

# Ερευνητικό Κέντρο Επιστημονικών Προσομοιώσεων

## Γενικά

Το Ερευνητικό Κέντρο Επιστημονικών Προσομοιώσεων (Ε.Κ.Ε.Π.) είναι ενταγμένο στο Δίκτυο Εργαστηρίων Υποστήριξης της Έρευνας του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων (Δ.Ε.Υ.Ε.Π.Ι.). Στόχος του Κέντρου είναι η παροχή υπολογιστικού χρόνου για τη διεξαγωγή μεγάλης κλίμακας παράλληλων προσομοιώσεων. Η βασική υλικοτεχνική υποδομή του Κέντρου εγκαταστάθηκε το Δεκέμβριο του 2006, στο πλαίσιο του έργου «Ανάπτυξη Ερευνητικού Κέντρου Επιστημονικών Προσομοιώσεων» και χρηματοδοτήθηκε από την Περιφέρεια Ηπείρου. Το εν λόγω σύστημα αποτελεί μια σημαντική υπολογιστική υποδομή καθώς η εντατική χρήση της συνεισφέρει ενεργά στην έρευνα και στην εκπαίδευση που πραγματοποιείται στο Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων.

## Υποδομή-Εξοπλισμός

Η υλικοτεχνική υποδομή του Ε.Κ.Ε.Π. αποτελείται από 200 υπολογιστικούς κόμβους με δύο (2) ανεξάρτητους κεντρικούς επεξεργαστές AMD Opteron™ 248 2.2 GHZ. Συνεπώς, ο συνολικός αριθμός των διαθέσιμων επεξεργαστών του συστήματος ανέρχεται στους τετρακόσιους (400). Ο κάθε υπολογιστικός κόμβος περιλαμβάνει 4GB ECC μνήμη RAM, 80GB τοπικό δίσκο και δύο δικτυακές θύρες ταχύτητας 1Gbps. Η διασύνδεση των υπολογιστικών κόμβων γίνεται μέσω ενός κεντρικού μεταγωγέα Ethernet υψηλής χωρητικότητας (>380Gbps) ο οποίος περιλαμβάνει τον απαραίτητο αριθμό θυρών. Ο κεντρικός αποθηκευτικός χώρος του συστήματος για τις εφαρμογές παρέχεται από μια συστοιχία δίσκων (raid 5) και διαμοιράζεται στους υπολογιστικούς κόμβους μέσω δικτύου από έναν εξυπηρετητή αρχείων.

Η παραπάνω υλικοτεχνική υποδομή πλαισιώνεται από τα απαραίτητα συστήματα υποστήριξης:

- συστήματα ψύξης με ικανότητα μέχρι 400KBTUs/h,
- αδιάλειπτα παροχή ισχύος (UPS) με ικανότητα μέχρι 120 KVA.

Επίσης, η εγκατάσταση (σχήμα 1) περιλαμβάνει ένα σύνολο συστημάτων και υπηρεσιών που ελέγχουν την ορθή λειτουργία της υποδομής. Για τον χειρισμό και την κατανομή των εργασιών στους κόμβους έχει εγκατασταθεί κατάλληλο λογισμικό διαχείρισης των υπολογιστικών πόρων.



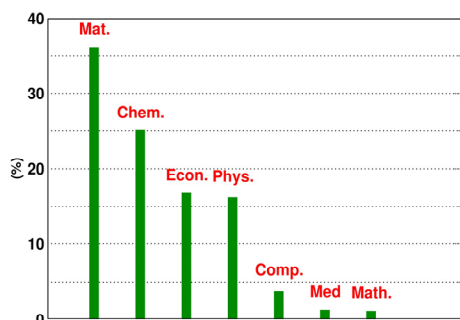
Σχήμα 1. Η υλικοτεχνική υποδομή του Ε.Κ.Ε.Π.

## Προσφορά Υπηρεσιών

Το Ε.Κ.Ε.Π. δίνει την δυνατότητα στα μέλη της ακαδημαϊκής κοινότητας του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων να διεξάγουν παράλληλους υπολογισμούς μεγάλης κλίμακας σε ένα πλήθος ερευνητικών πεδίων (Χημείας, Επιστήμης Υλικών, Φυσικής, Ιατρικής, Μαθηματικών, Βιολογίας, Οικονομικών, Επιστήμης της Πληροφορικής και άλλα). Οι υπολογισμοί και προσομοιώσεις που διεξάγονται θα ήταν αδύνατο να πραγματοποιηθούν χωρίς την δυνατότητα της παραλληλίας που προσφέρει η υποδομή του Ε.Κ.Ε.Π.

Συνολικά έχουν αιτηθεί για την χορήγηση πρόσβασης 50 χρήστες από τους οποίους οι 26 χρησιμοποίησαν την υποδομή για χρονικό διάστημα άνω των 1000 ωρών και θεωρούνται συμβατικά ως συστηματικοί χρήστες.

Κατά την τελευταία τριετία, οι εφαρμογές και τα προγράμματα των χρηστών κατανάλωσαν συνολικά 5630 Khours. Ενδεικτικά αναφέρεται ότι η υλικοτεχνική υποδομή του Κέντρου έχει χρησιμοποιηθεί από μέλη ΔΕΠ των Τμημάτων Μηχανικών Επιστήμης Υλικών, Χημείας, Οικονομικών, Φυσικής, Πληροφορικής, Ιατρικής και Μαθηματικών του Παν/μίου Ιωαννίνων (σχήμα 2).



**Σχήμα 2.** Ενδεικτική κατανομή του χρόνου αξιοποίησης της υλικοτεχνικής υποδομής του Ε.Κ.Ε.Π.

Επιπλέον, σημαντική είναι η συνεισφορά του Κέντρου στην εκπαίδευση μεταπτυχιακών φοιτητών και υποψήφιων διδασκόντων.

Τέλος, στο πλαίσιο του ευρωπαϊκού προγράμματος “Enabling Grids for E-science” (EGEE III), τμήμα της υλικοτεχνικής υποδομής του Ε.Κ.Ε.Π. συνδέθηκε με την ευρωπαϊκή ομάδα υπολογιστικών συστημάτων τύπου “πλέγματος” (Grid) EGEE. Η δράση αυτή προβάλλει το ίδρυμα σε ευρωπαϊκό και διεθνές επίπεδο. Επίσης, δίνει την δυνατότητα πρόσβασης και ενημέρωσης σε θέματα λειτουργίας υπολογιστικών υποδομών τύπου «πλέγματος» που βοηθά στην βελτίωση των παρεχόμενων υπηρεσιών και στην ανάπτυξη της απαραίτητης τεχνογνωσίας για την λειτουργία του Κέντρου.

## Προσωπικό του Κέντρου

Το προσωπικό του Κέντρου αποτελείται από Επιστημονική Επιτροπή μελών ΔΕΠ του Πανεπιστημίου Ιωαννίνων, που είναι υπεύθυνη για την εύρυθμη λειτουργία, την οργανολογική βελτίωσή του, καθώς και για την βελτίωση της παροχής υπηρεσιών. Η Επιτροπή αυτή αποτελείται από τους:

1. Ισαάκ Λαγαρή, Καθηγητή Τμήματος Πληροφορικής, Πρόεδρο της Επιτροπής και Επιστημονικό Υπεύθυνο του Κέντρου
2. Στέργιο Αναστασιάδη, Επίκ. Καθηγητή Τμήματος Πληροφορικής
3. Βασίλειο Δημακόπουλο, Επίκ. Καθηγητή Τμήματος Πληροφορικής
4. Δημήτριο Παπαγεωργίου, Επίκ. Καθηγητή Τμήματος Μηχανικών Επιστήμης Υλικών
5. Κων/νο Παρσόπουλο, Επίκ. Καθηγητή Τμήματος Πληροφορικής
6. Ιωάννη Σταματίου, Επίκ. Καθηγητή Τμήματος Μαθηματικών

Υπεύθυνος για την εύρυθμη λειτουργία της υλικοτεχνικής υποδομής του Κέντρου έχει οριστεί, ο Ε. Βαμβακόπουλος, Δρ. Φυσικής.

## Αντιπροσωπευτικές δημοσιεύσεις

1. Stavrakoudis A., “Computational modelling and molecular dynamics simulations of a cyclic peptidomimotope of the CD52 antigen complexed with CAMPATH-1H antibody”, *Molecular Simulation*, in press, (2010).
2. Fadoulglou V.E., Stavrakoudis A., Bouriotis, V., Kokkinidis, M., Glykos, N.M., “Molecular dynamics simulations of bczbp, a deacetylase from bacillus cereus: Active site loops determine substrate accessibility and specificity” *Journal of Chemical Theory and Computation*, 5, 3299 (2009).
3. Stavrakoudis A., “Conformational studies of the 313-320 and 313-332 peptide fragments derived from the  $\alpha$ IIb subunit of integrin receptor with molecular dynamics simulations” *International Journal of Peptide Research and Therapeutics*, 15, 263 (2009).
4. A. C. Tsipis, “Upright or In-Plane Conformational Preference: Dilemma of  $\eta^2$ -Coordinated C=C Double Bond in  $PtX_2(CO)(\eta^2\text{-ene})$  (X=H, Cl or  $C_6F_5$ ) Complexes”, *Organometallics* 27, 3701 (2008).
5. A. T. Chaviara, E. E. Kioseoglou, A. A. Pantazaki, A. C. Tsipis, P. A. Karipidis, D. A. Kyriakidis, C. A. Bolos, “DNA interaction studies and evaluation of biological activity of homo- and hetero-trihalide mononuclear Cu(II) Schiff Base complexes”, *Quantitative structure-activity relationships J. Inorg. Biochem.* 102, 1749 (2008).
6. K. Christopoulos, K. Karidi, A. C. Tsipis and A. Garoufis, “Synthesis, characterization, DNA-binding properties and electronic structure (DFT) of Ruthenium oligopyridine complexes”, *Inorganic Chemistry Communications* 11, 1341 (2008)
7. E. Lidorikis and A.C. Ferrari, “Photonics with Multi-Wall Carbon Nanotube Arrays”, *ACS Nano* 3, 1238 (2009).
8. M. Guffey, E. Lidorikis, X.-M. Lin, J.D. Joannopoulos and N.F. Scherer, “Plasmon Delocalization in Au Nanoparticle Monolayer Arrays Established by Optical Experiments and Simulation”, to be submitted *Journal of Physical Chemistry C*.
9. S. Egusa, E. Lidorikis, M. Guffey, X.-M. Lin, J.D. Joannopoulos, and N.F. Scherer, “Resonant transmission of coherent light through 2D metallic nanocrystal arrays”, to be submitted in *Phys. Rev. B*.
10. D.A. Kilimis, D.G. Papageorgiou, “Density functional study of small bimetallic Ag-Pd clusters”, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, in press, (2010).
11. D.A. Kilimis and D.G. Papageorgiou, “Structural and electronic properties of small

- bimetallic Ag–Cu clusters”, *Eur. Phys. J. D* 56, 187 (2010).
12. C. Voglis , P.E. Hadjidoukas , I.E. Lagaris , D.G. Papageorgiou, "A numerical differentiation library exploiting parallel architectures" *Computer Physics Communications*, in press (2009).
  13. I.G. Tsoulos and I.E.Lagaris, “GenMin: An enhanced genetic algorithm for global optimization”, *Computer Physics Communications* 178, 843, (2008).
  14. I.G. Tsoulos, I.E. Lagaris, “MinFinder v2.0: An improved version of MinFinder, *Computer Physics Communications*”, 179, 614, (2008).
  15. G. V. Papamokos , I. G. Tsoulos , I.N. Demetropoulos , E. Glavas, “Location of Amide I mode of vibration in computed data utilizing constructed neural networks”, Accepted for publication in *Expert Systems With Applications*.
  16. G.A.Almyras, Ch.E. Lekka, N. Mattern and G.A. Evangelakis, “On the microstructure of the Cu<sub>65</sub>Zr<sub>35</sub> and Cu<sub>35</sub>Zr<sub>65</sub> metallic glasses”, *Scripta Materialia* 62, 33 (2010).
  17. Ch. E. Lekka, Jun Ren, Sheng Meng, Efthimios Kaxiras, “Structural, electronic and optical properties of representative Cu-flavonoid complexes”, *Journal of Physical Chemistry B* 113 (18), 6478 (2009).
  18. Ch. E. Lekka, N. Panagiotopoulos, Ph. Komninou, P.Patsalas, G.A.Evangelakis, “Electronic properties and bonding characteristics of AlN:Ag Thin Film Nanocomposites; a computational and experimental study”, to be submitted in *Acta Materialia*.