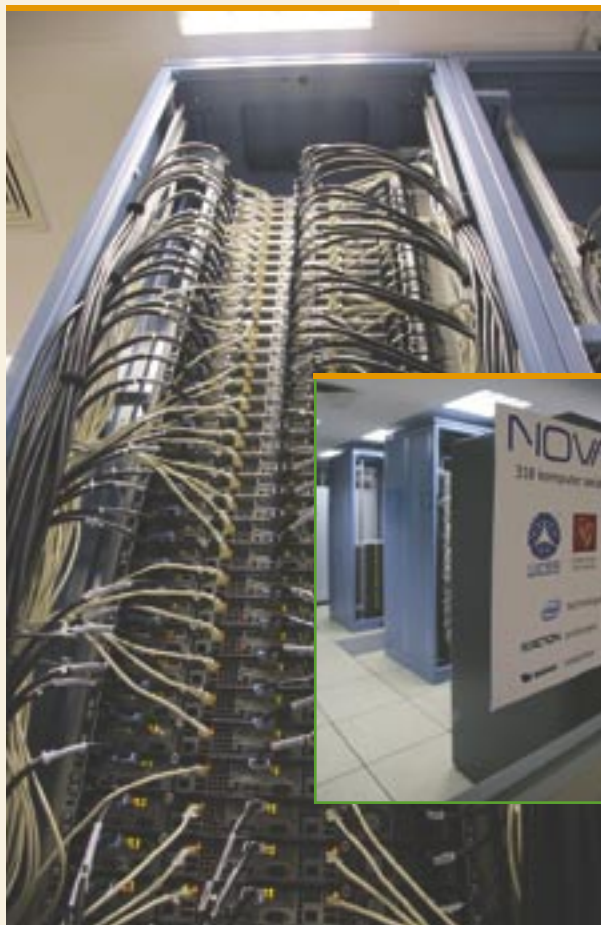


Nova na wyciągnięcie ręki



Klaster obliczeniowy Nova zajmuje wśród komputerów akademickich 75. miejsce na świecie, zaś 40. w Europie (z Rosją). Jego wydajność teoretyczna to 16 Teraflopsów, a zmierzona testem LINPACK – 11,34 Teraflopsów. Nova składa się z węzła dostępowego, dwóch węzłów usługowych i 288 komputerów, mających łącznie 1696 rdzeni obliczeniowych, połączonych sieciami Gigabit Ethernet i InfiniBand. Na każdy rdzeń obliczeniowy przypada 2 GB pamięci operacyjnej, co daje w sumie 3,4 TB. Dyski klastra mają łączną pojemność 70 TB. Jego moce są wykorzystywane przez polskich uczonych, głównie chemików, do obliczeń naukowo-technicznych. Wyniki tych badań służą m.in. projektowaniu nowych materiałów dla nanotechnologii czy nowych leków. Klaster jest włączony do gridu Enabling Grids for E-science (EGEE) – największej na świecie multidyscyplinarnej infrastruktury gridowej złożonej z 300 instalacji komputerowych w 50 krajach, mających ponad 80 000 procesorów.

We Wrocławskim Centrum Sieciowo-Superkomputerowym, działającym przy PWr, 3 lipca br. odbyła się uroczystość symbolicznego uruchomienia superkomputera Nova.

Wzięli w niej udział m.in.: prorektor ds. badań naukowych i współpracy z gospodarką, rektor-elekt PWr, prof. Tadeusz Więtkowski, zastępca dyrektora Wydziału Informatyki UM Wrocławia Dariusz Dauksza oraz przedstawiciele firm kooperujących przy instalacji superkomputera: integratora – Paweł Kuch i Krzysztof Małek z firmy WASKO SA, producenta – Edward Wojtysiak, wiceprezes ACTION S.A. oraz Paweł Gerner z firmy INTEL, która opracowała technologię procesorów. Obecni byli też: dyrektor Instytutu Informatyki Stosowanej prof. Zbigniew Huzar, przedstawiciel PAN i Rady Użytkowników WASK prof. Leszek Borzemski, prof. W. Andrzej Sokalski z Wydz. Chemicznego PWr.

Dr Józef Janyszek, zastępca dyrektora WCSS, przypomniał, że klaster Nova działa już od kwietnia br., kiedy był atestowany przez audyt zewnętrzny, w celu umieszczenia superkomputera na liście Top 500.

Rozwój Centrum odzwierciedla ją zwiększające się moce jego komputerów: pierwszy IBM SP2 miał

15 procesorów i zajmował 482. miejsce na liście Top 500, dzisiejsza Nova ma 1696 rdzeni obliczeniowych i zajmuje 318. pozycję na tej liście. Na lata 2009-2012 planowane jest dalsze zwiększenie mocy obliczeniowej. W tym roku Nova zostanie rozbudowany o 40 komputerów oraz o wysoko wydajny, współdzielony system plików.

Jak mówił dr Janyszek, w Europie brakuje mocy obliczeniowych i choć Stary Kontynent stara się

konkurować z USA, europejscy badacze muszą czekać na dostęp do amerykańskich centrów obliczeniowych. W tym roku w Ameryce zbudowano pierwszy komputer petaflopsowy.

Centrum bierze udział w krajowych i międzynarodowych projektach badawczych i rozwojowych, np. EGEE III. W styczniu br. rozpoczęły się prace nad projektem PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe), w którego ramach zostanie przygotowana koncepcja infrastruktury obliczeń wysokiej wydajności – HPC (High Performance Computing) dla Europy, a jej wdrożenie planuje się na lata 2009-2010. Oba ww. projekty są finansowane z 7. PR Komisji Europejskiej.

Prof. W. Andrzej Sokalski, kierownik Zakładu Modelowania Molekularnego i Chemii Kwantowej, zaprezentował badania chemików – głównych użytkowników Novej, podkreślając, że potencjał naukowców Wydziału Chemicznego znajduje odzwierciedlenie także w licznych nagrodach, FNP i innych – w czym profesor dopatruje się też zasługi superkomputerów z WCSS.

Na zakończenie uroczystości referaty zaprezentowali najlepsi absolwenci wydziałów PPT i Chemicznego, a obecnie doktoranci Zakładu, którzy w swoich badaniach zdążyli już skorzystać z mocy obliczeniowych nowego superkomputera: mgr inż. Edyta Dyguda-Kazimierowicz opowiedziała o modelowaniu aktywności katalitycznej enzymów metodami chemii obliczeniowej, a mgr inż. Karol Langner przedstawił analizę oddziaływań w układzie cząsteczek. Zauważył też, że obliczenia, które zwykły komputer wykonuje przez rok, Novej zabrały tylko 17 godzin! ■



Od lewej: prof. Z. Huzar, prof. L. Borzemski, prof. T. Więtkowski, dr J. Janyszek podczas prezentacji superkomputera Nova.

Krystyna Malkiewicz
Zdjęcia:
Krzysztof Mazur