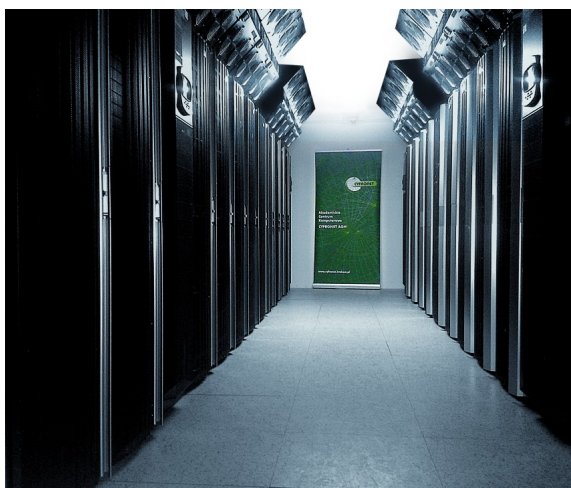


Infrastruktura PLGrid	1
Superkomputer Zeus z AGH - najmocniejszym komputerem w Polsce w 2014 r.	1
...a Prometheus już szykuje się do pracy	2
Sukces zespołu Onedata w konkursie Copernicus Masters	3
Użytkownicy, granty, zespoły	4
Nowe usługi i narzędzia w Infrastrukturze PLGrid	4
Usługi ogólne	5
Narzędzia pracy zespołowej	5
Usługi PLGrid Plus dedykowane wybranym dziedzinom nauki	5
Baza Danych Projektowych (Akustyka)	5
Słuch (Akustyka)	6
Obserwacje nasion (Ekologia)	6
Portal Nanomechanika (Nanotechnologie)	7
Wirtualny Akcelerator (SynchroGrid)	7
Nowe inicjatywy gridów dziedzinowych w projekcie PLGrid NG	8
Chemia Obliczeniowa	8
eBalticGrid	11
Konferencja CGW Workshop	13

Infrastruktura PLGrid

Superkomputer Zeus z AGH – najmocniejszym komputerem w Polsce w 2014 r. ...



Komputer Zeus z ACK Cyfronet AGH w Krakowie ponownie znalazł się na prestiżowej liście TOP500, pięciuset najpotężniejszych superkomputerów świata – tym razem na 211 miejscu – i po raz kolejny (10-ty) z rzędu uzyskał tytuł najszybszego komputera w Polsce.

Najnowsza edycja listy TOP500 została ogłoszona 17 listopada 2014 r. na konferencji SC'2014 w Nowym Orleanie, USA.

Krakowski superkomputer posiada aktualnie 25468 rdzeni obliczeniowych o łącznej teoretycznej mocy obliczeniowej 374Tflops (teraflopsów), 60 TB (terabajtów) pamięci operacyjnej RAM oraz pamięć dyskową o pojemności 2,3 PB (petabajta). Klaster Zeus zbudowany jest z ponad tysiąca trzystu pojedynczych serwerów typu blade, połączonych ze sobą za pomocą sieci Infiniband o prędkości 40 Gb/s. Część serwerów wyposażona jest w karty GPGPU firmy NVIDIA, umożliwiające wielokrotne przyspieszenie wybranych algorytmów używanych w aplikacjach naukowych. Klaster pracuje pod kontrolą systemu operacyjnego Scientific Linux.

Zeus jest największym superkomputerem Infrastruktury PLGrid, ogólnopolskiej infrastruktury prowadzenia badań naukowych *in silico*. Jego moc obliczeniowa pozwala mu wykonywać ponad 370 bilionów operacji matematycznych w ciągu sekundy. Odpowiada to wydajności ponad 20 tysięcy standardowych komputerów klasy PC. Superszybka sieć Infiniband pomiędzy serwerami wchodzącymi w skład Zeusa umożliwi przesłanie zawartości całej płyty DVD w czasie nieco przekraczającym jedną sekundę, a przestrzeń dyskowa, przeznaczona dla użytkowników klastra, byłaby w stanie pomieścić zawartość niemal 500 tysięcy takich płyt.

Dzięki Infrastrukturze PLGrid i gridom dziedzinowym – de-

dykowanym środowiskom badań – naukowcy z całej Polski mają możliwość łatwego wykorzystywania olbrzymiej mocy Zeusa do rozwiązywania coraz bardziej złożonych problemów obliczeniowych. Modelowanie sieci energetycznych i zapotrzebowania na energię, projektowanie leków i nowych materiałów to jedynie wybrane zagadnienia badawcze z blisko trzydziestu gridów dziedzinowych, realizowanych przy jego pomocy.

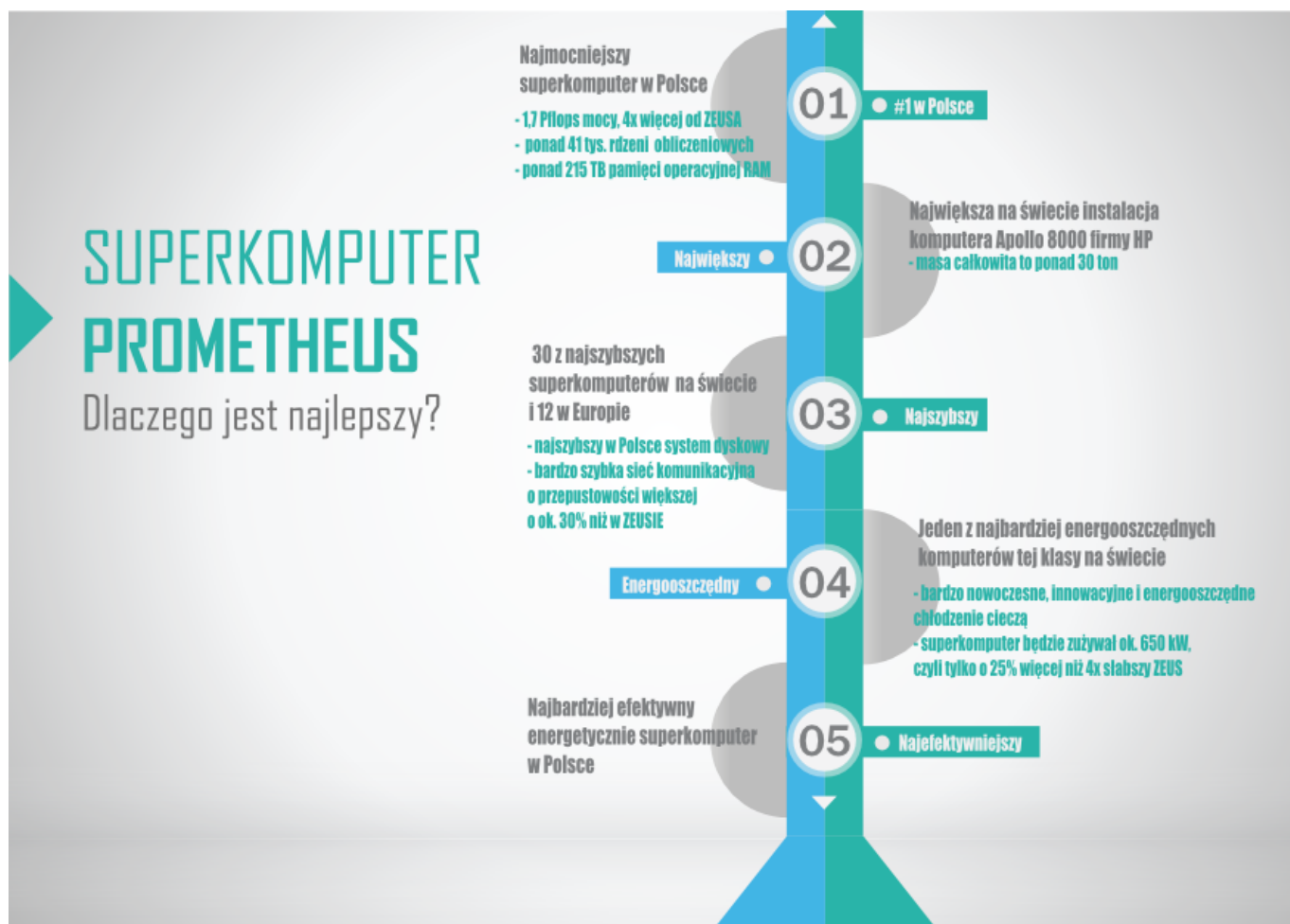
Zeus jest częścią ogólnopolskiej infrastruktury gridowej stworzonej w ramach projektu PL-Grid i rozwijanej w projektach PLGrid Plus, PLGrid NG i PLGrid Core.

...a Prometheus już szykuje się do pracy

20 października 2014 roku, w ACK Cyfronet AGH nastąpiło uroczyste podpisanie umowy na dostawę najpotężniejszego superkomputera w historii Polski – Prometheusa. Będzie on cztery razy mocniejszy niż słynny Zeus – do tej pory najlepszy komputer w Europie Środkowo-Wschodniej.

Nowy superkomputer zostanie zbudowany przez firmę Hewlett-Packard i zostanie złożony z ponad 1700 serwerów platformy HP Apollo 8000, połączonych superszybka siecią Infiniband o przepustowości 56 Gbit/s. Komputer będzie po-

siadał ponad 41 tysięcy rdzeni obliczeniowych (procesorów Intel Haswell najnowszej generacji) oraz ponad 215 TB pamięci operacyjnej w technologii DDR4. Do Prometheusa zostaną dołączone dwa systemy plików o łącznej pojemności 10 PB oraz ogromnej szybkości dostępu: 150 GB/s. Teoretyczna moc obliczeniowa nowego polskiego superkomputera wynosić będzie niemal 1,7 Pflops (petaflopsów). Oznacza to, że według obecnej listy TOP500 będzie to jeden z 30 najszybszych komputerów na świecie i 13 w Europie.



Prometheus, dzięki innowacyjnej technologii bezpośredniego chłodzenia wodą procesorów i modułów pamięci operacyjnej, stanie się jednocześnie jednym z najbardziej energooszczędnych komputerów tej klasy na świecie – efektywność energetyczna tego systemu będzie dorównywać systemom największych centrów danych na świecie, takich jak Google czy Facebook. Chłodzenie wodą umożliwi osiągnięcie ekstremalnie wysokiej gęstości instalacji, dzięki czemu ważyca ponad

trzydzieści ton część obliczeniowa zmieści się w zaledwie piętnastu szafach – w przypadku zastosowania tradycyjnego chłodzenia powietrzem byłoby ich co najmniej dwa razy więcej. Cały system obliczeniowy zostanie zainstalowany w niedawno oddanej do użytku hali komputerowej w nowym budynku ACK Cyfronet AGH. Oprócz samego komputera i systemu dyskowego, zostaną tam także zainstalowane niezbędne elementy infrastruktury technicznej, takie jak system gwarantowanego zasilania elektrycznego z dodatkowym generatorem awaryjnym.



Najpotężniejszy polski superkomputer, podobnie jak Zeus, służyć będzie naukowcom z różnych dziedzin – będą to obliczenia z dziedziny chemii, fizyki, astrofizyki, biologii, energetyki czy nanotechnologii. Komputer realizować będzie także zadania na potrzeby wielkich projektów naukowych, w których uczestniczy ACK Cyfronet AGH. Tak jak w przypadku Zeusa, również z zasobów Prometheusa naukowcy będą korzystać bezpłatnie.

Prometheus wejdzie w skład ogólnopolskiej infrastruktury gridowej, stworzonej i rozbudowywanej w ramach projektów realizujących Program PLGrid.

Prometeusz zostanie zainstalowany w nowym budynku Cyfronetu

Sukces zespołu Onedata w konkursie Copernicus Masters



Zespół Wykonawców z Katedry Informatyki AGH i ACK Cyfronet AGH realizujący system Onedata, w ramach projektów PLGrid Plus i PLGrid Core, zajął 3. miejsce w kategorii „T-SYSTEMS BIG DATA CHALLENGE” międzynarodowego konkursu organizowanego przez Program Copernicus.

Program Copernicus to program monitorowania Ziemi i środowiska, współfinansowany przez Unię Europejską, European Space Agency i European Environment Agency, we współpracy z bawarskim Ministerstwem Gospodarki, T-Systems GmbH oraz Centrum Aplikacyjnym w Oberpfaffenhofen. Od roku 2011, corocznie, odbywa się konkurs Copernicus Masters, w ramach którego przyznawane są nagrody za rozwiązania innowacyjne dla gospodarki i społeczeństwa, związane z obsługą danych otrzymywanych z obserwacji Ziemi. W 2014 r. w 9 kategoriach zgłoszono 171 prac z 43 krajów.



Onedata to system, który zapewnia jednolity i efektywny dostęp do danych przechowywanych w środowiskach rozproszonych organizacyjnie.

Przeznaczony jest zarówno dla administratorów zarządzających systemami składowania danych dostępnymi w obrębie infrastruktury ośrodków, jak np. w obrębie Infrastruktury

PLGrid, jak i użytkowników tej infrastruktury.

Unikalną cechą Onedata jest zdolność do elastycznego integrowania danych z różnych źródeł (np. publicznych i prywatnych) oraz z różnych typów źródeł (np. systemów plików, baz danych lub zasobów chmurowych) w jedną logiczną, zdefiniowaną przez użytkownika, przestrzeń danych.

Więcej informacji o systemie Onedata można znaleźć w broszurze „Onedata - Unified and Efficient Access to Your Data”, dostępnej na stronie:

http://www.plgrid.pl/projekty/plus/materialy_promocyjne/broszury/pliki/flyer_onedata.pdf

System Onedata jest dostępny dla użytkowników PLGrid ze strony: <https://veilfs.plgrid.pl/>

Użytkownicy, granty, zespoły

Użytkownicy. Na początku listopada 2014 w Portalu PLGrid było zarejestrowanych 2586 kont, co oznacza, że od lipca zanotowaliśmy przyrost liczby użytkowników Infrastruktury PLGrid o 456 osób. Z kolei liczba użytkowników posiadających certyfikat uprawniający do wykonywania obliczeń w trybie gridowym wzrosła w tym czasie z 1177 do 1397 osób.

Zespoły. Od lipca utworzone zostały 64 nowe zespoły użytkowników i obecnie liczba aktywnych zespołów użytkowników zarejestrowanych w Portalu PLGrid wynosi 540.

Granty. Liczba aktywnych grantów osobistych na początku listopada wynosiła 2659, a zarejestrowanych grantów właściwych było 184.

Helpdesk. Użytkownicy aktywnie korzystają z usług wsparcia w systemie helpdesk, o czym świadczą 194 nowe problemy zgłoszone w ostatnim miesiącu do tego systemu. Liczba zgłoszeń rozwiązanych w tym okresie wyniosła 172.

Nowe usługi i narzędzia w Infrastrukturze PLGrid

W ostatnich miesiącach, w Infrastrukturze PLGrid zostały zaimplementowane kolejne usługi ogólnego zastosowania oraz zorientowane dziedzinowo, przygotowane w ramach prac prowadzonych w projekcie PLGrid Plus we współpracy z naukowcami z dziedziny akustyki, ekologii, nanotechnologii i synchrogridu. Do aktywowania usług w Portalu PLGrid niezbędne jest posiadanie konta użytkownika, które można założyć poprzez Portal PLGrid (<https://portal.plgrid.pl>).

Poniżej przedstawiamy krótkie opisy tych nowych usług, a więcej informacji o wszystkich dostępnych usługach w Infrastrukturze PLGrid można znaleźć w Podręczniku Użytkownika, udostępnianym ze strony www.plgrid.pl.

Usługi ogólne

Narzędzia pracy zespołowej



Celem usługi jest udostępnienie profesjonalnych narzędzi wspomagających współpracę podczas realizacji różnego typu projektów. Dzięki pakietowi narzędzi firmy Atlassian, użytkownicy mogą tworzyć własną dokumentację (w narzędziu Confluence), zarządzać przydzielonymi w ramach współpracy zadaniami (używając JIRA) oraz śledzić postępy prac (korzystając z narzędzia Stash). Zespół może też zorganizować profesjonalną telekonferencję przy użyciu narzędzia Adobe Connect.

Wszystkie narzędzia oferowane w ramach usługi są chętnie używane przez jedne z największych firm zajmujących się badaniami i rozwojem specjalistycznego oprogramowania, m.in. przez NASA oraz Audi.

Usługa dostępna jest w Portalu PLGrid, w zakładce „Moje konto”, w sekcji „Narzędzia pracy zespołowej”.

Adobe Connect – to cenione na rynku rozwiązanie do prowadzenia telekonferencji. Aż 50 uczestników jednocześnie może brać udział w spotkaniach, szkoleniach, czy odczytach referatów. W trakcie konferencji narzędzie umożliwia omawianie dostępnej dla wszystkich prezentacji, współdzielenie pulpitu czy jednoczesną pracę nad dokumentem. Więcej informacji o platformie Adobe Connect dostępnych jest na stronie: http://www.plgrid.pl/oferta/telekonferencje_adobe_connect

Confluence – to przestrzeń do agregowania wiedzy typu „wiki”, w której zespoły współpracują i dzielą się efektami swojej pracy. Można w niej tworzyć dokumenty, kalendarze czy prezentacje, wspólnie na nich pracować i dyskutować. Wiedza i ustalenia, rozproszone dotychczas na różnych urządzeniach czy zaginione w korespondencji, mogą teraz znaleźć się w jednym miejscu.

Jira – to narzędzie do planowania pracy i śledzenia jej efektów. Pomaga dzielić zadania pomiędzy członków zespołu i monitorować postęp ich realizacji. Dzięki niemu można też łatwo kategoryzować prace wg priorytetów i terminów.

Stash – to repozytorium Git wraz z dodatkowymi narzędziami. Pomaga w śledzeniu i łączeniu zmian dokonywanych w kodzie przez wiele osób w różnym czasie. Niezastąpione w programistycznej pracy zespołowej.

Więcej informacji na temat usługi zawiera Podręcznik Użytkownika:

<https://docs.plgrid.pl/pages/viewpage.action?pageId=14190615>.

Usługi PLGrid Plus dedykowane wybranym dziedzinom nauki

Baza Danych Projektowych (platforma dziedzinowa: Akustyka)

Usługę stanowi portal internetowy, mający na celu udostępnienie użytkownikom PLGrid bazy danych numerycznych (rezultaty symulacji) oraz eksperymentalnych (wyniki pomiarów),

uzyskanych podczas koordynacji europejskich projektów, badających oddziaływanie fali uderzeniowej z warstwą przyścienną w przepływach około- i naddźwiękowych.

Jednym z głównych źródeł hałasu aerodynamicznego, występującym powszechnie w aeronautyce, są fale uderzeniowe. Niestacjonarne zachowanie fal uderzeniowych oraz ich wpływ na warstwę przyścienną i oderwanie generuje silne impulsy akustyczne, które odbierane są przez ucho ludzkie jako hałas. W europejskiej przestrzeni badawczej realizowane są projekty naukowe skoncentrowane na analizie zachowania fal uderzeniowych i ich kontroli, takie jak: EUROSCHOCK, EUROSCHOCK II, UFAST, czy TFAST. W ich wyniku powstaje ogrom danych, zarówno eksperymentalnych jak i numerycznych, niezmiernie pomocnych badaczom przy tworzeniu i weryfikacji nowych modeli teoretycznych i zrozumieniu podstaw fizycznych zjawiska. Niestety, ich dostępność jest zazwyczaj ograniczona do wąskiego grona uczestników konsorcjum projektu.



Głównym celem uruchomienia nowej usługi dziedziny składowania i udostępniania wyników europejskich projektów badawczych – Baza Danych Projektowych (BDP) – jest umożliwienie badaczom uzyskania dostępu do wartościowych danych dotyczących badań eksperymentalnych i numerycznych oddziaływania fali uderzeniowej z warstwą przyścienną (również niestacjonarnej) w zastosowaniach aeronautycznych w Europie. Jest to pierwsza usługa tego rodzaju, która pozwoli-

łaby, zarówno polskim naukowcom jak i innym, wykorzystać uzyskane wyniki projektów bezpośrednio w ich pracach badawczych.

Aby skorzystać z usługi, należy mieć założone konto w Portalu PLGrid. Usługa dostępna jest w zakładce „Moje konto”, w sekcji „Platforma dziedziny: Akustyka”.

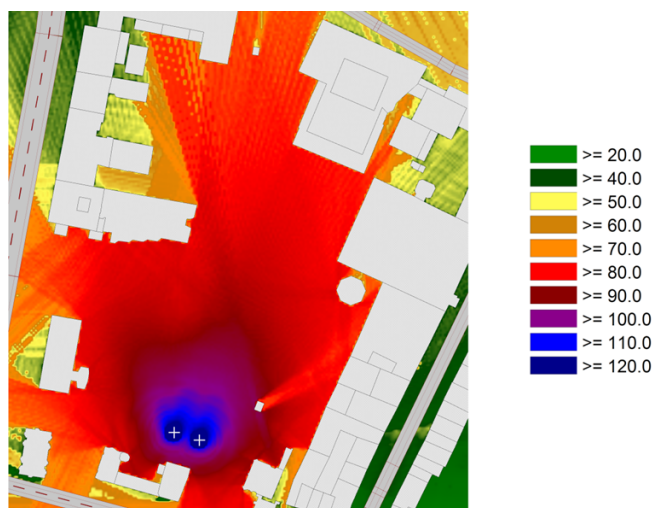
Więcej informacji: <https://docs.plgrid.pl/display/PLGDoc/Akustyka%3A+Baza+Danych+Projektowych>

Słuch (platforma dziedziny: Akustyka)

Usługa umożliwia oszacowanie skutków słuchowych wywołanych na skutek zadanych warunków ekspozycji na hałas. Do realizacji tego celu wykorzystano nowatorskie metody obliczeniowe, tzw. dozymetrię psychoakustyczną. Dzięki usłudze możliwe jest określenie charakteru czasowego przesunięcia progu słyszenia (ang. *Temporary Threshold Shift, TTS*) dla danego rodzaju hałasu i w konsekwencji – dokładne określenie stopnia zagrożeń słuchowych dla zadanych warunków akustycznych.

Aby skorzystać z usługi, należy mieć założone konto w Portalu PLGrid. Usługa dostępna jest w zakładce „Moje konto”, w sekcji „Platforma dziedziny: Akustyka”. Dostęp do usługi jest realizowany za pomocą klienta tekstowego QCG, dlatego wymagane jest zaaplikowanie o usługę „Globalny dostęp QoSCosGrid” (więcej na stronie <https://docs.cyfronet.pl/pages/viewpage.action?pageId=7078623>).

Więcej informacji na temat usługi „Słuch”: <https://docs.cyfronet.pl/pages/viewpage.action?pageId=14194142>

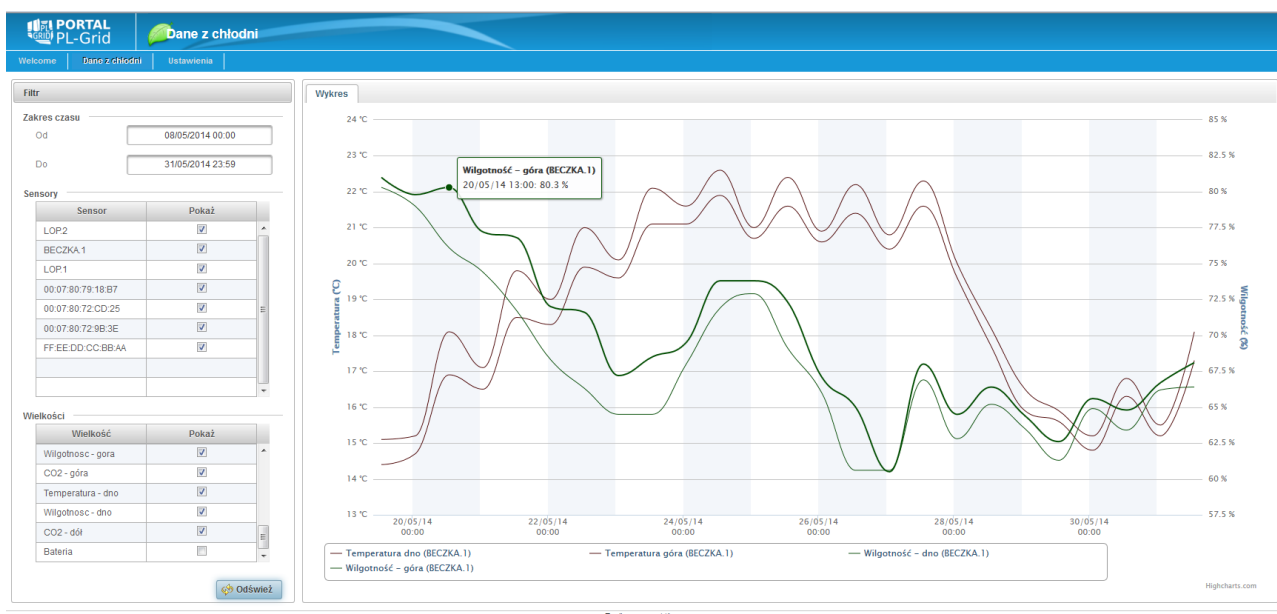


Obserwacje nasion (platforma dziedziny: Ekologia)

W leśnictwie istotnym zadaniem jest zachowanie i wzbogacanie lasów istniejących (odnawianie) oraz tworzenie nowych (zalesianie). Pierwszym etapem jest zbiórka i przechowywanie nasion w odpowiednich warunkach. W tym celu część nadleśnictw posiada specjalne przechowalnie nasion, w których są one składowane na okres od kilku miesięcy do nawet kilku lat. Usługa „Obserwacje nasion” ma na celu ciągły monitoring

warunków panujących w pomieszczeniach oraz kontenerach używanych do przechowywania nasion oraz informowanie użytkowników w przypadku wykrycia anomalii.

Przechowalnia nasion przeważnie podzielona jest na kilka komór, w których panują zróżnicowane warunki atmosferyczne, a które wykorzystywane są na różnych etapach przechowywania. Parametry mierzone w pomieszczeniach to wilgotność



i temperatura, natomiast kontenery, w których składowane są nasiona (beczki), wyposażone są w dwa zestawy czujników umieszczonych na dole oraz na górze, mierzące temperaturę, wilgotność oraz stężenie CO₂.

W ramach usługi, na terenie przechowalni nasion w nadleśnictwie Łopuchówko, zainstalowany został zestaw czujników oraz niezbędne elementy infrastruktury, takie jak sieć oraz zasilanie. Dane zbierane w wyniku działania sensorów wysyłane są do serwera głównego oraz składowane w bazie danych. Dostęp do zbieranych danych jest możliwy w portalu Obserwa-

cje Nasion (<https://nasiona.plgrid.pl/>). Uprawnione osoby są również w stanie skonfigurować działanie systemu – modyfikować typy sensorów, zmieniać ustawienia wyświetlania typów danych, ustawiać wartości alarmowe, powodujące przesłanie alertów do zainteresowanych osób.

Aby skorzystać z usługi, należy mieć założone konto w Portalu PLGrid. Usługa dostępna jest w zakładce „Moje konto”, w sekcji „Platforma dziedzinowa: Ekologia”.

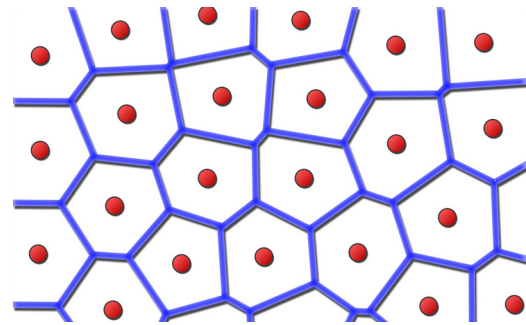
Więcej informacji na temat usługi: <https://docs.cyfronet.pl/display/PLGDoc/Ekologia%3A+Obserwacje+nasion>

Portal Nanomechanika (platforma dziedzinowa: Nanotechnologie)

Usługa przeznaczona jest dla osób, które jako podstawowe narzędzie badawcze wykorzystują metody Dynamiki Molekularnej. Usługa dostarcza szeregu narzędzi, w tym: 1) narzędzi umożliwiających przygotowanie i przeprowadzenie symulacji dynamiczno-molekularnej, 2) narzędzi służących do analizy rezultatów symulacji, w szczególności do charakteryzacji struktury materiałów symulowanych numerycznie.

W skład Portalu NanoMech wchodzi następujące narzędzia składowe: 1) narzędzie „Molecular Dynamics” – umożliwia przygotowanie oraz przeprowadzenie symulacji dynamiczno-molekularnej, stanowi interfejs użytkownika umożliwiający zlecenie zadań wykorzystujących programy LAMMPS oraz nanoMD, 2) narzędzie „Anelli” – służy do analizy pierścieniowej materiałów symulowanych numerycznie, umożliwia charakteryzację uporządkowania średniego zasięgu, 3) narzędzie „Simpl” – umożliwia charakteryzację uporządkowania krótkiego zasięgu przy użyciu analizy wielościanów Voronoï’a.

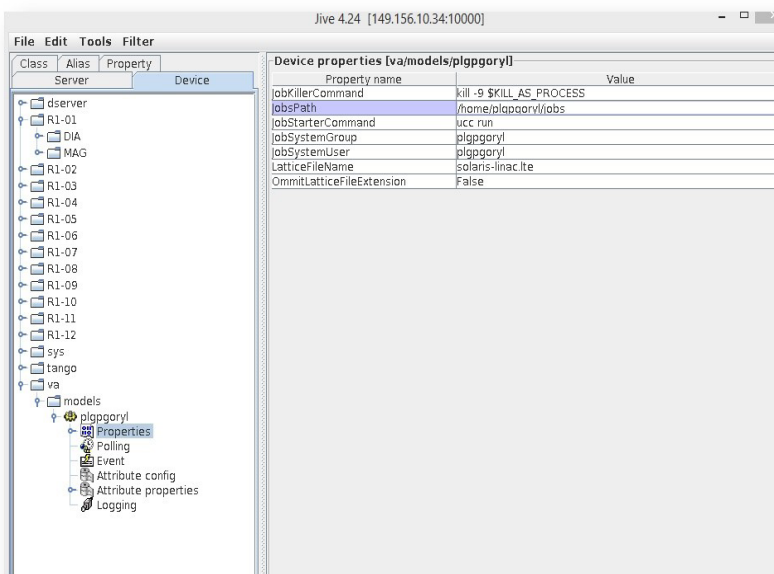
Aby skorzystać z usługi, należy mieć założone konto w Portalu PLGrid. Usługa dostępna jest w zakładce „Moje konto”,



w sekcji „Platforma dziedzinowa: Nanotechnologie”. Portal Nanomech do zlecania oraz monitoringu zadań wykorzystuje oprogramowanie pośredniczące QosCosGrid, konieczne jest więc również aktywowanie usługi „Globalny dostęp QosCosGrid” (<https://docs.cyfronet.pl/pages/viewpage.action?pageId=7078623>).

Więcej informacji: <https://docs.cyfronet.pl/display/PLGDoc/Nanotechnologie%3A+Portal+Nanomechanika>

Wirtualny Akcelerator (platforma dziedzinowa: SynchroGrid)



Usługa przeznaczona jest przede wszystkim dla operatorów oraz osób tworzących oprogramowanie dla synchrotronu. Dodatkowymi użytkownikami mogą w przyszłości być prowadzący zajęcia oraz studenci zajęć fizyki akceleratorowej.

W ramach usługi oferowany jest model systemu sterowania synchrotronu (warstwa Tango) wraz z podstawowym modelem obliczeniowym akceleratora. Modele te mogą być konfigurowane w zależności od potrzeb użytkownika.

Aby skorzystać z usługi, należy mieć założone konto w Portalu PLGrid, posiadać certyfikat gridowy oraz aktywną usługę „Globalny dostęp UNICORE”. Warto mieć również aktywne usługi potrzebne do obliczeń modelu akceleratora: „Elegant” oraz „Tracy”.

Więcej informacji: <https://docs.cyfronet.pl/display/PLGDoc/Synchrogrid%3A+Wirtualny+Akcelerator>

Nowe inicjatywy gridów dziedzinowych w projekcie PLGrid NG

Gridy dziedzinowe to unikalna inicjatywa, pozwalająca na łączenie wiedzy dziedzinowej ekspertów z inżynierią oprogramowania i wsparciem technicznym. Połączenie takie pozwala na maksymalnie efektywne wykorzystanie infrastruktury PLGrid przez jej użytkowników. Bezpośrednim efektem utworzenia gridu dla danej dziedziny nauki będzie nie tylko lepsze wykorzystanie dostępnych mocy obliczeniowych, ale przede wszystkim stałe podnoszenie poziomu naukowego badaczy danej dyscypliny.

W ramach projektu PLGrid Plus, zrealizowano już większość spośród zaplanowanych domenowo-specyficznych środowisk dla użytkowników z 13 strategicznych dziedzin nauki. Cel został osiągnięty dzięki rozbudowie infrastruktury, rozwojowi zaawansowanych aplikacji i usług poprzez zapewnienie

ponadregionalności proponowanych działań oraz ciągłemu rozwojowi bazy sprzętowej przy zachowaniu wysokiej dostępności dla użytkowników.

Sukces projektu PLGrid Plus, a w szczególności przygotowanych usług, spowodował wzrost zapotrzebowania na podobne narzędzia dla innych dziedzin nauki. Dlatego, celem projektu PLGrid NG jest dostarczenie dedykowanych dziedzinowych usług obliczeniowych dla 14 nowych grup badaczy z różnych dyscyplin naukowych – uznanych jako priorytetowe w Krajowym Programie Badań – i wdrożenie tych usług w narodowej infrastrukturze obliczeniowej PLGrid. Poniżej przedstawiamy więcej informacji na temat wybranych dwóch gridów dziedzinowych projektu PLGrid NG.

Gridowe usługi obliczeniowe z dziedziny „Chemia Obliczeniowa”

Informacji na temat usług i ich zastosowania udzielili nam naukowcy z Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego:



dr hab. Andrzej Eilmes
koordynator gridu
dziedzinowego „Chemia
Obliczeniowa”



dr Grzegorz Mazur
wykonawca zadań w
gridzie dziedzinowym



dr Marcin Makowski
wykonawca zadań w
gridzie dziedzinowym

Jaka jest tematyka prac gridu dziedzinowego „Chemia Obliczeniowa” w projekcie PLGrid NG?

Grid „Chemia Obliczeniowa” ukierunkowany jest na badaczy wykorzystujących w swych pracach metody chemii teoretycznej i szeroko pojętej chemii obliczeniowej – od symulacji klasycznej dynamiki molekularnej do dokładnych obliczeń kwantowochemicznych. Doskonalenie metodologii chemii teoretycznej, rozwój oprogramowania oraz zwiększenie jego dostępności, a także stały wzrost mocy obliczeniowych współczesnych komputerów spowodowały, że metody chemii obliczeniowej stały się typowym narzędziem badacza pozwalającym na interpretację wyników eksperymentów, a czasem nawet ich przewidywanie, oraz pomagającym w ra-

jonalnym projektowaniu nowych materiałów o pożądanych własnościach. Warto zwrócić uwagę, iż przedmiotem zainteresowania chemika są układy o rozmiarach różniących się o rzędy wielkości: od atomów i dwuatomowych molekuł, poprzez większe cząsteczki aż do makrocząsteczek (np. białek lub polimerów), czy układów wielu cząsteczek (kryształy, agregaty molekularne, roztwory, warstwy cząsteczek – np. błony biologiczne). Analogicznie, wśród narzędzi chemii teoretycznej są metody skrajnie różniące się kosztem obliczeniowym. Badanie konkretnego układu wymaga zatem odpowiedniego doboru metody, a w przypadku zastosowań w biochemii czy

nanotechnologii, na ogół umiejętnego połączenia wielu dostępnych metodologii przy budowie złożonych modeli opisujących układ na różnych poziomach. Dowodem dostrzeżenia znaczenia takiego modelowania jest przyznanie w 2013 roku Nagrody Nobla z chemii za „rozwój wieloskalowych modeli do opisu złożonych układów chemicznych”.

Wobec praktycznie nieograniczonej mnogości interesujących układów chemicznych oraz możliwości modelowania ich różnorodnych własności nie powinno być zaskakujące, iż badacze stosujący metody chemii obliczeniowej są jedną z najliczniejszych grup użytkowników Infrastruktury PLGrid – i jednocześnie bardzo intensywnie wykorzystujących zasoby

Infrastruktury. Grupa ta jest bardzo różnorodna: począwszy od studentów pragnących wspomóc swoje badania eksperymentalne obliczeniami, poprzez coraz bardziej doświadczonych badaczy, aż do ekspertów rozwijających metodologię lub oprogramowanie chemii obliczeniowej. W trakcie realizacji kończącego się projektu PLGrid Plus rozwinięta została platforma InSilicoLab for Chemistry, ułatwiająca uruchamianie obliczeń kwantowochemicznych w Infrastrukturze PLGrid oraz wspomagająca sekwencyjne łączenie modeli. Obecnie prace gridu dziedzinowego w projekcie PLGrid NG ukierunkowane są zasadniczo na użytkowników o większym doświadczeniu, a także tych, którzy prowadzą czasochłonne obliczenia.

Jakie nowe usługi zostały zaplanowane do wdrożenia w ramach prac gridu „Chemia Obliczeniowa”?

W wyniku prac gridu dziedzinowego powstanie baza danych spektroskopowych MOOSE (ang. *Molecular Optical Spectroscopy Database*), która będzie agregować dokładne dane eksperymentalne dotyczące stanów wzbudzonych cząsteczek oraz referencyjne wyniki obliczeniowe. Adekwatny opis stanów wzbudzonych jest z jednej strony kluczowy dla badaczy zajmujących się zagadnieniami z zakresu fotochemii czy spektroskopii molekularnej, z drugiej stają oni często przed problemem dokonania racjonalnego wyboru spośród różnorodności dostępnych metod obliczeniowych (lub ich wariantów – np. doboru odpowiedniego funkcjonatu DFT). Aplikacja bazoda-

nowa ma dostarczyć im informacji pomocnych w wyborze spośród nich takich metod, które będą wystarczająco dokładne dla rozwiązania ich konkretnego problemu badawczego. Oprócz tej podstawowej funkcjonalności, baza ma stanowić także źródło danych dla naukowców tworzących narzędzia obliczeniowe, w szczególności implementujących i testujących nowe metody obliczeniowe. Zamierzamy również sprząc tworzoną usługę ze środowiskiem InSilicoLab for Chemistry, aby wykorzystać jej potencjał jako systemu ekspertowego oraz ułatwić proces przygotowywania obliczeń.

Baza danych spektroskopowych

Czy działania w ramach gridu „Chemia Obliczeniowa” przyniosą również jakieś korzyści dla badaczy prowadzących długotrwałe obliczenia?

Mimo ustawicznego zwiększania się szybkości procesorów oraz doskonalenia oprogramowania (implementacja wydajniejszych metod) widzimy, że zapotrzebowanie na czas obliczeniowy ze strony chemików nie tylko nie maleje, ale systematycznie wzrasta. Zjawisko to można określić popularnym powiedzeniem „apetyt rośnie w miarę jedzenia”. Zwiększająca się moc obliczeniowa dostępna dla naukowców zachęca do podejmowania ambitniejszych wyzwań – badania układów większych niż było to możliwe do tej pory oraz stosowania dokładniejszych (lecz bardziej kosztownych) metod. Rozmaitość i złożoność natury dostarczy zajęcia kolejnym pokoleniom badaczy, zatem przyspieszenie obliczeń będzie zawsze aktualnym wyzwaniem.

Ograniczenia natury fizycznej powodują, że zwiększenie wydajności systemów obliczeniowych uzyskuje się obecnie głównie nie poprzez przyspieszenie pracy elementarnych jednostek obliczeniowych, zwanych popularnie rdzeniami, a przez zwiększenie ich liczby. Jakkolwiek ten trend jest widoczny we wszystkich układach, specyfika grafiki komputerowej spowodowała, że najbardziej zaawansowane w tym względzie są karty graficzne (ang. *Graphics Processing Unit, GPU*). W przeciwieństwie do typowych procesorów (ang. *Central Processing Unit, CPU*), zawierających kilka do kilkudziesięciu rdzeni, karty graficzne zbudowane są z kilkuset do kilku tysięcy rdzeni. Dlatego też za przełomowe należy uznać rozszerzenie funkcjonalności GPU umożliwiające wykonywanie na nich obliczeń dowolnego rodzaju, a nie jedynie takich, które służą

do generowania grafiki komputerowej. To podejście, nazywane General Purpose computing on Graphics Processing Units (GPGPU), umożliwia znaczące przyspieszenie obliczeń naukowych poprzez wykorzystanie dużej mocy obliczeniowej nowoczesnych kart graficznych.

Oczywistym problemem każdej nowej architektury jest ograniczona dostępność oprogramowania umożliwiającego wykorzystanie jej możliwości. Na szczęście, potencjał drzemący w kartach graficznych spowodował ich dużą popularność w centrach obliczeniowych, co pociągnęło za sobą szybki rozwój aplikacji naukowych wykorzystujących nowe układy. Wśród nich znajduje się TeraChem, pakiet do obliczeń kwantowochemicznych przeznaczony do uruchamiania na kartach graficznych firmy Nvidia. Pozwala on na wyraźne, nawet kilkunastokrotne, przyspieszenie niektórych typowych obliczeń.

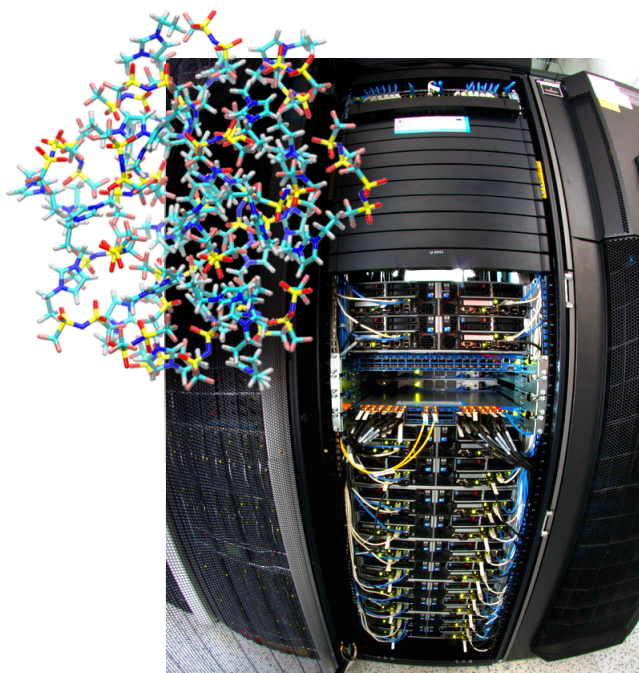
Niestety, uruchamianie nowego oprogramowania, na dodatek wykorzystującego nietypowe układy obliczeniowe, oznacza konieczność nie tylko opanowania przez użytkownika innego formatu danych wejściowych, ale też specyficznego sposobu uruchamiania obliczeń. Dlatego, aby ułatwić użytkownikom wykorzystanie dostępnej w klastrze Zeus mocy obliczeniowej, opracowujemy rozszerzenie platformy InSilicoLab for Chemistry o funkcjonalność umożliwiającą prowadzenie obliczeń kwantowochemicznych z wykorzystaniem kart graficznych. Ułatwi to użytkownikom rozpoczęcie pracy z nowym dla nich oprogramowaniem.

W jaki sposób Infrastruktura PLGrid będzie wykorzystana w pracach związanych z chemią obliczeniową?

W ACK Cyfronet AGH dostępny jest klaster Zeus GPGPU składający się z maszyn wyposażonych w przeznaczone do obliczeń naukowych karty GPU Nvidia – w sumie ponad 200 kart. Użytkownicy mogą korzystać na nim z szeregu programów, w

tym pakietu TeraChem do obliczeń kwantowochemicznych – obecnie poprzez system kolejkowy. Poszerzenie funkcjonalności portalu InSilicoLab for Chemistry o wsparcie obliczeń na GPGPU zachęci użytkowników gridu do skorzystania z możliwości, jakie stwarzają karty graficzne, pomagając w ten sposób lepiej wykorzystać potencjał klastra Zeus GPGPU.

Przyspieszenie obliczeń z użyciem GPU ma oczywiste znaczenie dla użytkownika – krócej czeka on na wyniki, zatem może szybciej rozwiązać postawiony problem lub w tym samym czasie zbadać więcej układów. Warto jednak zwrócić uwagę na nieco mniej oczywistą stronę zagadnienia, a istotną z punktu widzenia infrastruktury: dzięki wykorzystaniu kart graficznych wynik możemy otrzymać nie tylko szybciej, ale i przy mniejszym zużyciu energii elektrycznej. O ile „zwykły” użytkownik nie zaprzęta sobie głowy takimi szczegółami, o tyle zmniejszenie zapotrzebowania na energię jest ważne dla centrów komputerowych, nieustannie stojących przed problemem dostarczenia mocy niezbędnej do zasilania sprzętu, a później odprowadzenia wytworzonego ciepła. Oprócz aspektu „lokalnego”, dla centrum obliczeniowego, można dostrzec też aspekt globalny – potrzebujemy rozwiązań ograniczających zużycie energii przez naszą cywilizację. Możemy się więc pokusić o stwierdzenie, że skuteczne wykorzystanie kart graficznych do przyspieszania obliczeń naukowych pomaga chronić środowisko.



Zeus GPGPU

Gridowe usługi obliczeniowe z dziedziny „eBalticGrid”

Informacji na temat usług i ich zastosowania udzielili nam naukowcy z Instytutu Oceanologii PAN w Sopocie:



Jaromir Jakacki
koordynator



Michał Przyborski
specjalista analityk



Artur Nowicki
specjalista analityk



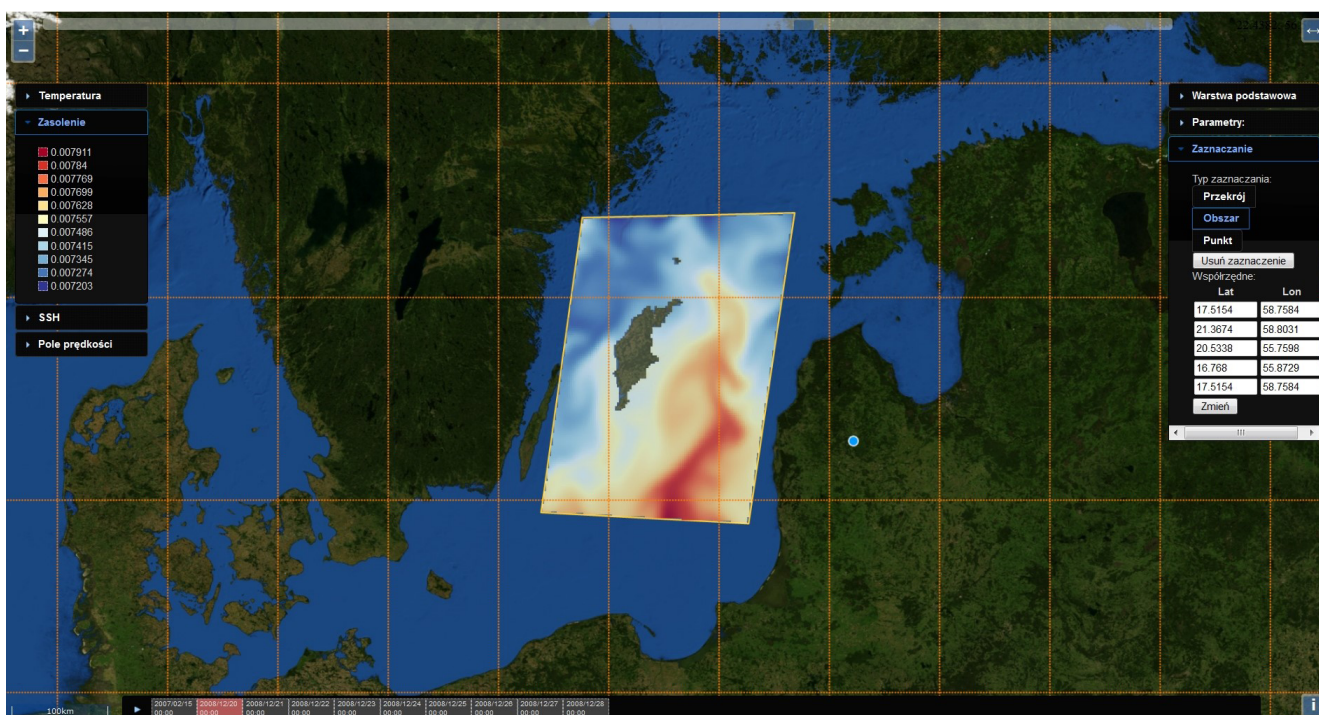
Anna Przyborska
specjalista analityk

Jakie zagadnienia są przedmiotem Waszych badań i prac w projekcie PLGrid NG ?

W ramach badań i prac w PLGrid NG planujemy udostępnić możliwości, na jakie pozwala modelowanie numeryczne procesów wielkoskalowych w Morzu Bałtyckim. Rozwój technologii informatycznych spowodował bardzo szybki rozwój modeli numerycznych, polegający przede wszystkim na zwiększeniu rozdzielczości, z czym związane są modyfikacje parametryzacji stosowanych w modelach. 10-20 lat temu pozioma rozdzielczość modeli o skali globalnej była rzędu jednego stopnia, co odpowiada odległości około 120 km, i była traktowana jako wysoka rozdzielczość. Obecnie jako standard w skali globalnej przyjmuje się 1/10 stopnia. Wzrost mocy obliczeniowych aktualnie dostępnych maszyn cyfrowych pozwala na wykonywanie

tego typu obliczeń w trybie operacyjnym. Głównym celem naszych prac jest dostarczenie użytkownikom wyników połączonych modeli lodu i oceanu dla Bałtyku.

Rezultaty działania takiego układu modeli to nic innego jak stan fizyczny Bałtyku, czyli trójwymiarowe rozkłady temperatury, zasolenia oraz prądów, wysokości powierzchni morza oraz poziomu zlodzenia. Powyższe parametry będą obliczane w trybie operacyjnym (inaczej mówiąc, przygotowana zostanie prognoza stanu Bałtyku – użytkownik będzie miał dostęp do wyników modelu 24 godziny wstecz oraz 48 godzin do przodu).



Zasolenie powierzchni dla wybranego, powiększonego obszaru Bałtyku

Struktura modelu jest bardzo skomplikowana. Obecnie nie istnieje model hydrodynamiczny Bałtyku udostępniony jako tzw. *open source*. Dodatkowo, struktura modelu wymaga dostępu do wieloprocessorowych jednostek obliczeniowych, takich jak klastry lub superkomputery. W związku z tym, liczba osób potrafiących wykorzystywać takie modele jest w skali

kraju bardzo ograniczona. Udostępnienie takiej struktury użytkownikom pozwoli na wykonywanie analiz bez konieczności poznawania nietrywialnej struktury modelu. Warto dodać, iż w naszym przypadku rozdzielczość pozioma modelu wynosi około 2,3 kilometra (dokładnie 1/48 stopnia), natomiast pionowa to 5 metrów dla prawie całego Bałtyku.

Jakie narzędzia i usługi będą opracowywane w ramach Infrastruktury PLGrid, aby rozwiązać powyższe zagadnienia i problemy?

Elementem, który pozwoli potencjalnym użytkownikom na dostęp do wyników modelu, będzie portal internetowy. Jednak jest to wyłącznie końcowy, najbardziej zauważany przez

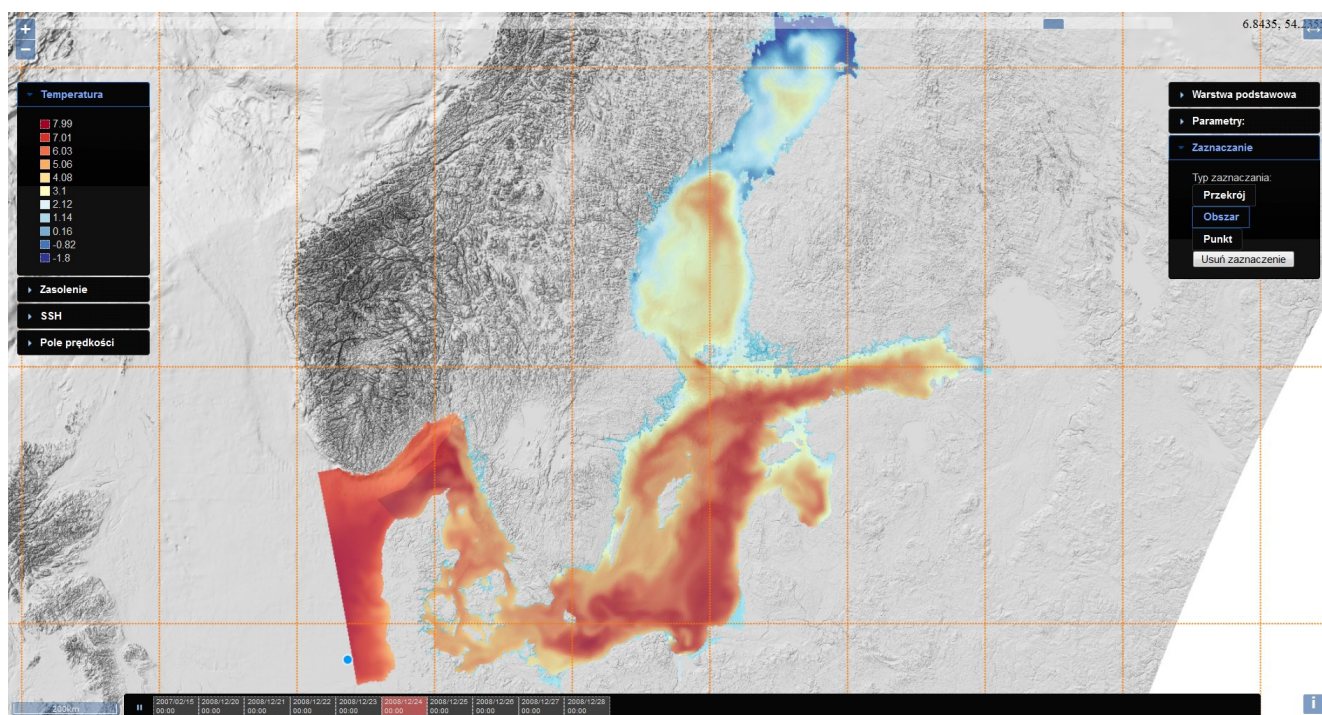
użytkowników element budowanej struktury. Całość można przedstawić jako:

1. Przygotowanie danych atmosferycznych (obecnie sami skonfigurowaliśmy własny model prognostyczny, który pracuje raz na dobę, natomiast docelowo planowane jest użycie danych z innej, obecnie tworzonej, usługi dziedzinowej).
2. Dane wysokości powierzchni morza z Göteborga, używane jako warunek brzegowy.
3. Uruchomienie prognozy modelu Bałtyku.
4. Wprowadzenie wyników do bazy danych PostgreSQL z rozszerzeniem PostGIS.
5. Udostępnienie wyników oraz pewnych operacji na nich użytkownikom poprzez portal oparty na języku PHP i JavaScript.
6. Udostępnienie wybranych danych do pobrania.

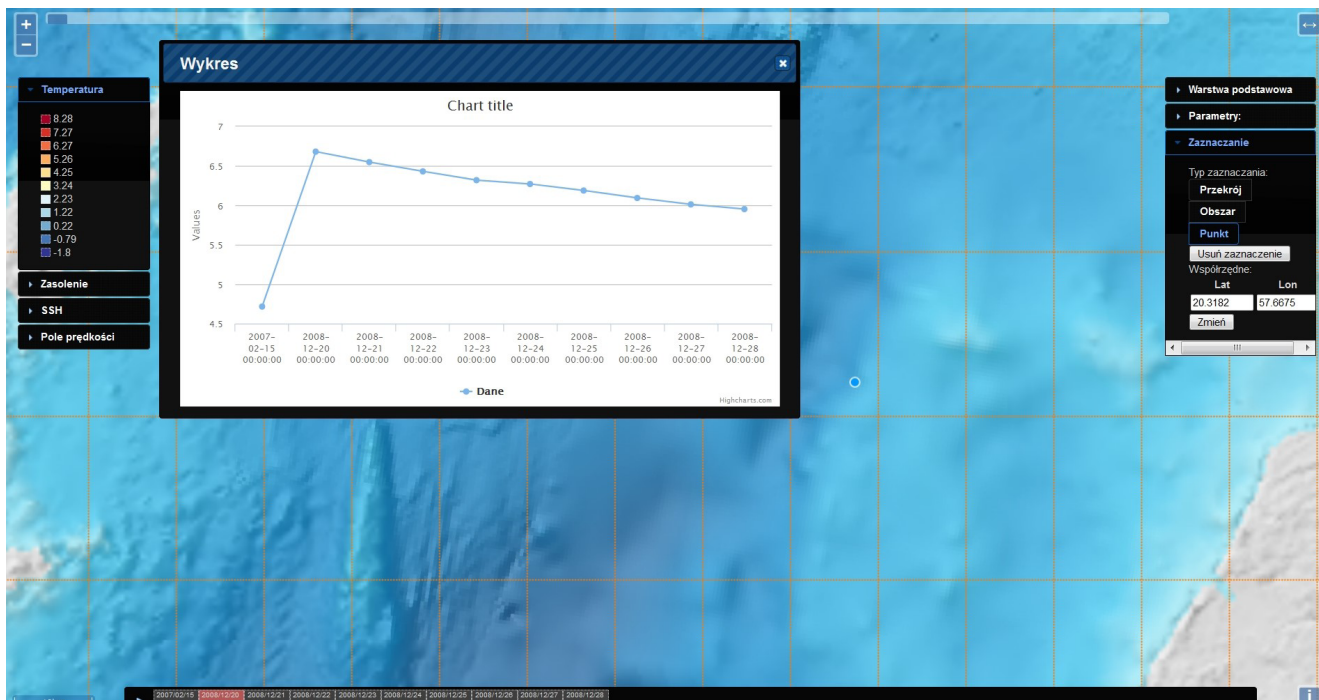
Co będzie wynikiem prowadzonych prac? Co umożliwią wyniki i rozwiązania uzyskane dzięki współpracy realizowanej w ramach projektu PLGrid NG?

Jak już wcześniej wspomnieliśmy, w wyniku prac powstanie portal zawierający prognozę stanu fizycznego Bałtyku. Wyniki będą mogły być wykorzystywane przez pracowników naukowych zajmujących się oceanografią. Będą mogły także służyć jako pomoc naukowa dla studentów. W sezonie urlopowym będzie można sprawdzić temperaturę wody oraz czy nie wy-

stąpi ochłodzenie wody w wyniku działań innych czynników niż temperatura powietrza. Idąc dalej, bardzo istotne są informacje o zlodzeniu w północnej części Bałtyku i prawdopodobnie będzie zainteresowanie w uzyskaniu tego typu danych. Struktura prądów mogłaby być natomiast wykorzystywana do optymalizacji tras statków.



Rozkład temperatury powierzchniowej Bałtyku.



Zmiany temperatury dla określonego punktu.

W jaki sposób Infrastruktura PLGrid będzie wykorzystana do prac prowadzonych w opisanych zagadnieniach związanych z eBalticGrid?

Bez Infrastruktury PLGrid niemożliwe byłoby wykonanie projektu. Wszystkie obliczenia będą wykonywane przy użyciu zasobów PLGrid. Składowanie danych też będzie się odbywało wewnątrz tej infrastruktury informatycznej. Dane meteorolo-

giczne będą dostarczane w ramach obecnie opracowywanej usługi „Meteorologia”. Serwery obsługujące portal, PostgreSQL, PHP i JavaScript będą również pracowały w ramach infrastruktury.

Konferencja CGW Workshop w Krakowie

CGW Workshop jest uznaną, międzynarodową konferencją, gromadzącą corocznie około 150 uczestników. Tematyka konferencji obejmuje: nowe technologie informatyczne z zakresu obliczeń wielkiej skali, obliczenia w chmurze i, tradycyjnie, gridy komputerowe. Konferencja CGW'14 odbyła się w dniach

27 – 29 października w Auli Głównej AGH i salach Katedry Informatyki AGH. Obejmowała prezentacje zaproszonych wykładowców, prezentacje uczestników oraz plakaty – w sumie ok. 65 referatów (w tym 24 dotyczące prac realizowanych w ramach projektów PLGrid Plus, PLGrid NG i PLGrid Core).



W ramach przeprowadzonego konkursu na najlepszy plakat CGW'14, spośród 26 zgłoszonych prezentacji plakatowych, zostały wyłonione do nagrody dwa plakaty (II. i III. miejsce) prezentujące rezultaty prac w ramach projektu PLGrid Plus:

- I. The Performance of the Czech National Grid Infrastructure after Major Reconfiguration of Job Scheduling System, *D. Klusacek and S. Tóth*
- II. Autoconfiguration of Remote Desktop Clients for Cloud-Based, Secure and Interactive Visualization, *D. Harezlak and M. Bubak*
- III. A Novel Environment for Simulation of Quantum Computing, *J. Patrzyk, B. Patrzyk, K. Rycerz, and M. Bubak*

Nagrodzone prezentacje posterowe oraz więcej informacji o tegorocznym programie można znaleźć na stronie konferencji <http://www.cyfronet.krakow.pl/cgw14/programme.html>

Kolejna, piętnasta edycja konferencji CGW zaplanowana jest na 26 – 28 października 2015.

Zapraszamy!



**CGW Workshop jest organizowany przez ACK Cyfronet AGH
we współpracy z Katedrą Informatyki AGH**

Konsorcjum PL-Grid



Newsletter został opracowany we współpracy z Partnerami Konsorcjum PL-Grid.



Projekty PLGrid Plus, PLGrid NG i PLGrid Core są współfinansowane ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka

