeckom výskume za jednu z najlepších investícií do rozvoja vedy.“



PODPORU VÝPOČTOVÝCH METÓD VO VEDECKOM VÝSKUME MOŽNO POVAŽOVAŤ ZA JEDNU Z NAJLEPŠÍCH INVESTÍCIÍ DO ROZVOJA VEDY

RIADITEĽ VS SAV
Tomáš Lacko

ZODPOVEDNÝ REDAKTOR A KOORDINÁTOR
Gabriela Obadalová

FOTOGRAFI
Pavol Novák
Gabriela Obadalová

GRAFIKA A DTP
Gabriela Obadalová

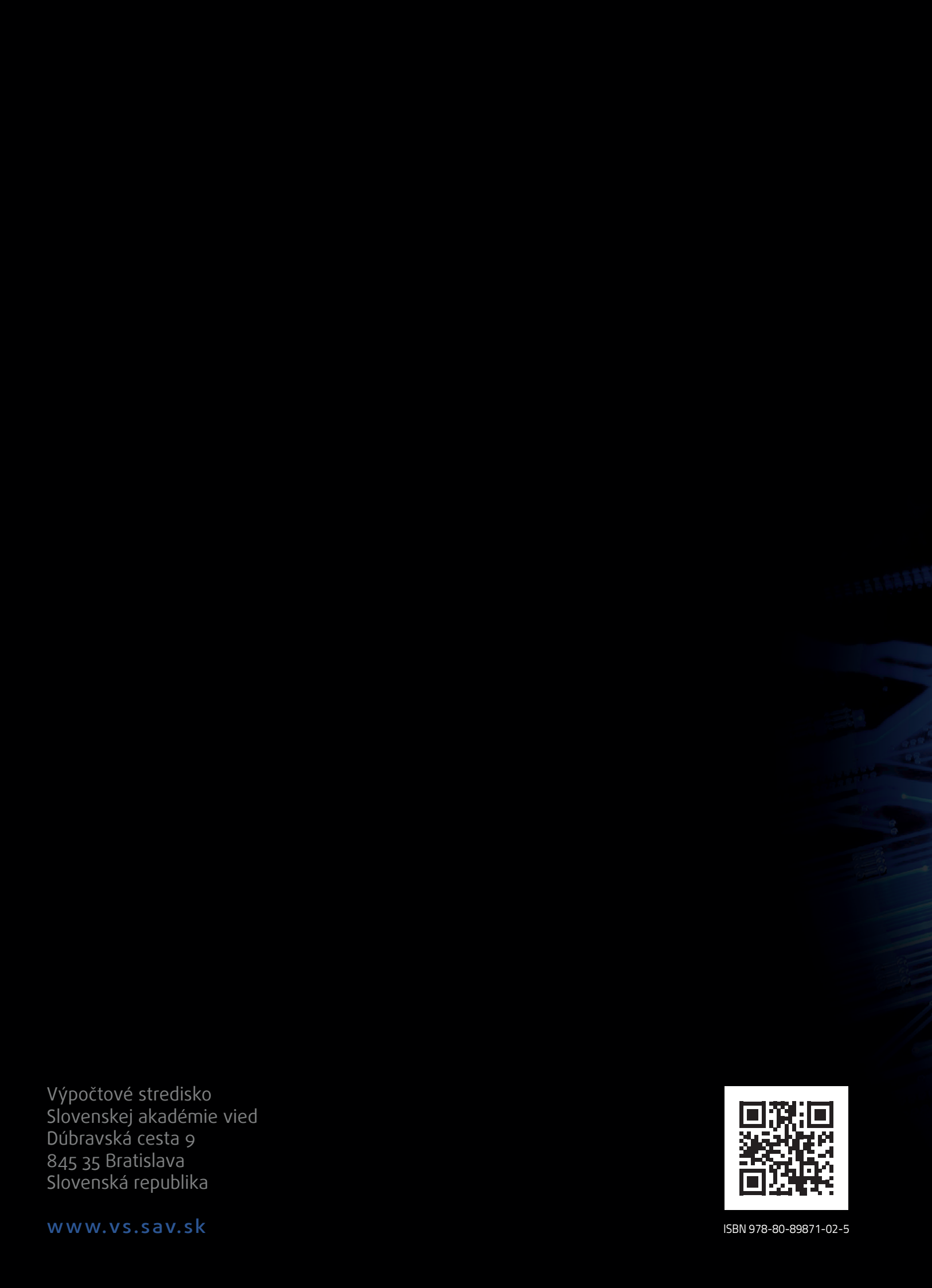
TLAČ
FO ART s.r.o.
Prešovská 45
821 02 Bratislava
foart@foart.sk
www.foart.sk

ADRESA
Výpočtové stredisko
Slovenskej akadémie vied
Dúbravská cesta 9
845 35 Bratislava
Slovenská republika

www.vs.sav.sk

ISBN 978-80-89871-02-5

Texty neprešli jazykovou korektúrou.



Výpočtové stredisko
Slovenskej akadémie vied
Dúbravská cesta 9
845 35 Bratislava
Slovenská republika

www.vs.sav.sk

ISBN 978-80-89871-02-5