

Theoretische Analyse der Lactid- Polymerisation in einer virtualisierten Grid-Umgebung

André Brinkmann, Sonja Herres-Pawlis

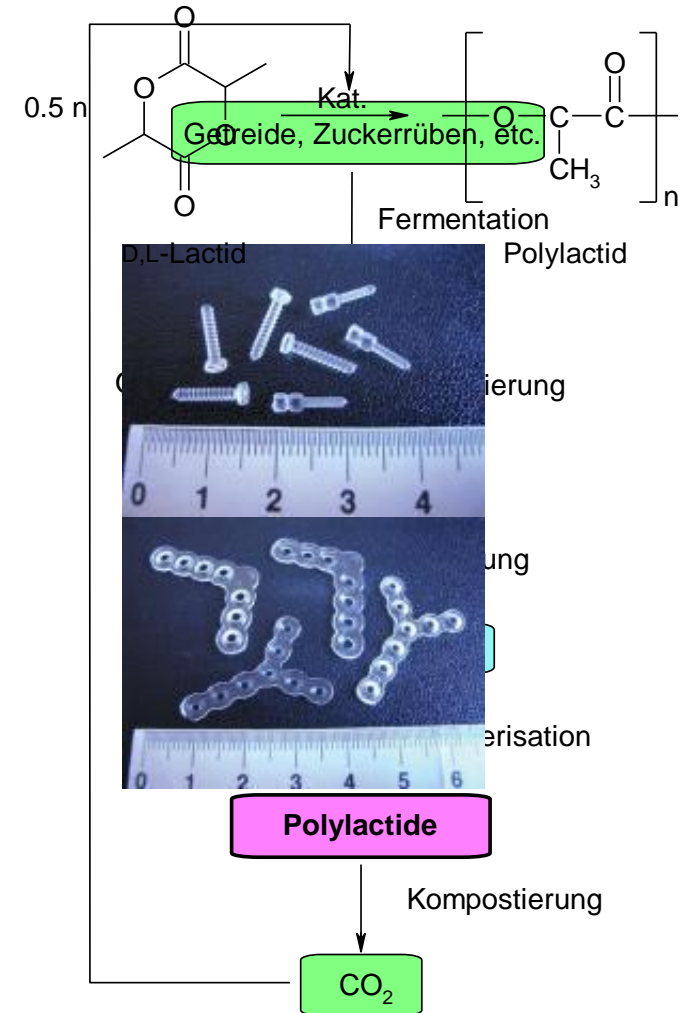
05. März 2009

Agenda

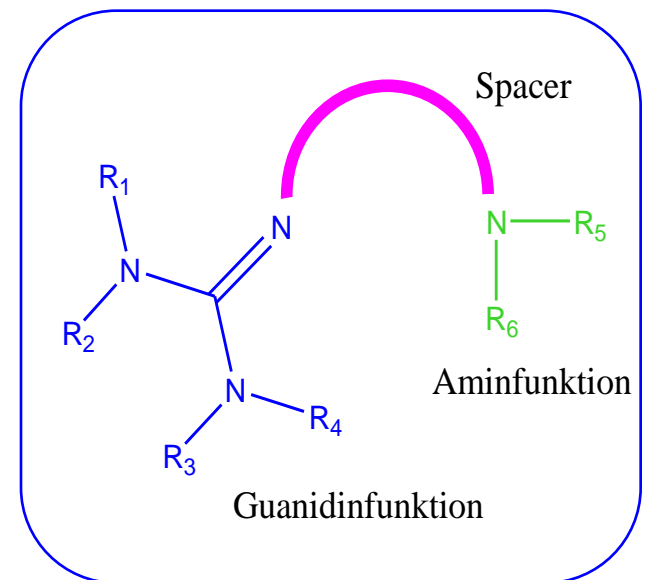
- Grundlagen Polylactide
- Anforderungsanalyse
- Workflows in chemischen Anwendungen
- Virtualisierung zur Steigerung der Flexibilität

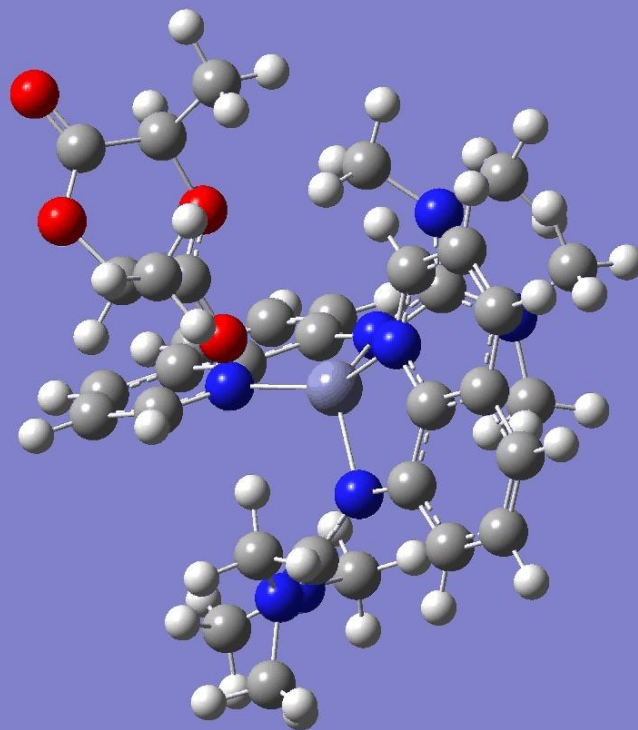
Bedeutung von Polylactid

- Ringöffnungspolymerisation (ROP) von Lactid zu Polylactid unter Verwendung metallhaltiger Katalysatoren (größentechnisch bisher SnOct_2)
- Vielseitige Verwendungsmöglichkeiten (von Verpackungsmaterial bis zu medizinischen und pharmazeutischen Anwendungen)
- Mit bisherigen Verfahren nicht konkurrenzfähig mit petrochemisch-basierten Kunststoffen → als Spezialmaterial, aber kaum breiter Masseneinsatz
- Biologisch abbaubares Polymer aus nachwachsenden Rohstoffen → CO_2 emissionsneutral



- Reaktionsbedingungen:
 - Bulkpolymerisation
 - Lösungspolymerisation
 - Temperatur
 - Reaktionszeit
 - Monomer-Initiator-Verhältnis
- Komplex:
 - Gegenion (Chlorid, Acetat, Triflat...)
- Ligandensystem:
 - Guanidingruppe
 - Aminogruppe
 - Spacereinheit
- Computer-gestütztes Liganden- und Katalysatordesign





Produced with VideoMach
www.videomach.com

Anforderungsanalyse

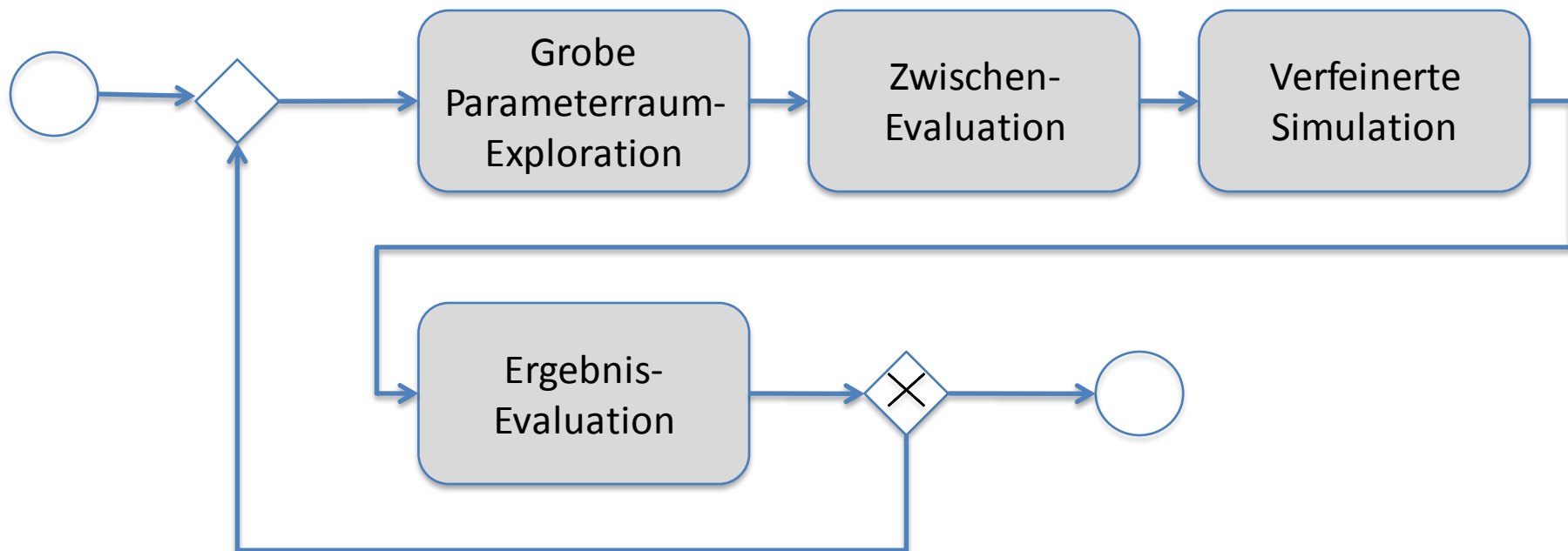
- Größe des Parameterraums erfordert Vielzahl von Experimenten
 - Nicht alle Experimente müssen mit gleicher Genauigkeit durchgeführt werden
 - Nimm alle verfügbare Rechenzeit!
- Laufzeit einzelner Experimente nur während des Experimentes abschätzbar
 - Experimente müssen jedoch zu gegebener Deadline beendet sein
- Starten und Auswerten von Experimenten mit hohem manuellem Aufwand verbunden
 - Automatische Selektion von geeigneten Kandidaten für weitere Experimente zeitintensiv

Grundansatz

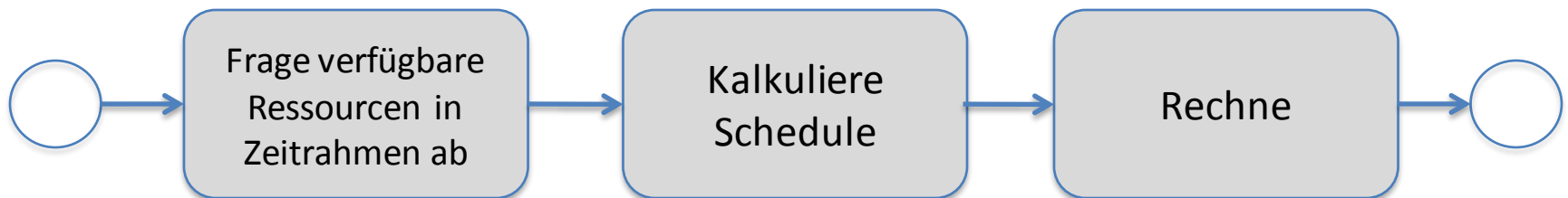
- Nutzung von Workflow-Prozesse zur weitgehend automatisierten Abarbeitung der Arbeitsabläufe
- Nutzung von Virtualisierung zur Steigerung der Flexibilität innerhalb der Arbeitsabläufe

Workflow-Bestandteile

- Grundablauf kann auf wenige Operationen abgebildet werden

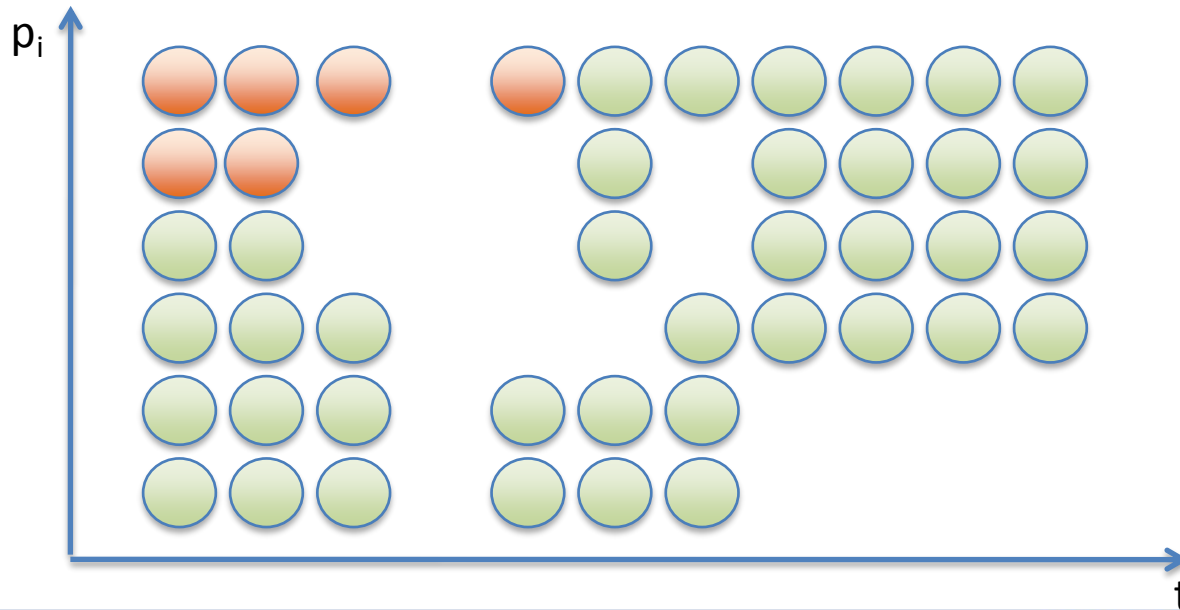


- Chemiker sind gierig
 - Größe der Anforderung hängt von Verfügbarkeit der Ressourcen ab
 - Aushandlung möglicher Ressourcen für erste Phase vor der eigentlichen Anfrage



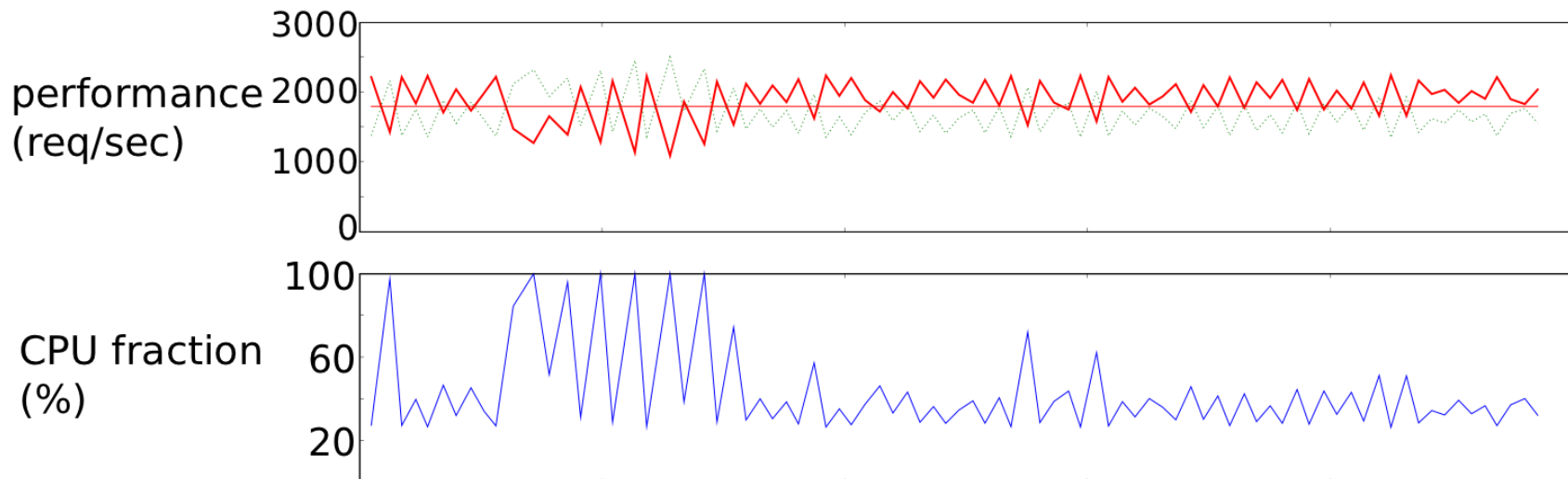
Ressourcen-Profil

- Auswahl des Programms hängt von Verfügbarkeit von Ressourcen ab
- Verfügbare Ressourcen müssen für den Rechenzeitraum nicht konstant sein
 - Aufgaben müssen zwischen Knoten verschoben werden → Virtualisierung als Basis



Rechenzeiten

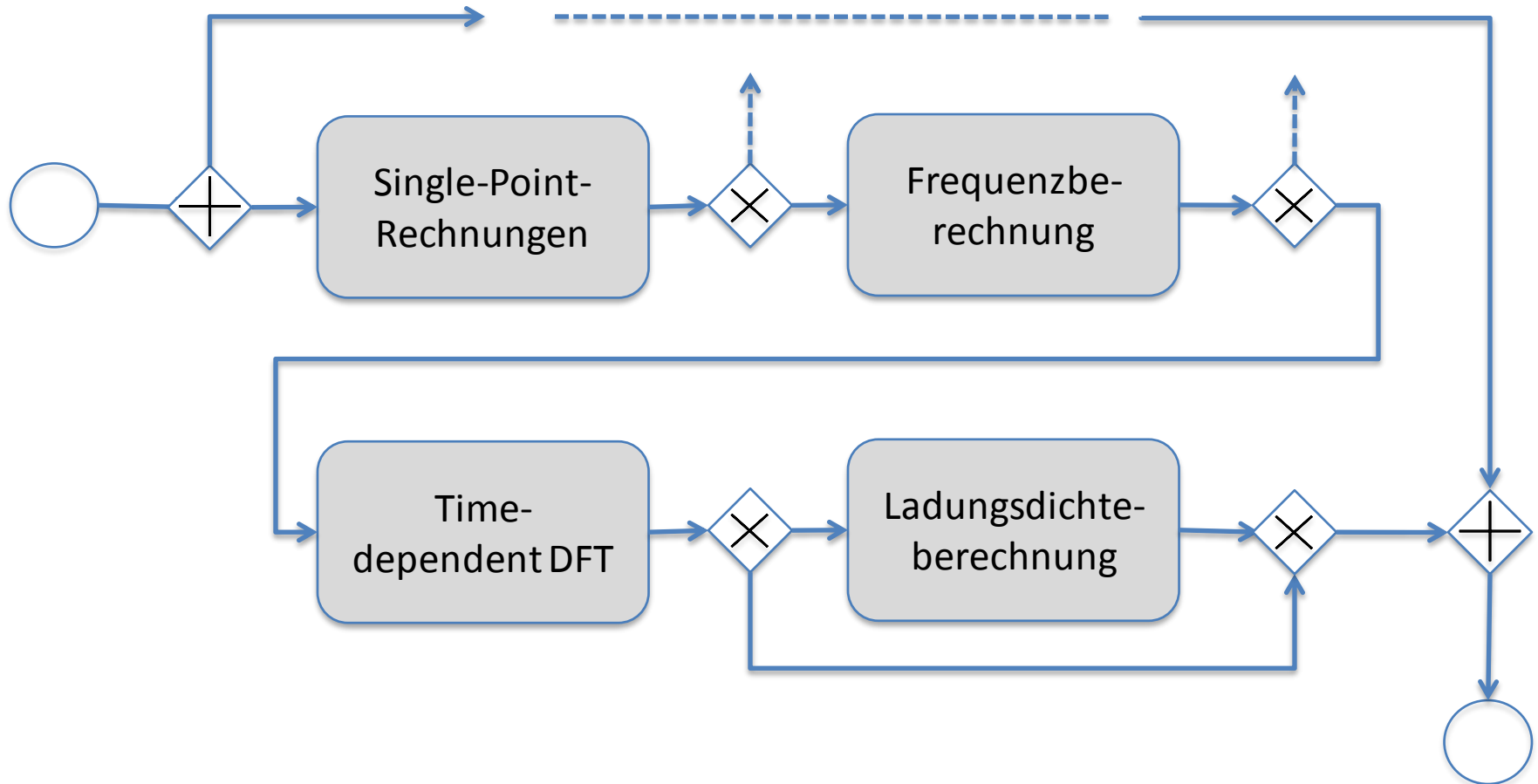
- Kleine Änderungen der Parameter können starke Auswirkungen auf notwendige Rechenzeit haben
- Überprüfung des Fortschrittes nach jedem Schritt notwendig
 - Zuordnung von mehr/weniger Ressourcen auf Knoten
 - Zuordnung von mehr Knoten auf einen Prozess
 - Verschiebung zwischen Knoten



Zwischen-Evaluation

- Evaluation der primären Ergebnisse erfordert manuelle Behandlung innerhalb des Workflows
- Ergebnisse der Zwischen-Evaluation bestimmen Ressourcen-Anforderungen der Hauptrechnung
- Kommunikation zwischen RMS und Workflow notwendig

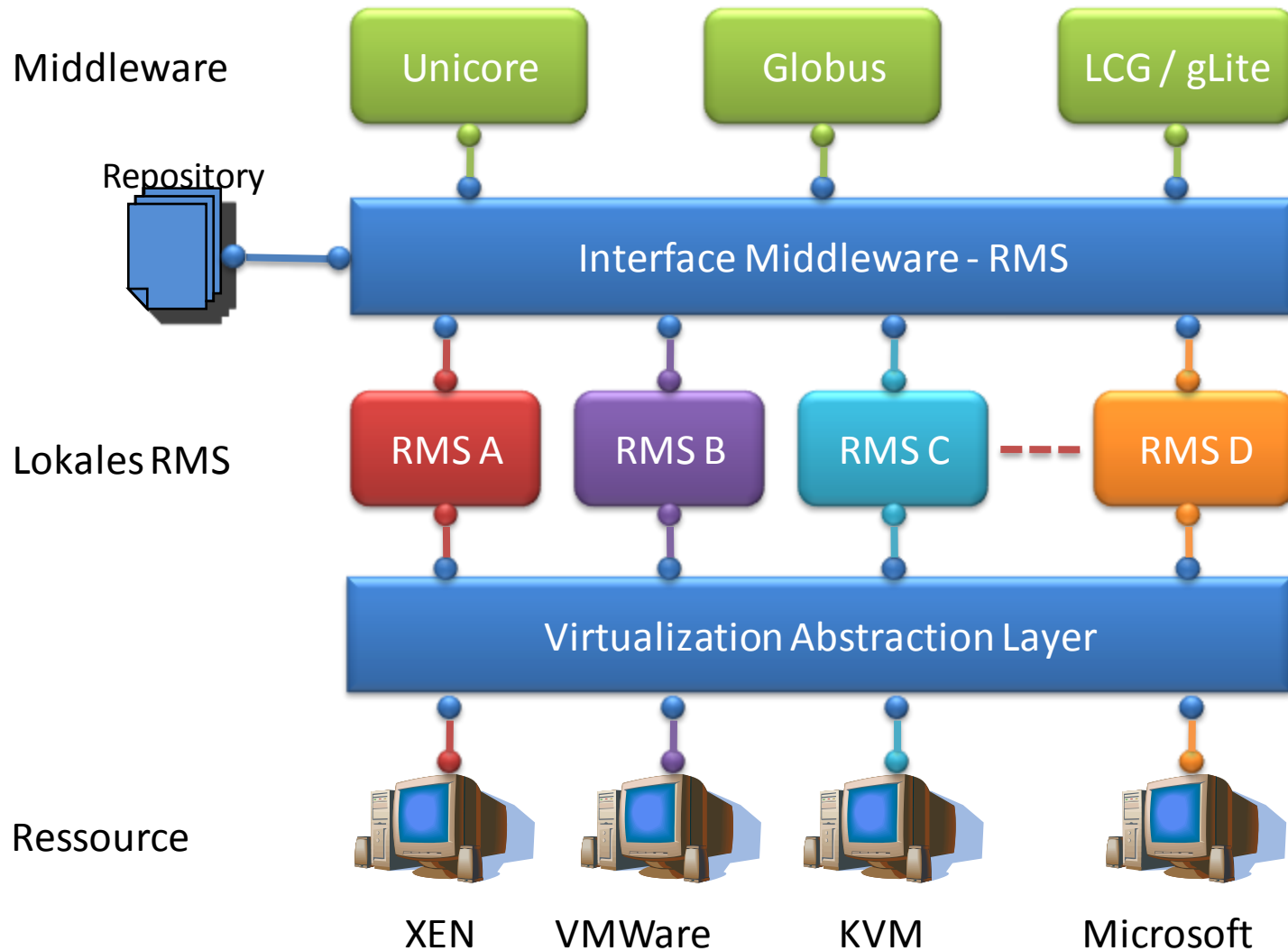
Verfeinerte Simulation



Anforderungen an RMS

- Zur effizienten Unterstützung muss RMS
 - Dynamisch mit dem Workflow-System verhandeln können
 - VPNs für einzelne Workflow-Schritte und zur Kopplung der Schritte bereitstellen
 - Ressourcen
 - Checkpointen
 - Migrieren
 - Vergrößern und Verkleinern
- können

Virtualisierung von HPC-Systemen



PC² homepage

<http://www.upb.de/pc2>

