Názov výsledku: Jednotná brána pre nanotechnologické simulácie k vysokovýkonnému a Gridovému prostrediu
Anglicky názov výsledku: Unified nanoscale gateway to HPC and Grid environments
Číslo a typ projektu: EGI-InSPIRE - EU FP7-261323 RI projekt: Integrovaná udržateľná paneurópska infraštruktúra pre vedu v Európe (2010-2014)
Autori: Giang NGUYEN, Ladislav HLUCHÝ, Jaroslav TÓBIK, Viera ŠIPKOVÁ, Miroslav DOBRUCKÝ, Ján ASTALOŠ, Viet TRAN, Róbert ANDOK
Hlavní odberatelia: Elektrotechnický ústav SAV, Oddelenie elektrónovej litografie ÚISAV, Fyzikálny ústav SAV

Rovnako ako mnoho ďalších odborov, výskum nanotechnológie vyžaduje výpočtovú aj infraštruktúrnu podporu, najmä pre modelovanie a simulácie. Vysokovýkonné klastrové a gridové počítanie poskytuje prostredie pre simuláciu reálnych a výpočtovo náročných javov na rôznych úrovniach. Najbežnejší spôsob, ako sa pristupuje k vysokovýkonným zdrojom, je SSH pripojenie, ktoré je síce bezpečné, ale pre používateľa nie je celkom pohodlné. Z tohto dôvodu vyvíjame experimentálnu vedeckú bránu (gateway) umožňujúcu prístup k vysokovýkonnej výpočtovej kapacite klastra na ÚI SAV, ktorý je zároveň súčasťou európskej gridovej infraštruktúry. Vedecká brána poskytuje používateľsky orientované rozhranie pre nanotechnologické simulácie s možnosťou jeho prispôsobenia aj pre iné zložité aplikácie.

Hlavné scientometrické výstupy:

- NGUYEN, Thu Giang - HLUCHÝ, Ladislav - TÓBIK, Jaroslav - ŠIPKOVÁ, Viera - DOBRUCKÝ, Miroslav - ASTALOŠ, Ján - TRAN, Dinh Viet - ANDOK, Róbert. Unified nanoscale gateway to HPC and Grid environments. In The 5th symposium on information and communication technology : SOICT 2014, ACM, December 2014, p. 85-91, DOI 10.1145/2676585.2676591. ISBN 978-1-4503-2930-9. AEC30
- TRAN, Dinh Viet - ANDOK, Róbert - HLUCHÝ, Ladislav - NGUYEN, Thu Giang - DOBRUCKÝ, Miroslav. High performance computing for nanoscale simulations. In EGI Community Forum 2014 : Session: Porting new applications to EGI, track: Porting applications to the grid and cloud platform. - 2014, contribution ID: 98. AFC01