



Wie die Universität Wien High Performance Computing der Huemer Group in der theoretischen Chemie nutzt

Dr. Markus Oppel ist Senior Scientist am Institut für Theoretische Chemie der Universität Wien und hat sich auf die Anwendung von High Performance Computing (HPC) im Bereich der Theoretischen Chemie spezialisiert. Am Institut für Theoretische Chemie wird das Verhalten von Molekülen unter dem Einfluss von Licht simuliert, um zu verstehen, wie photochemische Prozesse in verschiedenen Umgebungen ablaufen.

Dr. Oppel begann seine wissenschaftliche Laufbahn an der Freien Universität Berlin und arbeitet seitdem an der Schnittstelle zwischen Computational Chemistry und HPC. In seiner aktuellen Rolle an der Universität Wien plant und betreibt er lokale HPC-Cluster, die von etwa 20 Wissenschaftlern genutzt werden. Dieses HPC-System besteht aus zahlreichen Compute-Nodes mit etwa 1000 CPU-Kernen und 8 GPU-Nodes mit insgesamt 48 GPUs unterschiedlicher Typen. Das Highlight des Systems sind Cluster-Dateisysteme, realisiert mit BeeGFS und IBM's Storage Scale Technologien, welche mit HPE Standard-Hardware realisiert sind und über ein High-Speed InfiniBand-Netzwerk mit den Rechenknoten auf Basis von Apollo-Servern und Superdome Flex Maschinen kommuniziert.

Herausforderungen

- Hohe Anforderungen an HPC-Ressourcen
- Kosten Optimierung
- Komplexe Simulationen

Lösung

- HPE DL365 Server
- HPE Apollo Server
- HPE Superdome Flex Server
- HPE Parallel File System Storage

Die Arbeitsgruppe, in der Dr. Oppel tätig ist, konzentriert sich auf die Dynamik von photochemischen Reaktionen in komplexen Umgebungen. Das bedeutet, sie simulieren, wie Moleküle reagieren, wenn sie Licht ausgesetzt sind und wie diese Reaktionen in Umgebungen wie biologischen Zellen oder technischen Materialien ablaufen. Meistens handelt es sich um reine Grundlagenforschung, wobei die Ergebnisse in wissenschaftlichen Publikationen veröffentlicht werden.

Ein besonderes Augenmerk liegt auf den großen Datenmengen, die bei solchen Simulationen entstehen. Aufgrund der Komplexität der Simulationen werden Hunderttausende von Daten-Files generiert, die alle während des Forschungsprozesses gespeichert und später analysiert werden müssen. Eine besondere Herausforderung stellt dabei die Anzahl der Dateien dar, da dies Systeme belasten kann.

Ein aufregender Entwicklungsbereich für das Institut ist die Anwendung von Deep Learning und neuronalen Netzwerken. Anstatt jede Reaktion basierend auf den Gleichungen der Quantenmechanik zu berechnen, versuchen sie, diese komplexen Berechnungen durch trainierte neuronale Netze zu ersetzen, um den Simulationsprozess zu beschleunigen.

Auch der potenzielle Einsatz von Quantencomputern, welche das Lösen der Quantenmechanischen Gleichungen beschleunigen sollen, wird aktuell untersucht. Besonderes Augenmerk wird dabei auf die Verknüpfung von Quantencomputern mit klassischen IT-Systemen gelegt. Durch die Kombination dieser Architekturen soll zum Beispiel die Entwicklung neuer Medikamente mittels Computersimulationen massiv beschleunigt werden.

Dr. Markus Oppel und seine Kollegen stehen stets vor der Herausforderung, ihre HPC-Infrastruktur den sich ständig ändernden Anforderungen der Forschung anzupassen. Dies bedeutet sowohl Hardware-Upgrades als auch die Anpassung ihrer Ansätze an neue wissenschaftliche Erkenntnisse und Technologien. Trotz dieser Herausforderungen bleibt Dr. Oppel optimistisch und sieht eine helle Zukunft für die Verbindung von Computational Chemistry und HPC.

Huemer Group ist seit über 10 Jahren der Digitalisierungspartner und versorgt das Institut mit entsprechenden IT-Lösungen, um diese Herausforderungen zu bewerkstelligen.

Speziell im HPC-Umfeld ist das Know How in Österreich sehr limitiert, gerade deshalb ist die Huemer Group sehr stolz auf die realisierten Projekte.

Über Institut für Theoretische Chemie der Universität Wien

Die Arbeitsgruppen am Institut für Theoretische Chemie der Universität Wien untersuchen mittels Computersimulationen die Eigenschaften von Substanzen und Materialien. Durch Hochgenaue Rechnungen mit Methoden der Quantenchemie als auch durch die Entwicklung von neuen Verfahren zur Simulation der Reaktionsdynamik wird versucht, ein grundlegendes Verständnis von chemischen Prozessen zu gewinnen. Ein weiterer Fokus liegt in der Modellierung der Struktur von Biopolymeren und ihrer Funktion in zellulären Netzwerken. Die am Institut entwickelten Algorithmen und Programme werden in der Regel als Open Source Programmpakete der Öffentlichkeit zur Verfügung gestellt.



Huemer Group GmbH

Leonard-Bernstein-Straße 10

A-1220 Wien

office@huemer-group.com