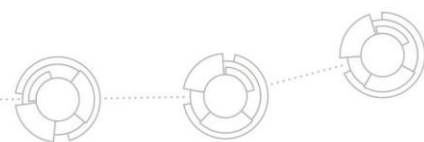


20 godina Isabelle – 20 godina HPC-a u Srcu

(Zagreb, 18. svibnja 2022.) Danas je u Sveučilišnom računskom centru (Srcu) održana proslava 20 godina računalnog klastera Isabella kojom je ujedno obilježeno i 20 godina računarstva visokih performansi (engl. High performance computing, HPC) u Srcu. Proslavi su prisustvovali predstavnici Ministarstva znanosti i obrazovanja, Ministarstva gospodarstva i održivog razvoja, Hrvatske zaklade za znanost, predstavnici vodećih znanstvenih i istraživačkih ustanova u RH, znanstvenici i istraživači - korisnici računalnog klastera Isabella i predstavnici medija.

Prije 20 godina Srce je akademskoj zajednici stavilo na raspolaganje računalni klaster Isabella kako bi se hrvatskim stručnjacima omogućilo sudjelovanje u vrhunskim znanstvenim projektima te potaknulo na širu uporabu paralelnih računalnih sustava i razvoj paralelnih algoritama i modela u različitim područjima moderne znanosti. Od tada je Isabella jedan od najsnažnijih računalnih sustava u Hrvatskoj i predstavlja temeljni zajednički računalni resurs svih znanstvenika i istraživača namijenjen izvođenju zahtjevnih računanja za potrebe istraživačkih projekata i obrazovanja.

Nakon pozdravnog govora ravnatelja Srca Ivana Marića, zamjenik ravnatelja Dobriša Dobrenić u svojem je izlaganju predstavio što se sve događalo s Isabellom i računarstvom visokih performansi u Srcu tijekom svih ovih godina. Istaknuo je: „*Od svibnja 2002. godine do danas Isabella je prošla kroz brojne nadogradnje - od početnih nakupina standardnih korisničkih računala, preko snažnih poslužitelja povezanih posebnom brzom računalnom mrežom, do najnovijih grafičkih procesora. Isabella danas ima 140 TFLOPS-a i sastoji se od 135 računalnih čvorova, 3.100 CPU jezgri, 12 grafičkih procesora NVIDIA V100, 16 TB radne memorije, 765 TB dijeljenog datotečnog prostora. Računalni čvorovi povezan su brzom mrežom Infiniband koja ostvaruje propusnost 56 Gbit/s. Isabella je zajednički računalni resurs svih znanstvenika i istraživača u Hrvatskoj zahvaljujući kojem oni mogu provoditi najzahtjevnije projekte i međunarodno relevantna istraživanja.*“



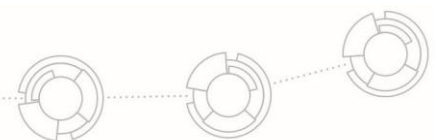
Potom je uslijedila prezentacija budućnosti računarstva visokih performansi u Srcu koju je održao Emir Imamagić predstojnik Sektora za napredno računanje. U svom je izlaganju predstavio sljedeću generaciju naprednog računanja koja dolazi s realizacijom projekta Hrvatski znanstveni i obrazovni oblak (HR-ZOO). HR-ZOO je strateški nacionalni projekt koji gradi računalni i podatkovni oblak, buduću temeljnu sastavnicu nacionalne istraživačke i inovacijske e-infrastrukture koja će akademskoj i istraživačkoj zajednici osigurati napredne računalne i spremišne resurse te na njima izgrađene digitalne usluge. U okviru HR-ZOO-a korisnici će moći koristiti usluge naprednog računanja, pohranjivanja podataka, uporabe znanstvenog softvera, mrežnog povezivanja i udomljavanje IKT opreme

Budući sustav HR-ZOO HPC činit će sustav HPE Cray performansi 1,156 PFLOPS-a, što ga čini prvim petaskalarnim superračunalom u Hrvatskoj. Sastoji se od 77 računalnih čvorova s 8.448 CPU jezgri, 85 grafičkih procesora NVIDIA A100 i ukupno oko 32 TB radne memorije. Spremišni sustav HPE ClusterStor E1000 pružat će 500 TB dijeljenog prostora na NVMe SSD diskovima ukupne propusnosti od minimalno 100 GB/s. Sve komponente superračunala povezane su računalnom mrežom Slingshot propusnosti 200 Gbit/s. Računalne komponente sustava su 100 % izravno hladene tekućinom, čime se postiže iznimno visoka energetska učinkovitost.

Uz računarstvo visokih performansi u okviru HR-ZOO-a korisnici će imati na raspolaganju i uslugu elastičnog računanja u oblaku koja će se odvijati na sustavu za računarstvo s visokom propusnošću HR-ZOO-a HTC. Računarstvo s visokom propusnošću omogućava interaktivnu analizu, obradu i vizualizaciju podataka te raspodijeljenu obradu velikih količina podataka. Sustav HR-ZOO HTC činit će HPE poslužitelji s procesorima AMD EPYC 7713 koji sadrže 64 CPU jezgre frekvencije rada 2,0 GHz i GPU-ovima NVIDIA A100 s 40 GB memorije. Sustav će imati više od 11 tisuća procesorskih jezgri, 16 GPU-ova, gotovo 60 TB radne memorije te bruto 415 TB brzog i 3 PB standardnog spremišta za pohranu podataka. Što će predstavljati značajan napredak u odnosu na sadašnjih 600 CPU jezgri i 4,7 TB radne memorije, koje pruža usluga HTC Cloud.

„Moderna znanost i istraživanja temelje se na podacima i danas su nezamislivi bez uporabe naprednih računalnih resursa koji omogućuju napredno računanje, obradu i upravljanje tim velikim skupovima podatka te značajno skraćuju vrijeme potrebno za provedbu samih istraživanja i dolazak do rješenja. Hrvatski znanstvenici i istraživači ove će resurse za napredno istraživanje moći koristiti po završetku projekta HR-ZOO koji se planira na proljeće 2023. godine.“ - naglasio je Emir Imamagić predstojnik Sektora za napredno računanje Srca.

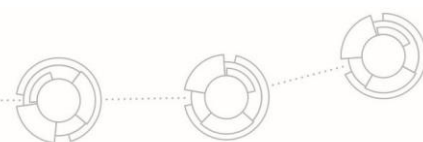
„Protetkih 20 godina uspjeli smo na brojne načine osigurati opstanak i razvoj Isabelle. Bez podrške Ministarstva znanosti i obrazovanja svih tih godina kao i interesa naših korisnika – znanstvenika i istraživača s vodećih hrvatskih znanstvenih ustanova, koji marljivo rade na svojim projektima i koriste resurse koje im Srce stavlja na raspolaganje, ne bismo danas obilježavali 20 godina Isabelle. Pred nama je i vrlo zanimljivo razdoblje u kojem ćemo pokrenuti prvo petaskalarno superračunalo u Hrvatskoj i sustav HR-ZOO HTC zahvaljujući financijskim sredstvima osiguranim kroz projekt HR-ZOO. Sigurni smo da će ovi vrhunski računalni resursi doprinijeti ostvarivanju još zahtjevnijih znanstvenih projekata te time omogućiti nove iskorake i nova saznanja u znanosti i istraživanju. Da



bismo u svemu tome bili uspješni ističemo važnost osiguravanja održivog financiranja napredne istraživačke infrastrukture u okviru strateškog planiranja dugoročnog financiranja hrvatskog istraživačkog sustava“ zaključio je Ivan Marić ravnatelj Srca.

Povodom 20 godina Isabelle uručena su posebna priznanja odabranim projektima, ustanovama i pojedincima.

Sveučilišni računski centar, Srce
web: <https://www.srce.unizg.hr/pressroom>
e-mail: press@srce.hr



Posebna priznanja povodom 20 godina Isabelle dodijeljena su u četiri kategorije.

U kategoriji „Najzahtjevnije računanje uporabom klastera Isabella u 2021. godini“ nagrade su dodijeljene projektima:

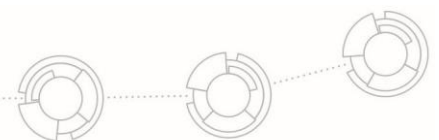
- Efekt kvantnog tuneliranja: dinamika molekula s kvantnim jezgrama
- Funkcionalizacija nanotrakica grafena i heksagonalnog borovog nitrida
- Enzimaska sinteza fluoriranih kiralnih građevnih blokova
- 3D verifikacija rezultata 2D simulacija strujanja fluida u spremniku
- Prijenos tvari kroz biološke membrane potpomognut proteinima

Cilj projekta „**Efekt tuneliranja: dinamika molekula s kvantnim jezgrama**“ je razvijanje novih računalnih metoda za opisivanje kvantnih pojava u kemiji. Pristup se temelji na teoriji instantona, a naglasak je na proučavanju efekta kvantnog tuneliranja u molekularnim sustavima. Nove metode omogućit će modeliranje tuneliranja u sustavima s više energetskih jama te asimetričnim sustavima. Takvi sustavi česti su u prirodi te je razumijevanje dinamike tuneliranja u njima ključno za objašnjavanje brojnih pojava koje su do sada izmicala postojećoj metodologiji. Razvijena teorija primijenit će se za proučavanje dinamike pregradnje grozdova molekula vode. Upravo ta dinamika je temelj za razumijevanje mikroskopske strukture tekuće vode, koja igra ključnu ulogu u brojnim kemijskim i biološkim procesima. Proučavat će se i fotoinducirane neadijabatske dinamike u pobuđenim elektronskim stanjima, koje će pružiti dublji uvid u mehanizme fotokemijskih reakcija.

Projekt „**Funkcionalizacija nanotrakica grafena i heksagonalnog borovog nitrida**“ izvodi se na Odjelu za fiziku Sveučilišta J. J. Strossmayera u Osijeku, a na njemu sudjeluju nastavnici, ali i studenti Odjela. Istraživanje je isključivo teorijske prirode te su za njega u potpunosti korišteni HPC resursi klastera Isabella. U okviru projekta „Funkcionalizacija nanotrakica grafena i heksagonalnog borovog nitrida“ istraživači istražuju kako bi upotreba heksagonalnog borovog nitrida u skladištenju energije doprinijela boljim načinima skladištenja energije

Projekt „**Enzimaska sinteza fluoriranih kiralnih građevnih blokova**“ koji provode znanstvenici s Instituta Ruđer Bošković sa suradnicima u cilju istraživanja ponašanja halogenhidrin-dehalogenaza na molekularnoj razini, što je važno za izgradnju modela odnosa strukture i aktivnosti (SAR) za enzime tj, za optimiranja njihovog katalitičke i stereospecifične efikasnosti. To bi u praksi moglo doprinijeti poboljšanju industrijske proizvodnje lijekova, smanjenju količine otpadnih materijala što ima pozitivan ekonomski i ekološki utjecaj. U okviru projekta koriste se resursi računalnog klastera Isabella za napredne računalne metode kao što su kvantno-mehanički računi i simulacije molekulskom dinamikom (MD).

Projekt „**3D verifikacija rezultata 2D simulacija strujanja fluida u spremniku**“ kruna je dugogodišnjega istraživanja grijanja tekućih tereta u pomorskom prometu na Fakultetu elektrotehnike, strojarstva i brodogradnje Sveučilišta u Splitu. Primjenom računalnoga klastera Isabella rješavane su stotine milijuna jednadžbi koje združeno opisuju složene

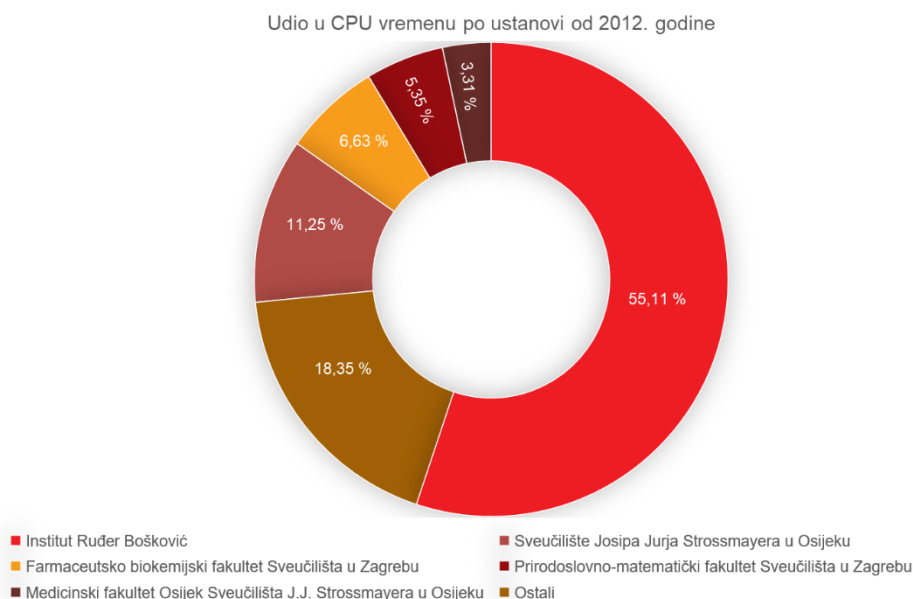


processe prijenosa topline i tvari u spremnicima tankera. Ostvareni rezultati produbljuju naše spoznaje i omogućuju gradnju djelotvornijih postrojenja za grijanje.

U projektu Hrvatske zaklade za znanost "**Prijenos tvari kroz biološke membrane potpomognut proteinima**" ispituju se kontrolirani prijenosi tvari preko staničnih membrana sastavljenih od lipida i proteina, a koji su nužni je za održavanje života. Istraživanje bi trebalo pružiti bolje razumijevanje temeljnih načela i mehanizama staničnog transporta, a znanje stečeno na tom putu pružit će snažne temelje u razvoju drugih, medicinski relevantnijih otkrića, kao što je dizajn pametne isporuke lijekova identificiranjem bitnih interakcija prijenosa kroz stanične membrane na molekularnoj razini.

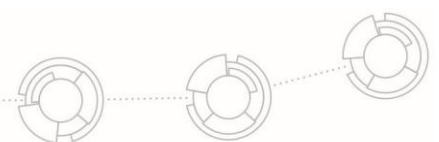
U kategoriji ustanova koje su najviše koristile klaster Isabela tijekom posljednjih 10 godina u provođenju vrhunskih znanstvenih projekata priznanja su dodijeljena sljedećim ustanovama:

- Institut Ruđer Bošković
- Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku
- Farmaceutsko biokemijski fakultet Sveučilišta u Zagrebu
- Prirodoslovno-matematički fakultet sveučilišta u Zagrebu
- Medicinski fakultet Osijek Sveučilišta J.J. Strossmayera u Osijeku



U kategoriji individualnih priznanja dodijeljena su priznanja trojici najdugovječnijih korisnika računalnog klastera Isabella:

- dr. sc. Darku Babiću
- dr. sc. Borislavu Kovačeviću i
- dr. sc. Robertu Vianellu



U kategoriji posebnih priznanja dodijeljena su posebna priznanja:

- Državnom hidrometeorološkom zavodu za doprinos razvoju klastera Isabella resursom VELEBit
- Ministarstvu gospodarstva i održivog razvoja za doprinos razvoju klastera Isabella resursom VELEBit
- Ministarstvu znanosti i obrazovanja za prepoznavanje značaja i dugogodišnju podršku u razvoju i radu klastera Isabella

