

Отчет
на дейността в лабораторията по
високопроизводителни изчисления (ВПИ) през 2017 г.
от
проф. дфзн Ана Пройкива, Софийски университет
ръководител на лабораторията ВПИ

1. Дейности и информация за спазване на трудовата дисциплина за 2017 г. в ЛВПИ

Лабораторията по Високопроизводителни изчисления беше открита официално на 17 март 2017 г. в присъствието на министъра на икономиката Теодор Седларски, директорите на София Тех Парк, зам.-ректора на Софийския университет, декана на факултета по математика и информатика на Софийския университет, директорът на института по математика и информатика – БАН, зам. – директорката на института по информационни и комуникационни технологии – БАН, преподаватели от Техническият университет-София, Софийския университет, студенти и ученици от Технологично училище „Електронни системи“ към Технически Университет – София, зам.-директора и служители на Държавното предприятие "Ръководство на въздушното движение".

В ЛВПИ се извършват дейности в съответствие с договора между Европейската комисия, Генерална дирекция Регионална и градска политика и София Тех Парк – **научните изследвания са 80%** от работното време на лабораторията, а **20% от капацитета** на лабораторията се използва срещу **заплащане по договор с Държавното предприятие "Ръководство на въздушното движение"**. Достъпът до лабораторията на академични потребители (университети и изследователски институти на БАН) е свободен като е необходимо в публикациите си и докладите, които изнасят да отбелязват номера на договора с Европейската комисия, с чието финансиране е изграден и оборудван София Тех Парк.

В лабораторията е назначен само един служител – Иво Илиев, който отговаря за техническата изправност на изчислителната система, за лабораторните условия – температура, влажност, запрашеност, за поддържането на дисковата система, за отваряне на акаунти на потребителите, за поддържане на нужния им софтуер, за обновяването на уеб-страницата на лабораторията <http://nestum.phys.uni-sofia.bg/>. Иво Илиев редовно представя седмични отчети в СНИРД, които са проверими по логовете на изчислителния клъстер.

Екипът на лабораторията (Илиев, Пройкива) обучават потребителите как се използва изчислителния клъстер.

В периода 17.03.2017 – 31.12.2017 в лабораторията имаше **единадесет** официални посещения включително и от генералния директор Роберт Ян Смитс на дирекция Научни Изследвания и Иновации на Европейската комисия, 26.06.2017 г. По време на посещенията бяха представени резултатите, получени от потребителите на лабораторията.

В периода 8-23.08.2017 г. екипът на лабораторията се среща с представители на **три фирми, изразили желание за съвместна работа във връзка с конкурс по ОПИК**. За наше удовлетворение, две от фирмите са класирани и ще бъдат финансирани и работата в лабораторията ще се увеличи няколкократно.

В лабораторията е абсолютно необходимо да бъде назначен още един човек с оглед на **предстоящата работа** на екипа на лабораторията по високопроизводителни изчисления като партньор на **фирмите, спечелили проекти от оперативната програма конкурентноспособност (ОП ИК)**, в конкурса BG16RFOP002-1.005 „РАЗРАБОТВАНЕ НА ПРОДУКТОВИ И ПРОИЗВОДСТВЕНИ ИНОВАЦИИ“.

Име на компанията с ВАЛИДЕН web-address & e-mail of the CEO	Дата на срещата	Тема на проекта	Искане към НРС лаборатория	Възможност на НРС lab	Външни партньори на НРС lab за работа по проекта
Heat Design	08.08.2017	Използване на Нестум за рендериране на 3D модели	Процесорно време & нов софтуер	1 специалист за 8 часа	
FTS Group	18.08.2017	Използване на Нестум за предварителна калибровка и тестове на математически модели в сферата на бизнеса. (Има изпратен pdf със по-точна характеристика)	Процесорно време плюс конфигурация и инсталиране на софтуер		
Intelligent systems	23.08.2017	Разработка на решение/алгоритъм за оптимизиране на маршрути на доставка	Външна оценка и разработване на алгоритъм, за решаване на задачата.	Искат от нас трима специалисти (4 часа)	Лаборатория „Изкуствен интелект и CAD системи“

2. Основни направления, по които работи лабораторията по високопроизводителни изчисления с описание на технологиите и апаратурата, която се използва

Апаратурата, която се използва е суперкомпютърът НЕСТУМ – втори по производителност в страната.

Характеристики на хардуер:

The Nestum HPC cluster consists of 24 computing nodes based on Fujitsu Primergy RX2530 M1 servers with two Intel Xeon E5-2698v3@2.3 GHz processors.

2 x Intel Xeon E5-2698v3@2.3 GHz processors

128 GB system memory

128 GB SSD hard drive

2 x 1 Gbps Ethernet controllers

1 x 56 Gbps FDR Infiniband controller

1 x iRMC Ethernet controller

Теоретичната пикова производителност се изчислява така: $R_{max} = \text{Number of nodes} \times \text{Number of cores per node} \times \text{AVX2 base frequency} \times \text{Number of DP operation per cycle} = 24 \times 32 \times 1.9 \times 16 = 23347 \text{ Gflops}$. Standard LINPACK test from the HPL-2.2 package, performed with Intel Compiler XE 2017 developer edition and OpenMPI-1.10.3

Инсталиран софтвер:

The base operation system is *Ubuntu 16.04 LTS*.

Научен софтуер:

Quantum Espresso is an integrated suite of Open-Source computer codes for electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale. It is based on density-functional theory, plane waves, and pseudopotentials.

Gromacs is a versatile package to perform molecular dynamics, i.e. simulate the Newtonian equations of motion for systems with hundreds to millions of particles. It is primarily designed for biochemical molecules like proteins, lipids and nucleic acids that have a lot of complicated bonded interactions, but since GROMACS is extremely fast at calculating the nonbonded interactions (that usually dominate simulations) many groups are also using it for research on non-biological systems, e.g. polymers.

WRF is a next-generation mesoscale numerical weather prediction system designed for both atmospheric research and operational forecasting needs. It features two dynamical cores, a data assimilation system, and a software architecture facilitating parallel computation and system extensibility.

AbInit is a package whose main program allows one to find the total energy, charge density and electronic structure of systems made of electrons and nuclei (molecules and periodic solids) within Density Functional Theory (DFT), using pseudopotentials and a planewave or wavelet basis. ABINIT also includes options to optimize the geometry according to the DFT forces and stresses, or to perform molecular dynamics simulations using these forces, or to generate dynamical matrices, Born effective charges, and dielectric tensors, based on Density-Functional Perturbation Theory, and many more properties. Excited states can be computed within the Many-Body Perturbation Theory (the GW approximation and the Bethe-Salpeter equation), and Time-Dependent Density Functional Theory (for molecules). In addition to the main ABINIT code, different utility programs are provided.

Инсталирани научни библиотеки

FFTW

ScaLAPACK

NetCDF

HDF5

ATLAS

Using Intel Parallel XE Cluster Edition 2017 or OpenMPI builds with Intel Compilers

А) Научни изследвания в областта **Природни науки, математика и информатика** в съответствие с приоритетите на ИСИС и националната стратегия за научни изследвания 2017-2030: “Информационни и комуникационни технологии” &

“Мехатроника и чисти технологии”.

Конкретни разработки са направени в:

- магнитни и електрични свойства на наноструктури (графен с дефекти)
- кристален растеж и дифузия върху неравновесни повърхности
- промени в климата

Б) Пресмятания на температурните полета и прогнозата за времето в страната във връзка с **договора, сключен с Държавно предприятие “Ръководство на въздушно движение”** при финансови условия, одобрени от ръководството на СНИРД.

Публикации, в които е изразена благодарност към HPC laboratory:

1. Desislava Dimova, Stoyan Pisov, Ana Proykova,

Magnetism Of Bilayer Graphene With Vacancies

Volume 2, Issue 12, Page 779-782, Year 2017 | DOI: 10.5185/amp.2017/914

2. D. Dimova, S. Pisov, N. Panchev, A. Proykova

The role of canonical ensemble in predicting the toluene film structure under external electric field, NANOSCIENCE AND NANOTECHNOLOGY: Nanostructured material, application and innovation transfer, v17. No.1, pp.14-18 (2017) ISSN:1313-8995

3. Desislava Dimova, Stoyan Pisov, Nikolay Panchev, Miroslava Nedyalkova, Sergio Madurga, and Ana Proykova,

Insight into electric field-induced rupture mechanism of water-in-toluene emulsion films from a model system

The Journal of Chemical Physics 146, 194703 (2017); doi: 10.1063/1.4983163

4. High-Performance Scientific Computing: First JARA-HPC Symposium , JHPCS 2016, Aachen, Germany, October 4–5, 2016, Revised Selected Papers, Volume 10164 of Lecture Notes in Computer Science, Theoretical Computer Science and General Issues, eds. Edoardo Di Napoli, Marc-André Hermanns, Hristo Iliev , Andreas Lintermann, Alexander Peyser, Springer International Publishing, 2017, ISBN 3319538616

Международни конференции, с участие на представител на ЛВПИ:

I) В периода 15-19 Май 2017 г. бе проведена среща на високо равнище по въпросите на Високопроизводителните изчисления в Европа, Барселона, Испания. <https://ec.europa.eu/digital-single-market/en/news/european-high-performance-computing-summit-week-2017>

В събитието взе участие д-р Стоян Писов от Софийския университет, който е част от екипа, отговорен за изграждането и дейността на лабораторията по високо-производителни изчисления. Участието на представител на СНИРД и в частност на лабораторията по Високопроизводителни изчисления беше полезно за установяване на работни контакти с новият управителен съвет на PRACE. и допринесе за включване на лабораторията в международната електронна инфраструктура **Labs Explorer**, обслужваща научните организации и изследователските инфраструктури. На събитието в Барселона д-р Писов представи възможностите на клъстера NESTUM за анализ на Big Data от областта на метеорологията.

II) В периода 21-25 Август 2017 г. бе проведен Европейския конгрес по нови материали (Стокхолм, Швеция), на който Ана Пройкиова докладва "Magnetism of bilayered graphene with vacancies" в секцията Global Graphene Forum: Growth, Synthesis and Characterizations. Докладванта работа е публикувана в Advanced Materials Proceedings: DOI: 10.5185/amp.2017/914

III) Пройкиова - съ-председател на секцията Growth of Carbon Nanomaterials (Chair: J. Andreas Larsson Co-Chair: Ana Proykova), международна конференция по нови материали (Хелзинки, Финландия) и представя възможностите на лабораторията по високопроизводителни изчисления

IV) Иво Илиев изнася доклад на международната конференция NANO'2017, 24-25.11.2017 г.: HIGH PERFORMANCE COMPUTING FOR NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY, I. Iliev, S. Pisov, A. Proykova

Докладът е **изпратен за печат** в NANOSCIENCE AND NANOTECHNOLOGY: Nanostructured material, application and innovation transfer с благодарност към ЛВПИ-СНИРД

V) На конференцията NANO'2017 е представен постер с благодарност към ЛВПИ-СНИРД : Magnetism of Bilayer Graphene – the role of unit cell by Dimova, Pisov, Proykova. Подготвя се статия за печат

VI) Пройкиова изнася поканен доклад Risk Governance of Engineered Nanomaterials на конференцията NANO'2017, в който се благодари на ЛВПИ

VII) На международната конференция NANO'2017 е представен постер Morphological transitions in a model of immiscible binary system by vacancy exclusion by Mihail Enimanev, Vesselin Tonchev, Stoyan Pisov с благодарност към ЛВПИ-СНИРД.

Забележка: таксите за правоучастие в посочените конференции са платени от бюджета на лабораторията по високопроизводителни изчисления.

Защити на дипломни работи, в които са използвани ресурсите на ЛВПИ:

- Магистърска дипломна работа, Иво Илиев (ФзФ-СУ, 2017)
- Бакалавърска дипломна работа, Михаил Ениманев (ФзФ-СУ, 2017)
- Магистърска дипломна работа, Тодор Вълев (ФМИ – СУ, 2017)

В процес на подготовка е **магистърски курс** High Performance Computing Resources for Teaching Cluster and Grid Computing courses.

Лабораторията по високопроизводителни изчисления е включена чрез СНИРД **като асоцииран партньор в Центъра по върхови постижения УНИТЕ**, класиран с най-добър резултат в конкурса на ОП НОИР в областта на ИИКТ и финансиран с договор **BG05M2OP001-1.001-0004-C01/28.02.2018 (2018-2023)**.

В програмата за дейността на ЛВПИ през 2018 г. са посочени конкретните задачи, върху които ще работим.

Разпространение на резултатите от изследванията в ЛВПИ за широката публика

- **Телевизия Блумбърг** предаде официалното откриване на лабораторията на 17.03.2017

<https://www.investor.bg/bloomberg-tv/461/a/simulaciiite-v-laboratoriite-na-sofiia-teh-park-promeniat-prilozimi-modeli-235849/>

- Лабораторията по ВПИ беше представена от Иво Илиев в европейската нощ на учения, 30.09.2017 г. пред повече от 200 посетители.

- **Bloomberg** Ана Пройкиова за финансирането на науката и високите научни постижения на наши учени, представя постиженията на ЛВПИ 8.11.2017

<https://www.bloombergtv.bg/video/ana-proykova-za-finansiraneto-na-naukata-i-visokite-nauchni-postizheniya-na-nashi-ucheni>

31.03.2018 г. Ръководител на ЛВПИ:

/ проф. дфзн Ана Пройкиова/

