



مرکز محاسبات سریع

High-Performance Computational Center



دانشکده علوم پایه

مقدمه:

امروزه با پیشرفت سریع علوم، فعالیت‌های مبتنی بر محاسبات کامپیوتری بیش از پیش روشن شده است و با توجه به رشد فزاینده سیستم‌های کامپیوتری و نرم افزارهای جامع، مدل‌سازی فرآیندهای پیچیده فیزیکی، مرقون به صرفه‌ترین راه ممکن می‌باشد. این امر با نظر به هزینه‌های بسیار بالای آزمایشات تجربی و بعضاً غیر قابل انجام بودن آنها جذاب‌تر می‌شود.

در شرایطی که تجربه و امکانات زیادی برای انجام آزمایش‌های علمی در مسائل مختلف پیچیده مهندسی وجود نداشته باشد، استفاده از مدل‌سازی و حل عددی این‌گونه مسایل در برخی موارد تنها راه حل ممکن می‌باشد. ابداع و استفاده از نرم افزارهای مکانیک محاسباتی جهت رفع نیازهای دانشگاه‌ها و سایر مراکز فنی و صنعتی کشور، مهمترین هدف مرکز محاسبات سریع به‌شمار می‌رود. به همین منظور علاوه بر تهیه و تامین نرم افزارها، سخت افزار مورد نیاز از قبیل سیستم کامپیوترهای موازی طراحی، ساخته و به‌کار گرفته می‌شود.

مرکز محاسبات دانشکده علوم پایه از تابستان 1390 با دو دستگاه کامپیوتر موازی شروع به کار نمود. این مرکز هم‌اکنون، دارای 8 دستگاه کامپیوتر محاسباتی شامل 46 هسته محاسباتی با حافظه 132 GB است که قابلیت انجام محاسباتی به صورت موازی را دارا می‌باشد. در حال حاضر انواع برنامه‌های شبیه‌سازی مولکولی و مکانیک کوانتومی در این مرکز موجود و قابل بهره‌برداری است. این دو نوع نرم افزار دارای قابلیت‌های گوناگون برای حل مسائل مختلف و مدل‌سازی دقیق بیشتر پدیده‌های فیزیکی و شیمیایی می‌باشد.



کاربران برای اجرای مسائل مورد نیاز خود بر روی سیستم موازی کافیتست که مسائل مربوطه را در هر یک از نرم افزارهای فوق، به صورت سری مدل نموده و به مرکز ارسال نمایند تا محاسبات مربوطه بر روی آن انجام شود.

برخی از تجهیزات سخت‌افزاری و نرم‌افزاری:

امکانات موجود این مرکز عبارتند از:

- 1- امکانات نرم‌افزاری شامل: سیستم عامل ویندوز لینوکس، کتابخانه‌های PVM و PMI به زبان های ++C و Fortran
- 2- امکانات سخت‌افزاری شامل: منبع تغذیه مناسب USP، خنک‌کاری سیستم سرمایش مناسب جهت سوپر کامپیوترها.

پروژه‌ها و طرح‌های پژوهشی انجام شده در آزمایشگاه:

برخی از فعالیت‌های تحقیقاتی و اجرایی مرکز محاسبات عبارتند از:

- 1- شبیه‌سازی انواع نانولوله‌های کربنی و بررسی خواص الکترونی آنها
- 2- بررسی تغییرات خواص الکترونی گرافن در اثر دوپ کردن عناصر مختلف
- 3- شبیه‌سازی انواع فلرنه‌های کربنی و غیر کربنی
- 4- شبیه‌سازی الکترودهای پیل‌های سوختی

افتخارات و پژوهش‌ها:

- چاپ بیش از 52 مقاله ISI و علمی پژوهشی حاصل فعالیت‌های پژوهشی
- ارائه بیش از 25 مقاله در کنفرانس‌های ملی و بین‌المللی حاصل فعالیت‌های پژوهشی
- دریافت 2 لوح تقدیر و تندیس در نتیجه کسب مقام برتر در رویدادهای مختلف (دریافت لوح پژوهشگر برتر، پایان‌نامه برتر تحصیلات تکمیلی، مقاله برتر و ...) توسط دانش‌جویان و دانش‌آموختگان

