Akademickie Centrum Komputerowe

CYFRONET AGH



2021







ACK CYFRONET AGH jest jednostką wiodącą, ustanowioną przez Komitet Badań Naukowych, w zakresie eksploatacji i rozbudowy komputerów dużej mocy (KDM) oraz miejskiej akademickiej sieci komputerowej (MAN). CYFRONET jest koordynatorem Programu PLGrid oraz uznanym przez NCBiR Centrum Kompetencji w zakresie rozproszonych infrastruktur obliczeniowych typu gridowego i chmurowego.

Szanowni Państwo!



Miniony rok przyniósł Polsce i światu nowe wyzwanie w postaci pandemii COVID-19. Wciąż opracowywana odpowiedź na tę sytuację wymaga wzmożonej współpracy specjalistów z wielu dziedzin. W ACK Cyfronet AGH, działającym na styku technologii informatycznych, nauki i gospodarki, niezmiennie wspieramy naukowców w ich badaniach, również w tych trudnych czasach. Obecnie granty obliczeniowe poświęcone badaniom nad koronawirusem SARS-CoV-2 oraz wywoływaną przez niego chorobą COVID-19 mają pierwszeństwo w kolejce dostępu do zasobów Prometheusa i uzyskują najwyższy priorytet w uruchamianiu. Kilkadziesiąt tysięcy rdzeni obliczeniowych superkomputera oraz infrastruktura towarzysząca pozwalają na szybkie przetwarzanie dużych ilości danych medycznych, biologicznych i chemicznych. Badane są m.in. przeciwciała obecne w czasie zakażenia, cząsteczki wykazujące potencjalne działanie hamujące infekcję oraz możliwości rozwoju szczepionek.

Superkomputer Prometheus o mocy obliczeniowej 2,65 PetaFlopsa w czerwcu 2020 roku, ponownie jako jedyny superkomputer z Polski, w rankingu TOP500 najszybszych superkomputerów świata zajął wysokie 288. miejsce. Dodatkowo, pomimo kilku lat od uruchomienia, nadal pozostaje jedną z najbardziej efektywnych energetycznie maszyn, co potwierdziło zajęcie 142 miejsca na liście Green500. Prometheus oraz jego poprzednik Zeus wykonały w 2019 roku łącznie niemal 5 milionów zadań dla naukowców z wielu uczelni i instytutów badawczych.

Superkomputer Prometheus służy medycynie nie od dziś – zainstalowane w jego zasobach specjalistyczne pakiety oprogramowania są na co dzień wykorzystywane m.in. w badaniach związanych z modelowaniem cząsteczek leków, do analiz danych z mikromacierzy DNA, identyfikacji białek i przewidywania ich roli w procesach biologicznych.

Warto podkreślić, że Cyfronet od wielu lat wspiera projekty i inicjatywy związane z rozwojem medycyny i farmacji. Wchodzi w skład i jest inicjatorem konsorcjum realizującego projekt SANO, jeden z 3 projektów zgłoszonych przez polskie jednostki naukowe, którym przyznano granty w europejskim konkursie Teaming for Excellence. Celem projektu jest wprowadzenie kompletnie nowych rozwiązań diagnostycznych i terapeutycznych wynikających z wytworzenia nowych, obliczeniowych biomarkerów chorób, zindywidualizowanych względem poszczególnych pacjentów.

Nie należy jednak zapominać, że tematyka badań naukowych realizowanych przy pomocy zasobów Centrum dotyczy bardzo wielu dziedzin, a liczba naukowców korzystających z naszych superkomputerów ciągle rośnie. Wspieramy badaczy w ich pracach naukowych i w dokonywaniu ważnych odkryć, a każdy sukces Użytkowników infrastruktury Cyfronetu jest dla nas niezmiernie istotny. Ważną informacją dla Użytkowników jest na pewno fakt, że wśród strategicznych infrastruktur wpisanych w styczniu 2020 r. na Polską Mapę Infrastruktury Badawczej znajdują się dwa przedsięwzięcia zgłoszone przez ACK Cyfronet AGH jako inicjatora i koordynatora konsorcjum PLGrid: *Narodowa Infrastruktura Superkomputerowa dla EuroHPC* oraz *Narodowa Infrastruktura Chmurowa PLGrid dla EOSC*.

Bardzo dziękuję wszystkim Przyjaciołom i Użytkownikom za współpracę i cenne wskazówki dotyczące dalszego rozwoju Centrum. Zapraszam do osobistych kontaktów z pracownikami Cyfronetu. W obecnej sytuacji będą to kontakty głównie zdalne, ale liczymy, że przyniosą wiele owoców…

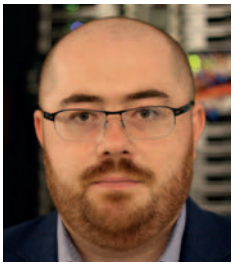
Z wyrazami szacunku
Prof. Kazimierz Wiatr
Dyrektor ACK Cyfronet AGH



DYREKTOR
prof. dr hab. inż. Kazimierz Wiatr
Tel. +48 12 633 34 26
e-mail: Kazimierz.Wiatr@cyfronet.pl



Zastępca Dyrektora
ds. Infrastruktury Informatycznej
mgr inż. Karol Krawentek
Tel. +48 12 633 34 26
e-mail: Karol.Krawentek@cyfronet.pl



Zastępca Dyrektora
ds. Komputerów Dużej Mocy
mgr Marek Magryś
Tel. +48 12 633 34 26
e-mail: Marek.Magrys@cyfronet.pl



Zastępca Dyrektora
ds. Administracyjnych
mgr Agnieszka Szymańska
Tel. +48 12 633 34 26
e-mail: Agnieszka.Szymanska@cyfronet.pl



Zastępca Dyrektora
ds. Ekonomiczno-Finansowych
mgr Angelika Zaleska-Walterbach
Tel. +48 12 633 80 53
e-mail: Angelika.Zaleska@cyfronet.pl

Dział Sieci Komputerowych – mgr Krzysztof Gaweł (kierownik)
Tel. +48 12 634 10 25, e-mail: Krzysztof.Gawel@cyfronet.pl

Dział Komputerów Dużej Mocy – mgr inż. Patryk Lasoń (kierownik)
Tel. +48 12 632 33 55, e-mail: Patryk.Lason@cyfronet.pl

Dział Pamięci Masowych – mgr Marek Magryś (kierownik)
Tel. +48 12 633 34 26, e-mail: Marek.Magrys@cyfronet.pl

Dział Oprogramowania HPC – mgr Łukasz Flis (kierownik)
Tel. +48 12 632 33 55, e-mail: Lukasz.Flis@cyfronet.pl

Dział Użytkowników Komputerów Dużej Mocy – dr Mariusz Sterzel (kierownik)
Tel. +48 12 632 33 55, e-mail: Mariusz.Sterzel@cyfronet.pl

Dział Centrum Operacyjne – dr Andrzej Zemła (kierownik)
Tel. +48 12 632 33 55, e-mail: Andrzej.Zemla@cyfronet.pl

Dział Techniczny Nawojki – mgr inż. Damian Trela (kierownik)
Tel. +48 12 632 33 55, e-mail: Damian.Trela@cyfronet.pl

Dział Techniczny Pychowice – mgr inż. Mariusz Kula (kierownik)
Tel. +48 12 632 33 55, e-mail: Mariusz.Kula@cyfronet.pl

Dział Administracyjny – mgr Agnieszka Szymańska (kierownik)
Tel. +48 12 633 34 26, e-mail: Agnieszka.Szymanska@cyfronet.pl

Dział Ekonomiczno-Finansowy – mgr Angelika Zaleska-Walterbach (kierownik)
Tel. +48 12 633 80 53, e-mail: Angelika.Zaleska@cyfronet.pl

Dział Obsługi Projektów – mgr Aleksandra Pałuk (kierownik)
Tel. +48 12 632 33 55, e-mail: Aleksandra.Paluk@cyfronet.pl

Laboratorium Programu PLGrid – prof. Jacek Kitowski (kierownik)
Tel. +48 12 633 34 26, e-mail: kito@agh.edu.pl

Laboratorium Akceleracji Obliczeń i Sztucznej Inteligencji
dr hab. inż. Paweł Russek, prof. uczelni (kierownik)
Tel. +48 12 633 34 26, e-mail: Pawel.Russek@cyfronet.pl

Laboratorium Technologii Chmurowych – dr Łukasz Dutka (kierownik)
Tel. +48 12 633 34 26, e-mail: Lukasz.Dutka@cyfronet.pl

Laboratorium Przetwarzania Danych – mgr Tomasz Szepieniec (kierownik)
Tel. +48 12 632 33 55, e-mail: Tomasz.Szepieniec@cyfronet.pl

Laboratorium Metod Informatycznych w Medycynie – dr inż. Marian Bubak (kierownik)
Tel. +48 12 633 34 26, e-mail: bubak@agh.edu.pl

Laboratorium Algorytmów Równoległych – prof. Bogusław Cyganek (kierownik)
Tel. +48 12 632 33 55, e-mail: cyganek@agh.edu.pl

Laboratorium Technik Wizualnych – mgr Jacek Przybylski (kierownik)
Tel. +48 12 632 33 55, e-mail: Jacek.Przybylski@cyfronet.pl

Laboratorium Zastosowań Technik Obliczeniowych – dr hab. inż. Łukasz Rauch, prof. uczelni (kierownik)
Tel. +48 12 632 33 55, e-mail: lrauch@agh.edu.pl





fot. Adam Frączek, KSAF AGH




fot. Krzysztof Mastalski, KSAF AGH

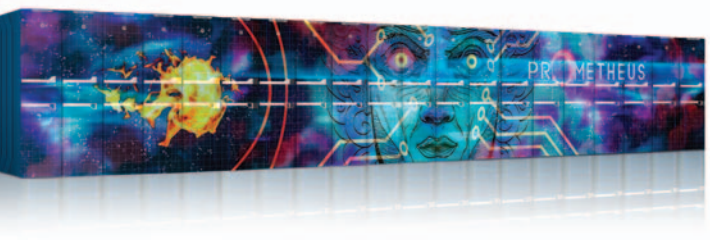
Kadencja 2017-2020

prof. dr hab. Marek Jarnicki *Przewodniczący*	Uniwersytet Jagielloński
prof. dr hab. Marek Jeżabek *Zastępca Przewodniczącego*	Instytut Fizyki Jądrowej PAN
mgr inż. Bogdan Bochenek	Instytut Meteorologii i Gospodarki Wodnej
mgr Andrzej Dietrich	Instytut Nafty i Gazu
mgr inż. Jan Dudek	Uniwersytet Ekonomiczny
prof. dr hab. inż. Florian Gambuś	Uniwersytet Rolniczy
dr inż. Jerzy R. Jaworowski	Politechnika Krakowska
mgr inż. Paweł Kruszelnicki	Akademia Wychowania Fizycznego
dr Robert Gryboś	Instytut Katalizy i Fizykochemii Powierzchni PAN
mgr inż. Wojciech Majka	Uniwersytet Jagielloński Collegium Medicum
mgr Paweł Mikłaszewski	Akademia Muzyczna
ks. dr Roman Mazur SDB	Uniwersytet Papieski Jana Pawła II
prof. dr hab. inż. Andrzej R. Pach	Akademia Górniczo-Hutnicza
dr Wojciech Palacz	Uniwersytet Jagielloński
dr hab. Bartłomiej Pokrzywka, prof. uczelni	Uniwersytet Pedagogiczny
mgr inż. Marek Policht	Instytut Zaawansowanych Technologii Wytwarzania
prof. dr hab. inż. Tomasz Szmuc	Akademia Górniczo-Hutnicza
Z-ca Dyrektora Jacek Barski	Urząd Marszałkowski Województwa Małopolskiego
Dyrektor Grzegorz Żych	Urząd Miasta Krakowa

Prometheus – PetaFlops'owa Moc

Bardzo szybko następujące zmiany w świecie nauki wpływają na tempo rozwoju zaplecza informatycznego, oferowanego naukowcom przez Cyfronet. Rosnące coraz wyraźniej zapotrzebowanie środowisk naukowych na moc obliczeniową i coraz większe magazyny danych jest wyraźnie zauważalne ze strony dziedzin niemalże tradycyjnie związanych z Komputerami Dużej Mocy: chemii, fizyki, astronomii, szeroko rozumianych nauk o życiu oraz dziedzinach im pokrewnych. Astronomia, astrofizyka czy fizyka przestrzeni kosmicznej z jednej strony opierają się na akwizycji i analizie danych, a z drugiej na złożonych symulacjach komputerowych. Nauki biologiczne, chemiczne, medyczne, jak i wyżej wymienione, cechują się dynamicznym rozwojem oraz wprowadzaniem nowych, coraz bardziej wyrafinowanych metod badawczych, np. technik molekularnych opierających się na wysokowydajnym sekwencjonowaniu DNA. Multidyscyplinarna dziedzina, jaką jest medycyna, mierzy się z wieloma czasochłonnymi analizami, m.in. genomu ludzkiego. W efekcie wzrasta zapotrzebowanie na automatyczne zbieranie, przechowywanie i analizowanie sygnałów oraz obrazów biomedycznych, a do realizacji tych procesów niezbędne stają się zasoby superkomputerowe. Możliwość powiązania ze sobą wielu unikatowych danych, to jest danych klinicznych, genetycznych oraz środowiskowych i społecznych, niesie ze sobą wiele korzyści, ale i tu konieczne są dedykowane usługi, które mogą zaoferować jedynie centra superkomputerowe.

To właśnie z tego typu zadaniami mierzy się Prometheus – najszybszy polski superkomputer. Jako następca Zeusa, został włączony do infrastruktury PLGrid i nieodpłatnie służy naukowcom, także w ramach międzynarodowych projektów badawczych.



Wykorzystanie superkomputera obejmuje: analizę wyników badań, symulacje numeryczne, przetwarzanie danych z sieci, zaawansowane wizualizacje oraz równoległą analizę ogromnych zbiorów danych (*big data*).

Prometheus składa się z ponad 2239 serwerów platformy HP Apollo 8000, połączonych superszybką siecią InfiniBand FDR o przepustowości 56 Gbit/s. Superkomputer posiada 53 748 rdzeni obliczeniowych (procesorów Intel Haswell oraz Intel Skylake) oraz 283,5 TB pamięci operacyjnej w technologii DDR4. Został wyposażony w dwa systemy plików o łącznej pojemności 10 PB oraz bardzo dużej szybkości dostępu wynoszącej 180 GB/s. Prometheus jest również wyposażony w 144 karty NVIDIA z procesorami graficznymi GPGPU Tesla K40 XL oraz w 32 karty NVIDIA Tesla V100. Teoretyczna moc obliczeniowa superkomputera to 2,65 PFlops (PetaFlops)!

Co ważne, dzięki innowacyjnej technologii bezpośredniego chłodzenia cieczą procesorów i modułów pamięci operacyjnej, Prometheus zaliczany jest do najbardziej energooszczędnych systemów obliczeniowych tej klasy na świecie. Zostało do osiągnięte dzięki wykorzystaniu do chłodzenia mikroprocesorów cieczy o temperaturze 28°C, do wychłodzenia której w naszym klimacie wystarczą tzw. *dry-coolery,* zamiast konsumujących duże ilości energii elektrycznej generatorów wody lodowej oraz klasycznych klimatyzatorów technologicznych. Dzięki zastosowaniu chłodzenia cieczą, elementy elektroniczne pracują w niższych niż zwykle temperaturach, co



pozytywnie wpływa nie tylko na ich mniejszą awaryjność, ale także pozwala uzyskać wydajność o ponad 5% większą niż dla analogicznej instalacji opartej na klasycznym chłodzeniu powietrzem. Ponadto, chłodzenie cieczą umożliwia osiągnięcie ekstremalnie wysokiej gęstości instalacji – 144 serwerów obliczeniowych, dzięki czemu ważąca ponad czterdzieści ton część obliczeniowa Prometheusa mieści się w zaledwie dwudziestu szafach. Ma to istotny wpływ także na wewnętrzną transmisję danych, bowiem odległości połączeń są tu krytyczne.

Cały system obliczeniowy, wraz z niezbędnymi elementami towarzyszącymi, w tym m.in. systemem gwarantowanego zasilania z dodatkowym agregatem prądotwórczym oraz nowoczesnymi systemami klimatyzacji technologicznej i gaszenia gazem, został zainstalowany w nowoczesnym Centrum Przetwarzania Danych (Data Center) Cyfronetu, specjalnie przystosowanym do eksploatacji Prometheusa.

Prometheus po raz kolejny znalazł się w zestawieniu 500 najszybszych komputerów świata (lista TOP500, edycja z czerwca 2020 r.) zajmując wysokie **288 miejsce, niezmiennie jako jedyny superkomputer z Polski**.

Prometheus w liczbach	
Liczba rdzeni obliczeniowych	53 748
Pamięć operacyjna	283,5 TB
Liczba kart z procesorami graficznymi GPGPU	144
Moc obliczeniowa	2,65 PFlops
Ranking TOP500 najszybszych komputerów świata (czerwiec 2020)	288 lokata

Ponieważ zastosowany w superkomputerze Zeus podział na partycje o różnej funkcjonalności został bardzo dobrze wykorzystany przez użytkowników, architektura superkomputera Prometheus składa się również z kilku klas węzłów o zróżnicowanym przeznaczeniu:

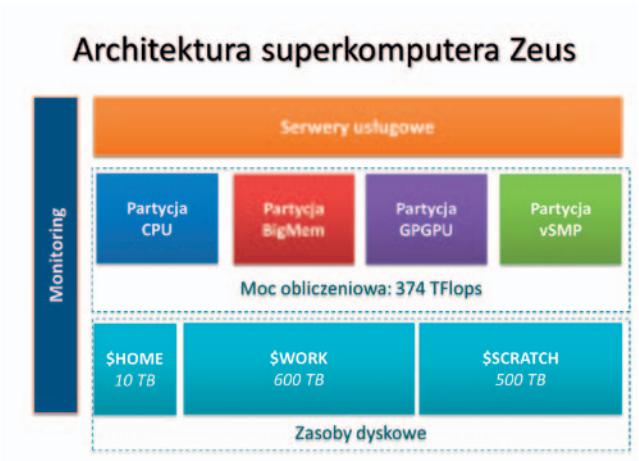
- klasycznej partycji ogólnego przeznaczenia z wydajnymi dwuprocesorowymi węzłami obliczeniowymi (Intel Xeon E5-2680v3 Haswell i Intel Xeon Gold 6128),
- zestawu serwerów wyposażonych w akceleratory graficzne GPGPU NVIDIA Tesla K40 XL,
- partycji akceleracyjnej wyposażonej w zestaw urządzeń uzupełniających konfigurację Prometheusa o kilka rodzajów akceleratorów (m.in.: karty GPGPU – NVIDIA K80, karty Intel Xeon Phi 7120P oraz karty Nallatech z układami FPGA Altera Stratix V: P395-AB2-330A-30 i P395-D8-330A-30),
- partycji dedykowanej dla obliczeń związanych ze sztuczną inteligencją, wyposażonej w akceleratory graficzne GPGPU NVIDIA Tesla V100. Warto wspomnieć, że **partycja ta stanowi system o mocy obliczeniowej ponad 4 PFlops dla operacji tensorowych i 256 TFlops dla standardowych obliczeń wykonywanych na liczbach podwójnej precyzji, co czyni go najszybszym dedykowanym rozwiązaniem dla sztucznej inteligencji dostępnym dla potrzeb nauki w Polsce**.



Rok	Liczba zadań	Czas CPU w latach
2015	1 099 822	5 811
2016	3 080 543	21 239
2017	5 032 438	36 600
2018	5 430 811	39 946
2019	2 738 534	41 829

Dzięki uruchomieniu superkomputera Prometheus użytkownicy otrzymali ponad siedmiokrotnie większe możliwości w porównaniu z wcześniej wykorzystywanym Zeusem. Znacznie wydajniejsze procesory, szybsza sieć połączeń wewnętrznych oraz większa ilość pamięci operacyjnej pozwalają realizować obliczenia w skali niemożliwej do osiągnięcia na wcześniejszych zasobach Cyfronetu.

Zeus – niemal 60 000 lat obliczeń



Nieprzerwanie od roku 2008 w Cyfronecie działa superkomputer Zeus – długoletni lider wydajnościowy rankingów najszybszych systemów obliczeniowych w Polsce. Superkomputer ten posiada aktualnie 25 468 rdzeni obliczeniowych o łącznej teoretycznej mocy obliczeniowej 374 TFlops, 60 TB pamięci operacyjnej RAM oraz pamięć dyskową o pojemności 2,3 PB. Wyposażony dodatkowo w ponad 200 kart GPGPU, stanowi bardzo duże wsparcie dla obliczeń wykonywanych przez społeczności naukowe.

Od momentu instalacji Zeus nieprzerwanie notowany był na liście **TOP500**, najszybszych superkomputerów świata (12 razy), zajmując bardzo wysokie miejsca: cztery razy w pierwszej setce, a najwyżej – **na 81 pozycji**. Zeus był 10-krotnie najszybszy w Polsce.

Architektura

Zeus jest heterogenicznym superkomputerem obliczeniowym. Składa się z czterech klas węzłów, zróżnicowanych pod względem architektury zasobów obliczeniowych, specjalnie dostosowanych do wymagań środowisk naukowych:

- **klasycznego klastra** serwerów obliczeniowych, z wysoko wydajnymi węzłami CPU wyposażonymi w dwa procesory Intel Xeon i 16-24 GB pamięci na węzeł,
- klastra serwerów z dużą ilością pamięci – złożonego z tzw. „**grubych"** węzłów z czterema procesorami AMD Opteron i 256 GB pamięci na węzeł,
- zestawu serwerów wyposażonych w akceleratory **GPGPU** (procesory Intel Xeon i karty NVIDIA M2050 oraz karty NVIDIA M2090) i **FPGA** (moduły Pico Computing M-503 z układami Xilinx Virtex-6 LX240T),
- **„wirtualnego" komputera SMP** z dużą ilością pamięci współdzielonej, wykorzystującego dodatkowe oprogramowanie vSMP firmy ScaleMP, które pozwala na uruchamianie maszyn posiadających do 768 rdzeni i 6 TB pamięci RAM.

Zróżnicowanie rodzajów węzłów umożliwia dopasowanie aplikacji użytkowników do sprzętu, który jest najlepiej dobrany do cech i specjalnych wymagań tych aplikacji. Na przykład, grupa

klasycznych węzłów CPU jest najczęściej wykorzystywana do realizacji szeregowych i równoległych (MPI) zadań obliczeniowych, podczas gdy druga grupa („grube" węzły) jest idealna dla zadań wymagających dużej ilości pamięci operacyjnej. Węzły GPU pozwalają niektórym aplikacjom na korzystanie z akceleratorów GPGPU, a z kolei węzły vSMP umożliwiają uruchamianie zadań wymagających ogromnej pamięci lub pozwalają na skalowanie aplikacji, które nie korzystają z żadnej biblioteki komunikacji między węzłami, takiej jak MPI, w celu zrównoleglenia obliczeń.



Użytkownicy

Od początku swego istnienia, superkomputer Zeus służył całemu polskiemu środowisku naukowemu. W 2019 roku, tylko sam Zeus wykonał ponad **2 miliony zadań** dla naukowców z wielu uczelni i instytutów badawczych. Większość z nich realizowanych było na więcej niż jednym procesorze, a typowe obliczenia użytkownika żądają nawet **kilku tysięcy rdzeni dla jednego zadania**!

Rok	Liczba zadań	Czas CPU w latach
2008	603 525	207
2009	2 227 804	876
2010	4 009 049	990
2011	7 557 817	5 052
2012	8 126 522	7 923
2013	7 932 978	11 016
2014	7 694 224	12 980
2015	6 405 941	10 141
2016	4 668 134	3 414
2017	4 034 454	2 632
2018	2 911 875	2 490
2019	2 255 105	2 198

Wykorzystanie superkomputerów

Prometheus i Zeus są częścią europejskiej chmurowej i gridowej infrastruktury w ramach Europejskiej Infrastruktury Gridowej (EGI). Jednocześnie, Prometheus i Zeus są również ważnymi superkomputerami w ogólnopolskiej infrastrukturze obliczeniowej PLGrid – platformie umożliwiającej prowadzenie badań naukowych *in silico* i wykonywanie obliczeń na komputerach dużej mocy, także w architekturze chmurowej i gridowej.

Dzięki infrastrukturze PLGrid możliwe jest intensywne wykorzystanie mocy obliczeniowych Prometheusa i Zeusa przez naukowców. Dedykowane środowiska obliczeniowe, tzw. gridy dziedzinowe, oraz specjalistyczne platformy informatyczne umożliwiają efektywną realizację coraz bardziej złożonych problemów obliczeniowych. Tematyka badań naukowych realizowanych przy pomocy superkomputerów ACK Cyfronet AGH jest bardzo bogata. Oto wybrane przykłady tematów obliczeń:

- modelowanie aktywności wybranych leków przeciwnowotworowych poprzez nanocząstki węglowe,
- symulacja materiałów biopochodnych do enkapsulacji leków,
- analiza sekwencji DNA preferencyjnie rozpoznawanych przez ludzkie czynniki transkrypcyjne YY1 i YY2,
- modelowanie wybranych białek, ich kompleksów oraz kompleksów jakie tworzą z tRNA i małocząsteczkowymi ligandami,
- opracowanie modelu numerycznego rozchodzenia się ciepła w atmosferze ziemskiej,
- struktura elektronowa i transport jonów w materiałach tlenkowych,
- nadprzewodnictwo w wybranych układach fizycznych,
- badanie właściwości elektronowych oraz transportowych nowych materiałów magnetycznych.

Szeroki zakres tematów badawczych jest dowodem ciągle rosnącej liczby naukowców, którzy są świadomi korzyści płynących z wykorzystania superkomputerów takich jak Zeus czy Prometheus. Z pomocą tych superkomputerów można uzyskać wyniki złożonych symulacji wiele, wiele razy szybciej niż na zwykłym komputerze stacjonarnym. Obliczenia, które przy użyciu pojedynczych komputerów często zajęłyby wiele lat (w konkretnych rzeczywistych przypadkach ponad 150, 700 czy nawet 1000 lat), tu mogą być wykonane najczęściej w ciągu zaledwie kilku dni. Co ważne, użytkownicy Cyfronetu mogą korzystać z profesjonalnego wsparcia – od pełnej dokumentacji, poprzez szkolenia, aż po indywidualne konsultacje z ekspertami.

Poza indywidualnymi naukowcami i małymi grupami badawczymi obliczenia w ramach wielu różnych dyscyplin naukowych prowadzą z pomocą superkomputerów nawet międzynarodowe konsorcja, oczywiście z udziałem polskich naukowców. Dzięki superkomputerom w Cyfronecie polscy uczeni mogą uczestniczyć w ważnych projektach międzynarodowych, w tym w eksperymentach CTA, LOFAR, EPOS, Wielkiego Zderzacza Hadronów w CERNie oraz niedawno odkrytych fal grawitacyjnych w detektorach LIGO i VIRGO.

Oczywiście, nawet najwyższe lokaty w zestawieniu TOP500, czy też najnowocześniejsze technologie wykorzystane do budowy komputerów dużej mocy nie oddają w pełni znaczenia tego rodzaju zasobów obliczeniowych dla polskiego środowiska naukowego. O użyteczności superkomputerów udostępnianych przez ACK Cyfronet AGH jako narzędzia prowadzenia prac naukowo-badawczych, najlepiej świadczą dane statystyczne dotyczące ich wykorzystywania.

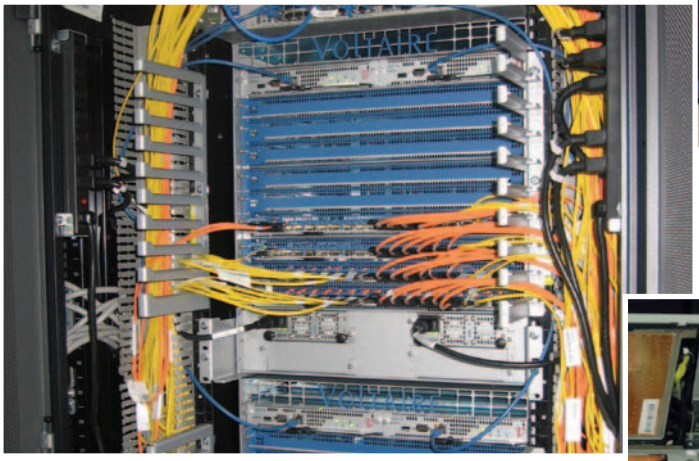
W tabeli przedstawione zostały zagregowane najważniejsze dane dotyczące liczby zadań obliczeniowych oraz czasu ich trwania, wykonanych przez Cyfronet dla innych jednostek.

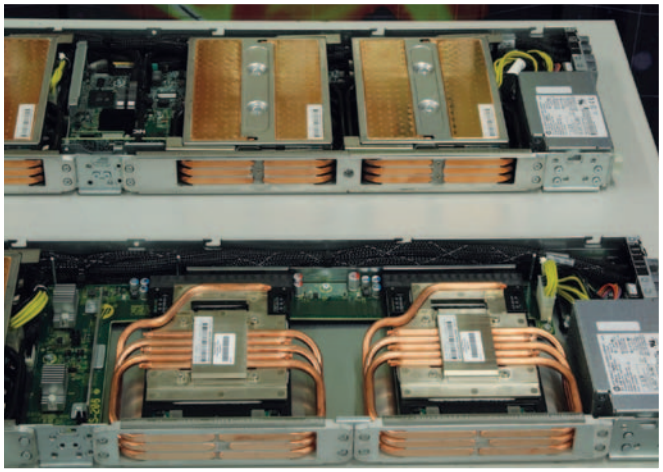
Warto podkreślić, że ogromne zapotrzebowanie użytkowników na moc obliczeniową i przestrzeń do przechowywania danych nie zostałoby zaspokojone bez ciągłego powiększania zasobów obliczeniowych i pamięci dyskowej. Dlatego uważnie analizujemy sugestie użytkowników i dane statystyczne dotyczące prowadzonych obliczeń, nie zapominając jednocześnie o ciągłej obserwacji światowych trendów w informatyce.

Rok	Liczba zadań	Czas CPU w latach
Superkomputer Zeus		
2008	603 525	207
2009	2 227 804	876
2010	4 009 049	990
2011	7 557 817	5 052
2012	8 126 522	7 923
2013	7 932 978	11 016
2014	7 694 224	12 980
Superkomputer Prometheus		
2015	1 099 822	5 811
2016	3 080 543	21 239
2017	5 032 438	36 600
2018	5 430 811	39 946
2019	2 738 534	41 829
Superkomputery Zeus i Prometheus łącznie		
2015	7 505 763	15 952
2016	7 748 677	24 653
2017	9 066 892	39 232
2018	8 342 686	42 436
2019	4 993 639	44 027




PROMETHEUS


VOLTAIRE



Pamięć masowa dla superkomputerów

Odpowiednie skorelowanie projektu architektury infrastruktury obliczeniowej z właściwym doborem technologii rozwiązań składowania danych pozwala zoptymalizować usługi świadczone na rzecz użytkowników naukowych. Skala problemów w tym obszarze rośnie wraz ze złożonością i wydajnością eksploatowanych superkomputerów – obecnie systemy składowania danych dołączone do superkomputerów Cyfronetu przechowują ponad 500 000 000 plików o rozmiarach sięgających nawet kilku terabajtów. Szeroki zakres tematyczny prac badawczych realizowanych na zasobach udostępnianych przez Cyfronet znajduje swoje odbicie w różnorodności konfiguracji kluczowych superkomputerów Centrum, a przez to również w konfiguracji dedykowanych im zasobów pamięci masowej.

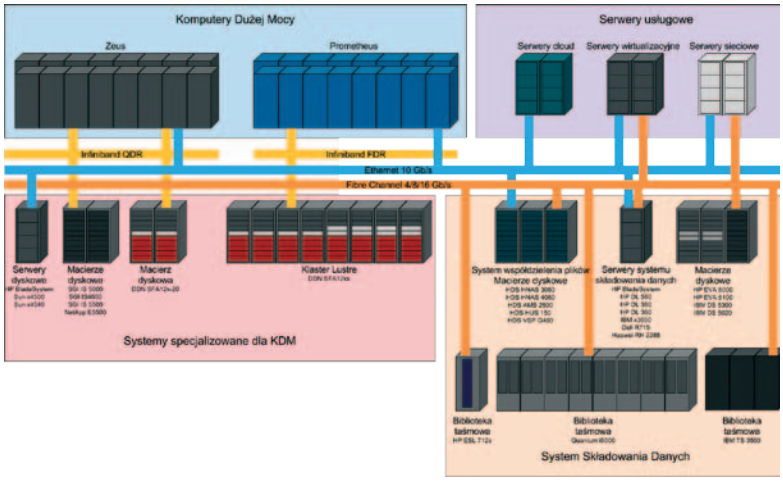
Najczęściej wykorzystywanym typem przestrzeni dyskowej są zasoby przeznaczone dla przechowywania katalogów domowych użytkowników. Przestrzeń tego rodzaju musi charakteryzować się bardzo wysokim poziomem dostępności oraz bezpieczeństwa danych, zwiększanego przez kopie migawkowe i zapasowe na zewnętrzne biblioteki taśmowe. Superkomputery Zeus i Prometheus oferują swoim użytkownikom uzyskanie opisanych funkcjonalności dzięki zastosowaniu specjalizowanych serwerów plików (tzw. głowic plikowych) HNAS. Serwery te wspierają sprzętowe implementacje protokołu NFS, zapewniając dużą wydajność, a także wysoką dostępność systemów plików. Głowice HNAS współpracują z macierzami dyskowymi Hitachi Data Systems AMS 2500 oraz HUS 150, służącymi jako repozytoria fizycznej przestrzeni dyskowej. Również i te urządzenia zapewniają niezwykle wysoki poziom bezpieczeństwa i wydajności, wynikający ze specyficznej charakterystyki danych przechowywanych w katalogach domowych.

W superkomputerach stosuje się także wydajną przestrzeń tymczasową „scratch". Tu kluczowym elementem jest szybkość działania, dlatego jest ona oparta na bardzo szybkiej architekturze rozproszonego systemu plików – Lustre. Zaletą Lustre jest możliwość skalowania pojemności jak i wydajności przestrzeni dyskowej. W wyniku łączenia pojemności wielu serwerów, przepustowość I/O jest również agregowana i skaluje się z dodatkowymi serwerami. Ponadto, przepustowość i/lub pojemność może być łatwo zwiększona poprzez dynamiczne dodawanie większej liczby serwerów, bez konieczności przerywania obliczeń użytkowników. Obecnie w Cyfronecie wszystkie superkomputery korzystają z przestrzeni „scratch" realizowanych przez Lustre. W przypadku Zeusa jest to system plików o pojemności niemal 600 TB i szybkości 12 GB/s, natomiast „scratch" Prometheusa charakteryzuje się pojemnością 5 PB i szybkością 120 GB/s, co czyni go najszybszym systemem plików w Polsce. Dodatkowo, dla zadań wymagających bardziej zawansowanego dostępu do zasobów dyskowych, możliwe jest użycie super szybkiego dysku RAM, dostarczonego przez partycję vSMP superkomputera Zeus.

Większa część zasobów pamięci dyskowej Cyfronetu jest przeznaczona dla potrzeb użytkowników usług dziedzinowych rozwijanych w programie PLGrid. Infrastruktura PLGrid oferuje dedykowaną przestrzeń roboczą dla grup korzystających z usług dziedzinowych – funkcjonalność niezbędną do umożliwienia współpracy między naukowcami pracującymi w rozproszonych geograficznie lokalizacjach. Na Zeusie tego typu przestrzeń, o pojemności niemal 200 TB, dostarczana jest za pomocą głowic HNAS i protokołu NFS, natomiast Prometheus realizuje podobną funkcjonalność za pomocą systemu plików Lustre. Maksymalna pojemność zasobu */archive* w superkomputerze Prometheus to 5 PB, a sumaryczna szybkość operacji zapisu i odczytu sięga 60 GB/s.

Szczególnym przypadkiem pamięci masowej są zasoby dla dużych projektów i kolaboracji międzynarodowych, w których uczestniczy Cyfronet, takich jak WLCG (Worldwide LHC Computing Grid), analizujący dane z detektora LHC w CERN czy CTA (Cherenkov Telescope Array), badający promieniowanie gamma za pomocą sieci radioteleskopów. Tego typu projekty wymagają ogromnych zasobów dyskowych, dostępnych najczęściej za pomocą nietypowych protokołów takich jak SRM, xroot czy GridFTP. Cyfronet dostarcza tego typu przestrzeń dyskową przy użyciu kilku instancji dedykowanego oprogramowania DPM (Disk Pool Manager) i za pomocą dedykowanych sieci, takich jak LHCone. Łączna pojemność systemów DPM w Cyfronecie przekracza 1 PB. Całkowita pojemność pamięci masowej przekracza **49 PB**.

Kompleksowa infrastruktura wydajnego i bezpiecznego składowania danych cyfrowych



Obserwowane obecnie zjawisko lawinowo rosnącej ilości wytwarzanych informacji w postaci cyfrowej dotyczy także środowiska naukowego. Dostęp do bardzo wydajnych superkomputerów umożliwia podejmowanie analiz wielkoskalowych problemów badawczych, w efekcie czego powstają olbrzymie zbiory danych. Wymagają one całkowicie nowego podejścia do procesów przetwarzania i przechowywania informacji. Problem ten, stanowiący obecnie jedno z najważniejszych wyzwań współczesnego świata cyfrowego, określany jest pojęciem BigData. Również i w ACK Cyfronet AGH wyraźnie widoczna jest korelacja pomiędzy wzrostem oczekiwań w zakresie dostępnej pojemności, szybkości oraz dodatkowych funkcjonalności zasobów pamięci masowej, spowodowanym oferowaniem coraz wydajniejszych systemów obliczeniowych. Architektura Systemu Składowania Danych Cyfronetu – głównej platformy pamięci masowej dla Komputerów Dużej Mocy, złożona jest z kilku podstawowych elementów:

- sieci SAN – dedykowanej, wydajnej i wysokodostępnej sieci przeznaczonej do komunikacji urządzeń wchodzących w skład Systemu Składowania Danych oraz klientów wykorzystujących udostępniane zasoby lub usługi,
- macierzy oraz serwerów dyskowych oferujących przestrzeń przeznaczoną na składowanie danych użytkowników o dużej rozpiętości parametrycznej – począwszy od szybkich lecz równocześnie drogich i mało pojemnych rozwiązań, a skończywszy na urządzeniach bardzo pojemnych i relatywnie tanich, ale zarazem o ograniczonej wydajności,
- serwerów usługowych wraz ze specjalistycznym oprogramowaniem usługowym i wirtualizacyjnym, udostępniających dla użytkowników funkcjonalności takie jak: automatyczne kopie zapasowe i archiwalne, hierarchiczne systemy składowania danych, wydajne sprzętowe platformy plików bądź rozproszone sieciowe systemy plików,
- bibliotek taśmowych oraz specjalizowanego oprogramowania służącego do zapisywania krytycznych danych użytkowników na nośnikach magnetycznych,
- infrastruktury dodatkowej, w tym sieci Ethernet, Infiniband, rozwiązań wspomagających zarządzanie infrastrukturą IT oraz umożliwiających bezpieczne przechowywanie nośników magnetycznych.

Aktualnie całkowita fizyczna pojemność zasobów dyskowych Cyfronetu wynosi ponad **24 PB**.

Kopie zapasowe i archiwizacja



ACK Cyfronet AGH zapewnia swoim użytkownikom szerokie portfolio usług związanych z zabezpieczaniem informacji przechowywanej w postaci cyfrowej. Oprócz zaawansowanych rozwiązań technologicznych, takich jak: dedykowane systemom pamięci masowej sieci komunikacyjne, nowoczesne macierze dyskowe, czy też sprzętowe serwery plików, Centrum realizuje również usługi kopii zapasowych i archiwalnych, opartych o nośniki magnetyczne. Wbrew przewidywaniom mówiącym o nieuchronnym zmierzchu rozwiązań wykorzystujących składowanie danych na taśmach magnetycznych, technologia ta stale się rozwija, oferując w kolejnych generacjach nie tylko coraz większe pojemności nośników, lecz również zdecydowanie lepsze przepustowości oraz mechanizmy wspierające bezpieczeństwo i efektywność zapisu informacji (np. wbudowane w napędy taśmowe algorytmy szyfrujące i kompresujące dane).

Cyfronet dysponuje aktualnie trzema bibliotekami taśmowymi posiadającymi łącznie niemal 6 tysięcy slotów na taśmy magnetyczne standardu LTO oraz 36 napędów generacji III, IV, V i VI. Pojedynczy nośnik magnetyczny LTO-6 posiada pojemność fizyczną 2,5 TB i pozwala na zapis z prędkością sięgającą 160 MB/s, co teoretycznie umożliwia przechowywanie w bibliotekach taśmowych prawie 15 PB nieskompresowanych danych. Opisane zasoby wykorzystywane są do realizacji bieżących kopii zapasowych oraz archiwalnych istotnych zasobów informacyjnych użytkowników Centrum.

Kopia zapasowa wykonywana jest na aktywnych danych poprzez proces replikacji z lokalizacji źródłowej do wyodrębnionej i wyizolowanej lokalizacji docelowej. Procedura wykonania kopii zapasowej zapewnia spójność danych źródłowych i zapasowych, zarówno na poziomie pojedynczego pliku, jak i całego środowiska (co ma miejsce w przypadku złożonych systemów IT, takich jak serwery baz danych lub poczty oraz systemy wirtualne). Fizycznie, proces klonowania jest zwykle wykonywany przez kopiowanie danych źródłowych z dysku klienta na zasoby dyskowe / taśmowe docelowego serwera archiwizacyjnego, przy użyciu dedykowanego lub współdzielonego medium dostępowego, takiego jak Ethernet lub sieć SAN. Celem utworzenia archiwum jest natomiast zapewnienie bezpieczeństwa nieużywanych danych i zwolnienie zajmowanych zasobów pamięci masowej. W odróżnieniu od kopii zapasowej, archiwum jest tworzone tylko jeden raz, poprzez migrację danych z lokalizacji źródłowej do docelowej.

Cyfronet oferuje szeroki zakres usług do tworzenia kopii zapasowych, zarówno dostępnych bezpośrednio dla użytkowników, jak i działających automatycznie, bez ich ingerencji. Wśród tych do dyspozycji użytkowników, są usługi oparte na protokołach sieciowych FTP, NFS i SCP, działające w ramach dedykowanych serwerów kopii zapasowych. Udostępniają one rozwiązania służące do wykonywania kopii zapasowych, umożliwiając bezpośredni dostęp do zapasowych danych. W gestii użytkowników pozostaje natomiast decyzja, które dane mają pełnić rolę kopii zapasowych, a które archiwum.

W szczególnych przypadkach, Centrum oferuje usługę kopii zapasowych i archiwalnych, zwaną Systemem Powszechnej Archiwizacji. W ramach tej usługi, użytkownik otrzymuje dedykowaną przestrzeń dyskową, zabezpieczoną na wielu poziomach. Dane są składowane na macierzach dyskowych wyposażonych w mechanizmy nadmiarowości typu RAID 6, współpracujące z systemem hierarchicznego składowania danych HSM. W celu zapewnienia jeszcze wyższego poziomu bezpieczeństwa danych, kopie zapasowe danych użytkowników są dodatkowo chronione przez geograficzną replikację danych do jednostek stowarzyszonych. Użytkownicy Systemu Powszechnej Archiwizacji mogą także zwiększyć bezpieczeństwo swych danych poprzez ich szyfrowanie przy pomocy certyfikatów. Obecnie, całkowita pojemność zasobów taśmowych w Cyfronecie przekracza **25 PB**.

Program PLGrid
Infrastruktura i projekty

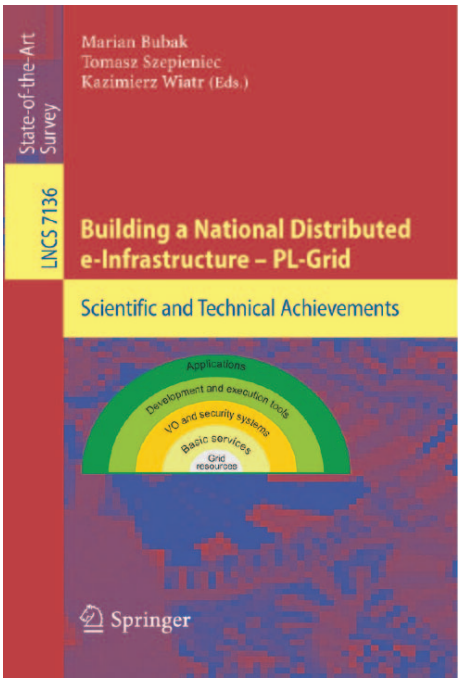
W ciągu ostatnich kilkunastu lat Cyfronet aktywnie uczestniczył w wielu krajowych i ogólnoeuropejskich projektach z zakresu technologii gridowych i cloudowych. Uzyskane w ten sposób wiedza i doświadczenie, a także podejmowane w wielu krajach Europy inicjatywy gridowe, przyczyniły się do sformułowania założeń i rozpoczęcia Programu PLGrid. Początkiem tego Programu było podpisanie porozumienia powołującego Konsorcjum PLGrid w 2007 roku, w skład którego weszły wszystkie akademickie centra superkomputerowe w Polsce: Interdyscyplinarne Centrum Modelowania Matematycznego i Komputerowego Uniwersytetu Warszawskiego, Poznańskie Centrum Superkomputerowo Sieciowe IChB PAN, Wrocławskie Centrum Sieciowo-Superkomputerowe PWr., Centrum Informatyczne Trójmiejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej PG oraz **Akademickie Centrum Komputerowe Cyfronet AGH jako inicjator i koordynator Programu i Konsorcjum PLGrid**. Praca podjęta przez pięciu partnerów Konsorcjum PLGrid zaowocowała zbudowaniem niezawodnej, działającej 24 godziny na dobę, przez cały rok, rozproszonej infrastruktury obliczeniowej dla nauki, w ramach której udostępniana jest użytkownikom wielka moc obliczeniowa, a także duże zasoby pamięci masowej oraz dedykowane narzędzia umożliwiające tworzenie zaawansowanych aplikacji naukowych.



Proces budowy infrastruktury PLGrid rozpoczął się w trakcie projektu PL-Grid (Polska Infrastruktura Informatycznego Wspomagania Nauki w Europejskiej Przestrzeni Badawczej) i stanowił odpowiedź na rosnące potrzeby polskich środowisk naukowych, w których coraz istotniejszą rolę odgrywały zasoby obliczeniowe. Głównym celem zbudowanej infrastruktury było wsparcie badań naukowych poprzez integrację danych eksperymentalnych i wyników zaawansowanych obliczeń komputerowych, prowadzonych przez geograficznie rozproszone zespoły naukowców, przy użyciu zasobów centrów superkomputerowych. Cel ten został osiągnięty między innymi poprzez rozbudowę zasobów obliczeniowych we wszystkich instytucjach wchodzących w skład Konsorcjum. Co więcej, dzięki pracom realizowanym w projekcie PL-Grid, jesienią 2011 r. superkomputery wszystkich polskich akademickich centrów superkomputerowych znalazły się na TOP500 – liście najszybszych superkomputerów świata. Tego samego roku, superkomputer Zeus, zlokalizowany w Cyfronecie, znalazł się na 81. pozycji listy TOP500, będąc najszybszym superkomputerem w Polsce.

Kolejnym etapem realizacji Programu PLGrid było zapewnienie naukowcom profesjonalnego wsparcia informatycznego poprzez opracowanie specyficznych środowisk obliczeniowych, czyli usług i oprogramowania oraz udzielanej pomocy użytkownikom w planowaniu, uruchamianiu i analizie wyników złożonych eksperymentów naukowych. Przygotowanie dedykowanych środowisk informatycznych, nazywanych gridami dziedzinowymi, dopasowanych do potrzeb 13 różnych grup naukowców, było najważniejszym zadaniem projektu PLGrid Plus (Dziedzinowo zorientowane usługi i zasoby infrastruktury PL-Grid dla wspomagania Polskiej Nauki w Europejskiej Przestrzeni Badawczej).

Przystosowanie infrastruktury do potrzeb naukowców konkretnych dziedzin było wielkim sukcesem projektu PLGrid Plus. Dlatego kierunek tych prac kontynuowano w ramach kolejnego projektu – PLGrid NG (Dziedzinowe Usługi Nowej Generacji w Infrastrukturze PL-Grid dla Polskiej Nauki), w ramach którego utworzone zostały usługi domenowo-specyficzne, spełniające wymagania kolejnych grup badawczych, reprezentujących 14 dziedzin nauki (**łącznie w obu projektach zbudowano narzędzia informatycznego wsparcia dla 27 dziedzin nauki**).



Uczestnicy Programu PLGrid nie poprzestali jednak na dostarczeniu domenowo-zorientowanych rozwiązań. Dzięki wieloletniemu zaangażowaniu w rozwój gridowych infrastruktur obliczeniowych, Cyfronet jest obecnie rozpoznawany jako Centrum Kompetencji w zakresie usług cloudowych i gridowych. Potwierdzeniem tego faktu było przyznanie ACK Cyfronet AGH środków na realizację nowego przedsięwzięcia: „Centrum kompetencji w zakresie rozproszonych infrastruktur typu gridowego – PLGrid Core". Będąc kolejnym krokiem implementacji Programu PLGrid, projekt ten miał na celu rozwój możliwości infrastruktury, m.in. w zakresie obliczeń chmurowych i na dużych zasobach danych. Oprócz rozbudowy sprzętu komputerowego czy tworzenia nowego oprogramowania, prace w projekcie koncentrowały się także na infrastrukturze towarzyszącej. Jedną z ważnych inwestycji była budowa nowego zapasowego centrum danych, zlokalizowanego w pewnej odległości od dotychczasowej serwerowni Cyfronetu, co przełożyło się bezpośrednio na zwiększenie bezpieczeństwa przechowywanych danych naukowych.

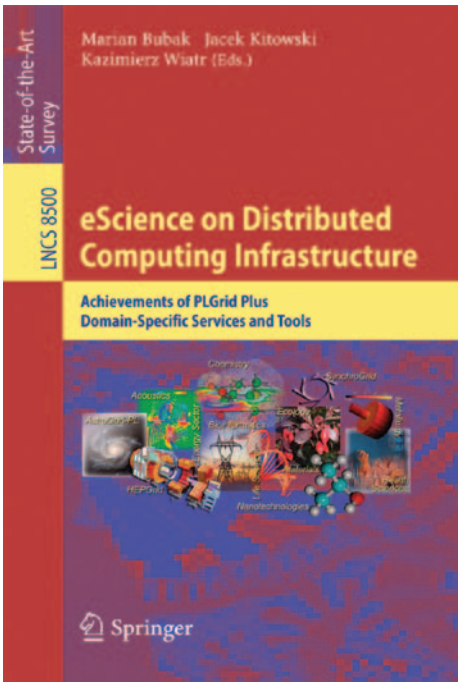
W ramach prac prowadzonych w projekcie PLGrid Core, w Cyfronecie uruchomiono nowy **superkomputer Prometheus – w edycji listy TOP500 z listopada 2015 roku został on sklasyfikowany na 38 miejscu, najwyższym w historii polskich superkomputerów!**

Obecnie w ramach infrastruktury PLGrid udostępnianych jest ponad 5 PFlops mocy obliczeniowej i ponad 60 PB pamięci dyskowej. W infrastrukturze zaimplementowanych zostało wiele narzędzi wspomagających organizację skomplikowanych eksperymentów obliczeniowych, projektowanie i uruchamianie aplikacji, wspierających obliczeniowo badania naukowe oraz wizualizację otrzymywanych wyników. Udostępniono także nową usługę – obliczenia w „chmurze".

Wszystkie projekty realizujące cele Programu PLGrid uzyskały finansowanie m.in. ze środków Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego w ramach Programu Operacyjnego Innowacyjna Gospodarka. ACK Cyfronet AGH miał zaszczyt pełnić odpowiedzialną rolę koordynatora tychże projektów. Szeroki wachlarz oferowanych usług przyczynia się do umacniania współpracy pomiędzy polskimi i międzynarodowymi grupami specjalistów z wielu różnych dziedzin nauki – także humanistycznych i społecznych. Istotnym jest fakt, iż każda osoba prowadząca badania naukowe może być użytkownikiem infrastruktury. Dostęp do wielkich mocy obliczeniowych, ogromnych zasobów pamięci oraz zaawansowanych usług na światowym poziomie jest nieodpłatny dla polskich naukowców i wszystkich osób prowadzących działalność naukową, związaną z uczelnią lub instytutem naukowym w Polsce. Jedynym warunkiem jest założenie konta przez Portal PLGrid.

Usługi zorientowane dziedzinowo w infrastrukturze PLGrid

Infrastruktura PLGrid powstała dzięki inicjatywie Cyfronetu oferuje jednolity dostęp do zasobów wszystkich pięciu polskich centrów Komputerów Dużej Mocy. Unifikacja ma miejsce na wielu poziomach, poczynając od jednego loginu i hasła użytkownika w całej infrastrukturze, aż po dostęp do aplikacji naukowych.



Mając na uwadze sygnalizowaną przez użytkowników potrzebę implementacji dodatkowych mechanizmów wsparcia prowadzenia badań naukowych, infrastruktura PLGrid została rozszerzona o szereg specyficznych środowisk, rozwiązań i usług, opracowanych zgodnie z wymaganiami zdefiniowanymi przez 13 pilotażowych grup naukowców w ramach projektu PLGrid Plus (2011-2015). Głównym celem projektu było ułatwienie naukowcom korzystania z infrastruktury, a tym samym, przyciągnięcie nowych społeczności użytkowników, którzy potrzebują dużej mocy obliczeniowej i przestrzeni dyskowej superkomputerów, ale posiadają zbyt małe umiejętności w posługiwaniu się nimi. Aby umożliwić i ułatwić tworzenie środowisk domenowo-specyficznych, w ramach projektu miała miejsce szeroka współpraca z przedstawicielami różnych dyscyplin, pracującymi często w konsorcjach dziedzinowych.

Dedykowane usługi dziedzinowe z jednej strony ukrywają złożoność infrastruktury, a z drugiej, w tym samym czasie, oferują funkcje istotne z punktu widzenia potrzeb badaczy z danego obszaru tematycznego. W ten sposób użytkownicy otrzymują dokładnie taką funkcjonalność, jakiej potrzebują. Co więcej, jest ona im dostarczona w sposób specyficzny dla danej dziedziny, tak aby osiągnąć maksymalną intuicyjność i użyteczność.

Osiągnięcia naukowe i techniczne projektu PLGrid Plus zostały przedstawione w książce opublikowanej w wydawnictwie Springer, we wrześniu 2014 roku. Książka ta jest ważnym źródłem informacji dla naukowców, programistów i administratorów systemów, którzy w swojej pracy korzystają ze środowisk sieciowych i chmurowych. Książka zawiera 36 rozdziałów i jest podzielona na trzy części: pierwsza (rozdziały 1 do 8) zawiera ogólny przegląd prac wykonanych w ramach projektu i opis obecnego stanu infrastruktury PLGrid, w tym nowych rozwiązań w dziedzinie bezpieczeństwa i oprogramowania pośredniczącego. Druga część (rozdziały od 9 do 13) prezentuje nowe środowiska i usługi IT, które mogą być wykorzystywane przez wszystkie wyżej wymienione grupy naukowców. Trzecia część (rozdziały 14 do 36) opisuje, jak specyficzne

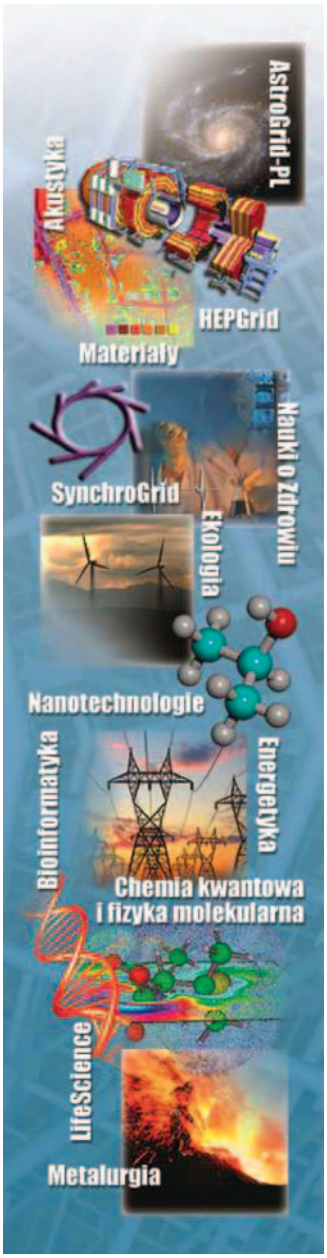
środowiska, narzędzia i usługi, przygotowane w ramach projektu PLGrid Plus, są wykorzystywane w zaawansowanych obliczeniach i symulacjach komputerowych przeprowadzonych przez różne grupy naukowców. Rozdziały te przedstawiają modele obliczeniowe, nowe algorytmy i metody ich implementacji przy użyciu dostępnych narzędzi i usług.

Sukces projektu PLGrid Plus, a w szczególności rosnąca popularność specjalistycznych narzędzi i platform przygotowanych dla użytkowników z pierwszych 13 strategicznych obszarów nauki, doprowadziły do szybkiego wzrostu zapotrzebowania na podobne usługi dla naukowców z innych dziedzin. Dlatego, Konsorcjum PLGrid rozpoczęło projekt PLGrid NG (2014-2015), którego głównym celem było wdrożenie i udostępnienie, w ramach infrastruktury PLGrid, kilkunastu dodatkowych usług informatycznych dla grup naukowców reprezentujących 14 kolejnych obszarów nauki.

Nowe, zorientowane dziedzinowo usługi objęły szeroki zakres aktywności: począwszy od dostarczenia specjalistycznego oprogramowania, poprzez mechanizmy przechowywania danych, aż po nowoczesne platformy zintegrowane z nowym rodzajem narzędzi oraz dedykowanymi bazami danych, które przyspieszyły prowadzenie badań naukowych, jak również usprawniły i zautomatyzowały pracę grup badawczych.

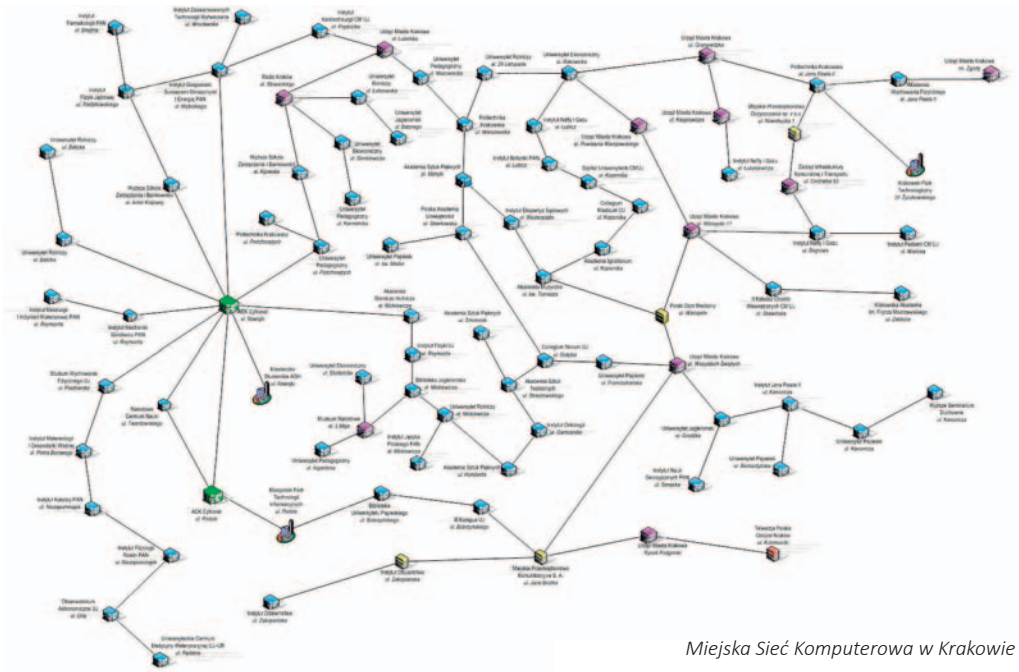
Przygotowanie i wdrożenie zestawu domenowo-specyficznych usług bardzo dobrze wpisało się w potrzeby wynikające z rozwoju zaawansowanej infrastruktury IT, przeznaczonej do realizacji nowoczesnych badań naukowych. Optymalnie dopasowana e-infrastruktura PLGrid spełnia nie tylko potrzeby naukowców dotyczące odpowiednich zasobów i usług obliczeniowych, ale także umożliwia polskim jednostkom naukowym współpracę z międzynarodowymi organizacjami badawczymi.

Rozbudowa istniejącej infrastruktury obliczeniowej w kierunku domenowo-specyficznych rozwiązań dla zespołów badawczych pozwoliła w efekcie końcowym na bardziej efektywne prowadzenie badań naukowych.



Miejska Sieć Komputerowa

ACK Cyfronet AGH stara się jak najlepiej służyć środowisku naukowemu, uczelniom i jednostkom naukowym w zakresie dostępu do krajowej i światowej sieci Internet oraz do mocy obliczeniowych na potrzeby badań naukowych. Dlatego ważnym zadaniem stawianym przed Cyfronetem jest zapewnienie bezawaryjnego funkcjonowania sieci oraz usług teleinformatycznych i obliczeniowych 7 dni w tygodniu przez 24 godziny na dobę.



Miejska Sieć Komputerowa w Krakowie

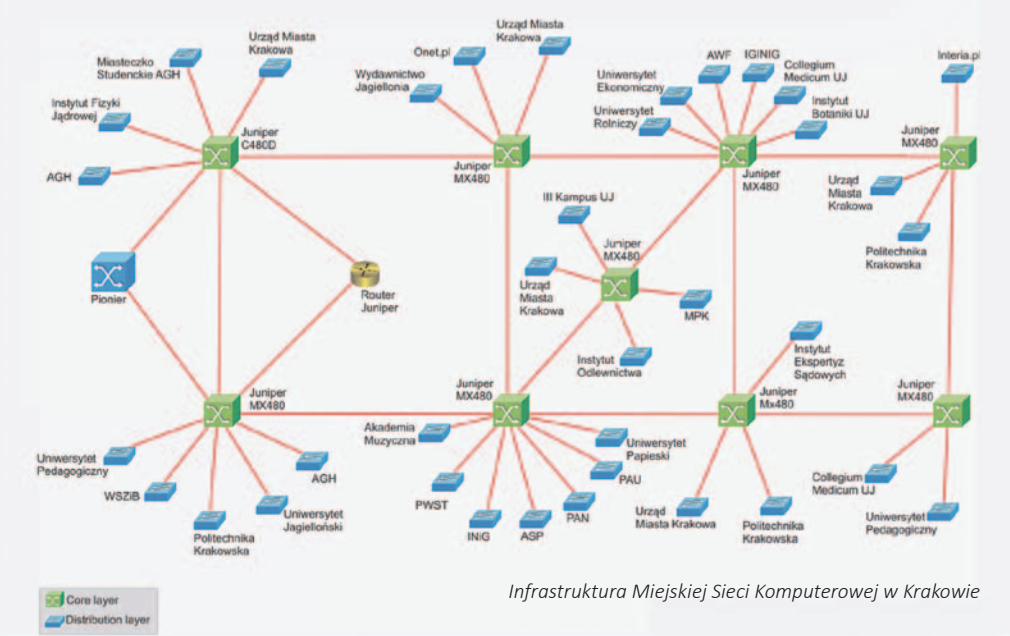
Charakterystyka MSK

ACK Cyfronet AGH, jako administrator Miejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej MSK w Krakowie, stale rozbudowuje i modernizuje sieć, dostosowując ją do potrzeb i oczekiwań użytkowników. Obecnie, MSK eksploatuje własną infrastrukturę światłowodową o łącznej długości blisko 200 km. Światłowody MSK są ułożone w rejonie Starego Miasta, w okolicach kampusu AGH, docierają do Bronowic, Krowodrzy oraz do Czyżyn i Nowej Huty. Zrealizowane zostały także przyłączenia odległych instytutów w Prokocimiu, w rejonie Borku Fałęckiego oraz na terenie III Kampusu Uniwersytetu Jagiellońskiego w Pychowicach. Światłowody są układane w kanalizacji własnej, w dzierżawionej kanalizacji teletechnicznej oraz napowietrznie.

Infrastruktura światłowodowa jest podstawą funkcjonowania Miejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej. ACK Cyfronet AGH dąży do tego, aby obejmowała ona jak największą liczbę obiektów uczelnianych i instytucji badawczych. Jednocześnie, z uwagi na stale rosnącą rolę

nowoczesnych środków łączności, w codziennej pracy bardzo ważnym jest, aby infrastruktura światłowodowa, oprócz dużej przepustowości, zapewniała również bezpieczną komunikację, uzyskiwaną w praktyce poprzez wykorzystanie łączy zapasowych pozwalających zachować ciągłość działania w sytuacjach zerwania tras podstawowych.

W warstwie rdzeniowej zastosowano nowoczesne przełączniki wyposażone w interfejsy 1 i 10 Gb Ethernet. Zapoczątkowano stopniowe doposażanie kluczowych przełączników w interfejsy 100 Gb. Wszystkie urządzenia warstwy rdzeniowej są połączone przynajmniej z dwoma lub trzema sąsiednimi, co pozwala automatycznie przełączyć ruch w przypadku awarii jednego z urządzeń lub awarii linii światłowodowej. Warstwę dystrybucyjną sieci oparto o przełączniki, z których każdy jest wyposażony w dwa interfejsy 1 Gb Ethernet (przyłączenie do warstwy rdzeniowej) oraz szereg interfejsów Ethernet typu 10/100/1000 Mbps służących do przyłączania użytkowników.



Infrastruktura Miejskiej Sieci Komputerowej w Krakowie

Miejska Akademicka Sieć Komputerowa w Krakowie jest ważnym węzłem Akademickiej Sieci PIONIER – ogólnopolskiej szerokopasmowej sieci optycznej stanowiącej istotną bazę dla badań naukowych i prac rozwojowych w Polsce. MSK jest połączona w kierunku Warszawy, Katowic, Bielska-Białej i Rzeszowa łączami sieci PIONIER, każde o przepływności 2x10 Gbps. Łączność pomiędzy Centrami Komputerów Dużej Mocy w Polsce (Gdańsk, Kraków, Poznań, Warszawa i Wrocław) realizowana jest z przepustowością 2x100 Gbps. Za pośrednictwem sieci PIONIER realizowana jest komunikacja z wieloma ośrodkami krajowymi oraz zagranicznymi. Łączność zagraniczna odbywa się poprzez europejską naukową sieć GEANT o przepustowości 100 Gbps. Oprócz głównego połączenia do sieci GEANT, realizowane jest połączenie rezerwowe o przepustowości 4 Gbps do sieci CenturyLink Communications.

Usługi sieciowe dedykowane użytkownikom

Akademickie Centrum Komputerowe Cyfronet AGH od początku powstania polskiego Internetu (w połowie 1991 roku) aktywnie uczestniczy w rozwoju zarówno infrastruktury telekomunikacyjnej, jak też, co bardzo istotne, w rozwoju szeroko rozumianych usług internetowych. Realizowane na bardzo wydajnych komputerach usługi obejmują między innymi:



- **e-mail** – internetowa poczta elektroniczna, z dostępem poprzez protokół SMTP lub interfejs webowy *http://poczta.cyfronet.pl*,
- **www** – udostępniane serwisy, obok nowości ze świata nauki, prezentują informacje dotyczące kultury, zabytków oraz wielu innych dziedzin,
- **news** – forum dyskusyjne podzielone na grupy tematyczne z wielu dziedzin, w tym dyskusje naukowe przeznaczone dla wąskiego grona specjalistów,
- **dns** – serwery systemu nazw domen – obsługujące usługę tłumaczenia nazw sieciowych na adres IP dla użytkowników Miejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej,
- **ftp** – serwer przechowuje i stale aktualizuje kopie zagranicznych archiwów oprogramowania (tzw. *mirror*), a także zawiera oprogramowanie typu shareware i freeware pracujące pod systemami MS-Windows oraz UNIX; dzięki uruchomieniu serwera ftp zostało znacznie ograniczone obciążenie łącza międzynarodowego, a także zwiększono wygodę użytkowników Miejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej,
- **eduroam** – umożliwia łączność z siecią akademicką w każdym miejscu na świecie objętym zasięgiem eduroamu, przy użyciu jednego autoryzowanego konta,
- **box** – dysk sieciowy (*http://box.cyfronet.pl*) umożliwiający wymianę plików i ich synchronizację; dzięki dedykowanym aplikacjom może być również używany na urządzeniach przenośnych.

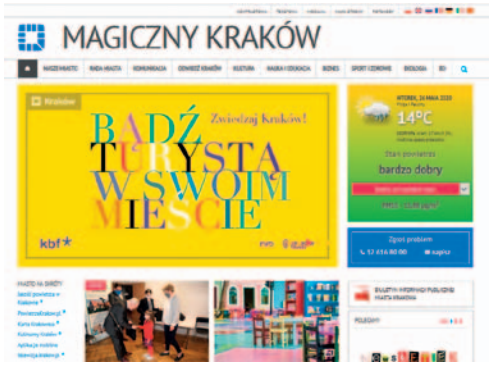
Usługi sieciowe w liczbach (w roku 2019)	
Liczba wysłanych i odebranych wiadomości e-mail	~ 16 500 000
Liczba sesji nawiązanych z serwerem pocztowym	~ 41 000 000

Portale i aplikacje mobilne



Centrum nie ogranicza swojej działalności jedynie do obszarów powiązanych z nauką, ale przyczynia się także do rozwoju społeczeństwa informacyjnego. Serwer WWW w ACK Cyfronet AGH pełni funkcję węzła internetowego dla całej krakowskiej społeczności naukowej. Centrum wciąż ulepsza i rozbudowuje swój portal internetowy, który na przestrzeni ostatnich lat zyskał dużą popularność.

Szczególne znaczenie dla Centrum ma współpraca z władzami Krakowa. Umowa pomiędzy Gminą Kraków i Cyfronetem, dotycząca promocji miasta, zaowocowała stworzeniem portalu internetowego, który oprócz prezentowania informacji naukowych zapoznaje czytelników z kulturą, zabytkami, turystyką, transportem lokalnym i wieloma innymi aspektami życia w Krakowie.

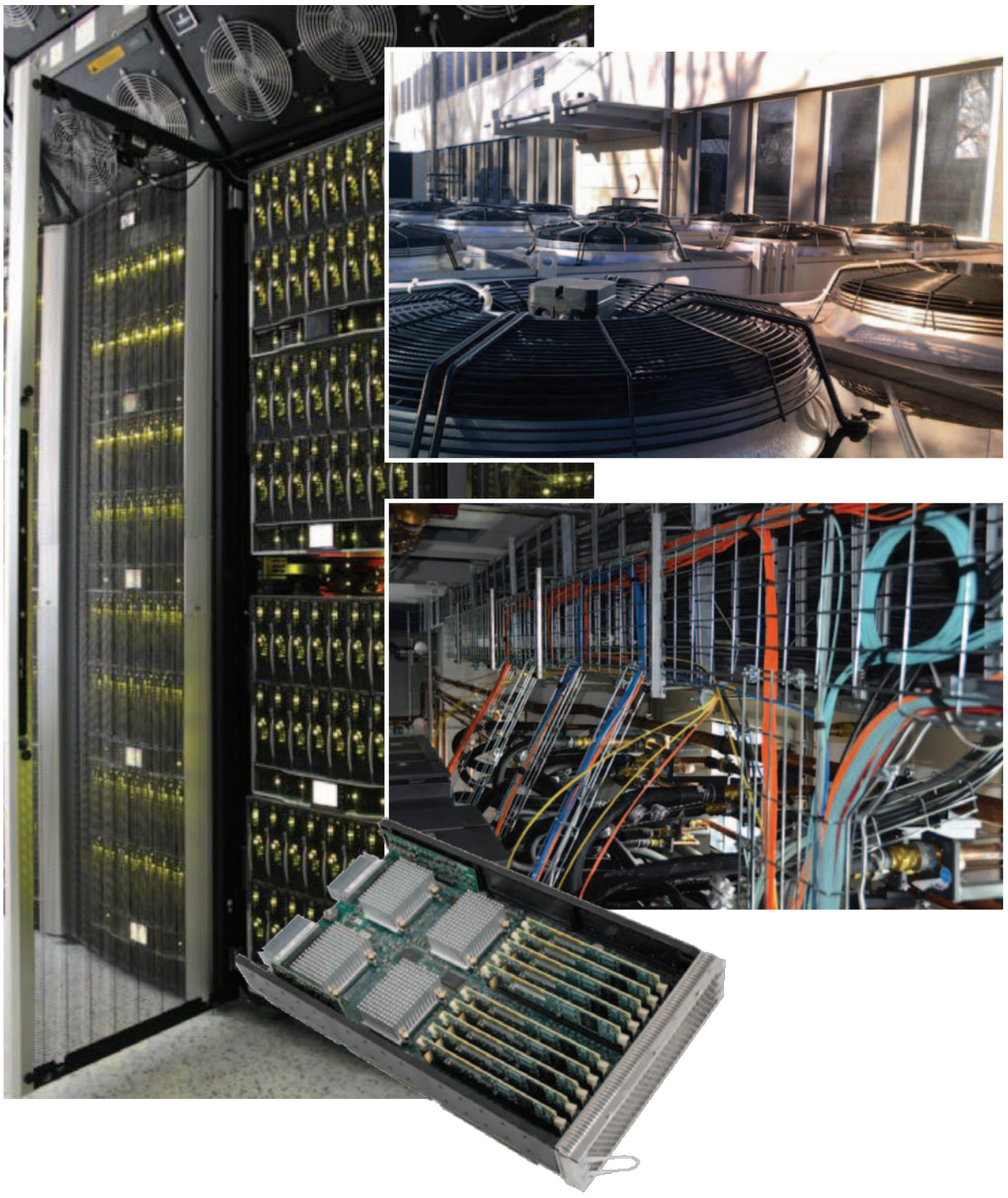


We współpracy z Urzędem Miasta Krakowa został przygotowany i uruchomiony Biuletyn Informacji Publicznej dla regionu krakowskiego. W roku 2005, współpraca ta została rozszerzona o świadczenie usług w zakresie publikacji treści dla miejskich instytucji, bibliotek, szkół, itp.

Najnowsza wersja oficjalnego serwisu internetowego miasta Krakowa została opublikowana jako Miejska Platforma Internetowa „Magiczny Kraków». W roku 2007, portal ten – dostępny pod adresem *www.krakow.pl* – został nominowany do World Summit Award jako najlepszy serwis e-administracji w Polsce. Mobilna wersja portalu została natomiast nagrodzona podczas konferencji Mobile Trends w roku 2012 jako najlepsza mobilna strona miejska w Polsce.



Współpraca z Urzędem Miasta wchodzi również w obszar urządzeń mobilnych – Cyfronet opracował m.in. mobilną aplikację *Kraków.pl*, która może być wykorzystana jako przewodnik miasta Krakowa i źródło ważnych informacji, takich jak numery telefonów, lokalizacje punktów informacyjnych, konsulatów lub aptek. Co ważne, aplikacja umożliwia znalezienie wszystkich tego typu miejsc w trybie mapy off-line. Aplikacja *Kraków.pl* jest dostępna w językach polskim, angielskim i hiszpańskim.



Zasoby obliczeniowe

ACK Cyfronet AGH dysponuje dojrzałą i unikatową infrastrukturą obliczeniową dostępną dla polskich naukowców. Jest ona oparta na pięciu filarach, rozbudowanych o szereg usług oraz rozwiązań przygotowanych wraz z naukowcami na potrzeby badaczy z różnych dziedzin nauki. Wraz ze szkoleniami i kompleksowym wsparciem, zasoby dostępne w naszym centrum obliczeniowym pozwalają na efektywne przeprowadzanie wszelkich badań naukowych wykorzystujących infrastrukturę komputerową.

Zasoby obliczeniowe

Superkomputery Prometheus i Zeus dostarczają:
3+ PFlops
79 000+ rdzeni
300+ GPGPU
340+ TB RAM





Zasoby dyskowe

21 PB przestrzeni dyskowej i 25 PB zasobów taśmowych na dane wraz z szybkim systemem plików Lustre umożliwia analizę wielkich zbiorów danych.





Profesjonalne oprogramowanie

Narzędzia i programy oraz biblioteki, które umożliwiają efektywne wykorzystanie zasobów obliczeniowych Cyfronetu, a także usprawniają pracę w różnych dziedzinach nauki.



Narzędzia pracy zespołowej

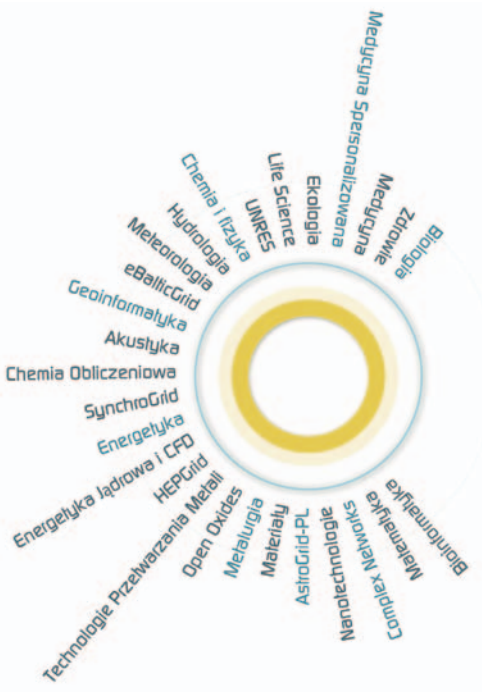
Serwisy i narzędzia takie jak serwer repozytoriów Stash Git oraz środowisko do zarządzania projektami JIRA ułatwiają realizację i koordynację złożonych projektów oraz współpracę zespołów badawczych.

Chmura obliczeniowa

Elastyczne rozwiązanie oparte o platformę OpenStack, pozwalające na łatwe dostosowanie środowiska obliczeniowego do potrzeb grupy badawczej.

Zaawansowane platformy obliczeniowe oraz usługi dla domen badawczych

Naukowcy prowadzący prace badawcze z wykorzystaniem superkomputerów i dużych zasobów pamięci masowej mają różne wymagania oraz sposoby pracy, zatem potrzebują różnego typu dostępu do komputerów oraz innych zasobów infrastruktury IT. Odpowiadając na potrzeby użytkowników, Cyfronet udostępnia szereg zaawansowanych platform informatycznych i dedykowanych usług. Ukrywają one złożoność infrastruktury i jednocześnie dostarczają funkcjonalności istotne z punktu widzenia badaczy z danej dziedziny, precyzyjnie dopasowane do ich potrzeb.



Wraz z infrastrukturą obliczeniową udostępniamy zbiór narzędzi, który umożliwia badaczom wykonywanie złożonych eksperymentów o wielkiej skali oraz efektywne i łatwe zarządzanie ich rezultatami. Efektywność obliczeń i analiz oraz bezpieczeństwo analizowanych danych są gwarantowane poprzez odpowiedni dobór rozwiązań IT rozwijanych oraz konfigurowanych przez doświadczonych programistów zatrudnionych w Cyfronecie. Platformy prezentowane poniżej zostały z powodzeniem zastosowane w gridach dziedzinowych dostępnych w Programie PLGrid. Wszystkie narzędzia, usługi oraz serwisy są udostępniane w ramach infrastruktury PLGrid, co pozwala polskim naukowcom i ich zagranicznym współpracownikom na dostęp do zasobów oraz danych w najbardziej dla nich wygodny sposób.

W Centrum oferujemy m.in. zaawansowane narzędzia i interfejsy graficzne umożliwiające budowę dedykowanych środowisk do prowadzenia badań naukowych, przeprowadzanie wirtualnych eksperymentów, budowę portali webaplikacji, wizualizację wyników obliczeń, uruchamianie złożonych scenariuszy obliczeniowych, jak również wspierające jednolity i efektywny dostęp do danych. Wszystkie te usługi są ważnym wsparciem dla osób prowadzących badania naukowe, wpływają bowiem na usprawnienie i, tam gdzie to możliwe, zautomatyzowanie pracy grup badawczych, co znacznie przyspiesza uzyskanie wyników badań naukowych. Na kolejnych stronach znajdują się opisy ich możliwości.

Zaproszenie do współpracy

Poszukujemy osób zainteresowanych rozwojem usług obliczeniowych, w tym tych zorientowanych na konkretne dziedziny badawcze. Oferujemy również wsparcie w prowadzeniu badań naukowych. Zachęcamy naukowców do udostępnienia swoich autorskich kodów ekspertom naszego Centrum, którzy będą mogli pomóc w ich efektywnej kompilacji na naszych superkomputerach. Równocześnie zapewniamy pomoc w ich użytkowaniu i efektywnym wykorzystaniu. Umożliwiamy również wykorzystanie własnych licencji oprogramowania naukowego posiadanych przez grupy badawcze, gdy umożliwiają one obliczenia na superkomputerach Cyfronetu.

Chmura obliczeniowa w infrastrukturze PLGrid



W trakcie tworzenia infrastruktury PLGrid w znacznej mierze kierowano się potrzebami naukowców. Dlatego parametry infrastruktury pozwalają na jej łatwe dostosowanie do rozwiązywania nawet skomplikowanych problemów badawczych przez różne grupy badaczy – począwszy od małych zespołów, a skończywszy na międzynarodowych konsorcjach naukowych. Aby spełnić ich wymagania, obok typowych platform obliczeniowych i przechowywania danych, oferujemy „chmurę obliczeniową".

– Do tej pory, infrastruktura PLGrid dostarczała szeregu platform informatycznych, wraz z zasobami obliczeniowymi i pamięcią masową. Chmura obliczeniowa nie stanowi jedynie ich rozszerzenia. Traktujemy ją jako nowy poziom jakości w prowadzeniu badań – mówi Kazimierz Wiatr, Dyrektor Centrum. *– Użytkownik może w łatwy sposób połączyć się z żądanym zestawem maszyn wirtualnych (VM), z pełnymi prawami dostępu do systemu operacyjnego. W celu zapewnienia wysokiego poziomu bezpieczeństwa, wszystkie maszyny wirtualne działają w dedykowanej sieci lokalnej. Dostęp do poszczególnych usług można uzyskać z całego świata, co ułatwia współpracę między naukowcami* – dodaje Dyrektor.

Należy podkreślić następujące zalety płynące z korzystania z chmury obliczeniowej:

- Chmura zwiększa elastyczność badań, ponieważ naukowcy mogą dostroić maszyny wirtualne do swych specyficznych potrzeb. Do tej pory, aby skonfigurować „wirtualne laboratorium" służące do rozwiązania określonego problemu naukowego, użytkownik potrzebował pomocy ze strony ekspertów PLGrid. Obecnie, każdy naukowiec może samodzielnie stworzyć i łatwo rozbudować takie wirtualne laboratorium.
- Katalog maszyn wirtualnych oferowanych przez PLGrid wspiera wiele systemów operacyjnych. Dzięki temu, użytkownicy mogą uruchamiać swoje aplikacje w systemach operacyjnych innych niż Scientific Linux, np. w Windows lub innych systemach linuxowych.
- Chmura obliczeniowa pozwala na łatwe zbudowanie i uruchomienie środowiska testowego. Ta funkcjonalność jest bardzo przydatna dla naukowców tworzących swoje własne oprogramowanie. Mogą w prosty sposób uruchomić każde zadanie testowe i szybko przeanalizować jego wyniki.
- Możliwe jest utrzymanie komunikacji z już uruchomionym zadaniem obliczeniowym. Ponadto, każda maszyna wirtualna może być łatwo powielana, nawet w tysiącach lub więcej egzemplarzy. Uruchomienie nowej maszyny wirtualnej zajmuje niespełna 30 sekund.
- Chmura obliczeniowa jest także najlepszym, a w wielu przypadkach jedynym, rozwiązaniem do uruchamiania zadań za pośrednictwem starszych pakietów oprogramowania. W bezpiecznym środowisku sieci LAN można korzystać nawet z przestarzałych, wycofanych już z powszechnego użycia, systemów operacyjnych. Ta funkcjonalność jest również dobrym rozwiązaniem dla rozproszonych grup międzynarodowych, wykorzystujących w swych badaniach wiele różnych pakietów. Każda grupa może prowadzić własne obliczenia i w prosty sposób udostępniać swoje wyniki innym.

– Chmura obliczeniowa w PLGrid i Cyfronecie to innowacyjne rozwiązanie na skalę europejską. Mamy silne przekonanie, że wprowadzi ona nowy poziom jakości dla badań prowadzonych przez naszych użytkowników – podsumowuje Profesor Wiatr.

Obecnie, w ramach zasobów Cyfronetu eksploatowanych jest **ponad 200 różnych typów maszyn wirtualnych**.

ONEDATA

Onedata jest globalnie skalowalnym systemem zarządzania danymi, który pozwala na przezroczysty dostęp do danych przechowywanych w rozproszonych systemach składowania danych. Onedata nadaje się równie dobrze dla małych grup użytkowników jak i dla dużych międzynarodowych środowisk naukowych, dzięki czemu mogą korzystać z tego systemu zarówno federacje użytkowników naukowych jak i komercyjnych. Onedata umożliwia użytkownikom korzystanie z jednorodnego systemu zarządzania danymi zarówno do przechowywania danych osobistych jak i związanych z pracą zawodową, np. wyników badań, oraz daje możliwość dostępu do nich w wydajny sposób z dowolnego urządzenia.



Onedata pozwala na budowanie federacji zaufanych użytkowników oraz dostawców przestrzeni dyskowej, co pozwala użytkownikom z jednej strony na korzystanie z rozproszonej przestrzeni dyskowej a z drugiej na kontrolowanie ilości zasobów udostępnianych poszczególnym użytkownikom lub grupom roboczym przez administratorów, bez konieczności stosowania certyfikatów.

Zalety dla użytkowników

- Zunifikowany dostęp do danych rozproszonych pomiędzy dostawców przestrzeni dyskowej opartych o heterogeniczne systemy. Korzystając z Onedata, użytkownicy mają dostęp do swoich danych w każdym miejscu i z dowolnego urządzenia.
- Dane użytkowników zorganizowane są w wirtualne foldery (ang. *Space*), które mogą być rozproszone pomiędzy dostawców przestrzeni dyskowej i dostępne przez użytkowników z przeglądarki WWW lub poprzez protokół POSIX.
- Łatwy w użyciu Graficzny Interfejs Użytkownika pozwalający na dostęp i wyszukiwanie danych oraz zarządzanie nimi.
- Wsparcie dla łatwego dzielenia się i współpracy z innymi użytkownikami w oparciu

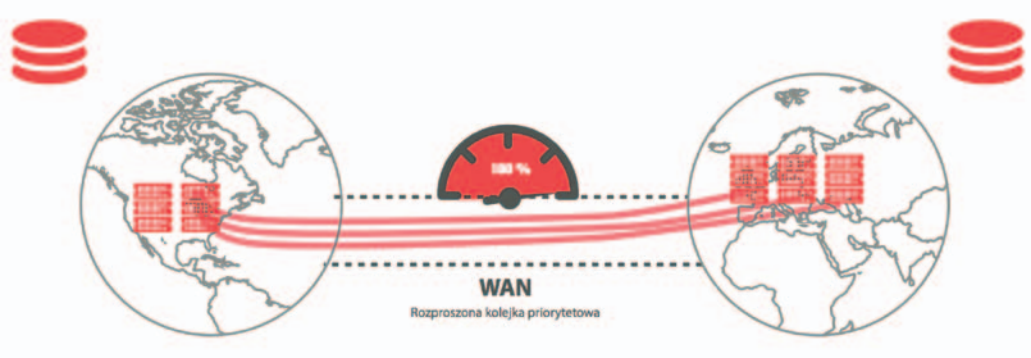
o dane, przy zachowaniu wysokiego poziomu bezpieczeństwa opartego o listy kontroli dostępu oraz złożony system grup i uprawnień do nich.
- Funkcjonalność publikowania i dostępu do danych otwartych oraz możliwość łatwej rejestracji identyfikatorów typu DOI dla zbiorów danych.

Zalety dla administratorów

- Łatwość instalacji i konfiguracji poprzez kontenery Docker i klientów powłoki.
- Uproszczony mechanizm przy zachowaniu pełnej kontroli administratorów w oparciu o system tokenów.
- Złożony system monitorowania dostarczający informacji o wszystkich aspektach systemu, dostępny poprzez interfejs REST oraz w postaci graficznej w panelu administracyjnym.
- Wsparcie dla wielu systemów składowania danych, w tym POSIX (np. Lustre), Amazon S3, Ceph, OpenStack Swift, czy GlusterFS.

Zalety dla twórców aplikacji

- Łatwa integracja z systemem poprzez interfejsy REST i CDMI.
- Elastyczna autentykacja i autoryzacja dostępna o technologie OpenID Connect i Macaroons.
- Kompletna dokumentacja interfejsów w postaci pozwalającej na automatyczne generowanie kodu aplikacji klienckich odpowiedzialnego za komunikację z usługami Onedata.



Użytkownicy Onedata

Onedata jest aktualnie uruchomione oraz testowane w ramach kilku infrastruktur europejskich, w tym w projektach: PL-Grid, INDIGO-DataCloud, EGI DataHub, Open Nebula Science Cloud oraz Human Brain Project. W projekcie HBP Onedata wykazało możliwość dostarczenia systemu zarządzania danymi pozwalającemu na spełnienie wymagań przepustowości dla aplikacji wizualizacji przekrojów mózgu w czasie rzeczywistym.

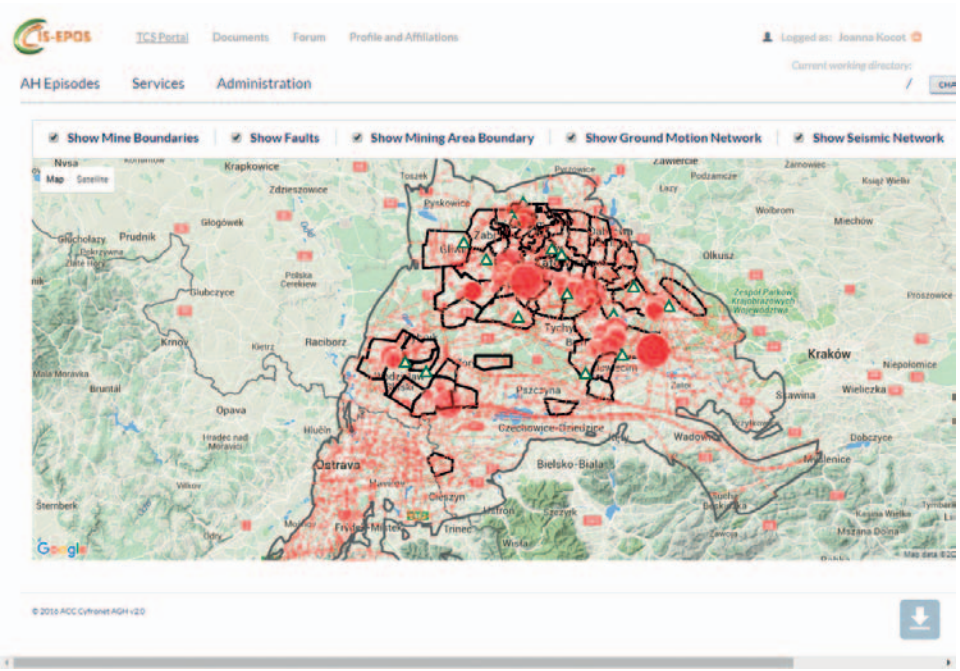
Więcej informacji można znaleźć pod adresem *https://onedata.org*.

InSilicoLab to zestaw zaawansowanych narzędzi i bibliotek programistycznych pozwalających opracowywać i rozwijać portale oferujące środowiska pracy dla naukowców. Podstawowym celem stojącym za budową takiego środowiska programistycznego jest możliwość tworzenia dedykowanych portali naukowych, które z jednej strony pozwalają w pełni wykorzystać możliwości obliczeniowe rozproszonej infrastruktury, z drugiej zaś pozwalają użytkownikom prowadzić eksperymenty *in silico* w sposób odzwierciedlający ich typowe sposoby prowadzenia badań.

Badacze wykorzystujący takie portale naukowe mogą traktować je jako dedykowane środowiska pracy, gdzie organizują swoje dane i przeprowadzają na nich skomplikowane obliczenia za pomocą oprogramowania danej dziedziny nauki, co ważne, w sposób specyficzny dla tej dziedziny.

Portale bazujące na technologii InSilicoLab są zaprojektowane tak, aby gromadzić w jednym miejscu całość narzędzi, których badacze potrzebują dla obliczeń *in silico*. To oznacza:

- możliwość organizowania danych będących przedmiotem badań lub ich wynikiem – w tym:
  - ułatwienie procesu przygotowania danych wejściowych dla obliczeń,
  - możliwość opisu i kategoryzacji danych wejściowych i wyjściowych za pomocą metadanych umożliwiających później szybkie odszukanie właściwych danych,
  - wyszukiwanie i przeglądanie dostępnych danych i opisujących je metadanych,
- łatwe uruchamianie nawet skomplikowanych, długich i wymagających wielu obliczeń, eksperymentów użytkownika.

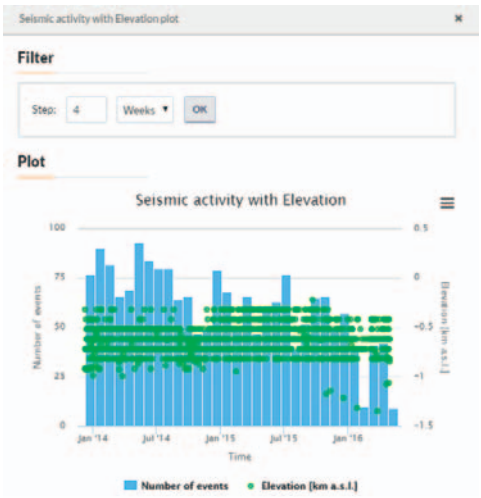


Cele platformy



To co wyróżnia technologię InSilicoLab, to dążenie do jak największej użyteczności budowanych za pomocą środowiska narzędzi, a więc jak najdokładniejszego dopasowania do potrzeb danej dziedziny nauki. Oznacza to przyjazność portalu naukowego dla użytkownika, ale co ważniejsze, użyteczność dla rozwiązywania rzeczywistych problemów naukowych. Tak postawione zadanie wymaga przygotowania dedykowanych narzędzi dziedzinowych umożliwiających rozwiązywanie specyficznych problemów interesujących badaczy, a zatem nie „ogólnego" środowiska umożliwiającego rozwiązanie każdego problemu badawczego z danej dziedziny. Zbudowanie takiego uniwersalnego i wszechstronnego narzędzia badawczego nie jest możliwe bez poświęcenia wygody i intuicyjności użytkowania, a brak tej ostatniej stanowi olbrzymią barierę w pozyskiwaniu nowych użytkowników. Przygotowanie dedykowanego portalu naukowego musi siłą rzeczy bazować na specyficznych problemach badawczych w ramach danej dziedziny. Cały portal jest natomiast sumą poszczególnych części składowych: dziedzinowych narzędzi, oprogramowania i niezbędnych serwisów, a także bibliotek należących do samej technologii InSilicoLab, stanowiących wspólną bazę dla wielu dziedzinowych portali.

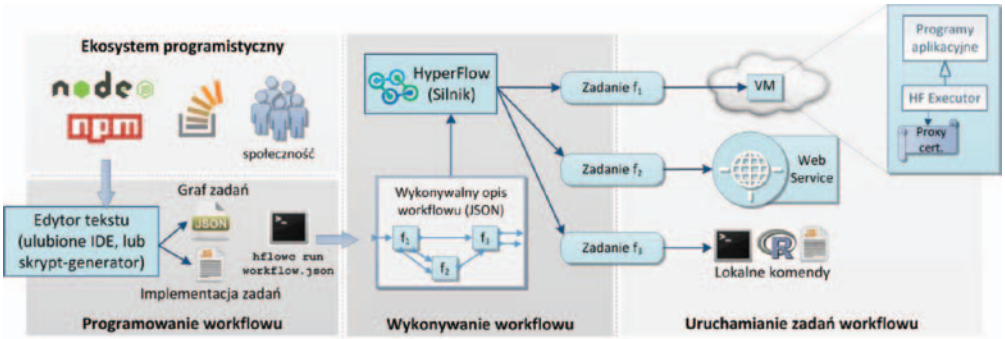
Aplikacje dziedzinowe



Każdy portal naukowy bazujący na technologii InSilicoLab jest dopasowany do specyficznych wymagań danej dziedziny lub też tylko do pewnej klasy jej problemów. Narzędzia wspólne środowiska dostarczają usług do zarządzania danymi użytkowników, ich kategoryzacji, opisu metadanymi i mechanizmów pozwalających określić źródło danych. Od strony infrastruktury zaś umożliwiają prowadzenie na niej obliczeń. Na tych narzędziach zbudowane są dziedzinowe modele danych i metadanych, scenariusze badań i specyficzne interfejsy użytkownika.

http://insilicolab.cyfronet.pl

HyperFlow jest narzędziem, które umożliwia kompozycję aplikacji naukowych w złożone przepływy, tzw. *workflowy naukowe*. HyperFlow wspomaga tworzenie przepływów, rozmieszczanie ich w chmurze obliczeniowej oraz ich uruchamianie.



Programowanie workflowów naukowych

W HyperFlow workflow jest opisywany jako graf zadań (nazywanych *procesami*) w prostym formacie opartym o JSON. Zadania workflowu reprezentują procedury naukowe – kolejne kroki w przepływie naukowym. Zadania te mogą być albo zaimplementowane w języku JavaScript, albo odwzorowane na programy wykonywalne. W pierwszym przypadku zadania workflowu są wykonywane przez *Node.js*, szeroko wykorzystywane środowisko uruchomieniowe dla języka JavaScript. Dzięki temu programowanie workflowu osadzone jest w dojrzałym ekosystemie programistycznym (społeczność, narzędzia, biblioteki, zasoby sieciowe), nie zaś w środowisku specyficznym dla danego systemu, mało znanym i wspieranym w ograniczonym stopniu. Dzięki możliwości niskopoziomowego programowania zadań workflowu, mogą one z łatwością wywoływać zewnętrzne Web Service'y, czy też wykonywać lokalne komendy, w ramach jednego przepływu.

W drugim przypadku twórca workflowu nie musi implementować kodu JavaScript, a jedynie przypisać każde zadanie workflowu do uprzednio utworzonej maszyny wirtualnej, na której zainstalowane są aplikacje naukowe, oraz określić komendę, która zostanie wykonana w przypadku uruchomienia danego zadania.

Dzięki wsparciu tych dwóch podejść do programowania workflowu, HyperFlow jest przydatny zarówno doświadczonym programistom / inżynierom, którzy pragną mieć możliwość programowania niskopoziomowego, jak i naukowcom dziedzinowym, którzy chcą jedynie komponować przepływy z uprzednio istniejących modułów.

Rozmieszczanie w chmurze

HyperFlow automatycznie rozmieszcza workflow w chmurze obliczeniowej. Aby to było możliwe, użytkownik musi jedynie przygotować plik konfiguracyjny, w którym określone jest odwzorowanie zadań workflowu na dostępne obrazy maszyn wirtualnych. Następnie użytkownik wykonuje prostą komendę *hflowc setup*, w wyniku której tworzone są instancje maszyn wirtualnych w chmurze. Instancje te zawierają komponenty środowiska uruchomieniowego HyperFlow oraz aplikacje naukowe uruchamiane z zadań workflowu.

Wykonanie workflowu

Po utworzeniu instancji workflowu w chmurze, użytkownik może ją uruchomić przy pomocy komendy *hflow run <workflow_directory>*. Każdy workflow uruchomiony jest ze swoją własną instancją środowiska uruchomieniowego HyperFlow. Powoduje to, że poszczególne workflowy są od siebie izolowane, co zwiększa bezpieczeństwo i niezawodność.

Środowisko uruchomieniowe HyperFlow (tzw. *HyperFlow Executor*) automatycznie przesyła dane wejściowe z katalogu użytkownika na instancje maszyn wirtualnych, wykonuje aplikacje naukowe, a następnie przesyła dane wyjściowe z powrotem do katalogu użytkownika. HyperFlow obsługuje kilka mechanizmów transferu danych, m.in. sieciowy system plików, gridftp oraz Amazon S3.

Aplikacje

HyperFlow jest częścią kilku większych systemów, w których jest wykorzystywany do implementacji szeregu aplikacji. W infrastrukturze PLGrid HyperFlow jest zintegrowany jako system zarządzania workflowami naukowymi, który umożliwia kompozycję naukowych workflowów i ich uruchamianie w chmurze. Przykładową aplikacją wspieraną przez HyperFlow jest solwer dla problemów opartych na metodzie elementów skończonych, który może być użyty do rozwiązywania wielu różnorodnych problemów naukowych. W projekcie Paasage (*http://www.paasage.eu*) HyperFlow jest integrowany jako silnik wykonawczy dla aplikacji naukowych uruchamianych w kontekście środowiska *multi-cloud*. W projekcie ISMOP (*http://www.ismop.edu.pl*) HyperFlow jest częścią systemu podejmowania decyzji w sytuacjach zagrożenia powodziowego. Hyperflow będzie miał również zastosowanie w obliczeniach parametrycznych i przetwarzaniu typu workflow, jako zamiennik technologii Scalarm.

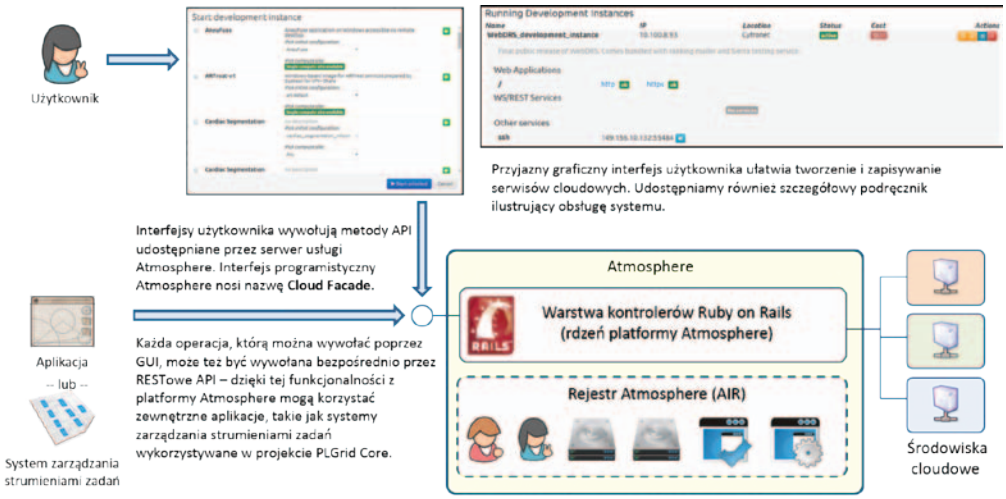
Kontakt

HyperFlow jest rozwijany i utrzymywany przez zespół DICE (*http://dice.cyfronet.pl*). Zapraszamy do zgłaszania wszelkich pytań oraz sugestii.

Kod źródłowy HyperFlow oraz podręczniki instalacji i użytkowania są dostępne na stronie *https://github.com/hyperflow-wms/hyperflow*.

Atmosphere

Platforma cloudowa Atmosphere jest zintegrowanym systemem umożliwiającym zarządzanie oraz interakcję z zasobami cloudowymi udostępnianymi w infrastrukturze PLGrid. Atmosphere to hybrydowe środowisko użytkownika umożliwiające integrowanie zasobów cloudowych dostarczanych przez rozmaite instytucje (w tym instytucje komercyjne). Platforma prezentuje swoim użytkownikom jednolitą, spójną przestrzeń zasobów, na których użytkownicy PLGrid mogą instalować i uruchamiać aplikacje naukowe wykorzystujące zasoby obliczeniowe dużej mocy. Oprócz narzędzi dla użytkowników aplikacji, udostępniamy również bogaty wybór narzędzi dla programistów oraz administratorów infrastruktur obliczeniowych.



Abstrakcja usług cloudowych

Podstawowym celem platformy Atmosphere jest sprawienie, by interakcja z zasobami cloudowymi była prosta i przejrzysta, zarówno dla początkujących jak i zaawansowanych użytkowników. Atmosphere jest w stanie instalować maszyny wirtualne w cloudzie, tworzyć obrazy maszyn oraz wspomagać współdzielenie usług obliczeniowych w zespołach PLGrid bez konieczności korzystania z niskopoziomowych bibliotek i interfejsów programistycznych. Dla wszystkich trzech klas użytkowników – administratorów, twórców aplikacji oraz użytkowników aplikacji – udostępniane są wygodne graficzne interfejsy użytkownika, a także niskopoziomowe interfejsy programistyczne umożliwiające integrowanie platformy Atmosphere z zewnętrznymi usługami, aplikacjami naukowymi oraz platformami zarządzania strumieniami zadań (systemami typu *workflow*).

Bezpieczeństwo

Platforma Atmosphere jest w pełni zintegrowana z mechanizmami uwierzytelniania oraz autoryzacji dostępu wbudowanymi w infrastrukturę PLGrid. Każdy z użytkowników PLGrid może zawnioskować o dostęp do zasobów cloudowych zapisując się do zespołu **plgg-cloud2**. Po akceptacji wniosku użytkownicy mogą tworzyć, wykorzystywać i współdzielić maszyny wirtualne w kontekście swoich własnych zespołów badawczych, a także na potrzeby indywidualnych projektów naukowych. Widoczność maszyn wirtualnych (oraz skojarzonych z nimi obrazów) jest automatycznie ograniczana do zespołu PLGrid, w ramach którego dane maszyny zostały zainicjalizowane. Atmosphere dba o automatyczne monitorowanie wykorzystania zasobów sprzętowych przez wszystkie maszyny wirtualne.

Zasoby

Atmosphere jest w stanie integrować cloudowe zasoby obliczeniowe udostępniane w rozmaitych technologiach. W ramach infrastruktury PLGrid w ACK Cyfronet AGH udostępniono zasoby obliczeniowe zarządzane przez popularny stos cloudowy OpenStack. Atmosphere potrafi również pozyskiwać zasoby od publicznych dostawców infrastruktur cloudowych, takich jak Amazon, RackSpace, Google Compute, itp. Opisana funkcjonalność nie wymaga od użytkowników opanowania dedykowanych bibliotek programistycznych ani interfejsów API.

Aplikacje

Oprócz zestawu szablonów systemów operacyjnych, platforma cloudowa PLGrid obsługuje szereg aplikacji naukowych. Poprzednia wersja platformy Atmosphere, wdrożona w projekcie VPH-Share, była z powodzeniem wykorzystywana przez około 25 niezależnych zespołów badawczych dla symulacji z zakresu Virtual Physiological Human w ramach konsorcjów VPH-Share oraz VPH-DARE, a także przez szereg samodzielnych zespołów współpracujących z ACK Cyfronet AGH oraz członków projektu EurValve, którego uczestnikiem był również Cyfronet.

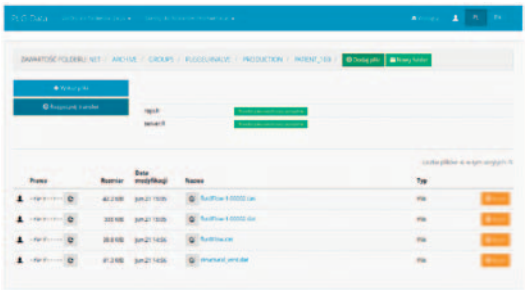
https://cloud.plgrid.pl

Proste narzędzie zarządzania plikami na klastrze obliczeniowym

PLG-Data

Usługa PLG-Data pozwala, za pośrednictwem przeglądarki WWW, zarządzać swoimi zbiorami danych, zgromadzonymi na zasobach dyskowych infrastruktury PLGrid. Dzięki niej można oglądać, pobierać, dodawać i usuwać pliki oraz foldery. Ułatwia także zarządzanie prawami dostępu dla innych osób, członków zespołu badawczego lub współpracowników spoza tej grupy. Posiada wsparcie dla klastrów Prometheus i Zeus.

Zestaw funkcjonalności, na które pozwala narzędzie, to m.in.:



- pobieranie plików z klastra na dysk lokalny,
- dodawanie nowych i usuwanie istniejących zbiorów,
- zmiana nazw plików i folderów, jak również zmiana uprawnień dostępu do nich,
- szybka nawigacja pomiędzy katalogami: domowym, roboczym i zespołów, dzięki poręcznemu menu skrótów,
- sprawny podgląd plików graficznych bez konieczności pobierania ich na dysk.

Dzięki odpowiedniej konstrukcji adresu URL do poszczególnych zbiorów, narzędzie pozwala łatwo przekazać ich lokalizację innej osobie, np. poprzez wklejenie wprost treści URL z paska adresu przeglądarki do wiadomości e-mail czy komunikatora. Adresat znajdzie współdzielony katalog lub pobierze plik jednym kliknięciem – pod warunkiem, że posiada odpowiednie uprawnienia dostępu.

Usługa jest zabezpieczona szyfrowanym protokołem HTTPS (na odcinku połączenia komputera użytkownika z portalem PLG-Data) oraz protokołem GridFTP – pomiędzy portalem usługi oraz klastrem obliczeniowym. Zastosowanie tych technik pozwala użytkownikom korzystać z niej w sposób bezpieczny oraz, z punktu widzenia innych współużytkowników PLGrid, ogranicza ich możliwości do zakresu przyznanego przez właścicieli danych. Innymi słowy, osoba korzystająca z usługi PLG-Data nie nabywa żadnych dodatkowych uprawnień w dostępie do zbiorów danych poza tymi, które już posiada.

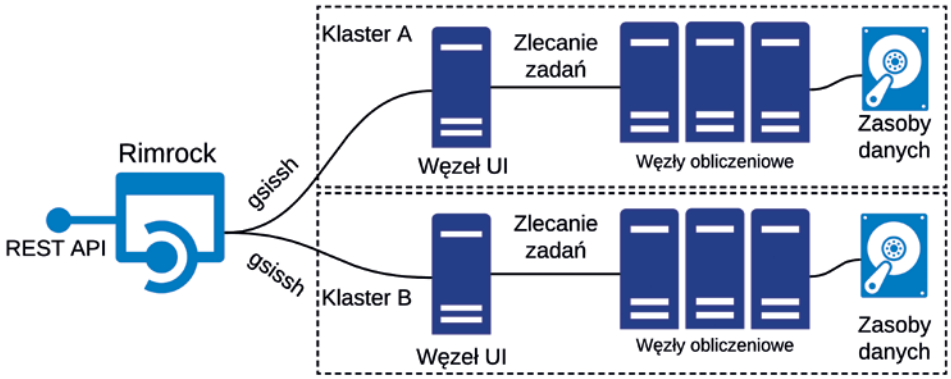
Logowanie do narzędzia odbywa się poprzez parę login-hasło PLGrid lub certyfikat p12 załadowany w przeglądarce. Usługa jest dostępna w polskiej i angielskiej wersji językowej, posiada także rozbudowany interfejs programistyczny (API), który pozwala na jej użycie przy budowie platform, narzędzi czy innych usług wykorzystujących zasoby infrastruktury PLGrid.

Adres narzędzia PLG-Data: *https://data.plgrid.pl*

Rimrock to usługa infrastruktury PLGrid umożliwiająca kontrolę obliczeń naukowych i zarządzanie otrzymywanymi za ich pomocą rezultatami dzięki nowoczesnym interfejsom dostępowym opartym o REST. REST (ang. *Representational State Transfer*) jest swego rodzaju wzorcem projektowania architektur rozproszonych aplikacji. Dzięki wykorzystaniu REST możliwy jest łatwy dostęp do usług, aplikacji i zaawansowanych skryptów.

Dostępność dla różnorodnych zastosowań

Zastosowanie interfejsów REST przy budowie usługi rimrock umożliwia wykorzystanie funkcjonalności usługi niezależnie od języka programowania, który został wybrany do tworzenia systemów wykorzystujących zasoby obliczeniowe. Można więc w oparciu o rimrock budować aplikacje internetowe i desktopowe, jak również tworzyć zaawansowane skrypty obliczeniowe (np. za pomocą języka powłoki *Bash* i polecenia *curl*). Ciekawym rozwiązaniem oferowanym przez usługę jest możliwość tworzenia aplikacji internetowych uruchamianych w całości w przeglądarce użytkownika, przy zminimalizowaniu udziału strony serwerowej.



Integracja z wieloma systemami zarządzania obliczeniami

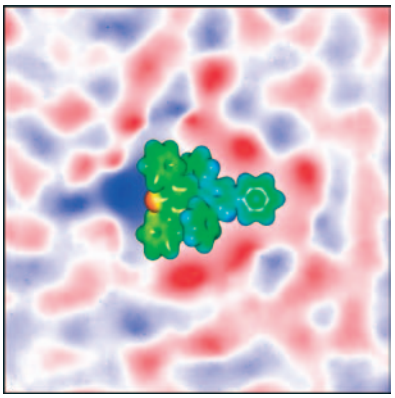
Usługa rimrock wykorzystuje kilka systemów zarządzania zadaniami (jak PBS/TORQUE lub Slurm), dzięki czemu zapewnia wsparcie dla ich unikatowych własności. Pozwala to na łatwą integrację aplikacji już istniejących w rozwijanych systemach. Dostęp do rezultatów obliczeń jest ułatwiony poprzez ukrycie wewnętrznego protokołu przesyłania plików (*GridFTP*) i grupowanie wyników zadań.

Bezpieczeństwo danych

Wymiana danych z usługą jest realizowana za pomocą bezpiecznego połączenia HTTPS, a do autoryzacji użytkowników wykorzystywany jest tymczasowy certyfikat użytkownika (tzw. *proxy*).

https://submit.plgrid.pl

Chemia i Biologia – struktura elektronowa i dynamika molekularna



A. Eilmes, P. Kubisiak: Potencjał elektrostatyczny cieczy jonowej w otoczeniu rozpuszczonej cząsteczki barwnika

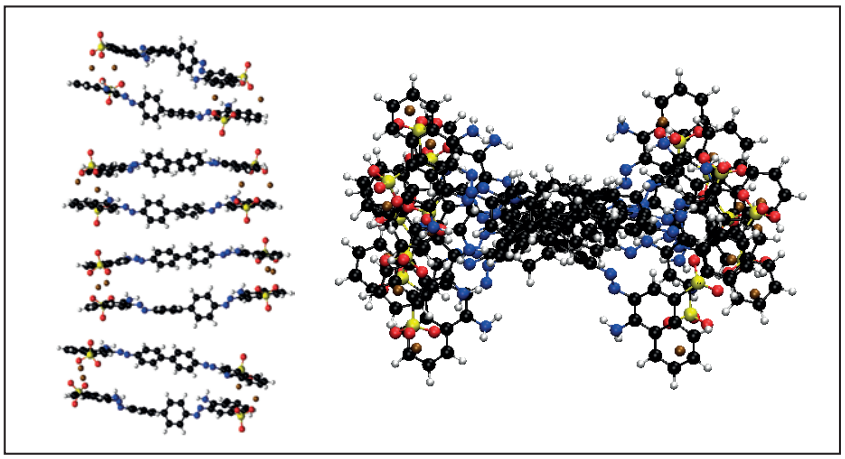
Współczesna chemia obliczeniowa wymaga ciągłego zwiększania zasobów, które umożliwiają przeprowadzenie symulacji dla coraz większych układów (ważnych m.in. w nanotechnologii i naukach biologicznych) oraz poprawę dokładności uzyskanych wyników. Na szczęście, ciągły rozwój technologii w połączeniu z profesjonalnym oprogramowaniem oferowanym przez Cyfronet wychodzi naprzeciw rosnącym wymaganiom i umożliwia przeprowadzanie różnorodnych obliczeń z zakresu chemii kwantowej.

Superkomputery *Zeus* oraz *Prometheus* składają się z węzłów obliczeniowych dysponujących nawet 1,5 TB RAM i 64 rdzeniami, co umożliwia wykonywanie obliczeń kwantowochemicznych wymagających ogromnych zasobów pamięci lub dużej liczby rdzeni ze współdzieloną pamięcią operacyjną. Co więcej, wszystkie węzły superkomputera połączone są szybkim interfejsem InfiniBand o wysokiej przepustowości i krótkim czasie dostępu, co przekłada się na zwiększenie szybkości wykonywania obliczeń, jeśli są one rozproszone pomiędzy węzły obliczeniowe. Wiele programów do symulacji chemicznych wymaga również szybkiego dostępu do systemów dyskowych, który jest możliwy dzięki wykorzystaniu rozproszonego systemu plików Lustre.

Wydajność zadań z chemii obliczeniowej zależna jest także od odpowiedniej konfiguracji oprogramowania naukowego oraz umiejętności jego użycia. Nasz zespół administratorów posiada niezbędną wiedzę, umiejętności oraz duże doświadczenie w instalacji oraz efektywnym wykorzystaniu dostępnych aplikacji i narzędzi. W naszym szerokim portfolio można odnaleźć wiele programów umożliwiających różnorodne obliczenia chemiczne. Wśród nich:

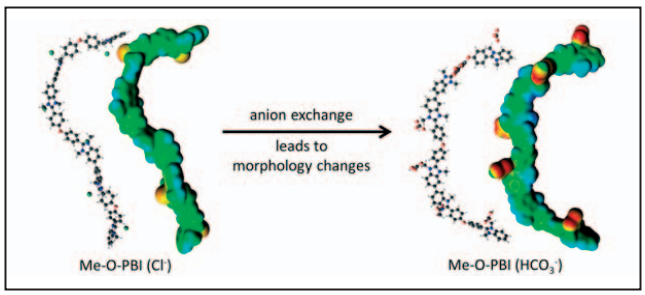
- Wszechstronne i powszechnie używane programy kwantowochemiczne takie jak **Gaussian**, **GAMESS US**, **NWChem**, **Schrödinger**, **Q-Chem** czy **TURBOMOLE,** dzięki którym można przeprowadzić obliczenia struktury elektronowej oraz wielu właściwości różnorodnych systemów molekularnych wykorzystując metody *ab initio,* pół-empiryczne oraz teorie funkcjonałów gęstości.
- Pakiety **Molpro**, **CFOUR** i **Dalton** do analizy systemów molekularnych z dużą dokładnością, w oparciu o zaawansowane schematy obliczeniowe, takie jak metody sprzężonych klastrów (CCSD(T)) oraz multireferencyjne (MCSCF).
- Pakiet Amsterdam Modeling Suite **(ADF, DFTB, MOPAC, COSMO-RS)** udostępniający metody do analizy różnorodnych właściwości systemów molekularnych (w szczególności spektroskopowych, takich jak widma NMR czy ESR) poprzez m.in. wykorzystanie relatywistycznego przybliżenia ZORA oraz metody COSMO-RS. Dodatkowo, rozbudowane GUI aplikacji **ADF** (**ADFInput**, **ADFViev**, etc.) ułatwia pracę naszym użytkownikom.

- Znacząca część dostępnych aplikacji może być używana do obliczeń właściwości systemów periodycznych. Wśród nich dostępne są **BAND**, **Quantum ESPRESSO** oraz **SIESTA**.
- **Desmond**, **Gromacs**, **Amber**, **LAMMPS**, **NAMD**, **Tinker-HP, CPMD**, **CP2K** i **Terachem** przeznaczone do symulacji wykorzystujących mechanikę molekularną oraz dynamikę molekularną dla systemów zbudowanych nawet z setek tysięcy atomów.



O. Klimas: Obliczona optymalna struktura klastra ośmiu cząsteczek czerwieni Kongo widziana z różnych perspektyw

Wykorzystanie kart graficznych do przeprowadzania obliczeń (**GPGPU**) w wielu dziedzinach nauki pozwala na wielokrotne przyspieszenie wykonywanych zadań. W naszym Centrum część węzłów umożliwia takie obliczenia poprzez użycie jednocześnie nawet ośmiu kart GPGPU wykorzystujących środowisko programistyczne **CUDA**. Wiele pakietów dostępnych w Cyfronecie umożliwia obliczenia GPGPU, wśród nich oprogramowanie chemiczne: **GAMESS**, **Terachem**, **NAMD**, **Quantum ESPRESSO**. Eksperci z ACK Cyfronet AGH współpracują z wieloma grupami tworzącymi i rozwijającymi powyższe pakiety. Warto dodać, że pracownicy Cyfronetu włożyli wiele wysiłku, aby dopracować środowiska obliczeniowe dla naszych użytkowników.



Potencjał elektrostatyczny cząsteczki tworzącej membranę jonowymienną. Opublikowane przez W. Germer, J. Leppin, C. Kirchner, H. Cho, H. Kim, D. Henkensmeier, K. Lee, M. Brela, A. Michalak oraz A. Dyck w Macromol. Mater. Eng. 2015, 300, 497–509

Uczenie maszynowe (ML) i sztuczna inteligencja (AI)

Analiza danych przyspieszona przez sztuczną inteligencję czyni wielkie postępy w wielu dziedzinach badań, w tym w naukach o materiałach, naukach przyrodniczych, językoznawstwie i naukach społecznych. Zdolność sieci neuronowych do uczenia się na podstawie złożonych danych może znacznie poprawić analizę danych, klasyfikację i wykrywanie wzorców, z potencjalnymi zastosowaniami w wielu systemach, m.in. w rozpoznawaniu obrazów, przetwarzaniu języka i optymalizacji.

Centrum superkomputerowe Cyfronet wychodzi naprzeciw tym wyzwaniom i przygotowało kilka pakietów:

PyTorch to pakiet, specjalna biblioteka dla języka Python, oparta na bibliotece Torch. Pozwala na implementację złożonych algorytmów Uczenia Głębokiego z obszaru Przetwarzania Języka Naturalnego, przetwarzania wideo i obrazów oraz wielu innych. Nadaje się bardzo dobrze do modelowania nowych architektur z dziedziny uczenia maszynowego z nastawieniem na eksperymenty.

TensorFlow pozwala podobnie jak Pytorch na implementację modeli bazujących na paradygmacie przepływu tensorów. Ze względu na swój charakter oraz statyczny graf reprezentacji umożliwia wydajną optymalizację treningu oraz inferencji modeli z uwzględnieniem platformy obliczeniowej.

Keras to biblioteka do projektowania modeli neuronalnych. Stanowi zewnętrzne API dla silników bazujących na TensorFlow, Microsoft Cognitive Toolkit, Theano lub PlaidML. Keras został zaprojektowany tak, aby był przyjazny dla użytkownika – jest aplikacją modułową i rozszerzalną.

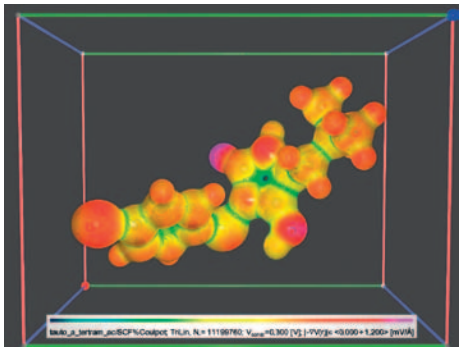
Scikit-learn to biblioteka dla języka Python. Posiada różne algorytmy klasyfikacji, regresji i grupowania, w tym obsługę maszyn wektorowych, losowych lasów, zwiększania gradientu, k-średnich i DBSCAN. Został zaprojektowany do współdziałania z bibliotekami numerycznymi i naukowymi Pythona: NumPy i SciPy.

SchNet to architektura głębokiego uczenia (deep learning), która umożliwia modelowanie molekularne materiałów na poziomie atomowym.

Horovod to zestaw narzędzi dla TensorFlow, Keras, PyTorch i MXNet. Głównym założeniem Horovod jest uczynienie procesu głębokiego uczenia (deep learning) rozproszonym, aby zwiększyć wydajność obliczeń i równocześnie ułatwić korzystanie z niego.

Wizualizacja danych, POVRay/ScPovPlot3D

Wizualizacja danych umożliwia analizę i zrozumienie wyników nawet bardzo złożonych obliczeń, szczególnie, jeśli ich forma finalna jest wielowymiarowa bądź uwzględnia czynnik czasu. Większość aplikacji do obliczeń numerycznych posiada jakiś moduł generujący ich wizualizację. W Python'ie jest dostępny moduł matplotlib czy VTK+, biblioteki graficzne posiadają także Matlab czy R. Podobnie wygląda sytuacja w przypadku programów do geowizualizacji (GIS) czy programów do obliczeń chemicznych. Niestety, niezależnie od tego, jak bardzo programy te są dopracowane, to wynik ich działania jest ograniczony iloczynem kartezjańskim dostępnych (a przy tym zgodnych) opcji.



Janusz Opiła: konfiguracja pola elektrostatycznego wokół molekuły polimeru. Ukazano powierzchnię stałego potencjału z aproksymacją trilinearną, kolor koduje moduł natężenia pola elektrostatycznego

Usunięcie tego ograniczenia – choćby tylko w celu stworzenia prototypu stylu wizualizacji do późniejszego wdrożenia w dedykowanym pakiecie – jest możliwe, wymaga jednak skorzystania z programu graficznego ogólnego przeznaczenia. Dobrymi przykładami są tu 3DMax, Blender czy POVRay. Jednak tylko ten ostatni wyposażony jest w domenowy język opisu sceny (SDL) o charakterze skryptowym, który pozwala na programowe, nieinteraktywne tworzenie wizualizacji. Posługiwanie się niezliczoną liczbą opcji języka SDL wymaga dość długiej nauki, dlatego napisano dedykowane API, w formie zestawu specjalizowanych modułów – pakiet ScPovPlot3D. Nie jest to projekt zamknięty, wciąż dopisywane są kolejne rozszerzenia, można zatem mówić o dojrzałej, działającej wersji beta. Aktualnie projekt znajduje się w wersji 4.0 i jest hostowany na GitHub'ie (URL: *https://github.com/JustJanush/Plot3Dv4*) – wieloplatformowe API wymaga POVRay'a w wersji min. 3.7.

Najważniejsze moduły to:

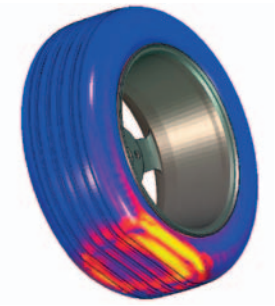
- VectorField.inc – hybrydowa wizualizacja pól wektorowych z użyciem widżetów i/lub rurek strumienia pola,
- Potential.inc – hybrydowa wizualizacja pól skalarnych, na siatkach regularnych i nieregularnych z interpolacją trilinearną albo sześcienną Catmull-Rom'a,
- BPatchSurf.inc – hybrydowa wizualizacja powierzchni w oparciu o dane na siatkach regularnych i nieregularnych z zaimplementowanym prostym krigingiem (KDE),
- Mesh2Surf.inc – hybrydowa wizualizacja danych określonych na regularnych siatkach 2D ($z = f(x, y)$),
- TextExt.inc – rozszerzone formatowanie tekstu 3D, zorientowane na prezentację równań.



Janusz Opiła: Wizualizacja terenu uzyskana w oparciu o dane wysokościowe zebrane na nieregularnej siatce i tekstury pozyskane z aplikacji GoogleEarth-Pro (okolice Karlobagu, Chorwacja). Opracowanie własne, DOI: 10.23919/MIPRO.2018.8400037

W razie potrzeby developer pakietu służy wsparciem technicznym. Informacje kontaktowe: *https://skos.agh.edu.pl/osoba/janusz-opila-2390.html*.

CAD/CAE



Aplikacje typu CAD (projektowanie wspomagane komputerowo) oraz CAE (komputerowe wspomaganie prac inżynieryjnych) stanowią dziś nieodłączną część procesu projektowania i budowy niemal wszystkiego – od części samochodowych po budynki. Dzięki symulacjom komputerowym inżynierowie mogą dokonywać oceny wytrzymałościowej elementów maszyn i konstrukcji, wykonywać liniowe i nieliniowe analizy strukturalne z uwzględnieniem odkształceń, zjawisk kontaktowych, plastyczności, hipersprężystości, itp. Istotne miejsce w dziedzinie nauk ścisłych zajmują również symulacje dotyczące: spalania, turbulencji, przepływów wielofazowych, reakcji chemicznych, radiacji i mechaniki płynów.

Wszystkie powyższe zagadnienia mogą być badane przez użytkowników dzięki specjalistycznemu oprogramowaniu, np. ANSYS, ABAQUS, FLUENT, MARC czy OPERA.

ANSYS jest rozbudowanym środowiskiem, posiadającym intuicyjny interfejs graficzny, wspierającym naukowców z prawie wszystkich nauk ścisłych oraz przemysłu. Uzyskiwane wyniki charakteryzują się dużą dokładnością. Rezultaty prezentowane są w postaci tekstowej i graficznej, np. diagramy, izopowierzchnie, deformacje. Możliwości obliczeniowe ANSYS-a są bardzo duże, obejmują one m.in. analizę harmoniczną i spektralną, lepkosprężystość, drgania własne, statykę i dynamikę.

ABAQUS znajduje szerokie zastosowanie w przemyśle, a wykonywanie obliczeń opiera się o metodę elementów skończonych. Użytkownik opracowuje kombinacje elementów skończonych, materiałów, procedur analizy i sekwencji obciążeń, zgodnie ze swoimi wymaganiami.

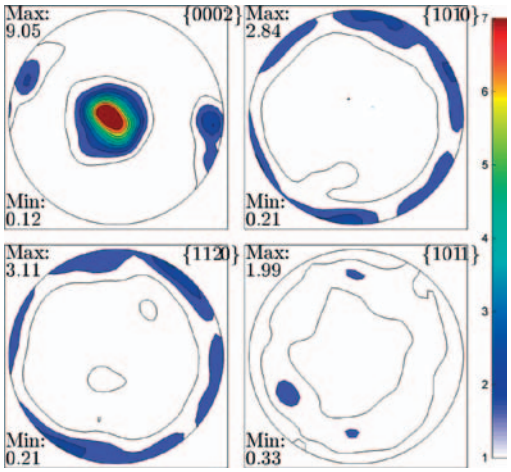
FLUENT umożliwia badanie i symulację zachowania cieczy, co znajduje zastosowanie przy projektowaniu urządzeń wykorzystujących lub transportujących płyny. Może być wykorzystywany w dziedzinie chemii, elektroniki, metalurgii, energetyki cieplnej, biomedycyny i innych.

MARC jest środowiskiem ogólnego zastosowania przeznaczonym do wykonywania obliczeń nieliniowej analizy elementów skończonych w celu wykonania symulacji zachowania produktu przy zmiennych warunkach statycznych, dynamicznych oraz z uwzględnieniem wszystkich rodzajów nieliniowości, w tym geometrycznej, materiałowej oraz warunków brzegowych i kontaktu. Jest to rozwiązanie posiadające możliwość symulacji produkcji i testowania wytworzonego produktu w celu wykrycia zniszczeń, uszkodzeń, awarii oraz propagacji pęknięć. Wszystko to można połączyć z możliwą analizą termiczną, elektryczną, magnetyczną i strukturalną.

OPERA jest oprogramowaniem używającym metody elementów skończonych do projektowania i optymalizacji urządzeń elektromagnetycznych, zarówno w dwóch jak i trzech wymiarach. Pozwala na wyszukiwanie rozwiązań numerycznych dla problemów z wielu dziedzin nauki: elektrostatyki, magnetostatyki, elektromagnetyzmu. Oprogramowanie umożliwia projektowanie różnych urządzeń elektrycznych: transformatorów, silników, przełączników, skanerów MRI i lamp rentgenowskich. To potężne narzędzie do wirtualnego prototypowania, dzięki któremu proces projektowania trwa o wiele krócej.

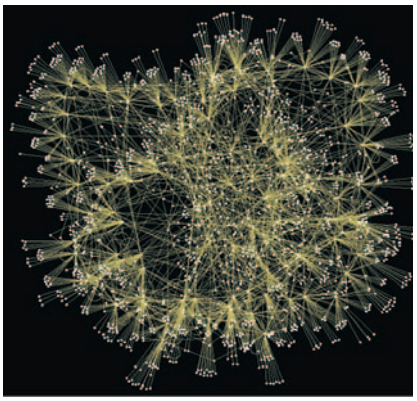
Aplikacje matematyczne

Dzięki aplikacjom matematycznym nawet bardzo rozbudowane i skomplikowane obliczenia mogą zostać wykonane w krótkim czasie. Użytkownicy ACK Cyfronet AGH mają dostęp do programów wspomagających wykonywanie zaawansowanych zadań z algebry, analizy, kombinatoryki, statystyki, teorii liczb, geometrii jak i innych działów matematyki. Wykonywanie działań takich jak całkowanie, różniczkowanie, obliczenia symboliczne, aproksymacja i interpolacja, Transformata Fouriera i Laplace'a, operacje macierzowe, przetwarzanie sygnałów cyfrowych, itp. staje się o wiele łatwiejsze. Przy pomocy odpowiednich narzędzi możliwa jest nawet wizualizacja wyników działań na zbiorach liczb rzeczywistych i/lub zespolonych. Niektóre programy pozwalają dodatkowo na tworzenie wykresów interaktywnych 2D bądź 3D. Wszystkie te funkcjonalności są bardzo istotne, ponieważ w pracy naukowców kluczowe jest często przygotowanie precyzyjnego modelu, jak najdokładniej opisującego analizowane zagadnienia.



Bartosz Sułkowski: Wyniki symulacji tekstury Zn po wytłaczaniu hydrostatycznym w 250 °C

Przykładem środowiska znajdującego zastosowanie w wyżej opisanych zagadnieniach jest **MATLAB**. Dzięki swoim dodatkowym modułom pozwala na wykonywanie obliczeń z zakresu modelowania finansowego, równań różniczkowych cząstkowych (PDE), czy optymalizacji wielokryterialnej, liniowej oraz nieliniowej. Inne zastosowania obejmują m.in. analizę danych geograficznych i generowanie na ich podstawie map, modelowanie biologicznych systemów dynamicznych i systemów hydraulicznych, czy analizę i wizualizację danych genomicznych oraz proteomicznych. Możliwe jest również użycie środowiska symulacyjnego Simulink, służącego do budowania modeli symulacyjnych z bloków, wizualizacji i analizy danych, bez potrzeby tradycyjnego programowania.



Rafał Rak: Sieć połączeń jednominutowych stóp zwrotu dla spółki KGHM (polska spółka giełdowa)

Obok tego rozbudowanego środowiska, użytkownicy znajdą w oprogramowaniu oferowanym przez Centrum także użyteczną aplikację, **MATHEMATICA**, dedykowaną do prowadzenia obliczeń równoległych ze zdefiniowaną dokładnością, do obliczeń symbolicznych i numerycznych. Zaletą tego pakietu jest także posiadanie narzędzia do automatycznego wykrywania i poprawiania błędów oraz możliwość zlecania zadań na kilku komputerach jednocześnie.

Innym uniwersalnym i interakcyjnym pakietem matematycznym jest **MAPLE**. Stosuje się go m.in. do upraszczania wyrażeń i dokładnej reprezentacji wielkości matematycznych. Oferuje możliwość korzystania z baz danych, generowania kodu innych języków programowania, tworzenia pokazów slajdów zawierających wykonywane zadania wraz z własnymi komentarzami, czy komunikację z aplikacjami MATLAB i systemami CAD.

Laboratorium Sztucznej Inteligencji

Nasza misja

Dzięki kompetencjom w dziedzinie algorytmów sztucznej inteligencji (SI) i znajomości nowoczesnych technik obliczeniowych wspieramy naukowców w ich pracach badawczych. Nasza wiedza i doświadczenie pozwala na skuteczną realizację uczenia maszynowego przy wykorzystaniu dostępnej w ACK Cyfronet AGH, dedykowanej do obliczeń neuronowych, partycji klastra komputerowego Prometheus. Partycja do obliczeń SI zbudowana została w oparciu o cztery wydajne serwery wyposażone w osiem kart GPGPU nVidia Volta V100 każdy. Całkowita moc obliczeniowa partycji to ponad 4 PetaFlops, czyli ponad cztery biliardy ($4x10^{15}$) obliczeń dla SI na sekundę.

Specjalizacje domenowe

Poniżej przedstawiono wybrane zastosowania sztucznej inteligencji w przetwarzaniu języka naturalnego, przetwarzaniu obrazów i analizie szeregów czasowych w różnych problemach badawczych i zastosowaniach praktycznych.

Przetwarzanie języka naturalnego

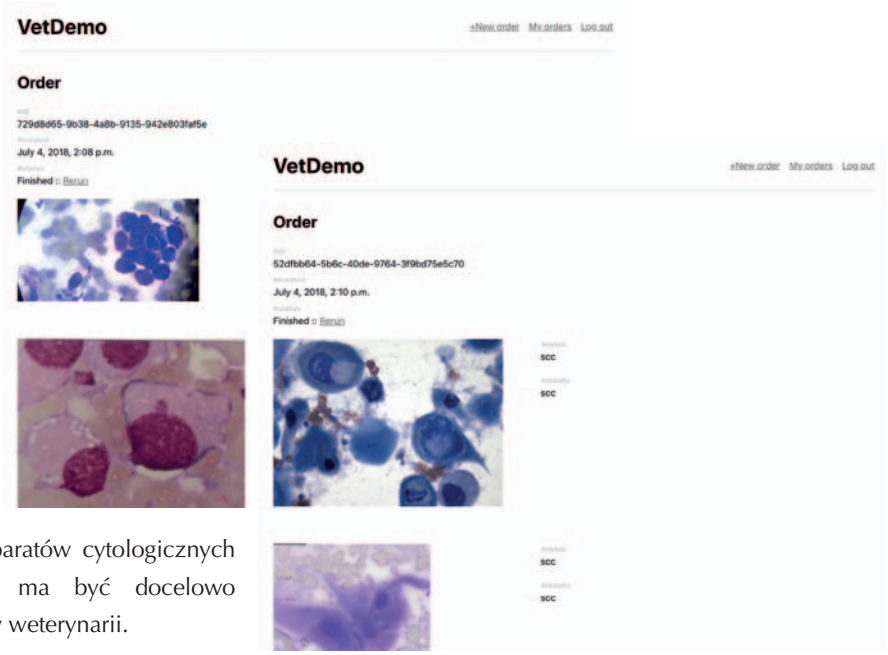
Przetwarzanie języka naturalnego to zagadnienie, w którym Laboratorium posiada wieloletnie doświadczenie. Od wielu lat tworzymy i rozwijamy narzędzie umożliwiające przeszukiwanie, porównywanie oraz klasyfikację dokumentów tekstowych. Praktycznym owocem tych prac jest usługa Scholar, dostępna w ACK Cyfronet AGH na platformie usług PLGrid. Jednym z ważnych zagadnień podejmowanych badawczo jest analiza efektywności metod redukcji dokładności reprezentacji danych tekstowych i ich wpływu na wyniki działania algorytmów. Udało nam się opracować modyfikacje pozwalające na 10-krotne zmniejszenie zużycia energii obliczeń w stosunku do oryginalnej implementacji.

Pojawienie się rozwiązań opartych o sieci neuronowe zrewolucjonizowało dziedzinę. Zajmujemy się badaniami nad możliwością kompresji i implementacji sprzętowej sieci do oceny sentymentu, które pokazały, że możliwa jest redukcja dokładności reprezentacji wag sieci do 8 a nawet 4 bitów przy zachowaniu niemal niezmienionej skuteczności działania sieci. Dodatkowo zajmujemy się zagadnieniami semi-nadzorowanego uczenia, w których ilość dostępnych, oznaczonych danych była bardzo ograniczona, a docelowe kategorie zmieniały się w trakcie działania systemu. Nasze badania pokazały, że możliwe jest opracowanie rozwiązania osiągającego dokładność nawet 98.9%.

Przetwarzanie obrazów

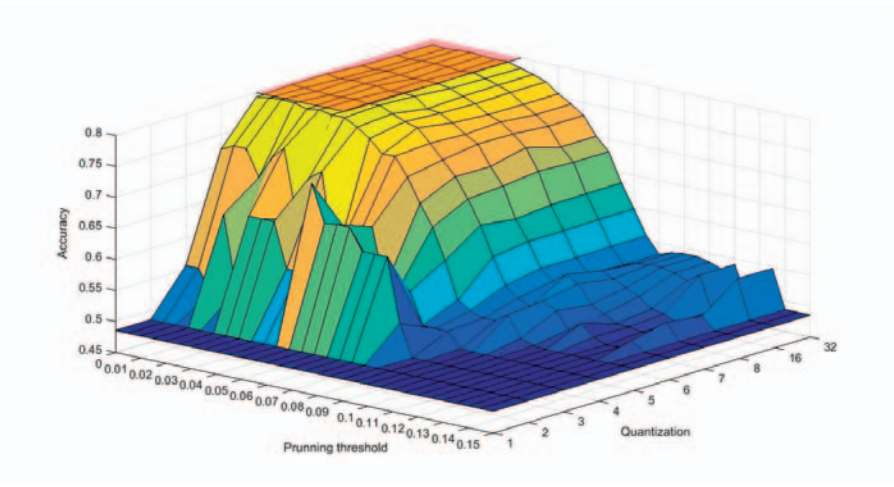
Przetwarzanie obrazów przy pomocy sieci neuronowych skupia się wokół prac Laboratorium, które związane są z rozpoznawaniem i detekcją obiektów na potrzeby aplikacji medycznych. W ich trakcie opracowany został system do klasyfikacji zmian nowotworowych w pobranych od zwierząt próbkach z badania cytologicznego. Zaproponowany system osiągnął skuteczność około 96% dla

wybranych trzech typów nowotworów. W pracach zostały wykorzystane modele głębokich sieci typu Resnet-50 oraz Resnet-152 i opracowany został specjalny schemat trenowania z wykorzystaniem algorytmów genetycznych dedykowany do klasyfikacji, który pozwala na selektywne wybieranie obszaru percepcji dla operacji klasyfikacji. Jednym z najnowszych osiągnięć w tym obszarze jest model do detekcji bazujący na architekturze Yolo3, który osiąga bardzo dobrą wartość współczynnika mAP, równą 0.86 dla specjalnie przygotowanych obrazów wykonanych z wykorzystaniem wielu preparatów cytologicznych niskiej jakości. Opracowywany system ma być docelowo wykorzystywany w codziennej pracy lekarzy weterynarii.



Analiza szeregów czasowych

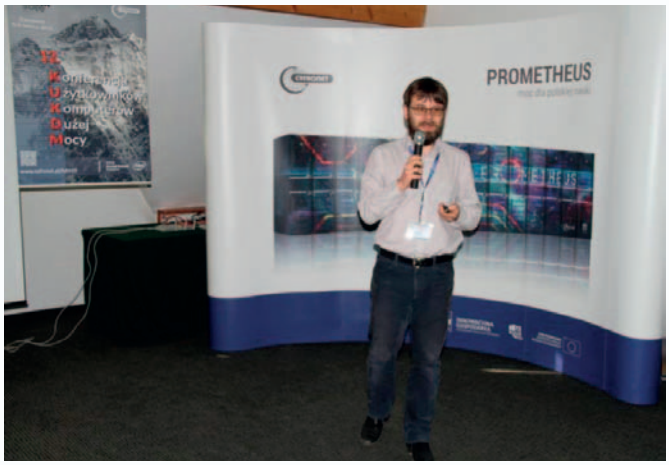
Prace Laboratorium dotyczą także modelowania szeregów czasowych służącego detekcji sytuacji nietypowych. Szczegółowe prace obejmują aplikacje praktyczne, takie jak predykcja anomalii w celu ochrony przed katastrofalnym uszkodzeniem magnesów Wielkiego Zderzacza Hadronów (LHC) oraz innych urządzeń stowarzyszonych znajdujących się w CERN. Opracowany system do detekcji quenchy w magnesach nadprzewodzących wykorzystuje sieci neuronowe GRU oraz LSTM oraz dedykowany post-processing, który pozwolił dodatkowo na klasyfikację wykrytych anomalii. Co więcej, opracowany algorytm został zrealizowany sprzętowo w architekturze FPGA Xilinx Zynq UltraScale+ MPSoC 285, co pozwoliło na uzyskanie bardzo niskiej latencji odpowiedzi.



W obszarze medycyny podejmowany jest problem detekcji zasłabnięć u osób hospitalizowanych, które długi czas są unieruchomione w łóżku szpitalnym. Analizy dotyczą znanego problemu zaniku funkcji wspomagania układu krążenia przez pracę mięśni nóg i są realizowane we współpracy z Medical University of Graz.

Konferencja Użytkowników Komputerów Dużej Mocy (KU KDM)





Podstawowym założeniem konferencji KU KDM było zainicjowanie corocznych spotkań naukowych gromadzących użytkowników, którzy wykonują obliczenia z wykorzystaniem komputerów dużej mocy i oprogramowania, udostępnianych przez ACK Cyfronet AGH.

Po raz pierwszy konferencja została zorganizowana w 2008 roku, a jej program obejmował liczne wystąpienia naukowców – prezentujące wyniki prac badawczych uzyskanych przy wykorzystaniu zasobów sprzętowych i oprogramowania oferowanego w Cyfronecie. Konferencję uświetniły wykłady zaproszonych gości – Norberta Attiga z Jülich Supercomputing Centre i Jaapa A. Kaandorpa z University of Amsterdam. Pierwsza edycja konferencji spotkała się z dużym uznaniem wśród jej uczestników. Tego typu wydarzenie było bardzo oczekiwane i potrzebne.

Obecna tematyka konferencji KU KDM koncentruje się na obliczeniach i symulacjach dużej skali, nowych algorytmach w informatyce, narzędziach i technikach w systemach dużej mocy obliczeniowej, zastosowaniach informatyki w dydaktyce oraz bazach danych. Jednakże jej głównym celem jest możliwość prezentacji osiągnięć naukowych szerokiemu gronu badaczy z różnych dziedzin. Jest to również okazja do przybliżenia użytkownikom samego Centrum oraz jego zasobów, w tym infrastruktury PLGrid.

Użytkownicy, którzy na co dzień prowadzą badania z wykorzystaniem zasobów Cyfronetu, uzyskują możliwość przedstawienia roli tych zasobów, typowych scenariuszy użycia i aspektów wydajnościowych w trakcie swoich prezentacji. Uczestniczący w konferencji przedstawiciele Cyfronetu, dzięki sposobności spotkania się z tymi naukowcami, prowadzenia rozmów i konsultacji, pozyskują wiedzę niezbędną do podjęcia działań zmierzających do dostosowania infrastruktury obliczeniowej do potrzeb wymagających środowisk naukowych. Atmosfera sprzyja

również wymianie doświadczeń pomiędzy naukowcami reprezentującymi te same lub różne dyscypliny oraz zapoznaniu się z nowymi technologiami oraz domenowo-specyficznymi usługami wdrażanymi przez Centrum.



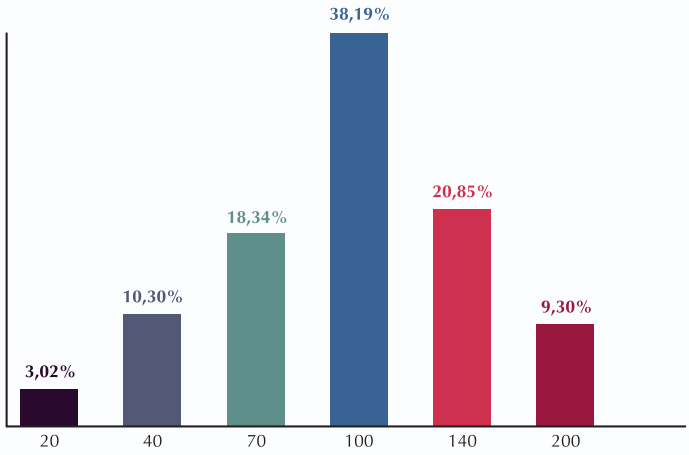
Do ważnych części konferencji należą spotkania z dostawcami sprzętu i oprogramowania dla Cyfronetu, a także dyskusja panelowa na temat efektywnego wykorzystania tych zasobów. Ta ostatnia cieszy się zawsze bardzo dużym zainteresowaniem użytkowników – naukowców, którzy mogą wtedy uzyskać informacje o nowościach w infrastrukturze obliczeniowej Centrum, a także bezpośrednio poinformować ekspertów z Cyfronetu o problemach, jakie napotkali w trakcie pracy z tą infrastrukturą.

Podczas konferencji KU KDM odbywają się również sesje plakatowe i szkoleniowe – w 2019 roku tematyka szkolenia obejmowała elementy programowania obliczeń naukowych w języku Python.

Artykuły naukowe opracowane na podstawie najlepszych prezentacji konferencyjnych są publikowane w jednym z dwóch znanych czasopism naukowych z dziedziny IT: Computing and Informatics (CAI) (*http://www.cai.sk*) lub Computer Science (CSCI) (*www.csci.agh.edu.pl*).



http://www.cyfronet.pl/kdm19/



Punktacja artykułów naukowych według MNiSW, powstałych w 2019 roku dzięki zasobom ACK Cyfronet AGH.

Sano: Centrum Zindywidualizowanej Medycyny Obliczeniowej – Międzynarodowa Fundacja Badawcza

W latach 2019-2026 Akademickie Centrum Komputerowe Cyfronet AGH wraz z pięcioma partnerami realizuje wyjątkowy projekt w ramach programu *Teaming for Excellence* Horyzontu 2020 Unii Europejskiej, programu Międzynarodowych Agend Badawczych prowadzonego przez Fundację na rzecz Nauki Polskiej oraz przy wsparciu finansowym Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego. W wyniku tego projektu w Krakowie powstało **Sano** – Centrum Zindywidualizowanej Medycyny Obliczeniowej. Ta międzynarodowa fundacja badawcza jest jedynym w Małopolsce i jednym z trzech polskich centrów prestiżowego programu *Teaming for Excellence*.

Misja **Sano** obejmuje:

- rozwój nowych metod obliczeniowych, algorytmów, modeli i technologii związanych z medycyną spersonalizowaną,
- wprowadzenie do codziennej praktyki opieki zdrowotnej nowych rozwiązań diagnostycznych i terapeutycznych opartych na symulacjach komputerowych,
- stymulowanie powstawania i rozwoju przedsiębiorstw tworzących technologie umożliwiające wprowadzanie nowych metod diagnostycznych i terapeutycznych,
- wkład w nowe programy kształcenia dla potrzeb nowoczesnej, zindywidualizowanej medycyny.

Centrum Sano zlokalizowane jest w Krakowie, gdzie kształci się licznych wysokiej klasy specjalistów w zakresie nauk medycznych i informatyki. Co ważne, krakowskie szpitale badawcze są wysoko oceniane w środowisku naukowym i systematycznie rośnie w tym mieście liczba firm w sektorze *life science*.

Rozwój **Centrum Sano** przyczyni się bezpośrednio do ulepszenia poziomu nauki w naszym regionie, poprzez nowe kontakty naukowe oraz możliwość kształcenia doktorantów na światowym poziomie, a ponadto wzmocni transfer wiedzy i technologii do gospodarki sprzyjając powstawaniu nowych firm działających w obszarze zaawansowanych technologii. Oddziaływanie Centrum będzie miało charakter ponadregionalny, czy wręcz międzynarodowy, przyczyniając się do rozwoju nowoczesnej medycyny, a w konsekwencji do wzrostu poziomu opieki zdrowotnej.

Warto podkreślić, że istotną rolę w działaniach **Sano** odgrywa współpraca ze Szpitalem Uniwersyteckim w Krakowie i jego pracownikami.

Program działania Centrum jest oparty m.in. na Polskiej Strategii Inteligentnej Specjalizacji i ma na celu rozwój współpracy nauki i biznesu w skali międzynarodowej. Kluczowymi wskaźnikami sukcesu są: liczba wysoko cytowanych publikacji naukowych i grantów uzyskanych przez Centrum, liczba rozwiązań opartych na modelach obliczeniowych wprowadzonych do praktyk klinicznych oraz liczba innowacyjnych rynkowych produktów i usług.

Centrum Zindywidualizowanej Medycyny Obliczeniowej Sano istnieje dzięki międzynarodowej współpracy następujących instytucji: ACK Cyfronet AGH, Klaster LifeScience Kraków – Krajowy Klaster Kluczowy, University of Sheffield i Insigneo Institute, Forschungszentrum Jülich, Fraunhofer Institute for Systems and Innovation Research ISI oraz Narodowe Centrum Badań i Rozwoju.

EOSC – ponadnarodowa integracja zasobów naukowych

European Open Science Cloud (EOSC) jest inicjatywą zmierzającą do stworzenia wirtualnego środowiska wypełniającego założenia paradygmatu Otwartej Nauki. EOSC ma w łatwy i przejrzysty sposób udostępnić nie tylko dane naukowe, ale też zaawansowane narzędzia i zasoby do ich składowania, udostępniania, przetwarzania i zarządzania nimi.

W ramach EOSC tworzone są połączenia pomiędzy istniejącymi e-infrastrukturami badawczymi i naukowymi. Integracja następuje między innymi poprzez ujednolicenie zasad dostępu i autoryzacji dla badaczy z różnych państw. Dzięki osiągnięciom EOSC-Hub, jednego z rodziny finansowanych przez UE projektów budujących EOSC, stworzono platformę realizującą powyższe zadanie. EOSC-Portal stanowi miejsce styku pomiędzy dostawcami usług i zasobów naukowych oraz badaczami, którzy mogą skorzystać nie tylko z samych zasobów, ale też wsparcia technicznego i szkoleń. Zespół ACK Cyfronet AGH odegrał w tym zakresie kluczową rolę, zostając dostawcą portalu oraz rozwijając serwis Marketplace, z rozbudowanym katalogiem usług i dokumentacji udostępnianych przez partnerów EOSC.

Dalszy rozwój EOSC

Od września 2019 roku trwa projekt EOSC Synergy (https://www.eosc-synergy.eu/), mający na celu wdrożenie standardów EOSC dla kolejnych 9 krajowych e-infrastruktur. Cyfronet, oprócz koordynacji działań na poziomie narodowym, wspiera proces planistycznie, szukając nowych, skutecznych rozwiązań dla integracji w innych krajach.

Drugi z aktualnie realizowanych projektów, EOSC Enhance (https://www.eosc-portal.eu/enhance), ma na celu usprawnienie Portalu pod kątem wygody i szybkości użytkowania. Prowadzone przez naszych specjalistów prace dotyczą między innymi zaawansowanej analityki zachowań użytkowników w celu stworzenia i wdrożenia najlepszych praktyk *user experience*. Dzięki badaniom, wywiadom i zbieraniu informacji zwrotnej od prawdziwych użytkowników, Portal rozwija się, stając się coraz bardziej przyjazny użytkownikowi. Jednocześnie wdrażane są nowe funkcjonalności, dzięki którym badaczom łatwiej będzie wykorzystać europejskie usługi naukowe oraz zbiory danych otwartej nauki.

Zarówno EOSC-Hub, jak EOSC Synergy i EOSC Enhance są finansowane z programu Unii Europejskiej „Horyzont 2020".

Równocześnie z rozwojem Portalu i towarzyszących platform, w EOSC prowadzone są prace nad stworzeniem przejrzystych zasad współpracy, zarówno z dostawcami usług, jak i użytkownikami końcowymi. Tworzenie struktur formatywnych jest koordynowane przez EOSC Secretariat, w ramach którego tworzone są dyskusyjne grupy robocze. Ich celem jest zbieranie wymagań i opracowywanie form kontaktu oraz procedur.

Polityka udostępniania danych w EOSC opiera się na zasadach FAIR: *findability* (wyszukiwalność), *accessibility* (dostępność), *interoperability* (interoperacyjność), and *reusability* (możliwość ponownego wykorzystania). Dzięki temu podejściu, Otwarta Nauka z teoretycznego paradygmatu staje się rzeczywistością.



EuroHPC – w stronę obliczeń w eksaskali

Europejskie Wspólne Przedsięwzięcie w dziedzinie Obliczeń Wielkiej Skali (European High-Performance Computing – EuroHPC) zostało powołane w celu radykalnego rozwoju istniejącej europejskiej infrastruktury komputerów dużej mocy i tym samym udostępnienia europejskim naukowcom mocy obliczeniowych porównywalnych z tymi dostępnymi w USA, Chinach i Japonii. EuroHPC zrzesza 32 państwa oraz prywatnych członków, a wspólnym celem jest zakup i rozmieszczenie dwóch superkomputerów o mocy w skali eksaflopsów (EFlops = 10^{18} operacji zmiennoprzecinkowych na sekundę), które znajdą się w światowej TOP5 (pierwszej piątce listy TOP500).

Konsorcjum LUMI

Kamieniem milowym na drodze do realizacji celów założonych przez EuroHPC będzie uruchomienie superkomputerów przed-eksaskalowych. Polska, reprezentowana przez ACK Cyfronet AGH i MNiSW, dołączyła do kierowanego przez Finlandię konsorcjum LUMI, które pracuje nad maszyną kilkukrotnie szybszą od najszybszego obecnie europejskiego superkomputera (włoski HPC5). Konsorcjum tworzą również: Belgia, Czechy, Dania, Estonia, Islandia, Norwegia, Szwecja i Szwajcaria.

LUMI, będące akronimem od The Large Unified Modern Infrastructure, jest również słowem z języka fińskiego oznaczającym „śnieg". I podobnie jak śnieg, może całkowicie zmienić krajobraz – w tym przypadku badań opartych na danych. Połączenie unikalnej wiedzy i doświadczenia w budowie i obsłudze systemów superkomputerowych, zarządzaniu Big Data oraz tworzeniu i wykorzystywaniu zaawansowanego oprogramowania ma zaowocować stworzeniem łatwo dostępnego, wydajnego i bezpiecznego środowiska HPC o dużych możliwościach.

Komputer przed-eksaskalowy

W celu zaspokojenia nieustannie wzrastającego zapotrzebowania środowiska akademickiego i przemysłu na zasoby obliczeniowe, superkomputer LUMI ma zapewniać moc obliczeniową przekraczającą 200 PFlops (0,2 EFlops) uzyskaną dzięki połączeniu partycji procesorów ogólnego przeznaczenia GPP i partycji akceleracyjnej GPGPU. Wraz z 60 petabajtami zasobów pamięci oraz usługami chmurowymi, maszyna da naukowcom możliwość wykonywania znacznie bardziej skomplikowanych obliczeń w krótszym czasie i szybkiego przetwarzania dużych zbiorów danych. Spodziewanym wynikiem będzie szybki rozwój w wielu kierunkach badawczych – w zakresie m.in. chemii, biologii, nanotechnologii, inżynierii materiałowej i innych dziedzin kluczowych dla współczesnej gospodarki. Dodatkowo nowy superkomputer przyczyni się do wielu osiągnięć w obszarach takich jak na przykład astrofizyka, prognozowanie pogody, aktywność sejsmiczna, medycyna spersonalizowana.

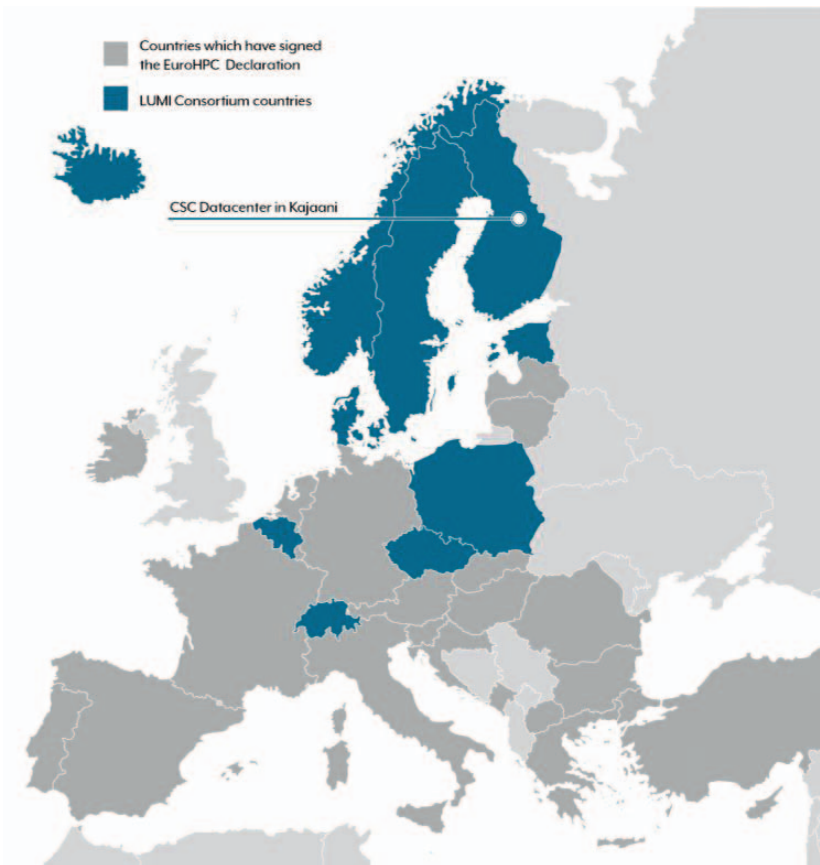
"*Superkomputer będzie można wykorzystać do rozwiązywania tych problemów nauki, które przy obecnie dostępnych maszynach pozostają nierozwiązane* – mówi Marek Magryś, Zastępca Dyrektora Cyfronetu ds. Komputerów Dużej Mocy. – *Takim flagowym przykładem są symulacje mózgu*".

W momencie instalacji superkomputer LUMI będzie jednym z najszybszych systemów komputerowych na świecie. Będzie działał w centrum danych CSC w fińskim mieście Kajaani, ale jego moc obliczeniowa, zasoby pamięci i usługi będą dostępne dla polskich naukowców. Jednym z celów Cyfronetu jest zapewnienie dla nich wydajnego i przyjaznego dla użytkownika środowiska pracy z superkomputerem, na bazie wypracowanych dobrych praktyk oraz zaadaptowanej do nowych warunków infrastruktury krajowej.

Z dbałością o środowisko

Dzięki klimatowi panującemu w rejonie Kajaani centrum danych CSC korzysta z naturalnego chłodzenia przez cały rok. Ponad 90% energii całego okręgu Kajaani pochodzi ze źródeł odnawialnych. Kajaani jest wyposażone w 3 lokalne hydroelektrownie (30 MW) oraz elektrownię opartą na biomasie (88 MW), co zapewnia dostawy czystej energii. Ma z nich korzystać również superkomputer LUMI. Dodatkowo, samo miasto również będzie korzystać z jego obecności. Ciepło generowane jako efekt uboczny pracy superkomputera zostanie przekazane do miejskiego systemu grzewczego, zapewniając nawet 20% zapotrzebowania Kajaani, w którym mieszka blisko 37 tys. osób. Będzie to możliwe dzięki wykorzystaniu do chłodzenia LUMI systemu rurek z wodą. Podobne rozwiązanie zostało wykorzystane przy budowie Prometheusa. Szacuje się, że dzięki wykorzystaniu ciepła odpadowego Kajaani zmniejszy roczną emisję CO_2 o 13,5 tys. ton.

Superkomputer LUMI ma zostać uruchomiony w pierwszej połowie 2021 roku.



Cyfronet w przedsięwzięciach wpisanych na Polską Mapę Infrastruktury Badawczej



Wśród strategicznych infrastruktur wpisanych w styczniu 2020 r. na Polską Mapę Infrastruktury Badawczej znajdują się dwa przedsięwzięcia zgłoszone przez ACK Cyfronet AGH jako inicjatora i koordynatora konsorcjum PLGrid: *Narodowa Infrastruktura Superkomputerowa dla EuroHPC* oraz *Narodowa Infrastruktura Chmurowa PLGrid dla EOSC.

Celem programu **Narodowa Infrastruktura Superkomputerowa dla EuroHPC** jest budowa infrastruktury obliczeniowej dla badań naukowych dotyczących rozwiązań odpowiadających na aktualne i przyszłe potrzeby polskiego społeczeństwa, środowiska naukowego i gospodarki.

Infrastruktura będzie opierać się o nowoczesne systemy superkomputerowe umożliwiające realizację zarówno tradycyjnych zadań symulacyjnych, jak i analizę danych z wykorzystaniem metod sztucznej inteligencji. Produkcyjne systemy obliczeniowe budowane w ramach projektu będą należeć do czołówki światowych superkomputerów. Poza infrastrukturą obliczeniową projekt zapewni też dostęp do specjalistycznych szkoleń oraz eksperckiego wsparcia technicznego dla użytkowników z nauki i gospodarki, a także niezbędne procedury alokacji i rozliczania wykorzystania zasobów.

Projekt wpisuje się bezpośrednio w ramy międzynarodowej inicjatywy EuroHPC – European High-Performance Computing opublikowanej w komunikacie Komisji Europejskiej nr COM/2018/08 final – 2018/03 (NLE). EuroHPC jest przedsięwzięciem mającym na celu utworzenie europejskiego systemu komputerów dużej mocy klasy eksaskalowej, unikatowych na skalę światową, zbudowanych w oparciu o technologie rozwijane w Europie. Przedsięwzięcie będzie realizowane przez Konsorcjum PLGrid.

W efekcie realizacji przedsięwzięcia Narodowa Infrastruktura Superkomputerowa dla EuroHPC powstanie infrastruktura do prowadzenia badań na potrzeby nauki, gospodarki i społeczeństwa czerpiąca z najnowocześniejszych technologii w zakresie HPC wypracowanych w ramach międzynarodowej kooperacji EuroHPC. Infrastruktura będzie oferowała usługi w zakresie masywnie równoległych symulacji komputerowych, wysoce wydajnego przetwarzania zbiorów danych, wykorzystania metod sztucznej inteligencji, oprogramowania i narzędzi wysokiej produktywności, w tym wizualizacji danych, oraz wsparcia i szkolenia użytkowników. Poza głównymi systemami obliczeniowymi w skład infrastruktury wejdą także mniejsze systemy testowe i badawcze, służące weryfikacji nowych technologii procesorowych, akceleratorowych, pamięciowych i sieciowych w kontekście wykorzystania ich do budowy systemów produkcyjnych, a także prowadzeniu prac badawczych i rozwojowych w zakresie efektywnych infrastruktur HPC.

Usługi będą oferowane za pośrednictwem infrastruktury PLGrid, która integruje większość dostępnych w kraju zasobów obliczeniowych, co ułatwi proces alokacji zasobów i wsparcia użytkowników. Zrealizowana zostanie także integracja z europejskimi systemami preeskaskalowymi i petaskalowymi udostępnionymi w ramach programu Euro-HPC, w szczególności z maszyną budowaną przez konsorcjum LUMI, którego Polska jest członkiem.

Narodowa Infrastruktura Chmurowa PLGrid dla EOSC to program wykorzystania zasobów chmurowych do badań naukowych odpowiadających na aktualne i przyszłe potrzeby polskiego społeczeństwa, środowiska naukowego i gospodarki. Zakres tych badań obejmuje m.in. dane, infrastruktury i platformy przetwarzania danych oraz efektywne algorytmy i dedykowane aplikacje.

Podstawą programu są wymagania społeczeństwa, gospodarki i polskich badaczy, w szczególności współpracujących w ramach międzynarodowych zespołów naukowych. Grupy te wymagają zaawansowanych środowisk integracji rozproszonych zasobów: oprogramowania, infrastruktur i dedykowanych usług. Wymagania te mogą być spełnione jedynie przez zaawansowane technologie IT, połączone z zasobami obliczeniowymi, pamięci masowych i danych. Współdziałanie tych wszystkich elementów w ramach elastycznego ekosystemu umożliwiają technologie chmurowe.

Narodowa Infrastruktura Chmurowa PLGrid dla EOSC jest częścią ekosystemu Europejskiej Chmury dla Otwartej Nauki (EOSC, Deklaracja z dnia 26.10.2017). Polska rozwija obecnie dwa kluczowe komponenty tego federacyjnego, globalnie dostępnego i multidyscyplinarnego środowiska: Onedata – system jednolitego udostępniania i zarządzania danymi oraz Portal EOSC. Jako część europejskiego ekosystemu Narodowa Infrastruktura Chmurowa PLGrid będzie oferować zaufane i otwarte środowiska dla użytkowników w całym cyklu życia danych. Pozwoli to na publikację, wyszukiwanie, wykorzystywanie i wielokrotne użycie zgromadzonych danych, narzędzi, oprogramowania i innych wyników prac przez naukowców, gospodarkę i całe społeczeństwo.

Badania zaplanowane w ramach Narodowej Infrastruktury Chmurowej PLGrid dla EOSC pozwolą na opracowanie, walidację i w konsekwencji udostępnienie usług (ogólnych i dedykowanych), a tym samym wykorzystanie nowoczesnych technologii i efektywnych technik zarządzania, przetwarzania i ponownego wykorzystania danych przez środowiska naukowe, podmioty gospodarki i społeczeństwo.

W tym celu Infrastruktura będzie dostarczać:

- technologie rozwiązań dla środowisk rozproszonych, w tym chmurowych, obejmujące zarządzanie usługami w środowisku rozproszonym, automatyzację złożonych procesów, integrację platform i infrastruktur badawczych,
- oparte o krajowe technologie bezpieczne udostępnianie danych i zarządzanie nimi, zgodne ze standardami EOSC,
- badania specyficznych potrzeb użytkowników w zakresie wielkoskalowego przetwarzania danych w środowisku rozproszonym, w tym: przetwarzanie „blisko danych", wykorzystanie paradygmatu „data lakes" wraz z nowymi modelami analizy, skalowalne zasoby w środowisku rozproszonym,
- weryfikacje rozwiązań przygotowywanych na potrzeby społeczeństwa, nauki i gospodarki w zaawansowanych aplikacjach,
- katalog ogólnych serwisów i usług chmurowych dla gospodarki, nauki i społeczeństwa będących wynikiem prac badawczych i rozwojowych we współpracy z EOSC.

Pierwszy etap tych prac jest obecnie realizowany w ramach zasobów infrastruktury PLGrid.

**Materiały z broszury MNiSW pt. „Polska Mapa Infrastruktury Badawczej".*

Celem projektu EPOS-SP jest opracowanie i wdrożenie założeń pozwalających na zapewnienie trwałości infrastruktury EPOS wytworzonej w poprzednich projektach (EPOS-PP oraz EPOS-IP).

Projekt EOSC Enhance ma na celu zbudowanie ulepszonej, bardziej zintegrowanej wersji Portalu EOSC, co umożliwi poprawę i rozszerzenie rozwiązań, które sprawią, że łatwiej będzie odszukać europejskie usługi naukowe oraz zbiory danych otwartej nauki.

Projekt EOSC-Synergy wprowadza standardy EOSC dla infrastruktur krajowych w dziewięciu krajach Unii Europejskiej. Stanie się to poprzez zharmonizowanie polityk oraz rozszerzenie dostępu do infrastruktur badawczych, danych naukowych i serwisów dziedzinowych.

Celem projektu jest utworzenie w Krakowie ośrodka medycyny obliczeniowej. Centrum będzie głównym motorem europejskiego postępu w tym szybko rozwijającym się sektorze, opracowując zaawansowane metody inżynieryjne do zapobiegania, diagnozowania i leczenia chorób oraz zaspokajając ogólnoświatową potrzebę radykalnie usprawnionych systemów opieki zdrowotnej.

W ramach projektu stworzony zostanie system wspierania decyzji klinicznych (Clinical Decision Support System – CDSS) dla leczenia nowotworów (nauroblastoma, glejak) występujących u dzieci.

Celem projektu było przygotowanie uruchomienia produkcyjnej infrastruktury dla otwartej nauki w Europie i praktyczne zastosowanie rozwiązań wypracowanych w ramach projektu EOSC-Pilot do realnego środowiska wielkiej skali rozproszonego na większość krajów europejskich.

Rozwiązania opracowane w projekcie są przełomowym krokiem na drodze do stworzenia innowacyjnych serwisów przetwarzania eksaskalowych danych, maksymalizujących korzyści, jakie niosą nowoczesne systemy obróbki danych.

Głównym zadaniem projektu PRACE-6IP jest implementacja nowych rozwiązań oraz utrzymanie operacyjności środowiska PRACE w obszarze europejskich infrastruktur obliczeniowych HPC.

Projekt EPOS IP to faza implementacyjna projektu EPOS (System Obserwacji Płyty Europejskiej). Głównym celem projektu była integracja różnorodnych i rozproszonych Europejskich Infrastruktur Badawczych w naukach o „twardej" Ziemi, w oparciu o nowoczesne technologie IT.

Istotą projektu było stworzenie systemu eksperckiego, pomagającego ocenić strategie spersonalizowanego leczenia choroby zastawki serca. W celu uzyskania odpowiedniej jakości terapii, uczestnicy projektu wykorzystali szereg złożonych technik symulacji pracy serca oraz interpretacji danych medycznych.

Celem projektu EGI-Engage była popularyzacja idei „Open Science Commons", czyli paradygmatu otwartej nauki dla wzbogacenia doświadczenia, wiedzy i współpracy pomiędzy grupami naukowców w Europie. Implementacja paradygmatu oparta została o sfederowane w ramach EGI infrastruktury obliczeniowe, danych, komunikacji, a także o wiedzę i doświadczenie społeczności naukowych je wykorzystujących.

Zadaniem projektu było opracowanie systemu komputerowego wspierającego elastyczne projektowanie technologii walcowania wyrobów płaskich na gorąco, na podstawie wyników obliczeń dedykowanych modułów do symulacji numerycznych.

W ramach projektu tworzono i rozwijano nowe gridowe narzędzia i usługi służące do uruchamiania interaktywnych aplikacji, wymagających dużych mocy obliczeniowych do przeprowadzania wielkoskalowych obliczeń rozproszonych.

Zadaniem projektu jest wytworzenie usług infrastruktury obliczeniowej oraz składowania danych na potrzeby projektu PRACE w ramach 6-ciu dedykowanych laboratoriów: 1) L. przetwarzania HPC oraz chmurowego, 2) L. dostępu do infrastruktury przetwarzania, 3) L. zarządzania i monitorowania usług, 4) L. usług zarządzania danymi, 5) L. zarządzania rozproszonymi danymi oraz transparentnego dostępu do danych, 6) L. bezpieczeństwa infrastruktury.

Celem projektu jest udostępnienie szerokiemu gronu odbiorców ikonograficznych zbiorów artystycznych i naukowych przechowywanych w Polskiej Akademii Umiejętności poprzez przeprowadzenie ich digitalizacji, przygotowanie opisów digitalizowanych danych oraz finalną publikację digitalizatów w platformie PAUart.

Głównym zadaniem projektu było udostępnienie pochodzących z satelitów Sentinel sieci Copernicus danych satelitarnych. W ramach projektu powstała infrastruktura do automatycznego pobierania danych bezpośrednio z satelitów, ich bezpiecznego przechowywania oraz udostępniania na potrzeby nauki, administracji i szkoleń.

Celem projektu było opracowanie kompleksowego testu opartego na analizie materiału pobranego z guza w trakcie operacji lub biopsji u pacjentów chorych na glejaka oraz próba opracowania metody "liquid biopsy" opartej na podstawie analizy wolnokrążącego DNA (cfDNA) guza we krwi obwodowej.

Zadaniem projektu jest budowa krajowej infrastruktury badawczej z zakresu nauk o Ziemi oraz jej integracja z międzynarodowymi bazami danych, serwisami i usługami realizowanymi w ramach europejskiego programu EPOS (European Plate Observing System).

Celem projektu był rozwój wyspecjalizowanego centrum kompetencji technologicznych w zakresie rozproszonych infrastruktur obliczeniowych, ze szczególnym uwzględnieniem technologii gridowych, obliczeń w chmurze oraz infrastruktur wspierających obliczenia na wielkich zbiorach danych. W rezultacie, użytkownikom zostały zaoferowane wielkie moce obliczeniowe i duże zasoby pamięci. Infrastruktura PLGrid została wzbogacona o nowe usługi bazowe i usługi dla użytkowników końcowych.

W trakcie trwania projektu nastąpiła realizacja nowych usług dziedzinowych dla grup badaczy z 14 dyscyplin naukowych, co pozwoliło użytkownikom efektywniej wykorzystywać infrastrukturę PLGrid i krócej oczekiwać na wyniki prowadzonych obliczeń.

Projekt wspierał polskie grupy naukowców w prowadzeniu badań oraz ułatwiał szerszą współpracę międzynarodową w obszarze e-Science.

Międzynarodowe przedsięwzięcie Zespół Teleskopów Czerenkowa (CTA) ma zaprojektować nowoczesne narzędzia ułatwiające analizę danych CTA. Projekt ma na celu przede wszystkim rozwój środowiska InSilicoLab Science Gateway dla CTA, przeznaczonego głównie do analizy i wizualizacji opracowanych danych.

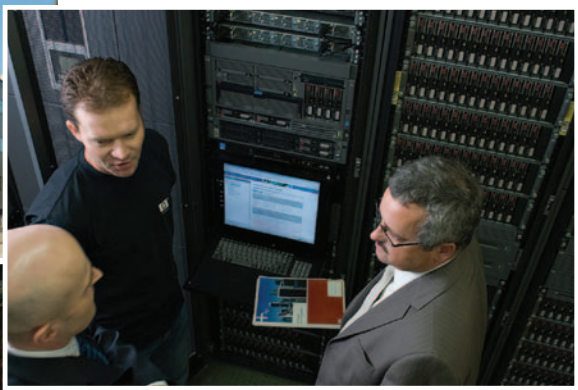
W trakcie projektu miała miejsce integracja wybranych usług dostępnych w sieci PIONIER i opracowano nowe usługi, w zakresie zwiększania niezawodności i bezpieczeństwa.

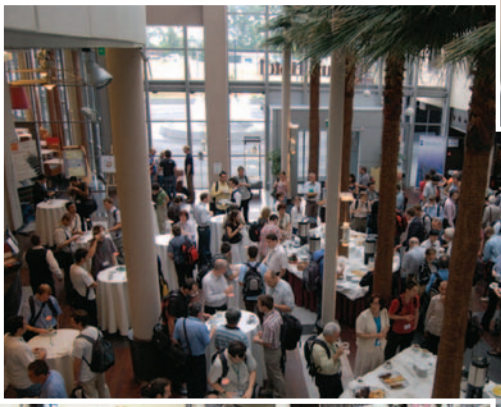
Głównym zadaniem projektu było stworzenie i uruchomienie pięciu usług działających w oparciu o sieć PIONIER: wideokonferencji, eduroam, usług kampusowych, powszechnej archiwizacji oraz naukowej interaktywnej telewizji HD.

Celem projektu była rozbudowa 21 środowiskowych sieci teleinformatycznych nauki dla zapewnienia instytucjom naukowym dostępu do nowoczesnej oraz bezpiecznej infrastruktury sieciowej i umożliwiającej łączność z jednostkami naukowymi całego świata, wspierając polskie grupy naukowców.

W ramach projektu PL-Grid została zbudowana Polska Infrastruktura Gridowa, w celu dostarczenia polskiej społeczności naukowej platformy informatycznej opartej na klastrach komputerów, służących e-Science w różnych dziedzinach.







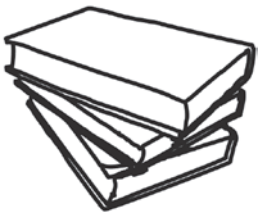





www.CYFRONET.krak

Młodzi naukowcy w Cyfronecie





Organizowany corocznie konkurs na najlepszą pracę doktorską zrealizowaną w oparciu o zasoby obliczeniowe ACK Cyfronet AGH jest jedną z ważniejszych tradycji w naszym Centrum. Ocenie konkursowej poddawana jest wartość naukowa zgłoszonej pracy doktorskiej, możliwość jej praktycznego zastosowania oraz zakres wykorzystania zasobów obliczeniowych i pamięci składowania danych w Cyfronecie. Dla autorów najlepszych prac przewidziano nagrody. Na przestrzeni ostatnich lat Konkurs stał się ważnym narzędziem promującym badania prowadzone przez młodych naukowców, a do kolejnych edycji Konkursu zostało zgłoszonych wiele prac opisujących ciekawe zagadnienia naukowe z takich dziedzin jak chemia, energetyka, elektronika, fizyka, informatyka, inżynieria materiałowa, matematyka i robotyka. Młodzi badacze łączyli w swoich badaniach wyniki bezpośrednich pomiarów w laboratorium i obliczenia na komputerach dużej mocy. W swojej pracy korzystali z różnych narzędzi uruchamianych na szerokim wachlarzu architektur obliczeniowych oferowanych przez Cyfronet.

Prezentacja najważniejszych tez prac doktorskich Laureatów Konkursu miała miejsce w trakcie Dnia Otwartego Cyfronetu w listopadzie 2020. Z przyjemnością prezentujemy fragmenty kilku wybranych wywiadów z uczestnikami Konkursu, które znajdziecie Państwo na kolejnych stronach.

Zapraszamy serdecznie do uczestnictwa w kolejnej edycji Konkursu!

http://www.cyfronet.pl/konkurs



Laureaci jednej z poprzednich edycji



dr inż. Mateusz Sitko

Rozmowa z autorem pracy:
„Opracowanie wysokowydajnego obliczeniowo modelu automatów komórkowych dla rekrystalizacji"

Co sprawiło, że zajął się Pan modelowaniem struktur metali? Jakie aspekty są dla Pana najbardziej interesujące?

Najbardziej interesującym aspektem mojej pracy jest możliwość prowadzenia badań na styku dwóch dziedzin nauki, czyli wykorzystanie wiedzy z zakresu informatyki i inżynierii materiałowej do opracowania oraz implementacji systemów wspomagających opracowywanie nowych materiałów, a także technologii ich kształtowania. Już w trakcie studiów inżynierskich oraz magisterskich zainteresowałem się opracowaniem aplikacji do komputerowego wspomagania projektowania technologii kształtowania zaawansowanych stopów metali, wykorzystując koncepcję cyfrowego bliźniaka materiału. Praca ta pozwoliła mi bliżej poznać zagadnienia związane z koncepcją cyfrowej reprezentacji materiałów, która pozwala nie tylko odwzorować to, co dzieje się w materiale na niespotykanym dotąd poziomie dokładności, ale również przewidywać zachowanie materiału w coraz bardziej złożonych stanach naprężenia. W przypadku pracy z takimi materiałami jak nowoczesne stopy metali, najbardziej interesująca jest praktyczna strona rozwiązywania problemów oraz aplikacyjności uzyskanych rozwiązań.

W jaki sposób przybliżyłby Pan wykorzystanie automatów komórkowych dla symulacji rekrystalizacji osobie niezwiązanej z dziedziną?

Proszę sobie wyobrazić sytuację projektowania nowego elementu konstrukcyjnego, na przykład do samochodu, który musi spełniać wygórowane oczekiwania inżynierów, tak aby przy akceptowalnych kosztach zapewnić odpowiedni poziom bezpieczeństwa użytkowników. Uzyskanie takiego wyrobu gotowego związane jest z szeregiem różnych procesów przeróbki plastycznej i obróbki cieplnej. Jeśli chcemy uzyskać wyrób o dokładnie zadanym kształcie i wspomnianych parametrach użytkowych, konieczna jest precyzyjna kontrola wielu parametrów procesowych takich jak czas, temperatura, czy też sposób chłodzenia bądź nagrzewania. Te parametry bezpośrednio wpływają na zmiany zachodzące w materiale na poziomie mikrostruktury, która z kolei wpływa na własności użytkowe wyrobów gotowych. Dlatego też kontrolowanie wszystkich takich zmian w mikroskali, np. przebudowy mikrostruktury w wyniku rekrystalizacji statycznej, jest szczególnie istotne z punktu widzenia opracowania nowej technologii produkcji wyrobów o wymaganych własnościach. Automaty komórkowe są jedną z niewielu metod, przy pomocy której można w bezpośredni sposób odwzorować – a przez to kontrolować – to, co stanie się z mikrostrukturą materiału podczas przeróbki cieplno-mechanicznej.

Co stanowiło największe wyzwanie w badaniach obejmujących teorię metalurgii, modelowanie numeryczne, programowanie i eksperyment?

Największym wyzwaniem, które pojawiło się w trakcie realizacji pracy, były badania laboratoryjne przeprowadzone na stażu w Deakin University w Australii. Na potrzeby pracy doktorskiej

zaprojektowałem oraz przeprowadziłem eksperyment odkształcenia plastycznego wraz z różnymi cyklami obróbki cieplnej oraz późniejszą analizą metalograficzną. Ponieważ na co dzień w pracy zajmuję się głównie implementacją różnego typu algorytmów, było to dla mnie dużym wyzwaniem, ale równocześnie znacząco poszerzyło moje zrozumienie zachowania się materiału, z którym pracowałem.

Czy może Pan wskazać kamienie milowe pracy nad rozprawą doktorską?

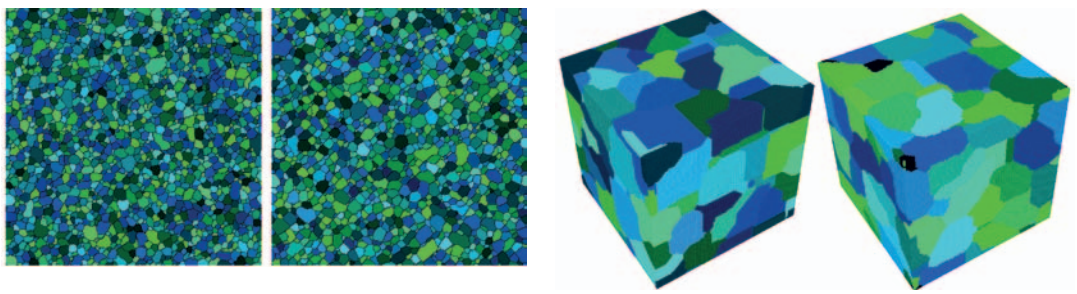
Pierwszym kamieniem milowym rozprawy doktorskiej było opracowanie i implementacja kompleksowego modelu automatów komórkowych rozwoju mikrostruktury podczas rekrystalizacji statycznej, z uwzględnieniem najważniejszych mechanizmów zachodzących podczas tego zjawiska. Drugim kluczowym etapem pracy były wspomniane badania laboratoryjne, które pozwoliły na identyfikację parametrów opracowanego modelu oraz jego późniejszą weryfikację. Ostatnim, najważniejszym aspektem była natomiast adaptacja opracowanych algorytmów do ich wykonania w sposób równoległy. Koncepcja zrównoleglenia wykorzystuje podejście dekompozycji w dziedzinie problemu do zastosowania w systemach wielowęzłowych, przy użyciu technologii MPI. Podczas tego etapu badań opracowano algorytmy odpowiedzialne za przesyłanie komunikatów, a także rozwiązano problemy związane z nakładaniem się obliczeń i komunikacji. Zaproponowano i zaimplementowano również różne mechanizmy komunikacji pomiędzy domenami obliczeniowymi.

W jaki sposób skorzystał Pan z zasobów udostępnianych przez Cyfronet? Jakie możliwości okazały się najcenniejsze?

Zasoby Cyfronetu pozwoliły na realizację obliczeń na bardzo dużych, dyskretnych przestrzeniach obliczeniowych. Przetwarzanie takich danych na klasycznych serwerach nie byłoby możliwe zarówno pod względem dostępności pamięci operacyjnej, jak i czasu obliczeniowego. Obliczenia realizowałem na klastrze Prometheus, m.in. dla cyfrowych bliźniaków mikrostruktur materiału otrzymanych we współpracy z laboratorium Los Alamos w Stanach Zjednoczonych, z wykorzystaniem akceleratora kołowego cząstek.

Jakimi wskazówkami mógłby się Pan podzielić z osobami dopiero rozpoczynającymi studia doktoranckie?

Najważniejszą radą, jaką mogę dać młodszym kolegom i koleżankom, to przede wszystkim znalezienie odpowiedniego zespołu, w którym pracują ludzie z pasją. Doktorat to praca dla samego siebie i jeśli będzie ona realizowana w przyjaznej atmosferze, to rozwiązywanie coraz trudniejszych problemów sprawi naprawdę dużo satysfakcji. Nawet jeśli ktoś po ukończeniu doktoratu nie myśli o pracy na uczelni, to realizując badania w ramach międzynarodowych projektów można zdobyć nie tylko bardzo dobre doświadczenie, ale także nawiązać współpracę z najlepszymi ośrodkami zagranicznymi, a podczas staży zagranicznych podszlifować język. Drugą radą, jaką mogę udzielić, to nie bać się ryzyka i podejmować wyzwania naukowe, które faktycznie umożliwią znaczące przesunięcie granic naszej aktualnej wiedzy!



Przykład dwu- oraz trójwymiarowej cyfrowej reprezentacji mikrostruktury



dr inż. Wojciech Szczypka

Rozmowa z autorem pracy:
„Studia *in silico* struktury elektronowej oraz właściwości wiązań dla wybranych materiałów termoelektrycznych z grup chalkogenków oraz klatratów krzemowych"

W jaki sposób zainteresował się Pan chemią obliczeniową?

Podczas ćwiczeń z chemii ogólnej na pierwszym roku studiów często rozwiązywałem zadania na tablicy, korzystając z umiejętności nabytych w trakcie wielu konkursów z czasów liceum, w tym Olimpiady Chemicznej. Moje metody rozwiązywania, z uwagi na rozbudowany aparat matematyczny, przykuły uwagę prowadzącej zajęcia, która w niedługim czasie poleciła mi skontaktować się z innym pracownikiem Wydziału, specjalizującym się właśnie w chemii obliczeniowej. W ten sposób trafiłem pod opiekę mojego wieloletniego opiekuna naukowego i promotora, z którym współpracowałem niemal osiem lat. Jednoczesne zamiłowanie do matematyki, chemii i fizyki oraz fascynacja technologiami komputerowymi – te cechy sprawiły, że błyskawicznie pokochałem chemię obliczeniową, która stawia wyzwania w obrębie każdej z wymienionych dziedzin.

Co skłoniło Pana do poświęcenia rozprawy doktorskiej konkretnym związkom z grup chalkogenków oraz klatratów krzemowych?

Zanim jeszcze zacząłem myśleć o studiach doktoranckich, byłem już mocno zaangażowany w obliczenia teoretyczne dla materiałów termoelektrycznych. Jeszcze przed planowaniem wniosku o Diamentowy Grant, który później otrzymałem, często rozmawiałem z doświadczonymi naukowcami z tej dziedziny, zarówno na Wydziale, jak i w trakcie konferencji naukowych. W ten sposób wyłoniłem szczególnie interesujące układy, które warto było zbadać metodami popularnymi w chemii obliczeniowej (analiza topologii gęstości elektronowej, metody walencyjności wiązań), a rzadko spotykanymi w pracach dotyczących materiałów termoelektrycznych, w których zdecydowanie dominowała analiza typowa dla fizyki ciała stałego. W przypadku chalkogenków, materiałów w większości bardzo dobrze już poznanych zarówno od strony eksperymentalnej, jak i teoretycznej, wybór padł na $AgSbTe_2$ i uporządkowanie w podsieci kationowej oraz wpływ obecności defektów samoistnych. Choć oba te czynniki znacząco wpływają na właściwości materiału, to dotychczas powstało niewiele prac w tym zakresie. Klatraty krzemowe są materiałami znacząco różniącymi się od chalkogenków pod względem chemicznym. Ich wybór związany był z chęcią wykazania w mojej pracy uniwersalności stosowanych metod, pozwalających zrozumieć wiele istotnych cech obu grup materiałów. W przypadku klatratów krzemowych przyjąłem jeden typ struktury z wielu możliwych dla tych materiałów do dalszej analizy przekrojowej, aby ograniczyć złożoność badanych układów.

Jakie największe problemy pojawiły się w czasie badań i w jaki sposób Pan je przezwyciężył?

Planując badania do pracy doktorskiej początkowo prowadziłem rozmowy z grupą eksperymentatorów, mając nadzieję na wspólne publikowanie prac naukowych. Niestety, w międzyczasie plany drugiej strony musiały zostać zmienione i ostatecznie trzeba było poradzić sobie samemu. Z tego powodu potrzebowałem zagłębić się jeszcze bardziej w opublikowanej już literaturze, w celu dostosowania planu badawczego do pracy czysto obliczeniowej, jednocześnie skupionej wokół konkretnych i aktualnych problemów dotyczących badanych grup materiałów. Ostatecznie problem ten był dla mnie motorem napędowym, by prowadzone przeze mnie badania były na światowym poziomie z innymi pracami teoretycznymi. Razem z promotorem udało mi się opublikować moje wyniki w bardzo dobrych czasopismach z listy filadelfijskiej.

W jaki sposób zasoby udostępniane przez Cyfronet wspomogły Pańską pracę?

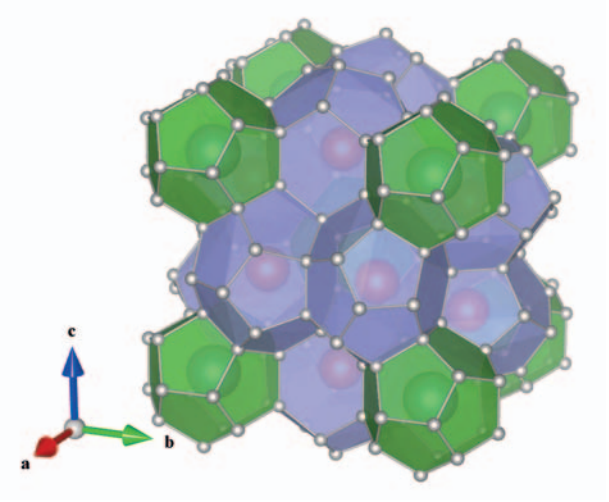
Właściwie, poza drobnymi rachunkami w arkuszach kalkulacyjnych, prawie wszystkie badania, zarówno z czasu pracy w studenckim kole naukowym, jak i potem na studiach doktoranckich, były obliczeniami wykonywanymi na zasobach Cyfronetu. Na początku był to superkomputer Zeus, następnie, w niedługim czasie po udostępnieniu, przenieśliśmy się na Prometheusa. Wykorzystywałem zarówno oprogramowanie, na które licencję posiadał Cyfronet, kompilowałem programy otwarto źródłowe korzystając z przygotowanego środowiska, czasami w okresach niskiego ruchu mogłem uruchomić wiele trudnych zadań obliczeniowych, wykorzystując niejednokrotnie kilkaset rdzeni jednocześnie. Łącznie wykorzystałem ponad 750 000 godzin obliczeniowych!

Jak ocenia Pan kierunki rozwoju badań nad układami termoelektrycznymi i co Pana zdaniem jest potrzebne do stworzenia instalacji dużej skali?

Badania nad możliwościami wykorzystania materiałów termoelektrycznych w modułach do produkcji energii elektrycznej trwają już od dziesięcioleci. Generatory termoelektryczne z powodzeniem zostały użyte w sondach kosmicznych, między innymi z uwagi na brak elementów ruchomych, oraz w wielu innych specjalistycznych zastosowaniach, w których często bywają jak na razie niezastąpione. Jednak podstawowym czynnikiem limitującym wykorzystanie popularnych modułów termoelektrycznych na szeroką skalę jest ich duży koszt, wynikający z używanych do ich produkcji rzadkich pierwiastków, które niejednokrotnie są również silnie toksyczne. Stąd też bardzo prężnie rozwijają się te kierunki badań, w których poszukuje się materiałów pozbawionych tych negatywnych cech. Chociaż uzyskiwana dotychczas wydajność modułów termoelektrycznych jest wciąż niewystarczająca do tego, by stały się opłacalne na szeroką skalę w takich dziedzinach jak motoryzacja czy energetyka, to jednak szybki rozwój badań obserwowany w ostatnim dziesięcioleciu daje dużą nadzieję na to, że już niedługo będzie możliwe rozpowszechnienie urządzeń uzasadnionych zarówno ekonomicznie, jak i ekologicznie.

Co mógłby Pan poradzić osobom dopiero zaczynającym studia doktoranckie?

Moim zdaniem najważniejsze jest dobre przygotowanie – nieustanne poszerzanie wiedzy i swojego warsztatu, niezależnie od tego, czy nasze badania prowadzimy w laboratoryjnej probówce, czy na krzemowym plastrze. Trzeba również zdawać sobie sprawę, że obie metody są absolutnie niezastąpione w dzisiejszych czasach i gdy wzajemnie się przenikają i uzupełniają, realnie umożliwiają przekraczanie kolejnych granic w badaniu rzeczywistości. Dlatego bardzo ważny jest fundamentalny przegląd literaturowy, zarówno przekrojowy, jak i szczegółowy, a także przegląd dostępnych metod i narzędzi – wszystko to pozwoli stworzyć dobry plan badawczy. Jestem wyznawcą zasady: „jeśli musisz ściąć drzewo w 5 minut, poświęć pierwsze 3 minuty na ostrzenie topora".



Struktura klatratu krzemowego typu I z zaznaczonymi klatkami T_{20} i T_{24}



dr inż. Karolina Śliwa

Rozmowa z autorką pracy:
„Roślinne ekstrakty micelarne jako składniki aktywne preparatów do pielęgnacji skóry atopowej"

Co skłoniło Panią do poświęcenia rozprawy doktorskiej badaniu składników preparatów do pielęgnacji skóry atopowej?

Od początku chciałam, żeby moja praca doktorska miała praktyczne zastosowanie. Kiedy w 2010 roku zaczęłam przegląd literaturowy dotyczący atopii, uświadomiłam sobie, że obserwuje się gwałtowny wzrost zachorowalności na atopowe zapalenie skóry (AZS) – problem ten dotyczy ponad 20% ludności. Najbardziej poruszyło mnie to, że AZS jest jedną z najczęstszych chorób skóry wieku niemowlęcego i dziecięcego, a u większości pacjentów choroba ta pozostaje na całe życie. Chwilę później urodził się mój siostrzeniec, u którego zdiagnozowano atopowe zapalenie skóry. Wtedy uświadomiłam sobie, jak trudne dla niego, jego mamy i całej rodziny jest to schorzenie. W leczeniu atopii dermatolodzy przepisują maści z glikokortykosteroidami, ale niestety ich długotrwałe stosowanie obarczone jest występowaniem wielu działań niepożądanych. Dlatego postanowiłam zacząć szukać alternatywy pielęgnacyjnej opartej na naturalnych, niealergizujących składnikach i stworzyć innowacyjną serię produktów o skutecznym działaniu. Produktów tego typu nie ma obecnie na rynku kosmetycznym i farmaceutycznym.

Jak przedstawiłaby Pani proces ekstrakcji ze wspomaganiem micelarnym osobie niezwiązanej z dziedziną?

Proces ekstrakcji wspomaganej micelarnie, czyli w skrócie UAMME (*ultrasonic assisted micelle mediated extraction*), to wyodrębnianie pojedynczych związków chemicznych lub ich grup z roślin, z zastosowaniem wodnych roztworów surfaktantów. W celu zwiększenia wydajności proces prowadzi się w łaźni ultradźwiękowej. Surfaktanty, a inaczej związki powierzchniowo czynne, to takie związki chemiczne, w których strukturze można wyróżnić część rozpuszczalną oraz nierozpuszczalną w wodzie, a dzięki temu w wodzie ich cząsteczki gromadzą się w większe skupiska, czyli agregaty lub micele. W trakcie ekstrakcji UAMME substancje aktywne, które w normalnych warunkach słabo rozpuszczają się w wodzie, np. flawonoidy o działaniu antyoksydacyjnym, są solubilizowane, czyli rozpuszczane we wnętrzach agregatów surfaktantów. Ponieważ w moich badaniach zastosowałam surfaktanty kosmetyczne, to otrzymane przeze mnie ekstrakty mogą być bezpośrednio stosowane jako surowce do produkcji kosmetyków.

Jakie są główne zalety tego typu ekstrakcji w porównaniu do sposobów stosowanych powszechnie w przemyśle kosmetycznym i farmaceutycznym?

Ekstrakcja micelarna przebiega w temperaturze niższej niż ekstrakcja wrzącymi rozpuszczalnikami organicznymi, zapewniając stabilność wrażliwych na podwyższoną temperaturę substancji. Nie bez znaczenia są też względy ekonomiczne – stężenia surfaktantów są niskie, a ich obecność w produkcie końcowym może podnosić jego walory. Brak kontaktu z organicznymi rozpuszczalnikami pozwala także na szersze zastosowanie wydzielonych substancji w bezpośrednim kontakcie z organizmem człowieka. W ekstrakcji substancji aktywnych metodą UAMME najczęściej stosowane są surfaktanty niejonowe, ponieważ wykazują dobre właściwości solubilizujące, nie powodują problemów toksykologicznych i dermatologicznych. Ponadto, struktura miceli zabezpiecza ekstrahowane związki przed szkodliwym wpływem utleniaczy i przedłuża ich trwałość. Istnieje potencjalna możliwość komponowania tak przygotowanych ekstraktów w różne formy kosmetyczne, w których wprowadzone wraz z ekstraktami związki powierzchniowo czynne mogą pełnić również swoje tradycyjne role: emulgatorów i zwilżaczy. Dla przemysłu kosmetycznego metoda jest więc bezodpadowa, ponieważ stosowane surfaktanty stanowią

jednocześnie koemulgator w otrzymanych emulsjach. Zastosowanie różnych układów micelarnych pozwala dodatkowo na zwiększenie selektywności w pozyskiwaniu wybranych grup związków chemicznych, co może pomóc w eliminowaniu substancji potencjalnie alergizujących. Jest to metoda całkowicie bezpieczna, nietoksyczna dla człowieka, przyjazna środowisku, a zatem wpisywana jest w grono metod ekstrakcji opartych na zasadach „Zielonej Chemii". Faktem przemawiającym za coraz częstszym zastosowaniem tej metody jest przede wszystkim wysoka wydajność izolowanych substancji naturalnych.

W jaki sposób zasoby Cyfronetu przysłużyły się części teoretycznej badań?

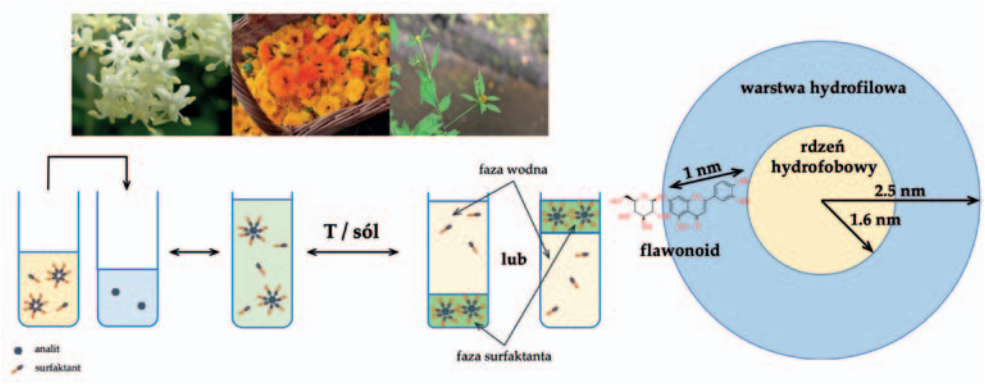
W celu analizy zjawisk zachodzących w procesie agregacji surfaktantów jak i solubilizacji flawonoidów w roztworze micelarnym, wykonałam badania teoretyczne z zastosowaniem metody dynamiki molekularnej. Pewnym ograniczeniem zastosowanej metodologii była konieczność stosowania modeli surfaktantów (stosowane w części eksperymentalnej związki to najczęściej mieszaniny) i przybliżeń (rozmiar pudełka symulacyjnego, krótki czas symulacji). Badania teoretyczne w pracy okazały się być kluczowymi do wyjaśnienia mechanizmu procesu.

Jakie dalsze kroki mogą zostać podjęte na podstawie wypracowanych przez Panią wyników?

Obecnie ukazały się cztery patenty z recepturami preparatów zawierających ekstrakt micelarny z uczepu trójlistkowego. Wstępnie zainteresowana jednym z patentów jest firma farmaceutyczna, która – mam nadzieję – kupi patent od Politechniki Krakowskiej. Myślę, że można się spodziewać wdrożenia. Sama też zastanawiam się nad wdrożeniem swoich pomysłów, ale pochłaniają mnie kolejne badania naukowe. Obecnie uczestniczę w projekcie dotyczącym preparatów na łuszczycę. Niezależnie, pracuję nad własną serią onkokosmetyków.

Jakich porad mogłaby Pani udzielić młodym naukowcom rozpoczynającym kariery naukowe, bazując na własnym doświadczeniu?

Osobiście nie byłam uczestnikiem studiów doktoranckich. Swoją pracę na uczelni zaczęłam od etatu pracownika technicznego, a równolegle stworzono mi możliwość prowadzenia badań naukowych. Tym sposobem, od 2010 r. prowadząc zajęcia, projekty naukowo-badawcze, jeżdżąc na staże naukowe i przemysłowe oraz konferencje naukowe, miałam wystarczająco dużo czasu na zgłębienie tematu atopii, pielęgnacji skóry, recepturowania, ekstrakcji wspomaganej micelarnie, a także na poznanie nowych ziół, ich składu i działania. Jako młody naukowiec uważam, że doktoranci na początku swojej kariery, kiedy mają już pomysł na wynalazek, powinni od razu zacząć procedurę patentowania, ponieważ jest ona długotrwała, a niestety opublikowanie innowacji w formie pracy doktorskiej czy publikacji zamknie im drogę do uzyskania patentu.



Pozyskiwanie składników aktywnych z roślin metodą ekstrakcji wspomaganej micelarnie



dr Ewelina Wlaźlak

Rozmowa z autorką pracy:
„Badanie wpływu oddziaływań międzycząsteczkowych na właściwości wybranych jodków i trójjodków"

Skąd u Pani zainteresowanie szeroko rozumianą elektrochemią, nowymi materiałami, ich właściwościami i potencjalnym zastosowaniem?

To zainteresowanie wynika głównie z zapotrzebowania na nowe materiały. Istnieje wiele sposobów na przewidywanie właściwości nowych związków, ale jednoznaczne informacje dostajemy przeważnie dopiero po otrzymaniu nowego materiału. Aby zrozumieć, co właściwie się w nim dzieje, trzeba zbadać zachodzące w nim procesy elektrochemiczne. Można wtedy wyjaśnić właściwości nowego związku i zweryfikować, czy uzyskaliśmy materiał o pożądanych cechach, który do czegoś się nadaje, czy też kolejną ciekawostkę.

Jakie największe problemy napotkała Pani w czasie badań i jak zdołała je Pani rozwiązać?

Podczas badań nad nowym fotokatalizarorem uzyskałam materiał, który niestety nie wytrzymywał warunków, w jakich powinien pracować (roztwory wodne). Zmieniając odpowiednio fragmenty struktury tego związku udało się uzyskać materiał nie ulegający hydrolizie… za to ulegający fotokorozji. Uzyskany materiał okazał się mieć za to właściwości memrystywne, co zapoczątkowało dodatkowy kierunek badań.

W jaki sposób skorzystała Pani z zasobów udostępnianych przez Cyfronet?

Zasoby Cyfronetu wykorzystywałam w głównej mierze do obliczania struktur pasmowych i gęstości elektronowych nowych związków. Uzyskane wyniki były niezwykle pomocne podczas analizy oddziaływań obecnych w strukturze nowego materiału, mających dominujący wpływ na właściwości nowego półprzewodnika.

Jakie dalsze kroki mogą zostać podjęte na podstawie wyników badań uzyskanych przez Panią i zespół?

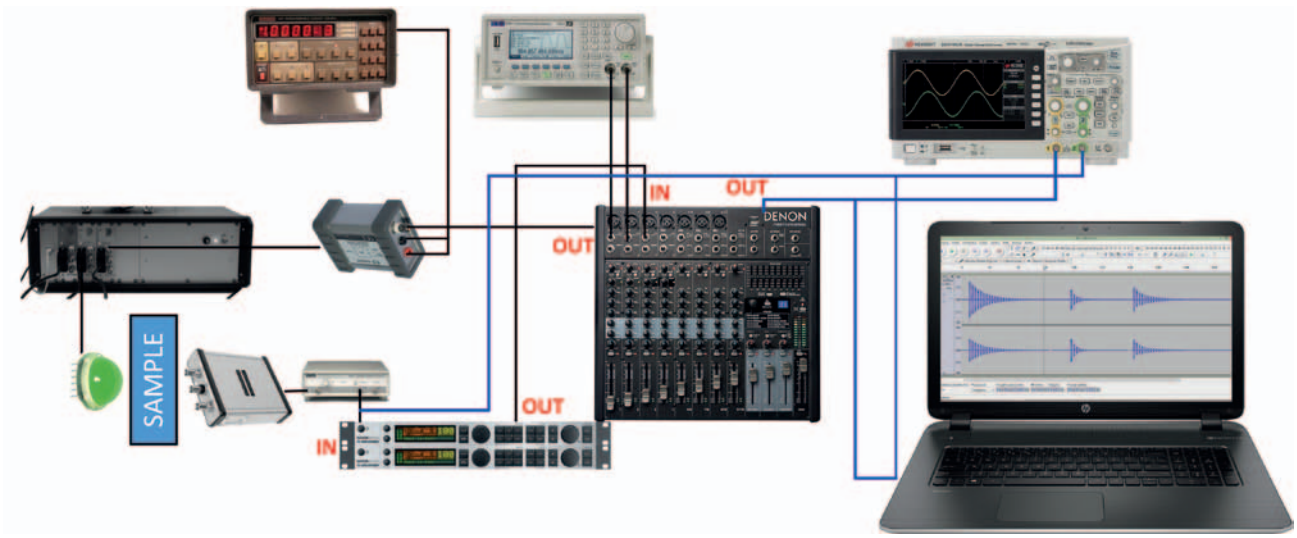
Większość prowadzonych przeze mnie badań miało charakter badań podstawowych i nie przewiduję wdrożenia praktycznego związków, które opisałam w mojej rozprawie. Istotne jest to, że wyniki, które uzyskałam, pozwalają zdeterminować kluczowe warunki, jakie musi spełniać materiał wykorzystany do budowy memrystora, którego działanie byłoby oparte o modulację bariery Schottky'ego. Stosując się do tych wytycznych można znaleźć materiał w puli już istniejących związków, które byłyby prostsze w implementacji i tańsze podczas wdrażania na większą skalę. Wymaga to jednak dalszych badań prowadzonych pod nieco innym kątem niż do tej pory.

Jakie są Pani prognozy dotyczące wykorzystania memrystorów dla przechowywania i przetwarzania informacji w najbliższej przyszłości? Czy mamy do czynienia z kolejną rewolucją technologiczną?

Nad wykorzystaniem memrystorów pracują koncerny takie jak IBM, HP czy też Samsung. W tej chwili trudno jest powiedzieć czy zastosowane w memrystorach materiały (głównie tlenki metali) wytrzymają rygorystyczne wymagania i zostaną wprowadzone na szerszą skalę. Można powiedzieć, że obecnie jesteśmy świadkami rewolucji technologicznej, w której biorą udział memrystory, ale nie są one jej inicjatorem. Co dwa lata ilość przechowywanych informacji podwaja się, ale tylko ułamek zostaje zanalizowany. To zjawisko określa się często mianem „informacyjnej czarnej dziury". Niekonwencjonalne przetwarzanie informacji wydaje się w tej chwili najlepszym rozwiązaniem tego problemu. I tu memrystory wykorzystane w hardware'owych sieciach neuronowych lub układach rezerwuarowych mają swoje miejsce m.in. dzięki wielostanowości tego urządzenia. Oprócz stanów 0 (powiedzmy: wyłączony, lub wysokooporowy stan memrystora) i 1 (włączony, niskooporowy stan) możliwe jest również wykorzystanie całego zakresu stanów pomiędzy 0 a 1, co otwiera pełną gamę nowych możliwości.

Jakich porad udzieliłaby Pani młodym naukowcom, którzy dopiero zaczynają studia doktoranckie? Na co te osoby powinny zwrócić uwagę, czego unikać?

Przede wszystkim wybrać tematykę, która jest interesująca dla doktoranta. Praca nad projektem potrafi czasem pochłonąć dużo więcej czasu, niż można się spodziewać i nie ma nic bardziej zniechęcającego niż ciężka praca nad niewciągającymi i nieistotnymi problemami. Po drugie, warto czasem zająć się czymś, o czym na początku nie ma się bladego pojęcia. Umiejętność poradzenia sobie w takich sytuacjach jest niezwykle cenna i jeśli ktoś do tej pory jej nie zdobył, to jest to ostatni dzwonek. Po trzecie, należałoby się dość wcześnie zdecydować, co zamierza się robić po doktoracie. Wbrew temu, co się może czasem wydawać – tak, istnieje życie po doktoracie i trzeba je sobie też jakoś zorganizować.



Układ rezerwuarowy wykorzystywany podczas analizy sygnału z wykorzystaniem memrystora

Nagrody Narodowego Centrum Nauki dla użytkowników zasobów obliczeniowych ACK Cyfronet AGH

Główna misja Cyfronetu to służba środowisku naukowemu, aktywne wspieranie m.in. indywidualnych badaczy poprzez udostępnianie im zasobów teleinformatycznych Centrum: od mocy obliczeniowej superkomputerów, poprzez pamięci masowe, aż po superszybką sieć komputerową i przydatne narzędzia informatyczne. Bardzo cieszy nas fakt, że wśród szerokiego zakresu tematów i prac badawczych realizowanych przy pomocy superkomputerów ACK Cyfronet AGH znalazły się również takie, które zostały docenione i nagrodzone przez Narodowe Centrum Nauki. Sukcesy naukowe użytkowników infrastruktury Cyfronetu najlepiej świadczą bowiem o jej użyteczności jako narzędzia prowadzenia prac naukowo-badawczych.


fot. Michał Niewdana, NCN


fot. Michał Niewdana, NCN

Nagroda Narodowego Centrum Nauki to wyróżnienie dla młodych uczonych za znaczące osiągnięcia naukowe, dokonane w ramach badań podstawowych prowadzonych w polskiej jednostce naukowej, udokumentowane publikacjami afiliowanymi w takiej jednostce. Nagrodę ustanowiła Rada Narodowego Centrum Nauki w lutym 2013 r. Wyróżnienie przyznawane jest w trzech obszarach badawczych: 1) nauki humanistyczne, społeczne i o sztuce, 2) nauki o życiu, 3) nauki ścisłe i techniczne.

Nagroda Narodowego Centrum Nauki dla dr hab. Adama Rycerza z Instytutu Fizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego*

W dniu 10 października 2017 laureatem Nagrody w obszarze nauk ścisłych i technicznych został dr hab. Adam Rycerz. Nagroda została przyznana za analizę teoretyczną kwantowego transportu ładunku w nanoukładach grafenowych. Za szczególnie ważne dokonanie Kapituła uznała zaproponowanie przez laureata mechanizmu kontroli polaryzacji prądu w przestrzeni dolinowych stopni swobody za pośrednictwem pól elektrostatycznych.

– W teorii materii skondensowanej fascynuje mnie zwłaszcza możliwość przewidywania – stosunkowo niewielkim nakładem sił i środków – zupełnie nowych, nieznanych wcześniej zjawisk fizycznych, których praktyczne wykorzystanie jest właściwie

w zasięgu ręki – mówi dr hab. Adam Rycerz. – *Chociaż przypadki, kiedy realizacja tak nakreślonego planu zakończyła się sukcesem można policzyć na palcach jednej ręki (zwykle to odkrycie doświadczalne poprzedzało żmudny proces budowania teorii), zaniechanie podobnych prób z pewnością będzie oznaczało koniec cywilizacji.*

Dr hab. Adam Rycerz wspiera swoje badania obliczeniami na superkomputerach Cyfronetu w ramach grantu obliczeniowego CORRCO2: „Makroskopowe efekty kwantowe i zjawiska krytyczne w materiałach dirakowskich".

Nagroda Narodowego Centrum Nauki dla dr hab. Joanny Sułkowskiej z Centrum Nowych Technologii oraz Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego*

W dniu 10 października 2018 r. laureatką Nagrody w obszarze nauk o życiu została dr hab. Joanna Sułkowska za prace nad „zaplątanymi białkami". Warto podkreślić, że niewłaściwe działanie „zapętlonych białek" może prowadzić do różnych chorób cywilizacyjnych, a rozszyfrowanie ich tajemnic może przynieść przełom w leczeniu choroby Alzheimera, Parkinsona, czy też otyłości.


fot. Michał Niewdana, NCN

Dr hab. Sułkowska specjalizuje się w biofizyce molekularnej i teoretycznej. Jej badania mają charakter interdyscyplinarny – wykorzystuje w nich wiedzę fizyczną, matematyczną, biologiczną oraz teorię węzłów.

– *Bardzo ważną rzeczą w mojej pracy jest umiejętność szerokiego patrzenia, nieprzywiązywania się do danej dziedziny: analizowania struktury białek nie tylko okiem fizyka, lecz również biorąc pod uwagę perspektywę biologa i chemika. Trzeba wyobrażać sobie rzeczy, których nie widać gołym okiem, choć one rzeczywiście istnieją* – mówi dr hab. Sułkowska.


fot. Michał Niewdana, NCN

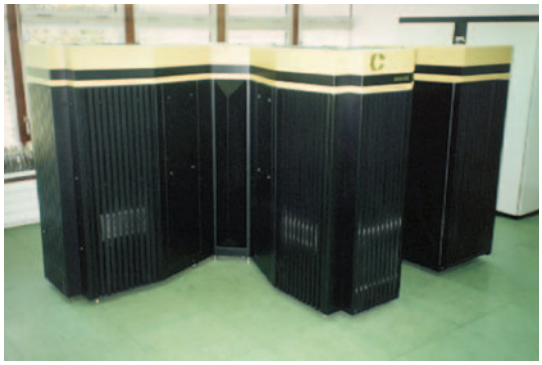
Dr hab. Joanna Sułkowska wspiera swoje badania obliczeniami na superkomputerze Prometheus znajdującym się w ACK Cyfronet AGH. Badania realizuje w ramach grantu obliczeniowego TRMDMG3: „Mechanizm metylacji tRNA z udziałem białek zawęźlonych".

Serdecznie gratulujemy Laureatom i życzymy dalszych sukcesów!

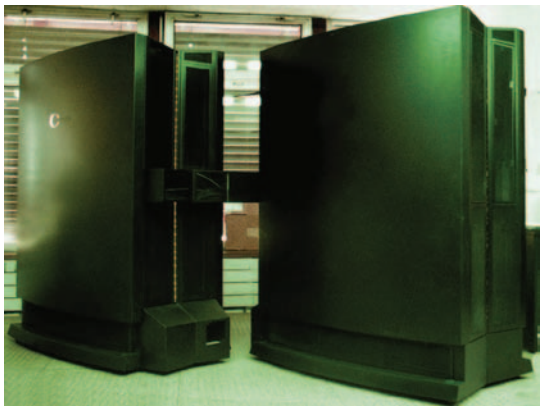
**Materiały prasowe z https://ncn.gov.pl/*



CDC CYBER 72



Convex C3840



Exemplar SPP1600/XA

1973 Powstanie CYFRONETu

1975 Instalacja komputera CDC CYBER 72 w Centrum

1990 Instalacja pierwszego w Krakowie węzła sieci EARN / BITNET (komputer IBM 4381)

1991 Instalacja Convex 120 – pierwszego komputera wektorowego w Europie Środkowo-Wschodniej.

Pierwsze internetowe połączenie międzymiastowe z Warszawą.

Początek budowy Miejskiej Sieci Komputerowej w Krakowie

1994 Uruchomienie połączenia internetowego z Warszawą o prędkości 2 Mb/s

1996 Komputer Exemplar SPP1600/XA umieszczony na prestiżowej liście TOP500.

Instalacja pierwszej automatycznej biblioteki taśmowej ATL 2640

1997 Uruchomienie podsieci komunikacyjnej ATM w Miejskiej Sieci Komputerowej.

Przyłączenie Centrum do krajowej sieci POL-34

1998 Instalacja komputera SGI Origin2000

2000 Zwiększenie przepustowości połączenia sieciowego Centrum do 155 Mbps

2002 Instalacja komputera RackSaver PC w ramach projektu CrossGrid

2003 Instalacja pierwszego w Polsce komputera HP Integrity SuperDome

2005 Instalacja macierzy dyskowej HP Storage Works XP12000.

Zwiększenie przepustowości połączenia sieciowego Centrum do 622 Mbps

2006 Instalacja macierzy dyskowej HP Storage Works EVA 8000 i superkomputera SGI ALTIX 3700 (Baribal) o teoretycznej mocy obliczeniowej 0,8 TFlops

2007 Podpisanie umowy Konsorcjum PL-Grid dotyczącej ogólnopolskiej infrastruktury gridowej PL-Grid.

Instalacja superkomputera SGI ALTIX 4700 z modułem akceleracyjnym SGI RASC.

Instalacja serwerów IBM BladeCenter HS21 (6,2 TFlops).

Instalacja macierzy dyskowej HP EVA 8100

2008 Rozbudowa konfiguracji superkomputera SGI ALTIX 3700 (do 1,5 TFlops).

Rozpoczęcie eksploatacji łącz sieci szkieletowej w technologii 10 Gbps Ethernet.

Połączenie MSK w kierunku Warszawy i Bielska-Białej łączami sieci PIONIER, każde o przepływności 2x10 Gbps.

Instalacja superkomputera Zeus (HP Cluster Platform 3000 BL), posiadającego 2 048 rdzeni

2009 Rozpoczęcie projektu „Infrastruktura Informatycznego Wspomagania Nauki w Europejskiej Przestrzeni Badawczej – PLGrid"

2010 Po rozbudowie konfiguracji do 9 544 rdzeni Intel Xeon superkomputer Zeus zostaje wpisany na listę TOP500 na 161 pozycji

2011 Wdrożenie wydajnego sieciowego systemu współdzielenia plików dla infrastruktury obliczeniowej, bazującego na rozwiązaniach firmy Hitachi Data Systems.

Całkowita pojemność zasobów dyskowych przekroczyła 2 PB.

Rozbudowa konfiguracji superkomputera Zeus do 12 032 rdzeni Intel Xeon.

Zeus zajmuje 81 miejsce na liście TOP500

2012 Rozpoczęcie realizacji projektu PLGrid Plus – dziedzinowo zorientowane usługi i zasoby w infrastrukturze PL-Grid.

W kwietniu, ScaleMP, wiodący dostawca wirtualnych rozwiązań dla superkomputerów, ogłosił „Zeusa-vSMP" największym systemem v-SMP w Europie.

Zeus w pierwszej setce rankingu TOP500.

Połączenie MSK w kierunku Rzeszowa łączem sieci PIONIER o przepływności 2x10 Gbps



SGI Origin2000



SGI ALTIX 3700



HP Cluster Platform 3000 BL



Medal jubileuszowy



Hala Maszyn



Superkomputer Prometheus

2013 Po rozbudowie do 25 468 rdzeni, superkomputer Zeus osiągnął teoretyczną moc obliczeniową 374 TFlops.

Wybicie medalu z okazji jubileuszu 40-lecia ACK Cyfronet AGH

2014 Oddano do użytku nową Halę Maszyn.

Rozpoczęcie realizacji dwóch nowych projektów: PLGrid NG i PLGridCore.

Połączenie MSK w kierunku Katowic łączem sieci PIONIER o przepływności 2x10 Gbps

2015 Instalacja superkomputera Prometheus (41 472 rdzenie), który na liście TOP500 zajmuje 49 miejsce (edycja lipcowa), a następnie (po rozbudowie do 53 568 rdzeni) 38 miejsce (edycja listopadowa).

Po raz pierwszy w historii polskiej informatyki dwa superkomputery z jednego ośrodka (Zeus i Prometheus) znalazły się jednocześnie na prestiżowej liście TOP500.

Oddano do użytku nowe, zapasowe centrum danych.

Rozpoczęto realizację projektów INDIGO-DataCloud, EGI-Engage, EPOS-IP i PRACE 4IP.

Łączność pomiędzy Centrami Komputerów Dużej Mocy w Polsce (Gdańsk, Kraków, Poznań, Warszawa i Wrocław) realizowana jest z przepustowością 2x100 Gbps

2016 Prometheus zajmuje 48 miejsce (edycja czerwcowa) i 59 miejsce (edycja listopadowa) na liście TOP500

2017 Prometheus zajmuje 71 miejsce (edycja czerwcowa) i 77 miejsce (edycja listopadowa) na liście TOP500.

Dalszy dynamiczny rozwój Centrum, w tym powstanie 6 nowych laboratoriów.

Rozpoczęto realizację projektów Sat4Envi, Gliomed, EPOS-PL oraz eXtreme DataCloud

2018 Prometheus (53 604 rdzenie, 2,4 PFlops) zajmuje 103 miejsce (edycja czerwcowa) i 131 miejsce (edycja listopadowa) na liście TOP500.

Rozpoczęcie realizacji projektów EOSC-Hub i PRIMAGE

2019

Cyfronet reprezentuje Polskę w konsorcjum LUMI, złożonym z ośmiu krajów, które będą wspólnie budować jeden z najszybszych europejskich superkomputerów.



Prometheus zajmuje 174 miejsce (edycja czerwcowa) i 241 miejsce (edycja listopadowa) na liście TOP500.

Prezentacja Cyfronetu na stoisku wystawowym w trakcie konferencji ISC'19.

Cyfronet udostępnia nowy system obliczeniowy dla badań z użyciem metod sztucznej inteligencji o mocy ponad 4 PFlops dla operacji tensorowych i 256 TFlops dla standardowych obliczeń.

Rozpoczęto realizację projektów PRACE-LAB, PRACE-6IP, SANO, EOSC-Synergy i EOSC Enhance

2020

Wśród strategicznych infrastruktur wpisanych w styczniu 2020 r. na Polską Mapę Infrastruktury Badawczej znajdują się dwa przedsięwzięcia zgłoszone przez ACK Cyfronet AGH jako inicjatora i koordynatora konsorcjum PLGrid: *Narodowa Infrastruktura Superkomputerowa dla EuroHPC* oraz *Narodowa Infrastruktura Chmurowa PLGrid dla EOSC*.



Prometheus (53 748 rdzeni, 2,65 PFlops) zajmuje 288 miejsce na liście TOP500 (edycja czerwcowa).

Superkomputer Prometheus wspomaga naukowców w walce z koronawirusem.

Rozpoczęto realizację projektów EPOS PL +, EPOS SP, PROTEUS-RS i EUROCC



KAMPUS AGH



LEGENDA

1. Rektorat
2. Wydział Górnictwa i Geoinżynierii
3. Wydział Inżynierii Metali i Informatyki Przemysłowej
4. Wydział Elektrotechniki, Automatyki, Informatyki i Inżynierii Biomedycznej
5. Wydział Informatyki, Elektroniki i Telekomunikacji
6. Wydział Inżynierii Mechanicznej i Robotyki
7. Wydział Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska
8. Wydział Geodezji Górniczej i Inżynierii Środowiska
9. Wydział Inżynierii Materiałowej i Ceramiki
10. Wydział Odlewnictwa
11. Wydział Metali Nieżelaznych
12. Wydział Wiertnictwa, Nafty i Gazu
13. Wydział Zarządzania
14. Wydział Energetyki i Paliw
15. Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
16. Wydział Matematyki Stosowanej
17. Wydział Humanistyczny
18. Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii AGH
19. Centrum Energetyki AGH
20. Biblioteka Główna
21. Szkoła Ochrony i Inżynierii Środowiska im. Walerego Goetla
22. Studium Języków Obcych
23. Studium Wychowania Fizycznego i Sportu
24. Basen AGH
25. Centrum e-Learningu AGH
26. Akademickie Centrum Komputerowe CYFRONET AGH
27. Uczelniane Centrum Informatyki
28. Dział Nauczania
29. Centrum Studentów Zagranicznych
30. Centrum Dydaktyki AGH
31. Uczelniana Komisja Rekrutacyjna
32. Miasteczko Studenckie AGH
33. Uczelniana Rada Samorządu Studentów
34. Centrum Karier AGH
35. Centrum Transferu Technologii
36. Dział Współpracy z Administracją i Gospodarką
37. Krakowskie Centrum Innowacyjnych Technologii INNOAGH
38. Centrum Obsługi Projektów
39. Dział Współpracy z Zagranicą
40. Biuro ds. Osób Niepełnosprawnych
41. Muzeum AGH
42. Muzeum Geologiczne WGGiOŚ AGH
43. Wydawnictwa AGH
44. Akademickie Centrum Kultury Klub STUDIO
45. Klub Studencki Gwarek
46. Klub Studencki Zaścianek
47. Klub Studencki Karlik
48. Klub Studencki Filutek





Akademickie Centrum Komputerowe
CYFRONET AGH
ul. Nawojki 11

30–950 Kraków, P.O.Box 386
telefon: +48 12 632 33 55
fax: +48 12 633 80 54

cyfronet@cyfronet.pl
www.cyfronet.pl

ISBN 978–83–61433–35–4