

# Exascale Day 2024

Dnevi odprtih vrat slovenskih superračunalniških centrov

Anže Hubman

Laboratorij za molekularno strukturno dinamiko, Teoretični odsek  
Kemijski inštitut

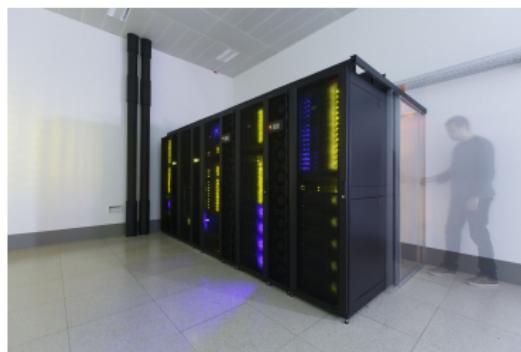


## 18.10. - naključje?

**Ponovimo:**  $10^6$  - mega,  $10^9$  - giga,  $10^{12}$  - tera,  $10^{15}$  - peta,  $10^{18}$  - exa

### Kako izmeriš hitrost (super)računalnika?

- FLOPS: Floating Point Operations Per Second
- primer 1 FLOP :  $18.10e^5 + 20.24e^3$
- namizni računalniki: gigaFLOP - teraFLOP  
superračunalniki: petaFLOP - exaFLOP



Ažmanov računski center na KI<sup>[1]</sup>



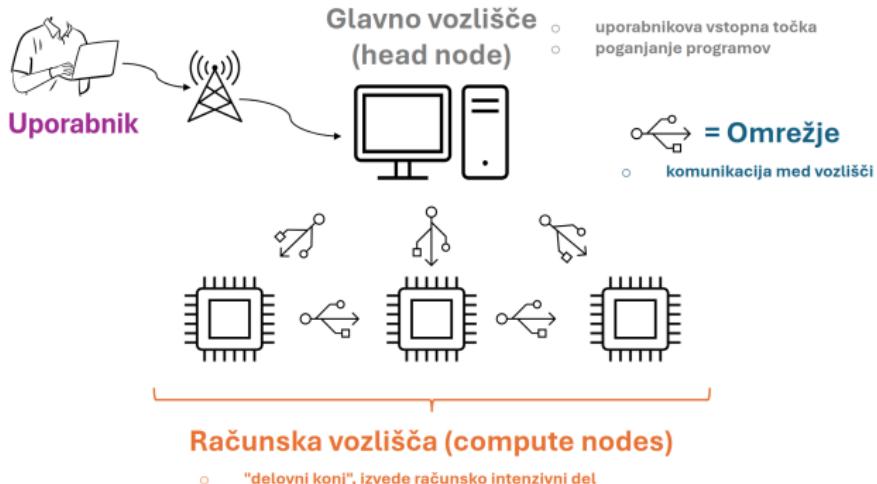
Superračunalnik Frontier na ORNL<sup>[2]</sup>

# Od računalnika do superračunalnika

## Žargon:

- *HPC*: High Performance Computing (Computer)
- *cluster*: računalniška gruča

## Sestavimo HPC:



# Od računalnika do superračunalnika

## Običajno:

- a) veliko računsko nezahtevnih izračunov
- b) manj izjemno zahtevnih izračunov

## Kaj je še pomembno?

- ustrezna programska oprema (o tem kasneje)
- "job scheduler"
- izobraževanje uporabnikov
- administracija HPC (zahtevno)
- zadostna količina spomina
- hlajenje!

## Programska oprema

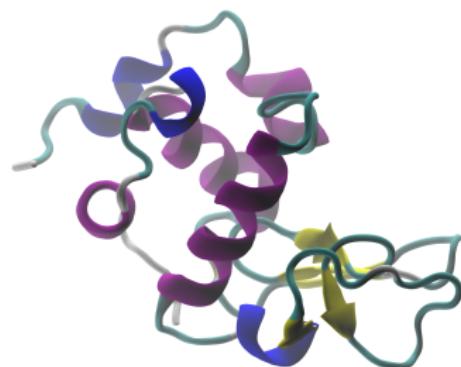
- programska koda naj bo:
  - učinkovita
  - prenosljiva, združljiva z raznimi distribucijami Linux OS
  - paralelizirana
- razvoj in vzdrževanje zahtevata specialista
- nekaj opcij:

OpenMP

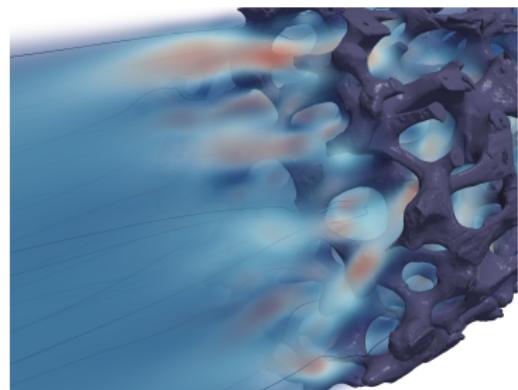


## Kdo uporablja superračunalnike?

- teoretična kemija, fizika kondenzirane snovi
- modeliranje finančnih trgov
- strojno učenje, obdelava eksperimentalnih podatkov
- napovedovanje struktur biomolekul, ciljan razvoj zdravil
- računska dinamika tekočin
- napovedovanje vremena



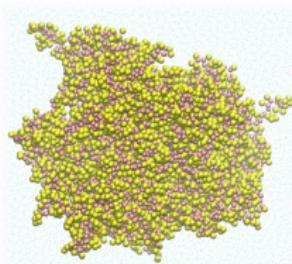
Protein lisozim kot modelni sistem pri simulacijah biomolekul.



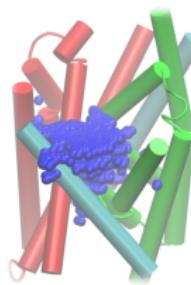
Simulacija toka tekočine preko poroznega materiala.<sup>[3]</sup>

# Dejavnosti na Kemijskem inštitutu: Atomistične simulacije

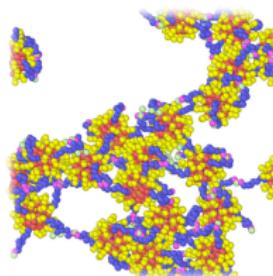
Nekaj primerov:



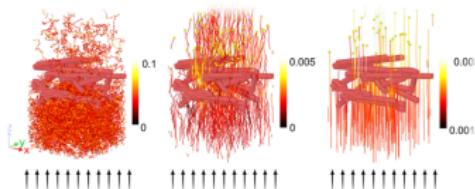
Biološki kondenzati oz. organeli brez membrane<sup>[4]</sup>



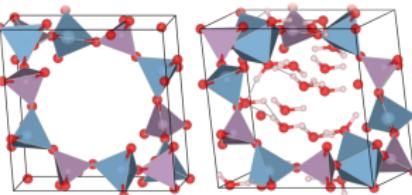
Mehanizem transporta vode preko proteinskih prenašalcev<sup>[5]</sup>



Zaznavanje biomarkerjev preko magnetnih nanodelcev<sup>[6]</sup>



Računalniško podprt razvoj zaščitnih mask<sup>[7]</sup>



Obnašanje vode v porah naprednih materialov za shranjevanje energije<sup>[8]</sup>

# O atomističnih simulacijah

- večina (zanimivih) problemov *ni* analitično rešljivih
- najpogostejša metoda: simulacija **molekulske dinamike** (MD)
- **ideja:** simuliramo gibanje atomov in ga nato analiziramo
- **ključno:** ali si lahko privoščimo ustrezne **časovne** in **velikostne** skale za naš problem?
- **potek dela:**

(1)

- Izgradnja vhodnega modela
- kristalografski podatki, NMR, ML orodja
  - $r(t = 0), v(t = 0)$
  - definiramo opis interakcij

(2)

- Integracija enačb gibanja
- $$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + (F(t)\Delta t^2)/2m$$

↓  
= 2 fs
  - $r(t)$  je trajektorija
- ↓  
časovno zahteven korak

(3)

- Analiza trajektorij
- izračun količin, ki nas zanimajo
  - uporabljamo statistično fiziko
  - vizualizacija

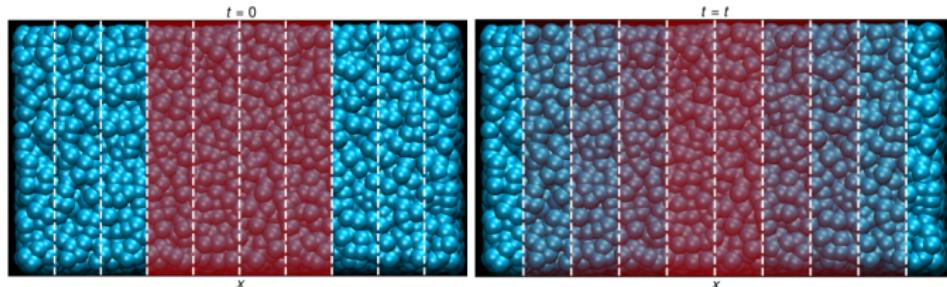
- kadar je možno **primerjava z eksperimentom**

## Primer: določanje topotnih prevodnosti tekočin

- **motivacija:**  $\lambda$  pogosto težko merljiva (nevarni materiali, taline)
- Fourierov zakon ( $j = -\lambda \frac{\Delta T}{l}$ ) + ohranitev energije:

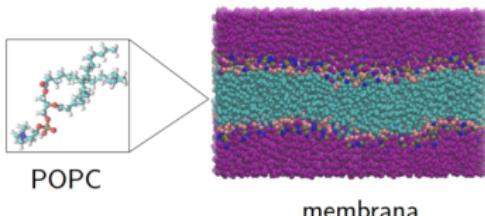
$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2}$$

- $T(x, t)$  lahko izpeljemo "na papirju" → primerjava izračunanih in simuliranih profilov vrne  $\lambda$ .



Potovanje temperaturne motnje  $T(x, t)$  po tekočini.<sup>[9]</sup>

## Preizkusite sami!



Exascale Day 2024: Simulacija POPC membrane



Navodila tudi na: <https://github.com/AnzeHubman/Exascale-Day-2024>

### Naučili se boste:

- namestitve in osnov dela z Ubuntu Linux OS
- uporabe okolja conda in Jupyter Notebook-ov
- simulirati lipidni dvosloj s programom GROMACS

## Vprašanja?

Sledi: ogled Ažmanovega računskega centra

Poščite nas:



Kontakt: [anze.hubman@ki.si](mailto:anze.hubman@ki.si)

## Reference

- ① <https://www.ki.si/odseki/d01-teoreticni-odsek/azmanov-racunski-center/> (17. 10. 2024)
- ② [https://en.wikipedia.org/wiki/Frontier\\_\(supercomputer\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Frontier_(supercomputer)) (17. 10. 2024)
- ③ <https://www.openlb.net/porous-media/> (17.10.2024).
- ④ Vizualizacija proteinske kapljice. Domena proteina se imenuje FUS-LCD.
- ⑤ Sever, M.; Merzel, F. Collective Domain Motion Facilitates Water Transport in SGLT1. *Int. J. Mol. Sci.* 2023, 24, 10528.
- ⑥ T. Potisk, J. Sablić, D. Svenšek, E. S. Diego, F. J. Teran, M. Praprotnik, Analyte-Driven Clustering of Bio-Conjugated Magnetic Nanoparticles. *Adv. Theory Simul.* 2023, 6, 2200796.
- ⑦ T. Potisk, M. Remškar, L. Pirker, G. Filipič, I. Mihelič, M. Ješelnik, U. Čoko, M. Ravnik, Single-Layer and Double-Layer Filtration Materials Based on Polyvinylidene Fluoride-Co-hexafluoropropylene Nanofibers Coated on Melamine Microfibers, *ACS Applied Nano Materials* 2023 6 (17), 15807-15819.
- ⑧ HUBMAN, Anže, 2023, Modeliranje adsorpcije vode v aluminofosfatu tipa LTA [na spletu]. Magistrsko delo. (17. 10. 2024).
- ⑨ A. Hubman, F. Merzel, Determination of thermal conductivities in liquids by identifying heat transport in nonequilibrium MD simulations, *J. Mol. Liq.*, 2023, 120916.