

Nowe komputery WCSS

2 marca 2007 r. we Wrocławskim Centrum Sieciowo-Superkomputerowym uroczystie przekazano do eksploatacji nowe komputery i bibliotekę taśmową. W uroczystości wzięli udział: prorektor ds. badań naukowych i współpracy z gospodarką prof. Tadeusz Więckowski, kierownik WCSS prof. Daniel J. Bem, prof. Waclaw A. Sokalski z Wydziału Chemicznego (głównym użytkownik Centrum), pracownicy i dziennikarze. Prezentacji nowego superkomputera dokonał dr Józef Janyszek, zastępca kierownika Centrum ds. technicznych.



Klaster Nova składa się ze 152 dwuprocesorowych węzłów obliczeniowych (304 CPU) oraz trzech serwerów pomocniczych. Jest przeznaczony dla użytkowników WCSS i włączony do infrastruktury gridowej europejskiego projektu EGEE (**E**nabling **G**rids for **E**-science), który ma doprowadzić do powstania bardzo dużego gridu obliczeniowego, zdolnego do podejmowania największych wyzwań obliczeniowych. Obecnie w gridzie dostępne są komputery zawierające łącznie około 20 000 procesorów. Dotychczas WCSS udostępniał niewielki klaster złożony z 8 komputerów.

Komputer Altix 3700 po rozbudowaniu liczy 128 procesorów Itanium2 i 256 GB pamięci operacyjnej dostępnej dla wszystkich procesorów. Pozwala to na prowadzenie obliczeń wymagających dużej pamięci operacyjnej.

Nowoczesna i pojemna **biblioteka taśmowa** Adic Scalar 10K stanowi element zasobów dyskowych i systemu archiwizacji tworzonego w WCSS. Wyposażona jest w 4 napędy LTO3 i 300 taśm. Umożliwia składowanie 120TB danych (bez kompresji).

Zespoły badawcze mogą tu przechowywać duże zbiory danych potrzebnych do obliczeń łącznie z tworzonymi kopiami zapasowymi. Zasoby dyskowe są też wykorzystywane na potrzeby systemów i do realizacji usług realizowanych przez WCSS. Dzięki nim sprawnie działają serwery obliczeniowe, poczta elektroniczna, biblioteka cyfrowa oraz zaawansowany system kopii bezpieczeństwa.

O Centrum...

Wrocławskie Centrum Sieciowo-Superkomputerowe działa nie tylko na rzecz środowiska akademickiego Dolnego Śląska. Służy także Górnemu Śląskowi i Opolszczyźnie.

Udostępnia m.in. serwery obliczeniowe do badań naukowych. Serwery te, określane mianem Komputerów Dużej Mocy (KDM), muszą ze względu na charakter prowadzonych tu obliczeń charakteryzować się wysoką jakością i niezawodnością sprzętu, systemów i oprogramowania. WCSS wspiera także tworzenie Dolnośląskiej Biblioteki Cyfrowej oferując na jej potrzeby serwer i zasoby dyskowe.

Poza klastrem EGEE i serwerem Altix 3700 w dyspozycji Centrum są:

Klaster Gromada – jeden z pierwszych krajowych klastrów z procesorami Intel Itanium2. Ma 32 dwuprocessorowe węzły (64 CPU) spięte superszybka siecią InfiniBand.

Klaster Układ – jeden z pionierskich klastrów na skalę Polski o architekturze 32-bitowej, liczy 40 procesorów Intel Xeon 2.8 GHz. Szczególnie niezawodny. Działa niemal bez przerw: jest dostępny i w pełni funkcjonalny nawet w wypadku awarii pojedynczego węzła.

HP AlphaServer ES40 – czteroprocessorowy, skalowalny serwer, zdolny do obsługi bardzo dużego obciążenia.

SGI Tezro – czteroprocessorowa stacja graficzna do interaktywnej pracy z programami wizualizacyjnymi.

Zasoby obliczeniowe połączone są siecią wewnętrzną WCSS i podłączone do Wrocławskiej Akademickiej Sieci Komputerowej WASK stanowiącej element ogólnopolskiej sieci szerokopasmowej PIONIER.

WCSS uczestniczy w szeregu inicjatyw, projektów krajowych i międzynarodowych służących rozwojowi i bezpieczeństwu infrastruktur gridowych. W projekcie POSITIF (<http://www.positif.org>) bierze udział w opracowaniu zaawansowanych mechanizmów monitorowania, wykrywania i analizy naruszeń bezpieczeństwa w sieci komputerowej.

Centrum dysponuje specjalistycznymi programami wspomagającymi badania naukowe w wielu dziedzinach wiedzy: od chemii molekularnej, kwantowej, przez projektowanie i analizę inżynierską do medycyny i geologii.

Zanim badacze przystąpią do pracy eksperymentalnej, często modelują komputerowo badany proces i dokonują jego symulacji. Pozwala to obniżyć koszty i skrócić czas badań. Ponadto odtworzenie modelowanego procesu w dowolnym tempie ułatwia jego obserwację i analizę.

Równanie Schroedingera

Niewielu wrocławian wie, że urodzony w Wiedniu noblista prof. Erwin Schroedinger w latach 20. ub. stulecia wykładał w naszym mieście. Dzisiaj rozwiązywanie równania

noszącego jego imię, pozwalającego przewidywać właściwości dowolnych cząsteczek chemicznych, angażuje ponad 30% mocy amerykańskich centrów superkomputerowych, a w przypadku WCSS – ponad 95%. Wrocławskie środowisko chemików należy bowiem do najliczniejszych w kraju. Dzięki maszynom cyfrowym z ELWRO już w latach 60. i 70. XX wieku rozwinęły się na Politechnice i Uniwersytecie Wrocławskim badania z chemii kwantowej.

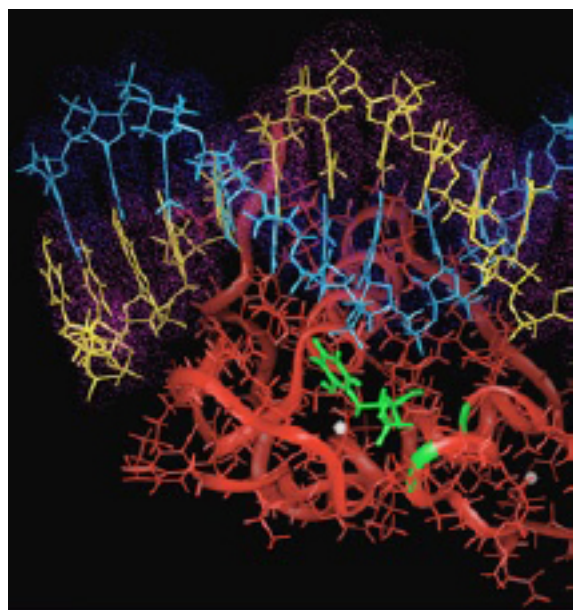
Prowadzi je także od lat Zakład Modelowania Molekularnego i Chemii Kwantowej (<http://ichfit.ch.pwr.wroc.pl/mml/>), rozwijając metody obliczeniowe, które pozwalają modelować strukturę molekularną i oddziaływania międzycząsteczkowe. Pracownicy Zakładu stosują też te metody do wyjaśnienia mechanizmów działania enzymów i leków. Współpracując z zespołami doświadczalnymi mogą dzięki temu projektować nowe biokatalizatory, leki, przełączniki molekularne i inne nowatorskie rozwiązania.

Takie obliczenia wymagają bardzo dużych mocy obliczeniowych. Wykonywane są w trzech największych krajowych centrach superkomputerowych: we Wrocławiu (WCSS), Poznaniu (PCSS) i Warszawie (ICM) oraz we współpracujących z nimi ośrodkach amerykańskich i europejskich. Tylko w WCSS obliczenia te zajęły w 2006 r. 70 tys. godzin pracy procesora, a wykorzystywane oprogramowanie liczy często miliony linii kodu.

Zakład Modelowania Molekularnego i Chemii Kwantowej organizuje regularnie konferencje i warsztaty międzynarodowe. W 2006 r. doktoranci PWr (jedni z najaktywniejszych użytkowników superkomputerów), szkolili amerykańskich profesorów w modelowaniu biomolekuł (patrz: Pryzmat nr 203).

Receptory białkowe

Badanie struktur związków chemicznych z wykorzystaniem symulacji komputerowych jest domeną modelowania molekularnego, które z powodzeniem wspiera uprawianą na szeroką skalę biologię molekularną, inżynierię białka czy chemię kombinatoryczną.



Jednym z projektów naukowych, realizowanych we współpracy z WCSS, było projektowanie inhibitora tworzenia kompleksów białkowych receptorów jądrowych w celu regulowania ich funkcji metabolicznych. Badania wykonywała Agnieszka Szamborska pod kierunkiem prof.

Andrzeja Ożyhara z Wydziałowego Zakładu Biochemii Wydz. Chemicznego przy współpracy Laboratorium Modelowania Molekularnego PWr.

Natura wiązań chemicznych

Zespół Teoretycznego Modelowania Procesów Chemicznych Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego pod kierunkiem prof. dr hab. Zdzisława Latajki od wielu lat zajmuje się teoretycznymi badaniami nad naturą wiązań chemicznych. W badaniach tych stosowane są najnowsze metody chemii kwantowej, wywodzące się z fizyki kwantowej. Wszelkie eksperymenty w tej dziedzinie przeprowadza się przy pomocy szybkich komputerów. Stosując dosyć skomplikowany aparat matematyczny, można analizować naturę wiązań chemicznych, określając miejsca pomiędzy atomami, gdzie gromadzą się elektrony. Jedną z metod używanych przez Zespół jest analiza topologiczna funkcji lokalizacji elektronów (*Electron Localization Function* - ELF).

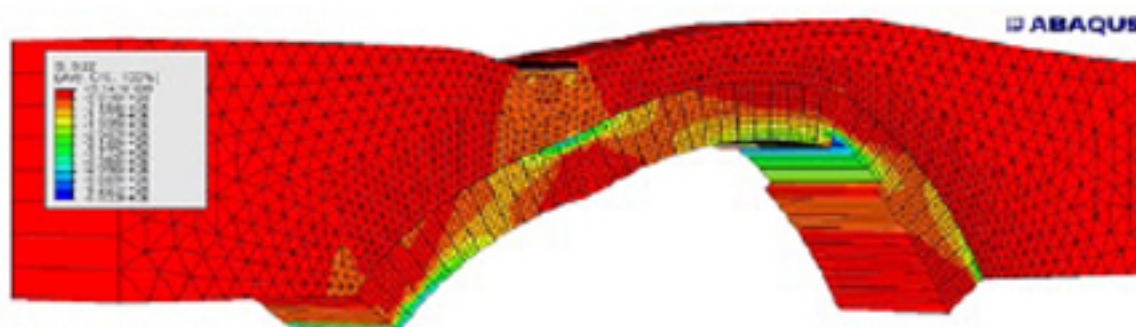
Zespół uniwersytecki jest jedynym w Polsce (i jednym z kilkunastu na świecie) zespołem naukowym wykorzystującym tę metodę do badania natury wiązań chemicznych. Wszystkie jego obliczenia są wykonywane na komputerach WCSS.

Uszkodzenia mostów i bezpieczne spichlerze

Program ABAQUS wykorzystywany jest przez zespół Instytutu Inżynierii Lądowej do prowadzenia nieliniowych analiz wytrzymałościowych murowanych mostów sklepionych. Takie konstrukcje charakteryzują się silnymi nieliniowościami geometrycznymi i materiałowymi oraz znacznie zróżnicowanymi parametrami mechanicznymi poszczególnych części składowych, które oddziałują między sobą w sposób na tyle skomplikowany, że wymagają złożonych i zaawansowanych modeli obliczeniowych.

– *Nasze prace bazują na dwu- i trójwymiarowych modelach MES i koncentrują się głównie na analizie stanu granicznego nośności mostów murowanych w stanie nieuszkodzonym jak i z uwzględnieniem ich typowych uszkodzeń* – mówią dr hab. Jan Bień i Tomasz Kamiński.

Prace te są częścią projektu 6. Programu Ramowego Unii Europejskiej „*Sustainable Bridges – Assessment for Future Traffic Demands and Longer Lives*” oraz projektu Międzynarodowej Unii Kolei (UIC) *Improving Assessment, Optimisation of Maintenance and Development of Database for Masonry Arch Bridges*.



Przykład analizy z użyciem dwuwymiarowego modelu, który uwzględnia ubytek fragmentu sklepienia uszkodzonego mostu murowanego – zdeformowana postać modelu MES z wizualizacją naprężeń

W Zakładzie Konstrukcji Betonowych Instytutu Budownictwa PWr program ABAQUS służy do prowadzenia nieliniowych analiz numerycznych silosu żelbetowego wypełnionego materiałem sypkim – zbożem.

Badania takie prowadzi doktorantka mgr inż. Elżbieta Pawlik pod opieką dr hab. Mieczysława Kamińskiego. Wnioski z jej badań przedstawiono m.in. na konferencji BulkEurope2006.

Kształtowanie metali

Przy użyciu programu MSC MARC można symulować procesy dynamiczne, jak np.: kształtowanie plastyczne metali, formowanie tworzyw sztucznych, zderzenia pojazdów, przepływ cieczy, ciepła czy prądu elektrycznego. Zajmuje się nimi Zakład Inżynierii Procesów Kształtowania Instytutu Technologii Maszyn i Automatykacji PWr pod kierownictwem prof. Zbigniewa Gronostajskiego. Pokazany przykład tworzenia fałd podczas tłoczenia blach spawanych umożliwia wykonywanie wyrobów bez wad, o dużej dokładności.

Paliwa przyszłości

Rodzaj scenariusza zmian klimatycznych naszej planety zależy w głównej mierze od tego, jakie uda się podjąć kroki zaradcze. Naturalne jest więc dążenie do zamiany paliw generujących gazy cieplarniane na takie, których produkty spalania będą obojętne dla środowiska. Za paliwo przyszłości uważany jest wodór, najbardziej rozpowszechniony pierwiastek we wszechświecie. Jednakże nie jest on paliwem w klasycznym pojęciu, a jedynie nośnikiem energii pozyskiwanej z innych źródeł, który musi być najpierw wyprodukowany. Przekłada się to na problemy technologiczne i ekonomiczne procesu jego produkcji.

Największą trudnością w wykorzystaniu wodoru jako paliwa jest sposób jego magazynowania. Próba rozwiązania tego problemu stała się inspiracją pracy badawczej przeprowadzonej na komputerach WCSS pod opieką dr. Bartłomieja Szyi przez Zakład Chemii i Technologii Paliw PWr.

(oprac. km)