

PR-Nr. 0511-049

Gewinner des SC05-Awards 'HPC Analytics Challenge' machen ihre Entdeckungen mit Lösungen von SGI

SGIs Visualisierungs- und Computing-Systeme unterstützen mehrere der Preisträger der Supercomputing-Konferenz SC05

München, 30. Nov 2005 – Wie können sich Biomoleküle wie die DNS durch Protein-Poren bewegen? Lange waren Simulationsrechnungen, die Licht in diesen Prozess bringen sollten, viel zu kompliziert. Nun wurde auf der Supercomputing-Konferenz SC05 in Seattle erstmals ein Team britischer Wissenschaftler geehrt, die sich der Problematik mit einem breiten Fächer virtueller Verfahren und IT-Technologien nähern und dabei auf Visualisierungs- und Computing-Lösungen von SGI zurückgreifen. Mit ihrem Projekt 'Simulated Pore Interactive Computing Environment' - kurz SPICE - konnten die UK-Forscher beim Wettbewerb 'HPC Analytics Challenge' den ersten Platz belegen und bei diesem anspruchsvollen Award im Bereich der HighPerformance-Computing (HPC) gestützten Analyse die Auszeichnung als Gewinner entgegen nehmen.

Mit dem neuem Wettbewerb 'HPC Analytics Challenge' möchte die Branche ausgewählte Ansätze und kommerzielle Anwendungen ehren, bei denen zum Lösen komplexer Aufgabenstellungen aus der wirklichen Problemwelt besonders fortschrittliche Analyse-Techniken zum Einsatz kommen.

Dem weltweit organisierten, von Wissenschaftlern des *University College London* (UCL) geführten SPICE-Team gelang es, für den Translokationsvorgang eines Biomoleküls, das sich entlang der vertikalen Achse einer Protein-Pore bewegt, die mit dem Platzwechsel verbundene Änderung der Freien Energie zu berechnen. Translokationsprozesse von DNS, RNS und Polypeptiden simulieren zu können, mag der medizinischen Forschung eines Tages helfen, solche Aktivitäten zu steuern, was bei vielen Krankheiten und speziellen medizinischen Gegebenheiten zu neuen Behandlungsmethoden führen könnte.

Wechselwirkung 100,000er Atome - Routine in 20 Jahren

Der Ansatz, mit dem sich das SPICE-Team der Aufgabenstellung nähert, ist so arriviert, dass eine Lösung des Problems mit traditionellen Mitteln unmöglich ist. Das laufende Projekt erfordert komplette atomistische Simulationen, die auf der Ebene kleinster Materieeinheiten präzisen Aufschluss über molekulare und chemische Wechselwirkungen geben.

“Die Zeitskala, in der sich DNS-Molekül-Translokationen abspielen, liegt bei einigen Zig Mikrosekunden,” erklärt Professor Peter Coveney, der beim SPICE-Projekt einer der führenden Forscher und am UCL der Leiter des Zentrums für Computational Science ist. “Simulationen in solchen Zeitskalen durchzuführen, und dies mit Modellen, die 275,000 Atome umfangreich oder noch größer sind, ist schlichtweg unmöglich mit Standard-Ansätzen der Moleküldynamik. Selbst wenn man annimmt, dass die Rechnerleistung auch in Zukunft nach dem Moore'schen Gesetz zunimmt, sind wir immer noch einige Jahrzehnte von dem Tag entfernt, an dem diese Art von Simulation Routine sein wird.”



Um die Ziele des SPICE-Projekts zu verfolgen, nutzt das Team zwei **HPC-Grids** (das **TeraGrid** in den USA und den **National Grid Service** von Großbritannien) zusammen mit SGI®-Visualisierungs-Ressourcen, die am UCL untergebracht sind. Zentraler Baustein für das Visualisieren der Simulation ist ein SGI-System **Silicon Graphics Prism**(tm) mit 6 Intel®-Itanium®2-Prozessoren und 4 Graphik-Pipelines auf Basis von ATI®-FireGL(tm)-Prozessoren; ausgestattet mit der Software **OpenGL Vizserver**(tm) kann es auch entfernte Team-Mitglieder beim kollaborativen Arbeiten unterstützen, indem es ihnen erlaubt, die Simulationen von remote aus interaktiv zu manipulieren. Während der SC05 setzte das SPICE-Team zwei weitere Prism-Systeme ein, die am Stand der Universität von Manchester installiert waren. Andere SGI-Systeme, die im Zuge des SPICE-Projekts genutzt werden, sind Ressourcen des **CSAR** (Computer Services for Academic Research) in Manchester, wozu auch eine Mehrknoten-Installation aus **SGI®-Altix®**-HPC-Servern gehört; die Systeme sind über das optische Netzwerk **UKLight** verbunden, so dass das SPICE-Team auf die entfernten Grid- und Visualisierungs-Ressourcen mit hoher Geschwindigkeit zugreifen kann.

“Ohne Zugriff auf eine ausgefeilte Grid-Infrastruktur und auf hochleistungsfähige Visualisierungs-Ressourcen wäre es nicht möglich gewesen, dieses Forschungsvorhaben in Angriff zu nehmen,” erklärt Coveney. “Über unsere gesamte Arbeit hinweg hat SGIs Hardware und Software eine wesentliche Rolle gespielt, um unsere Anstrengungen zu einem derartigen Erfolg zu führen.”

Bei der Führung des SPICE-Teams kooperiert Coveney mit den Forschern Shantenu Jha und Matt Harvey. Das Trio arbeitet seinerseits zusammen mit Stephen Pickles vom UCL, Robin Pinning von der Universität von Manchester, Peter Clarke von der Universität von Edinburgh, Bruce Boghosian von der Tufts University, Charlie Catlett am TeraGrid, Charles Laughton von der Universität Nottingham, Rob Pennington am TeraGrid beim National Center for Supercomputing Applications (NCSA), Sergiu Sanielevici am Pittsburgh Supercomputing Center, Jennifer Schopf am Argonne National Lab sowie mit Richard Blake beim CCLRC Daresbury.

“In der Arbeit der Forscher wird eine spezielle inspirierende Genialität sichtbar – eine, die auf Kollaboration setzt, um die Grenzen aktueller Technologie zu überwinden und auf diesem Wege etwas möglich zu machen, was bisher weithin als unmöglich galt“, erklärt Tim Butchart, der bei SGI Geschäftsführer für UK ist und EMEA-weit das Marketing leitet. “Es freut uns, dass SGIs Visualisierungs- und Computing-Lösungen eine Schlüsselrolle beim Erfolg des SPICE-Teams spielen. Wir gratulieren herzlich zum Gewinn des ‘HPC Analytics Challenge’.”

Weitere SC05-Awards ... und das ‘Gelbe Trikot’ für SGI Altix

Mit den auf den beiden jährlich stattfindenden Supercomputing-Konferenzen (Sommer in Deutschland, zum Jahresende in den USA) überreichten Preisen honoriert die Branche innovative Leistungen von Teilnehmern und führenden Persönlichkeiten im HPC-Sektor. Der auf der SC05 in Seattle gekürte Wettbewerb ‘HPC Analytics Challenge’ reflektiert den steigenden Bedarf, mit großen Mengen von Daten, die bisher üblicherweise unberücksichtigt bleiben, nutzbar arbeiten zu können. Aus diesem Bedarf heraus sind im Zusammenspiel mit neuen Möglichkeiten auf den Feldern HPC, Bandbreite und Networking neue ausgeklügelte Methoden für Analyse und HighEnd-Visualisierung entstanden.



Die beiden Teams, die auf der SC05 Awards gewannen, wurden unter 21 Wettbewerbsteilnehmer ausgewählt. Neben dem SPICE-Team wurde auch eine Forschergruppe für ihr Projekt 'Real Time Change Detection and Alerts from Highway Traffic Data' ausgezeichnet.

Mehrere andere Teams erhielten auf der SC05 Anerkennung für ihre Arbeiten, die im Zusammenhang mit dem 'Columbia'-System der NASA, dem mit 10,240-Prozessoren bestückten SGI-Altix-Superrechner realisiert wurden. So gelang es einem der anderen fünf Finalisten am 'HPC Analytics Challenge', für den Columbia-Rechner ergänzend zu der enormen Computing-Leistung ein neues Visualisierungs-Tool zu schaffen, mit dem das effiziente Untersuchen großer, zeitlich veränderlicher Datensätze möglich wird. Auch in einer anderen Kategorie konnten zwei Teams einen ersten Platz erringen: Die Auszeichnung 'Best Technical Paper' ging an den Vortrag 'High Resolution Aerospace Applications using the NASA Columbia Supercomputer', von den Autoren Dimitri Mavriplis an der University of Wyoming, Michael Aftosmis vom NASA Ames Research Center und Marsha Berger vom Courant Institute.

Nicht zuletzt konnte die Serverfamilie SGI Altix Spitzenehrungen bei der 'Tour de HPCycles' entgegen nehmen. In diesem dem Radsport-Vorbild 'Tour de France' nachempfundenen Wettbewerb verlieh ein Stab von HPC-Endusern Trikots in einer ganzen Reihe von Kategorien. SGI Altix erhielt das begehrte Gelbe Trikot als bester 'Rundum bewerteter Supercomputer'.

Weitere Infos: Hans-Peter Scherm, SGI Fon 089-46108-221
Dr Gernot Schärmeli, gsiCom Fon 089-182209, gsicom@trans.net

SGI ist weltweit führender Anbieter von Produkten, Lösungen und Services für High-Performance-Computing (HPC), High-Performance-Visualisierung (HPV) und komplexes Daten-Management. Mit ihnen schaffen sich technisch und kreativ orientierte Kunden Wettbewerbsvorteile in Kernbereichen. Systeme und Kompetenz der Marke SGI® öffnen in herausforderndsten Feldern den Weg zu Innovationen und Erkenntnissen - egal ob beim Entwickeln von Autos und Flugzeugen, Erforschen von Medikamenten und Methoden der Gehirn-Chirurgie, beim Erschließen von Energiequellen, Voraussagen des Wetters, Übergang von analogem nach digitalem Rundfunk oder bei missionskritischen Anwendungen in der Verteidigung. SGI (Silicon Graphics Inc) hat den Hauptsitz in Mountain View, Kalifornien. (sgi.com)

