

Sprawozdanie z działalności Uniwersyteckiego Centrum Obliczeniowego w akademickim 2019/2020.

Wprowadzenie

Uniwersyteckie Centrum Obliczeniowe (UCO), jest jednostką ogólnouczelnianą, której zadaniem jest udostępnianie infrastruktury obliczeniowej dla projektów naukowych, oraz wsparcie techniczne i merytoryczne w zakresie prowadzenia obliczeń i rozwoju algorytmów obliczeniowych. W UCO są zatrudnione 3 osoby: dwóch administratorów, jeden programista naukowy.

UCO jest zarządzane przez delegowanego do UCO samodzielnego pracownika naukowego, piastującego równoległe stanowisko profesora nadzwyczajnego w Instytucie Informatyki.

Organem opiniującym pracę UCO jest Rada Centrum. W jej skład wchodzi przedstawiciele wydziałów, przedstawiciele środowiska naukowego i przedstawiciele pracowników Centrum.

W skład Rady Centrum w roku akademickim 2019/2020 wchodzi:

- prof. dr hab. Marek Niezgódka, UKSW w Warszawie – przewodniczący,
- prof. dr hab. Marcin Moniuszko, Uniwersytet Medyczny w Białymstoku,
- prof. dr hab. Jacek Błażewicz, czł. rzecz. PAN, Politechnika Poznańska,
- prof. dr hab. Mirosław Brewczyk, przedstawiciel Wydziału Fizyki,
- dr hab. Artur Ratkiewicz, przedstawiciel Wydziału Chemii,
- prof. dr hab. Iwona Ciereszko, przedstawicielka Wydziału Biologii,
- dr hab. Bartosz Kwaśniewski, prof. UwB, przedstawiciel Wydziału Matematyki
- dr hab. Ewa Schmeidel, prof. UwB, przedstawicielka Instytutu Informatyki.
- dr hab. Witold Rudnicki, prof. UwB, dyrektor UCO,
- mgr Mirosław Najbuk, przedstawiciel pracowników UCO.

Infrastruktura UCO

UCO dysponuje infrastrukturą w postaci klastra obliczeniowego, składającego się z 78 węzłów obliczeniowych połączonych wysokoprzepustową siecią Infiniband, wysoko wydajnej macierzy dyskowej o pojemności 62 TB, serwera plików CEPH o pojemności 56 TB, serwera archiwizacji o pojemności 10 TB, oraz 6 serwerów pomocniczych służących do logowania, dostarczania usług sieciowych i prac rozwojowych. Dwadzieścia cztery węzły obliczeniowe są wyposażone w wysokowydajne akceleratory obliczeniowe GPU firmy NVIDIA.

UCO zarządza również licencjami na następujące oprogramowanie:

- Gaussian – program do obliczeń chemii kwantowej,
- Matlab – program do obliczeń inżynierskich,
- Mathematica – program do symbolicznych obliczeń matematycznych.

Utrzymanie ciągłości pracy UCO

W UCO wdrożony jest system zabezpieczeń przed wystąpieniem sytuacji zagrażających bezpieczeństwu infrastruktury obliczeniowej. W celu zabezpieczenia

ciągłości pracy urządzeń znajdujących się w serwerowni zaimplementowane są własne, niezależne systemy monitoringu zdalnego temperatury i wilgotności w serwerowni z funkcją powiadamiania przez SMS, e-mail oraz wiadomości PUSH. Opracowane zapobiegawcze systemy zdalnego monitoringu powstały pierwotnie jako odpowiedź na występujące awarie dostawy wody lodowej do urządzeń chłodniczych w serwerowni. System został następnie rozszerzony o monitoring wilgotności.

W celu zapobiegania kolejnym awariom utrzymywany jest system dyżurów operatorskich, wdrożone i przetestowane są procedury postępowania w wypadku wystąpienia awarii infrastruktury. Dzięki podjęciu wyżej wymienionych działań kolejne awarie systemu doprowadzania wody lodowej do UCO nie skutkowały awarią w obrębie infrastruktury UCO. Co więcej, dzięki istnieniu niezależnego systemu monitoringu udało się zapobiec eskalacji problemów i wcześniej powiadomić właściwe służby UwB.

Użytkownicy UCO

Z infrastruktury UCO korzystają pracownicy UwB z Wydziałów: Biologii, Chemii, Fizyki, Matematyki, Instytutu Informatyki oraz Wydziału Ekonomiczno-Informatycznego filii Uniwersytetu w Wilnie, a także współpracownicy pracowników UwB z ośrodków zagranicznych i krajowych: Radboud University (Holandia), Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Uniwersytet Warszawski, Centrum Fizyki Teoretycznej PAN. Ogółem z infrastruktury UCO skorzystało łącznie 95 użytkowników. W roku akademickim 2010/2020 w UCO było realizowane 25 granty obliczeniowych, w tym 1 administracyjny, 5 dydaktycznych i 19 naukowych.

Opis działalności UCO w roku akademickim 2019/2020

Realizowane projekty techniczne.

W roku akademickim 2019/2020 zrealizowano następujące projektu techniczne mające na celu unowocześnienie oferty UCO dla użytkowników, podniesienie funkcjonalności i otwarcie się na szerszą grupę potencjalnych użytkowników:

1. Rozbudowa systemu pamięci masowej.
2. Unowocześnienie systemu klastrowego.
3. Wprowadzenie dostępu do infrastruktury w postaci chmurowej.
4. Zakup licencji na nową wersję oprogramowania Gaussian.

Ad. 1. Wdrożono alternatywny do pierwotnie istniejącego system pamięci masowej oparty o dwa już posiadane serwery oraz nowo zakupione dyski twarde. Nowy system oparto o obiektowy system pamięci masowej Ceph, zapewnia redundancję zapisu oraz przestrzeń backup, dzięki czemu użytkownicy mają zapewnione wyższe bezpieczeństwo danych.

Ad 2. Przeprowadzono pierwszy etap modernizacji oprogramowania klastra UCO. Wdrożono nowe węzły dostępowe z nowym systemem operacyjnym i nowym systemem plików. System umożliwi współdzielenie plików między chmurą a klastrem KDM. Migracja użytkowników do nowego systemu odbędzie się w lutym 2020. Po przeprowadzeniu migracji planowany jest drugi etap modernizacji – przeznaczenie macierzy dyskowej w całości na tymczasowy system plików do obliczeń. Nowy system klastrowy został nazwany esperanto – dla podkreślenia związków z Białymstokiem.

Ad 3. Wdrożono dostęp do zasobów obliczeniowych w systemie chmurowym. System chmurowy został oparty na oprogramowaniu open source OpenStack. Wdrożenie oprogramowania wymagało znaczących nakładów pracy ze strony pracowników UCO, w szczególności dotyczyło to wyboru i optymalizacji podsystemu pamięci masowej, oraz samej instalacji wszystkich potrzebnych elementów systemu. Instalacja usług wiązała się z wszechstronnymi testami oprogramowania, które ujawniły bardzo dużą ilość ukrytych błędów. Dzięki współpracy zespołu UCO ze środowiskiem programistów OpenStack usunięto znaczącą liczbę błędów i doprowadzono proces instalacji do końca. Dodatkowym efektem jest włączenie pana Radosława Piliszka do grona kluczowych developerów w społeczności OpenStack.

Ad. 4. Dokonano zakupu licencji programu Gaussian 16, finansowanej ze współudziałem zespołu prof. Artura Ratkiewicza z Wydziału Chemii.

Wsparcie dla dydaktyki

W roku 2019/20 UCO udzieliło wsparcia technicznego dla realizacji 2 prac dyplomowych w Instytucie Informatyki.

Ponadto infrastruktura chmurowa UCO była wykorzystywana do prowadzenia w trybie zdalnym zajęć dydaktycznych w Instytucie Informatyki.

Promocja Uniwersytetu

UCO angażuje się w działania promocyjne Uniwersytetu, w ramach promocji pracownicy UCO m.in. prowadzą zajęcia edukacyjne i popularyzacyjne dla młodzieży. Infrastruktura UCO jest prezentowana gościom Uniwersytetu, a także w środowisku lokalnym, np. uczniom białostockich szkół. Pracownicy UCO uczestniczą również w ogólnouczelnianych akcjach promocyjnych w ramach Marcowych Spotkań z Nauką oraz Podlaskiego Festiwalu Nauki i Sztuki.

Z okazji uruchomienia w UCO dostępu do infrastruktury obliczeniowej w modelu chmurowym zorganizowano konferencję „Chmury dla Nauki i Biznesu”, która odbyła się w Białymstoku w dniu 4 lutego 2020. Konferencja została szeroko nagłośniona w lokalnych mediach.

Wykorzystanie infrastruktury UCO

W okresie lipiec 2019 – czerwiec 2020 średnie obciążenie serwerów UCO wyniosło około 30%, a w szczytowych miesiącach sięgało ponad 49%. Najwyższe dzienne obciążenie wynosiło 65%.

Lista grantów obliczeniowych realizowanych w UCO

W ramach poniższego zestawienia wymieniono wyłącznie granty, w których użytkownicy aktywnie wykorzystują infrastrukturę obliczeniową UCO. Zestawienie podzielono ze względu na wydział kierownika grantu.

Wydział Chemii

1. Kinetyka reakcji elementarnych istotnych w modelowaniu procesów spalania. Kierownik: dr hab. Artur Ratkiewicz.
2. Analiza oddziaływań niekowalencyjnych w układach karboksylowych pochodnych heterocyklicznych pierścieni aromatycznych. Kierownik: dr Sławomir Wojtulewski.

Wydział Fizyki

1. Badanie niestabilności ferromagnetycznej w dwuskładnikowym gazie Fermiego. Kierownik: prof. Mirosław Brewczyk
2. Atomistyczne i mikromagnetyczne modelowanie statyki i dynamiki namagnesowania w ultracienkich warstwach metalicznych. Kierownik: dr Jan Kisielewski
3. Badanie własności dwuskładnikowych gazów Bosego. Kierownik: dr Krzysztof Gawryluk,
4. Modelowanie numeryczne własności nanomateriałów. Kierownik: dr hab. Marian Uba.

Instytut Informatyki

1. Rozwój systemu Mizar oraz Mizar Mathematical Library. Kierownik: dr Adam Naumowicz.
2. Rozwój metod selekcji zmiennych. Kierownik: dr hab. Witold Rudnicki.
3. Eksploracja i wielowymiarowa analiza danych. Kierownik: dr Aneta Polewko-Klim.
4. Opracowanie algorytmu równoległego obliczania sekwencyjnych łańcuchów Markowa w atomistycznych symulacjach materii. Kierownik: dr hab. Witold Rudnicki
5. Platforma hostingowa do oprogramowania ChemSKOS. Kierownik: dr Dominik Tomaszuk

Publikacje wykonane z wykorzystaniem zasobów UCO

W wyniku badań prowadzonych z wykorzystaniem infrastruktury UCO w roku 2019/2020 opublikowano lub przyjęto do druku 26 artykułów naukowych, w większości w bardzo dobrych międzynarodowych czasopismach lub materiałach z konferencji informatycznych. Szczegółowy rozkład punktacji MNiSW dla publikacji zrealizowanych w UCO przedstawia się następująco:

200 pkt MNiSW – 1 artykuł, 140 pkt MNiSW – 4 artykuły, 100 pkt MNiSW – 9 artykułów, 70 pkt MNiSW – 1 artykuł, 40 pkt MNiSW – 1 artykuł, 20 pkt MNiSW – 5 artykułów, inne: 5 artykułów.

Sumaryczna liczba punktów MNiSW wyniosła 1870.

Sześć kolejnych artykułów zostało wysłane do redakcji czasopism międzynarodowych.

Szczegółowe zestawienie publikacji

MNiSW = 200

1. K. Mnich, W.R. Rudnicki. (2020). All-relevant feature selection using multidimensional filters with exhaustive search. *Information Sciences* 524, 277-297.

MNiSW = 140

2. A. Kitlas Golińska, W. Lesiński, A. Przybylski, W. R. Rudnicki (2020). Towards Prediction of Heart Arrhythmia Onset Using Machine Learning. In: Krzhizhanovskaya V. et al. (eds) *Computational Science – ICCS 2020*. ICCS 2020. Lecture Notes in Computer Science 12140, 376-389. Springer, Cham.
3. K. Mnich, A. Kitlas Golińska, A. Polewko-Klim, W.R. Rudnicki (2020). Bootstrap Bias Corrected Cross Validation Applied to Super Learning. In: Krzhizhanovskaya V. et al. (eds) *Computational Science – ICCS 2020*. ICCS 2020. Lecture Notes in Computer Science 12139, 550-563. Springer, Cham.
4. A. Polewko-Klim, W. R. Rudnicki (2020). Analysis of Ensemble Feature Selection for Correlated High-Dimensional RNA-Seq Cancer Data. In: Krzhizhanovskaya V. et al. (eds) *Computational Science – ICCS 2020*. ICCS 2020. Lecture Notes in Computer Science 12139, 525-538. Springer, Cham.
5. among others: A. Golińska, W. Lesiński, A. Polewko-Klim, W. Rudnicki (2019). Stratification of amyotrophic lateral sclerosis patients: a crowdsourcing approach. *Scientific Reports* 9, 1-14.

MNiSW = 100

6. P. Wałęjko, Ł. Dobrzycki, A. Ratkiewicz, P. Socha, S. Witkowski, M.K. Cyrański, (2019). An X-ray and Natural Bond Orbital (NBO) structural study of α -tocopheryl and 2,2,5,7,8-pentamethylchroman-6-yl succinates *Journal of Saudi Chemical Society*, 23, 365-377.
7. M. Baradyn, A., Ratkiewicz, (2019). Kinetics of the Hydrogen Abstraction PAH + $\cdot\text{OH} \rightarrow$ PAH Radical + H_2O Reaction Class: An Application of the Reaction Class Transition State Theory (RC-TST) and Structure-Activity Relationship (SAR). *The Journal of Physical Chemistry A*, 123, 759-763.
8. Baj, A., Cedrowski, J., Olchowik-Grabarek, E., Ratkiewicz, A., Witkowski, S. (2019). „Synthesis, DFT Calculations and In Vitro Antioxidant Study on Novel Carba-Analogs of Vitamin E” *Antioxidants*, 8, 589.
9. A. Wróbel, D. Maliszewski, M. Baradyn, D. Drozdowska, (2020). Trimethoprim: An Old Antibacterial Drug as a Template to Search for New Targets. Synthesis, Biological Activity and Molecular Modeling Study of Novel Trimethoprim Analogs. *Molecules* 25(1), 116.

10. A. Bankiewicz, S. Wojtulewski (2019). "Two New Cocrystals of the Dipicolinic Acid. Hirshfeld Atom Refinement of Crystal Structures and Quantum Theory of Atoms in Molecules Analysis of Molecular Complexes", *Cryst. Growth. Des.* 19 (12):6860-6872.
11. J. Ryszkiewicz, M. Brewczyk, T. Karpiuk, (2020). "Nonzero-temperature dynamics of a repulsive two-component Fermi gas", *Phys. Rev. A* 101, 013618.
12. K. Gawryluk and M. Brewczyk (2019). "Signatures of a universal jump in the superfluid density of a two-dimensional Bose gas with a finite number of particles", *Phys. Rev. A* 99, 033615.
13. M. Wrzesień, W. Treder, K. Klamkowski, W. Rudnicki (2019). Prediction of the apple scab using machine learning and simple weather stations. *Computers and Electronics Agriculture* 161 252-259.
14. R. Piliszek, K. Mnich, Sz. Migacz, P. Tabaszewski, A. Sułcki, A. Polewko-Klim, W. Rudnicki. (2019). MDFS: MultiDimensional Feature Selection in R. *R Journal* 11 1, 2073-4859. DOI:

MNiSW = 70

15. M. Baradyn, A. Ratkiewicz, (2020). "Kinetics of the Hydrogen Abstraction Alkane + O₂ → Alkyl + HO₂ Reaction Class: An Application of the Reaction Class Transition State Theory" *Structural Chemistry* 31(2), 731-746.

MNiSW = 40

16. S. Uba, A. Bonda, L. Uba, L.V. Bekenov, V.N. Antonov, (2020), "First principles calculations of intersite disorder influence on the electronic structure and X-ray magnetic circular dichroism in CoFeMnSi Heusler alloy", *International Journal of Modern Physics C* 2050109.

MNiSW = 20

17. A. Polewko-Klim, W. R. Rudnicki, (2020). Data Integration Strategy for Robust Classification of Biomedical Data. In: Rocha Á., Adeli H., Reis L., Costanzo S., Orovic I., Moreira F. (eds) *WorldCIST 2020: Trends and Innovations in Information Systems and Technologies. Advances in Intelligent Systems and Computing* 1160, 596-606. Springer, Cham.
18. W. Lesiński, A. Polewko-Klim, W. R. Rudnicki, (2020). Identification of Clinical Variables Relevant for Survival Prediction in Patients with Metastatic Castration-Resistant Prostate Cancer. In: Rocha Á., Adeli H., Reis L., Costanzo S., Orovic I., Moreira F. (eds) *WorldCIST 2020: Trends and Innovations in Information Systems and Technologies. Advances in Intelligent Systems and Computing* 1160, 607-617. Springer, Cham.
19. A. Naumowicz, 2020. Elementary Number Theory Problems. Part I. *Formalized Mathematics* 28(1), p. 115-120,
20. A. Kornilowicz, 2020. Partial Correctness of a Fibonacci Algorithm. *Formalized Mathematics* 28(2), p. 191-200.

21. A. Jaszczak and Artur Korniłowicz, 2019. Partial Correctness of a Factorial Algorithm. *Formalized Mathematics* 27(2), p. 181–187.

MNiSW < 20

22. K. Niedzielewski, M.E. Marchwiany, R. Piliszek, M. Michalewicz, W. Rudnicki. (2020). Multidimensional Feature Selection and High Performance ParalleX. *SN Computer Science* 1:40.
23. A. Naumowicz, 2020. Dataset Description: Formalization of Elementary Number Theory in Mizar. In: Benzmüller C., Miller B. (eds) *Intelligent Computer Mathematics. CICM 2020. Lecture Notes in Computer Science*, vol 12236. Springer, Cham.
24. A. Naumowicz, 2019. Testing Mizar User Interactivity in a University-level Introductory Course on Foundations of Mathematics. In: C. Kaliszyk et al. (eds.) *Joint Proceedings of the FMM and LML Workshops, Doctoral Program and Work in Progress at the Conference on Intelligent Computer Mathematics (CICM 2019)*, <http://ceur-ws.org/Vol-2634/FMM1.pdf>
25. A. Korniłowicz, 2019. Sethood Property in Mizar. In: C. Kaliszyk et al. (eds.) *Joint Proceedings of the FMM and LML Workshops, Doctoral Program and Work in Progress at the Conference on Intelligent Computer Mathematics (CICM 2019)*, <http://ceur-ws.org/Vol-2634/FMM3.pdf>.
26. A. Jaszczak, 2019. Formal verification of the correctness of chosen algorithms in Mizar. In: C. Kaliszyk et al. (eds.) *Joint Proceedings of the FMM and LML Workshops, Doctoral Program and Work in Progress at the Conference on Intelligent Computer Mathematics (CICM 2019)*, <http://ceur-ws.org/Vol-2634/FMM5.pdf>

Artykuły w trakcie procesu publikacyjnego:

1. T. Karpiuk, M. Nikołajuk, M. Gajda, and M. Brewczyk, "Modeling quantum aspects of disruption of a white dwarf star by a black hole", submitted to *Sci. Rep.*
2. P.T. Grochowski, T. Karpiuk, M. Brewczyk, and K. Rzążewski, "Breathing mode of a BEC immersed in a Fermi sea", submitted to *Phys. Rev. Lett.*
3. T. Karpiuk, M. Gajda, and M. Brewczyk, "Bistability of Bose-Fermi mixtures", submitted to *New J. Phys.*
4. T. Karpiuk, M. Nikołajuk, M. Gajda, & M. Brewczyk, (2019). Modelling quantum aspects of disruption of a white dwarf star by a black hole. *arXiv preprint arXiv:1907.12419*.
5. W. Lesiński, K. Mnich, A. Kitlas Golińska, W.R. Rudnicki. Integration of human cell lines gene expression and chemical properties of drugs for Drug Induced Liver Injury prediction. Submitted to *Biology Direct*.
6. A. Polewko-Klim, W. Lesiński, A. Kitlas Golińska, K. Mnich, M. Siwek, W.R. Rudnicki. Sensitivity analysis based on the Random Forest machine learning algorithm identifies candidate genes for regulation of innate and adaptive immune response of chicken. Submitted to *Poultry Science*.