

# Exascale Day 2025

Dnevi odprtih vrat slovenskih superračunalniških centrov

Anže Hubman

Laboratorij za molekularno struktурно dinamiko, Teoretični odsek  
Kemijski inštitut

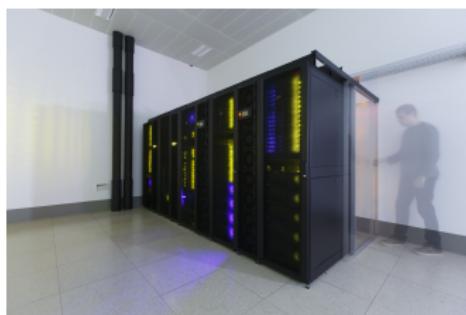


## 18.10. - naključje?

**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 :  $17.10e^5 + 20.25e^3$
- namizni računalniki: gigaFLOP - teraFLOP  
superračunalniki: petaFLOP - exaFLOP



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



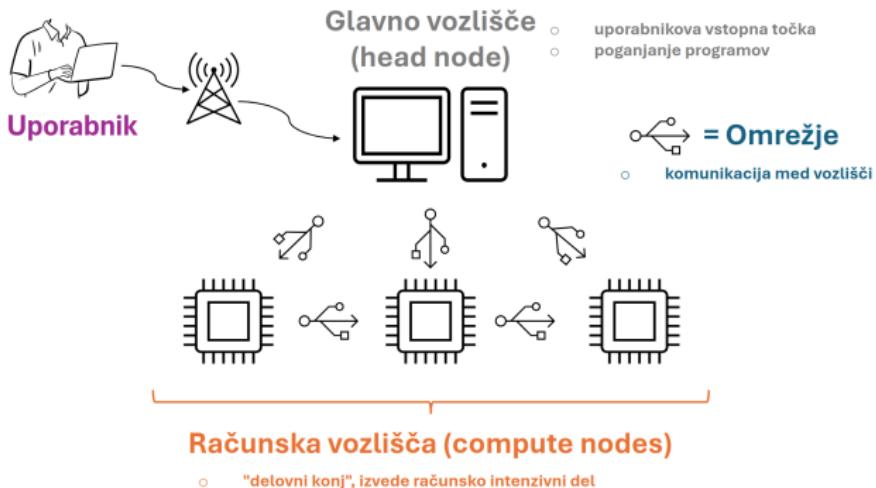
Superračunalnik Frontier na ORNL<sup>[2]</sup>

# 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

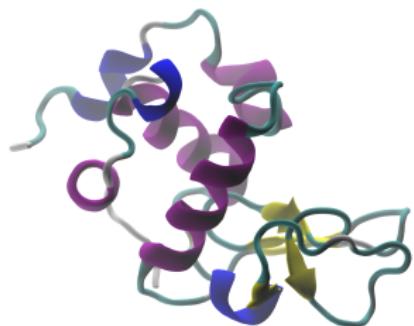
- programska koda naj bo:
  - ▶ učinkovita
  - ▶ prenosljiva, združljiva z raznimi distribucijami Linux OS
  - ▶ paralelizirana
- razvoj in vzdrževanje zahtevata specialista
- nekaj opcij:

OpenMP

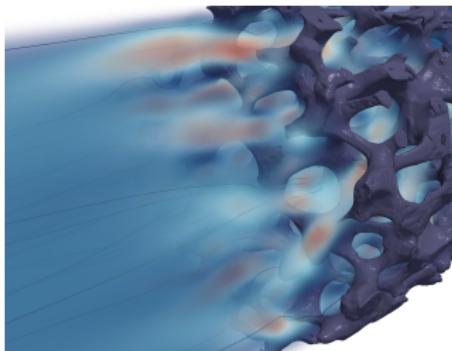


## Kdo uporablja superračunalnike?

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



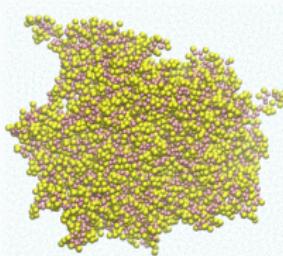
Protein lizocim kot modelni sistem pri simulacijah biomolekul.



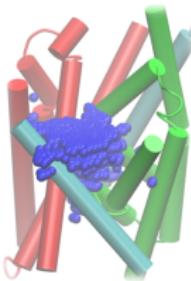
Simulacija toka tekočine preko poroznega materiala.<sup>[3]</sup>

# Dejavnosti na Kemijskem inštitutu: Atomistične simulacije

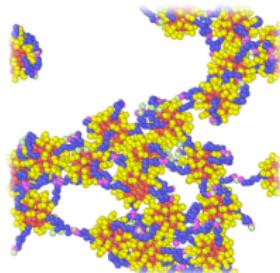
Nekaj primerov:



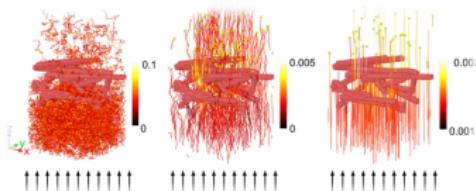
Biološki kondenzati oz. organeli brez membrane<sup>[4]</sup>



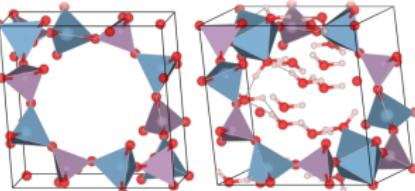
Mehanizem transporta vode preko proteinskih prenašalcev<sup>[5]</sup>



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



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



Obnašanje vode v porah naprednjih 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

- $$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + (F(t)\Delta t^2)/2m$$
  
↓  
 $= 2 \text{ fs}$
- $r(t)$  je trajektorija

3

Analiza trajektorij

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

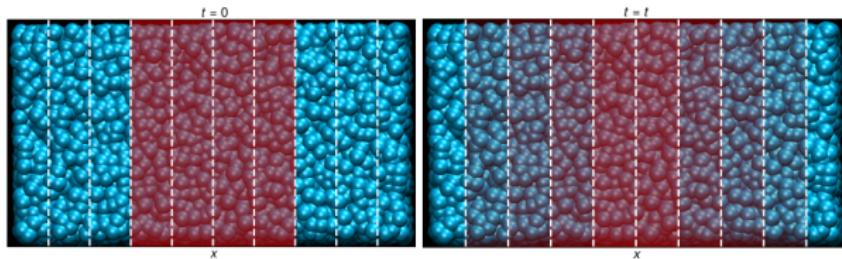
- kadar je možno **primerjava z eksperimentom**

## Primer: določanje toplotnih prevodnosti tekočin

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

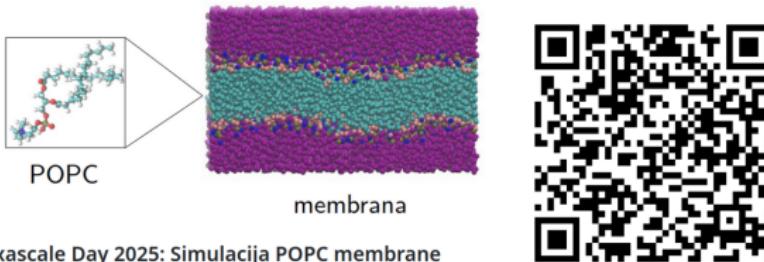
$$\frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho c_p} \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2}$$

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



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

## Preizkusite sami!



V tem direktoriju najdete vse potrebno za samostojno MD simulacijo modelne lipidne 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:

The screenshot shows the homepage of the Kemijski Institut (Chemical Institute) website. At the top, there is a navigation bar with links for "O inštitutu", "Odseki", "Za mlade", "Za gospodarstvo", and "Javni razpisi". To the right of the navigation bar are social media icons for Facebook, X, LinkedIn, and an envelope, followed by language links: "Iškanje | English", "Kontakt | Contact", and "Člananje | Joining". The main content area features a large banner with two orange cartoon figures holding microphones. The banner has a green header with the text "Predani znanosti" and a blue footer with the text: "Znanje in znanost, da zgodno razvijejo temelji napredka in gradnik prihodnosti. Prav ogled znanosti smo na institutu predani že več kot sedem desetlet. Z vodstvenostjo in kreativnostjo ter vrhunsko raziskovalno opremo rešujemo najtežje izzive." Below the banner, there is a search bar with the placeholder "Vnesi besedilo ali naslov" and a "Išči" button.

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.