

ICM: potencjał współpracy z Politechniką Warszawską

Marek Niezgódka

marekn@icm.edu.pl



UNIWERSYTET WARSZAWSKI
Interdyscyplinarne Centrum Modelowania
Matematycznego i Komputerowego
www.icm.edu.pl

Dotychczasowa współpraca ICM z Politechniką Warszawską (przykłady)

- × Szereg wspólnych projektów i inicjatyw z Wydziałem Inżynierii Materiałowej
- × Projekt strategiczny SyNaT z Wydziałem Elektroniki i Technik Informacyjnych
- × Wspólne prowadzenie warszawskiego centrum KDM
- × Udział przedstawicieli Wydziału IChiP w programie Graduate College z Uniwersytetem w Heidelbergu

O ICM



UNIWERSYTET WARSZAWSKI
Interdyscyplinarne Centrum Modelowania
Matematycznego i Komputerowego
www.icm.edu.pl

ICM, kilka faktów:

- Zał. 1993, centrum infrastruktury KDM: zasięg - Warszawa i kraj
- 1996: Biblioteka Wirtualna (WBN)
- Badania: nauki obliczeniowe
- Inicjatywy i realizacje ICM:
 - Krajowa infrastruktura naukowego oprogramowania aplikacyjnego (1996)
 - Krajowy program w3cache (1996)
 - Krajowa infrastruktura udostępniania danych naukowych (1997)
 - Otwarty system numerycznych prognoz pogody (1997)
 - Klaster wiodących laboratoriów modelowania i eksperymentu (2005), rdzeń uniwersyteckiego centrum nowych technologii (2012)

ale także, m.in.

- coroczne Festiwale Nauki (od 1997)



ICM: realizacje, c.d.

- Infrastruktura informacji naukowej: system INFONA (w projekcie SyNaT, w partnerstwie m.in. z PW)
- Polska Bibliografia Naukowa i Polski Indeks Cytowań (przekazane do OPI)
- EU: DRIVER i OpenAIRE – otwarteinfrastruktury repozytoryjne
- EU: EuDML (European Digital Mathematics Library)
- EU: UNICORE – infrastruktura gridu (funkcjonalności bezpieczeństwa)

ICM: ewolucja

- Centrum nauk obliczeniowych(1993+):
 - Modelowanie matematyczne
 - Podstawy: fizyka, chemia, biologia, ...
 - Serwisy Komputerów Dużej Mocy (*KDM, HPC*)
- Promocja i wdrażanie modeli Otwartej Nauki (1996+)
Polska i Europa:
 - software
 - Publikowanie i komunikacja naukowa
 - Dane badawcze
 - e-infrastruktury
- OCEAN: centrum kompetencji w obszarze *Data Science* i *data-driven sciences* (2013+)

Zasada: **INTERDYSCYPLINARNOŚĆ**



ICM: Centrum Komputerów Dużej Moc



UNIVERSITY OF WARSAW
Interdisciplinary Centre for Mathematical
and Computational Modelling
www.icm.edu.pl

- Centrum KDM ICM jest jednym z głównych ośrodków tego typu w Polsce
- **Misja:** udostępnianie zasobów obliczeniowych i pamięciowych, wraz z pomocą techniczną i merytoryczną dla całego środowiska akademickiego w Polsce
- Zasoby udostępniane w formule grantów obliczeniowych oraz poprzez ogólnopolskie serwisy gridowe

Infrastruktura komputerowa ICM

Zasoby obliczeniowe:

- Łącznie 500+ Tflop/s
- Różne architektury:
 - klastry x86
HP, Huawei
 - Systemy Masywnie Równoległe:
IBM Blue Gene/Q, IBM Blue Gene/P
IBM Power 775
 - Systemy akcelerowane GPU
- Węzeł obliczeniowy - podstawowy element zasobu obliczeniowego:
 - Kilkanaście do kilkudziesięciu rdzeni procesorowych
 - Pamięć operacyjna: od kilkudziesięciu GB do kilku TB
 - Interfejsy do komunikacji z innymi węzłami i danymi na dysku
- Moc superkomputerów wynika z super wydajnych połączeń międzywęzłowych
- Infrastruktura przechowywania wielkich danych

Zasoby archiwizacyjne: serwery i macierze dyskowe

- 5Pb+ macierzy dyskowych

Przykład: komputer IBM Blue Gene/Q (*Nostramo*)

Architecture: IBM Blue Gene/Q

Number of cores: 16384

Memory: 16 TB

CPU: PowerPC A2 @ 1.6GHz

Interconnect: 5D Torus

Binary format: big-endian

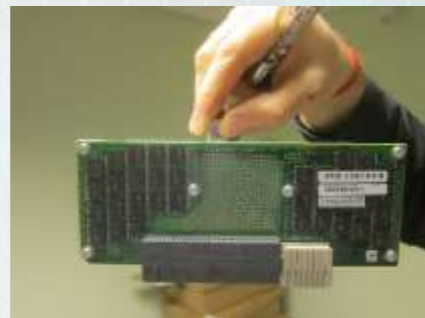
Cores per node: 16 cores (64 threads)

Memory per node: 16 GB

Storage: GPFS

OS: BG/Q Linux

Batch system: Slurm



- Centrum Komputerów Dużej Mocy to nie tylko sprzęt komputerowy
- Siłą Centrum jest współistnienie następujących komponentów:
 - **kompetencja merytoryczna** - konsultacje specjalistów z wybranych dziedzin nauk obliczeniowych
 - **aplikacje** - oprogramowanie naukowe, zarówno płatne jak i darmowe
 - **obsługa grantów** - pomoc techniczna i integracja środowiska naukowców prowadzących wielkoskalowe obliczenia
 - **pomoc programistyczna** - optymalizacja oprogramowania i współpraca przy tworzeniu algorytmów
 - **wspólne projekty** - realizacja projektów z silnym wsparciem programistyczno - algorytmicznym centrum KDM
 - **infrastruktura** - prowadzenie masywnych obliczeń i przechowywanie dużych danych

KDM: Ogólne zasady dostępu i realizacji projektów

12

- **Granty obliczeniowe** – przydzielane na podstawie oceny wniosku (www ICM)
- **Systemy obliczeniowe i zasoby dyskowe – udostępniane sieciowo:** praca (logowanie, kopiowanie) z komputerów użytkownika
- **Informacje** o użytkowaniu i aktualności dotyczące systemów – wyświetlane przy logowaniu
- **Obliczenia monitorowane** – czas CPU zliczany dla zadania/użytkownika/projektu
- **Wsparcie dla użytkowników:** pomoc@icm.edu.pl
- **Wszystkie obliczenia na systemach obliczeniowych ICM**
- prowadzone w ramach systemów kolejkowych



- UNICORE – Seamless Access to the Distributed Computing Resources
- Middleware wspierane przez PL-Grid, EGI, PRACE
 - Open Source, rozwijane od 1997
 - ICM odpowiada za infrastrukturę bezpieczeństwa
 - System AAI dla gridów i chmur
 - Wykorzystywany w PL-Grid, wdrażany w innych projektach (Human Brain Project, XSEED, EuDAT, PL-Grid, EGI...)
- UNICORE w praktyce:
 - Dostępne we wszystkich centrach w Polsce i szeroko w Europie
- Narzędzia dostępne:
 - Klient graficzny oparty o Eclipse
 - UNICORE Portal: szybkie tworzenie dedykowanych rozwiązań

- **Data center:**
 - Kolokacja serwerów i hosting
 - Systemy przechowywania danych
 - Maszyny wirtualne
- **Kadra tworząca, rozwijająca i utrzymująca**
 - Systemy elektroenergetyczne, klimatyzacyjne
 - Systemy zabezpieczeń technicznych
 - Systemy LAN i sieci komputerowe
 - Usługi teleinformatyczne
- **Sieci komputerowe:**
 - Własna sieć optyczna
 - Sieć połączeń wysokiej wydajności
 - Tranzyt międzysieciowy oraz wymiana ruchu IP
 - Laboratoria szkoleniowe

- **Sieć Pionier:**

- Dostęp do Internetu
- Dostęp do innych jednostek w sieci PIONIER
- Dostęp do usług federacyjnych i chmurowych (MAN-HA)
- Połączenie z europejską sieć GÉANT

- **Usługi projektu Platon:**

- U1 – Usługi wideokonferencji
- U2 – Dostęp do sieci eduroam (wifi edukacyjne)
- U3 – Pośrednictwo w usługach aplikacyjnych
- U4 – Usługi archiwizacji
- U5 – Usługi akademickiej telewizji

Oprogramowanie naukowe w ICM

- Udostępniany szereg pakietów oprogramowania naukowego:
 - koordynator pięciu licencji krajowych: Accelrys, SYBYL-X, Schrodinger, Gaussian, Ansys Fluent
 - udział w licencjach krajowych koordynowanych przez inne ośrodki, m.in. Matlab, Mathematica, Abaqus
 - naukowe oprogramowanie akademickie, m.in. AMBER, Charmm, Octave
- Wybrane dziedziny obejmowane przez oprogramowanie w Centrum KDM:
 - projektowanie materiałowe
 - ośrodki ciągłe, przepływy
 - modelowanie biomolekularne i analizy bioinformatyczne
 - analiza danych
 - chemia kwantowa
 - neurobiologia
 - wizualizacja
 - uczenie maszynowe
 - inne ...



GAMMESS



UNIVERSITY OF WARSAW
Interdisciplinary Centre for Mathematical
and Computational Modelling
www.icm.edu.pl

- **Wirtualna Biblioteka Nauki:**

- Zasoby światowej literatury naukowej:
 - Kolekcje wydawnicze czasopism (ok. 15 tys. tytułów)
 - Kolekcje książek
- Licencja otwartego publikowania (Springer Open Choice)
- Zasoby bibliograficzne i bibliometryczne

- **Platforma Otwartej Nauki:**

- Polskie czasopisma naukowe:
 - Ok. 1300 tytułów – metadane
 - Ok. 550 tytułów – pełne teksty
- Polskie bazy bibliograficzne
- Repozytorium Otwartej Nauk
- Książki naukowe (polskie)

ICM: projekt i centrum OCEAN



OCEAN: Centrum Danych, ich Analizy i Modelowania Obliczeniowego

Infrastruktura:

- Zdelokalizowane centrum danych (2 odległe lokalizacje)
- Systemy przechowywania danych
- Systemy krytycznego przetwarzania i analityki dużych danych (*krytyczne czasowo zastosowania*)
- Ekstremalne obliczenia (*capability computing*)

Koncepcja:

- Centrum nauk o danych i serwisów budowanych na danych
- Dualna struktura:
 - profil zorientowany badawczo
 - infrastruktura serwisów rządowych

ICM: zintegrowana koncepcja OCEANu

- Rozproszone lokalizacje:
 - Obecne centrum komputerowe – przyszła funkcja back-up’owa (2016)
 - Nowa siedziba:
 - W budowie
 - Operacje: Q1, 2016
 - Powierzchnia całkowita: 6000+ m
 - Zasilanie: 4 MW (zaplanowane 10 MW)
 - Konstrukcja efektywna energetycznie
 - Parametry:
 - Przechowywanie danych: początkowo ~ 40 PB systemów macierzy dyskowych
 - HP Analityka Danych: ~ 1 TeraTeps
 - Systemy obliczeniowe: ~ 2-3 Pflops/s



Centrum Kompetencji: Otwarte Centrum Danych i ich Analiz



UNIVERSITY OF WARSAW
Interdisciplinary Centre for Mathematical
and Computational Modelling
www.icm.edu.pl

OCEAN: program

- Krajowe infrastruktury danych:
 - Nauka: zintegrowana platforma INFONA
 - Administracja rządowa: repozytorium danych publicznych CRIP
- Wysoko wydajna (*HighPerformance*) analityka danych:
 - Wielkoskalowe zbiory danych
 - Krytyczne czasowo niezawodne serwisy
 - Rozwój specjalizowanych rozwiązań i infrastruktury dla potrzeb analityki dużych danych
- Obliczenia krytyczne (*capability computing*):
 - Zastosowania krytyczne czasowo
 - Obliczenia bazujące na danych
 - Tworzenie specjalizowanych rozwiązań

OCEAN: podstawowe obszary rozwiązań i serwisów

- Wielkie sieci operacyjne (interaktywne ustrukturyzowane populacje)
- Aplikacje:
 - Środowisko naturalne (pogoda, zanieczyszczenia, zagrożenia)
 - Energia (inteligentne sieci energetyczne - *smart grids*)
 - Transport (lotnictwo i formy naziemne)
 - Logistyka (serwisy dostawcze)
 - Opieka zdrowotna i medycyna precyzyjna (spersonalizowana), w tym biobanki cyfrowe
- Administracja publiczna:
 - CRIP (Centralne Repozytorium Informacji Publicznej)
 - Inteligentne miasto (Warszawa)
- Procesy społeczne związane z nowymi technologiami i cyfrową transformacją społeczną

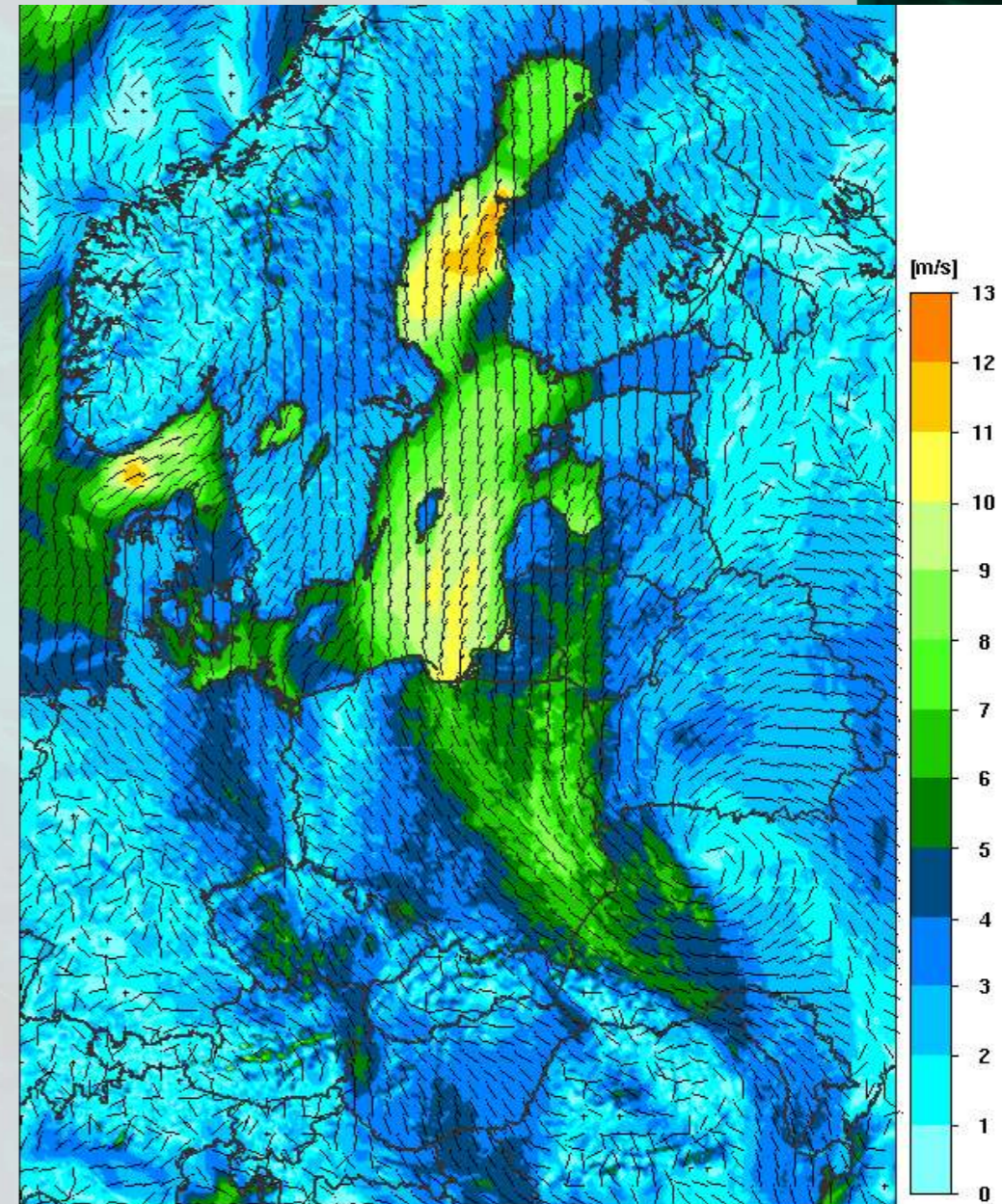
OCEAN: wybrane obszary referencyjne



Numeryczne prognozowanie pogody i serwisy pochodne (meteo.pl)

25

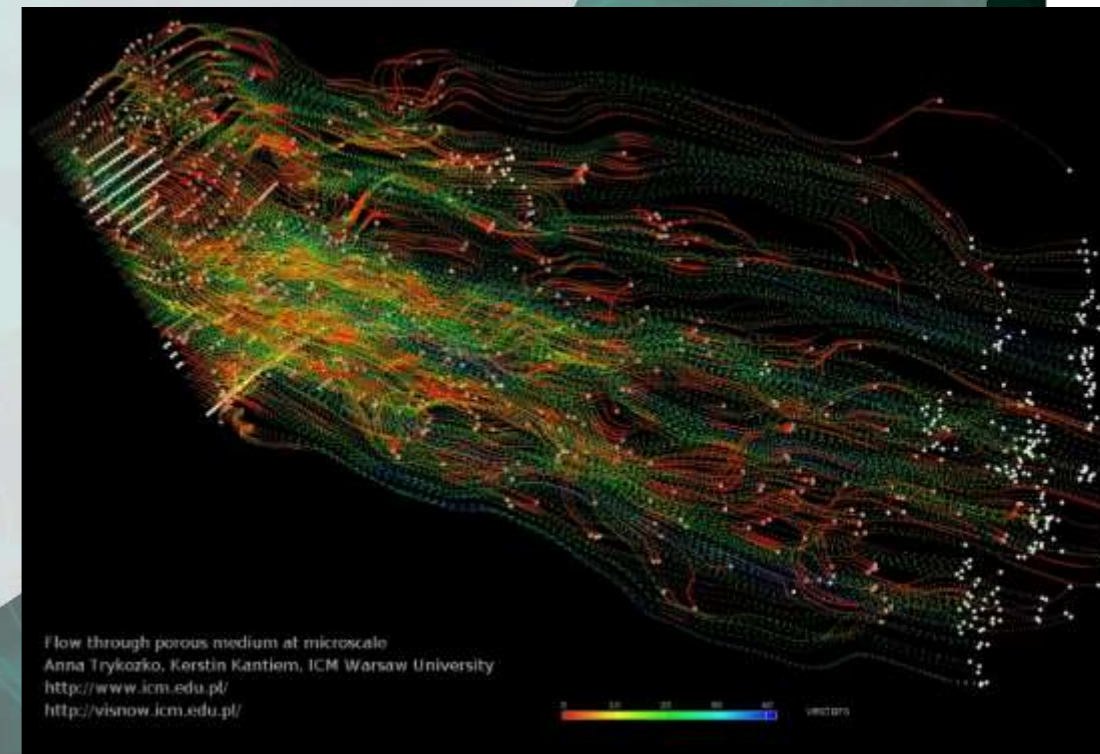
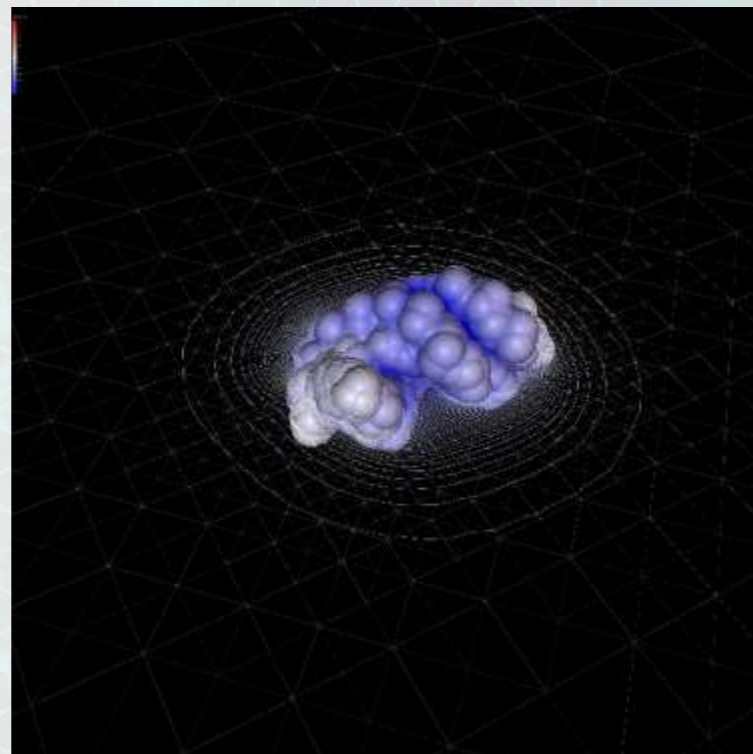
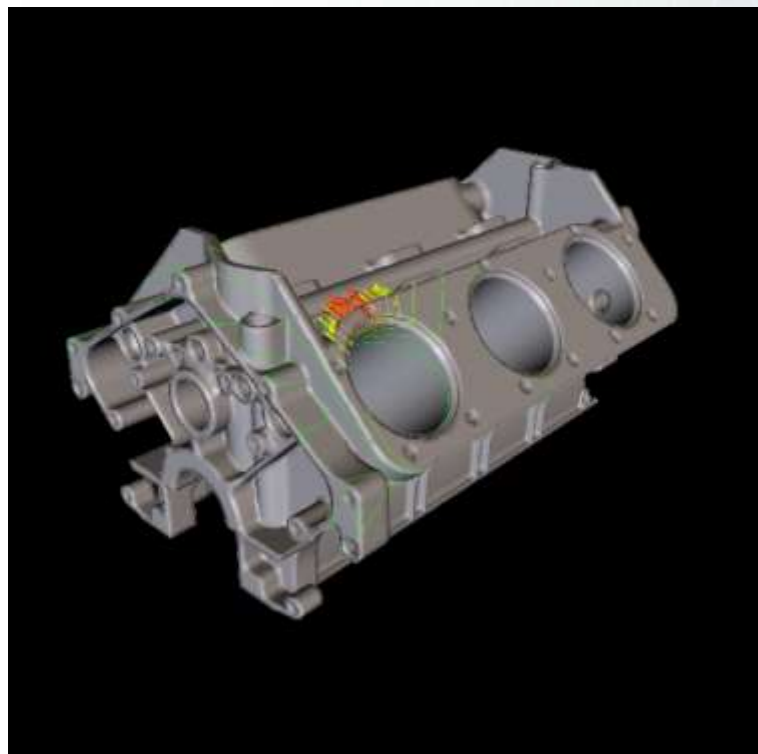
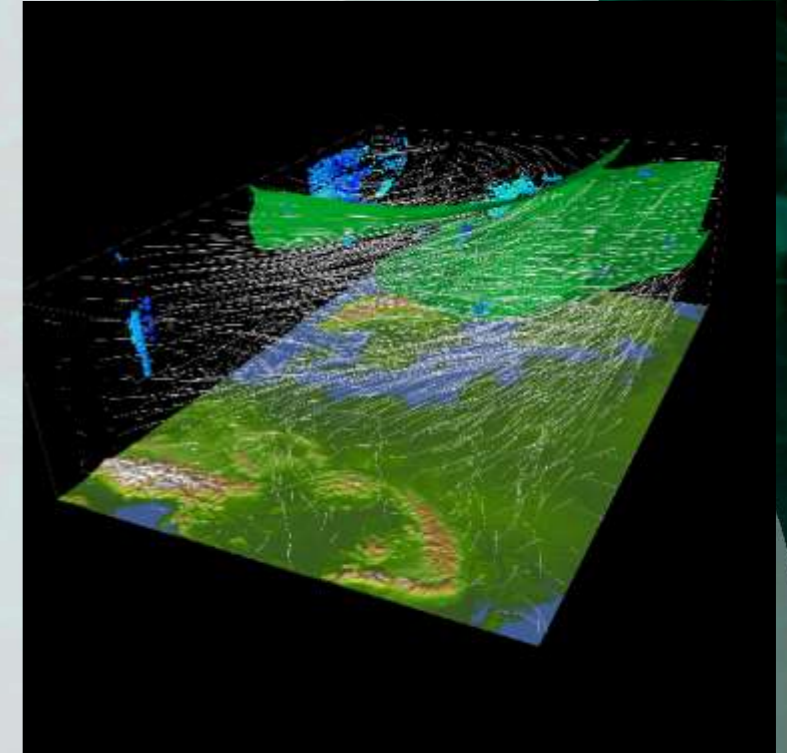
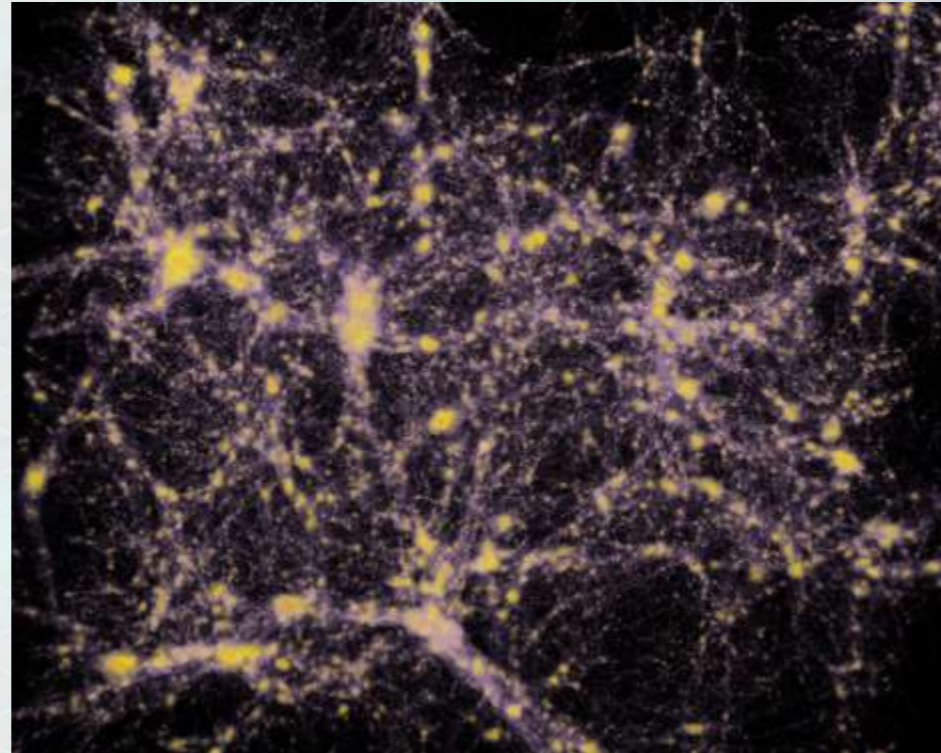
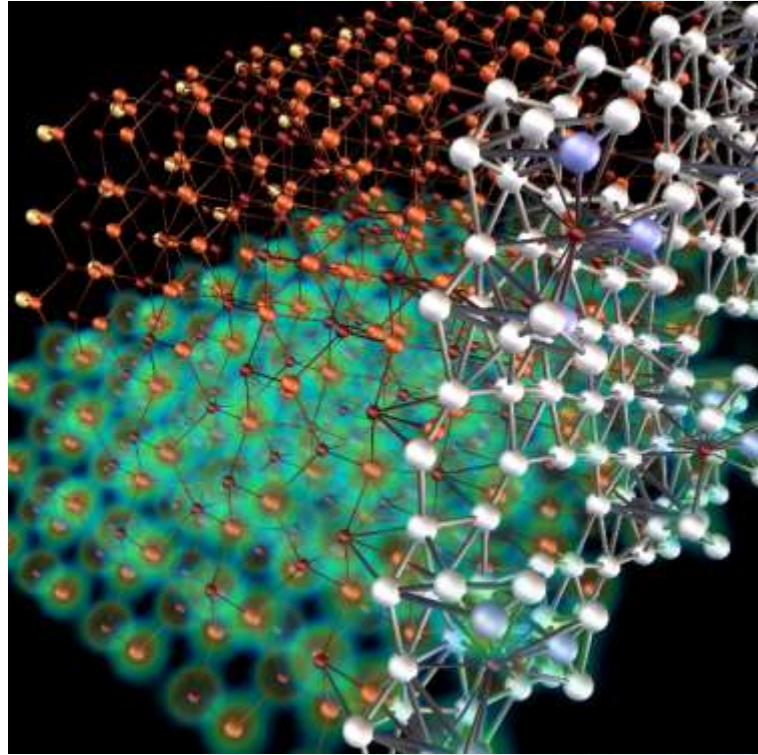
- Wielomodelowe wielosiatkowe procesy
- Docelowa rozdzielczość pozioma 1km
- Rozdzielczość pionowa: 70+ warstw
- **IBM Power 775** – 5x szybciej niż klaster x86
- **Technikalia:**
 - 4 przebiegi dobowe
 - 24 węzły obliczeniowe, 768 Power7 cores
 - approx. 20' czas zegarowy na przebieg
- meteo.pl
- Serwisy:
 - Systemy ostrzegania o zagrożeniach
 - Sektor energii
 - Transport i logistyka
 - Rolnictwo, leśnictwo, ...
- R&D:
 - Inteligentne gridy energetyczne
 - Zarządzanie przestrzenią powietrzną
 - Zagrożenia naturalne
 - Precyzyjne rolnictwo





VISNOW

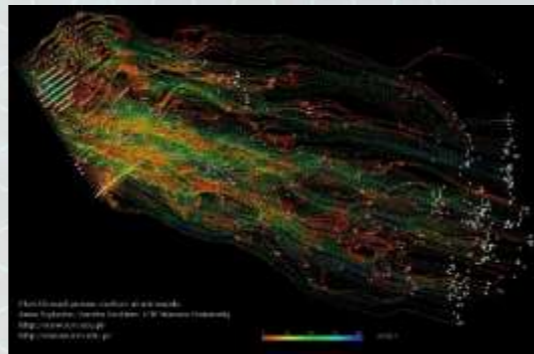
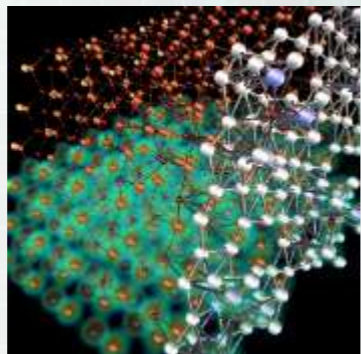
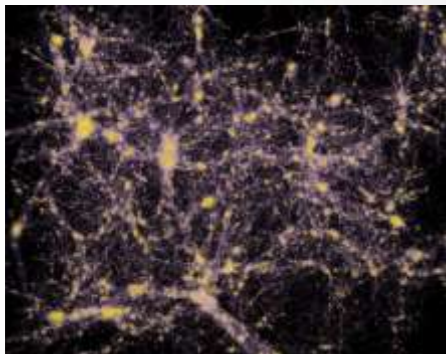
Software i serwisy



Flow through porous medium at microscale
Anna Trykozko, Kerstin Kantlem, ICM Warsaw University
<http://www.icm.edu.pl/>
<http://visnow.icm.edu.pl/>

0 10 20 30 40 vectors

- **Wizualizacja**
 - Translacja od danych do obrazu
 - Prezentacja informacji
 - Rozbudowana interpretacja danych
- **Analiza wizualna**
 - Ekstrakcja kluczowej informacji
 - Wydobycie nieoczekiwanej informacji
 - Wsparcie konstrukcji modeli
 - Umożliwienie analizy interaktywnej

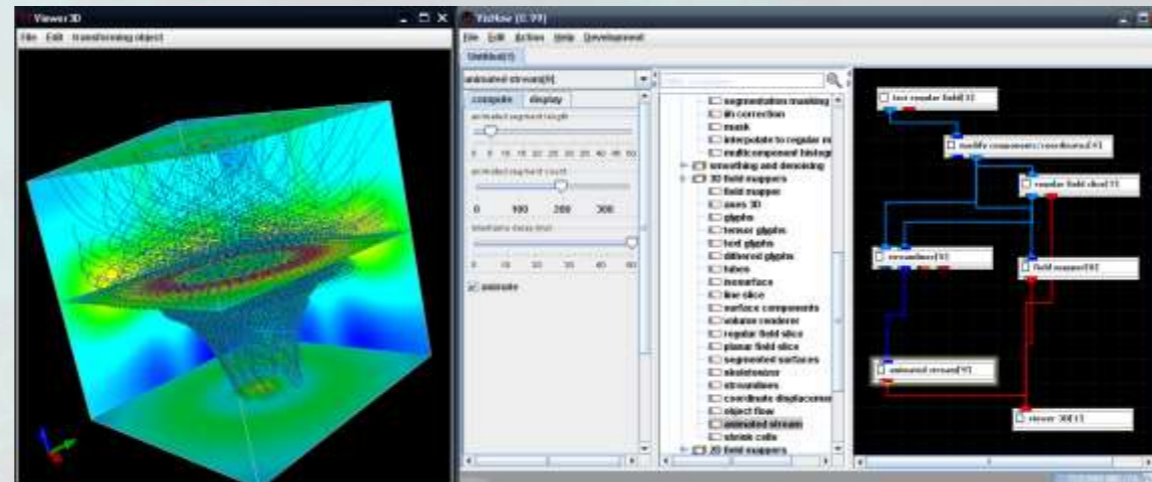
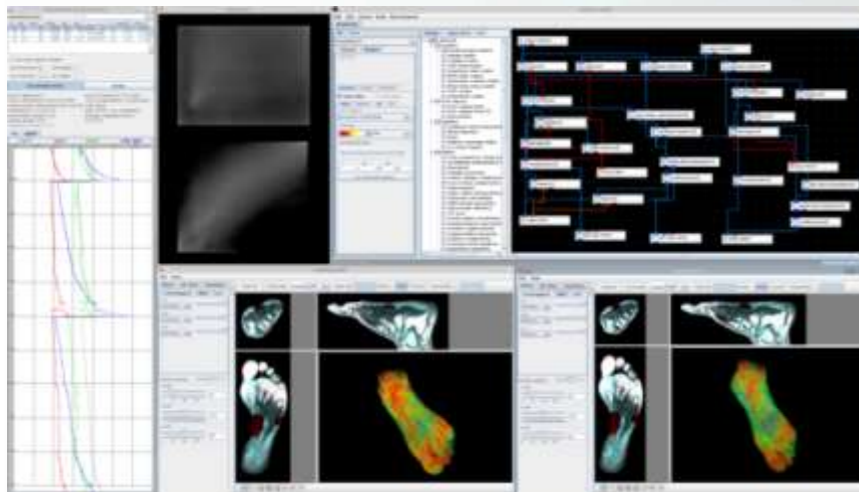
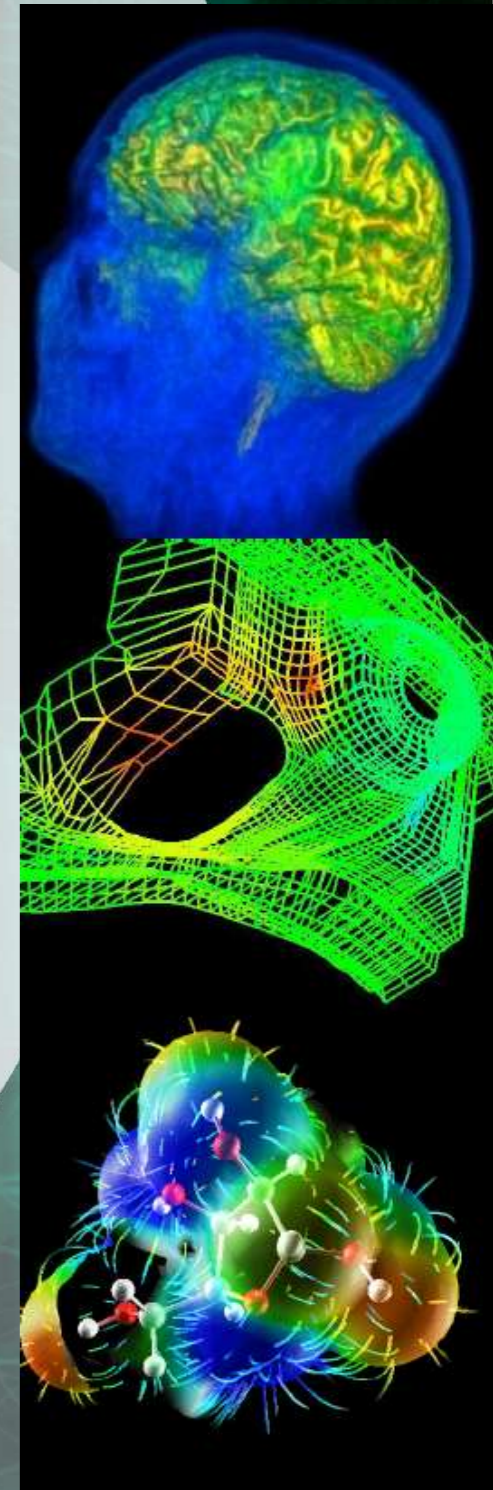


Wizualne obliczenia i analiza danych



Nowe rozwiązania: VisNow Software Analizy Wizualnej

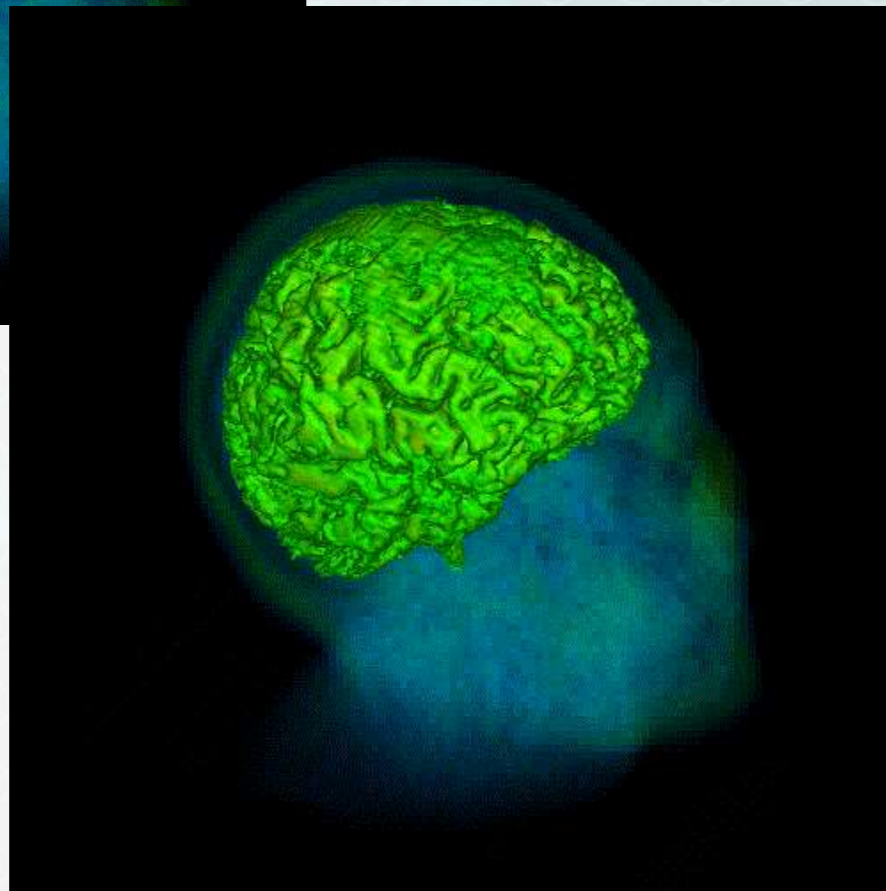
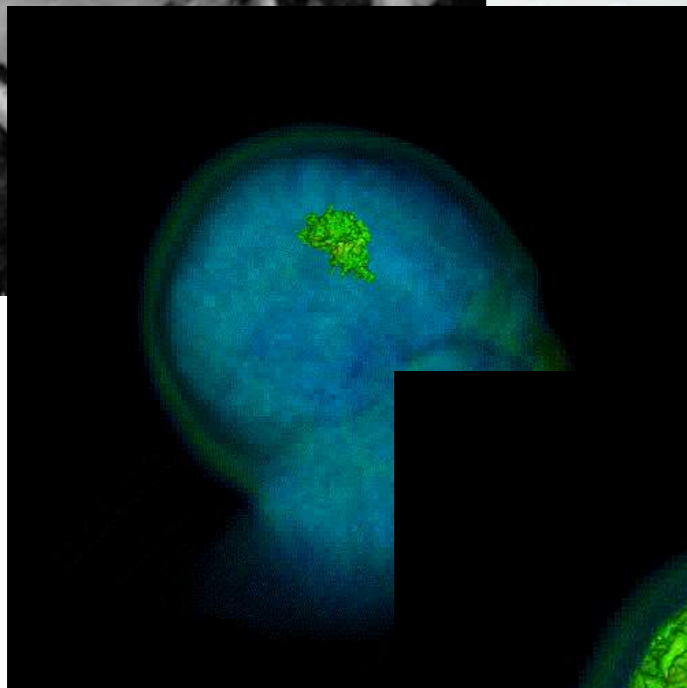
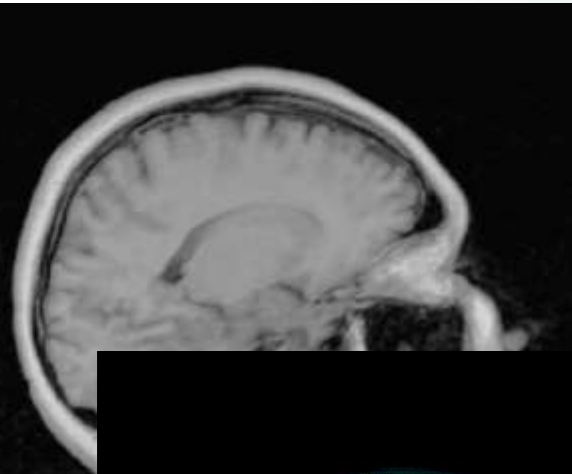
- Rozproszona maszyna wizualizacyjna (MPP, SMP, GPGPU)
- Wizualizacja In situ
- **Wizualizacja wyników symulacji komputerowych:**
 - Kosmologia
 - Przepływy turbulentne
 - Neurobiologia
 - Biomedycyna
- visnow.icm.edu.pl (licencja Open Source)



VisNow: zastosowania w wizualnym neurocomputing'u

rekonstrukcja 3D danych multimodal data
for therapy/surgery planning

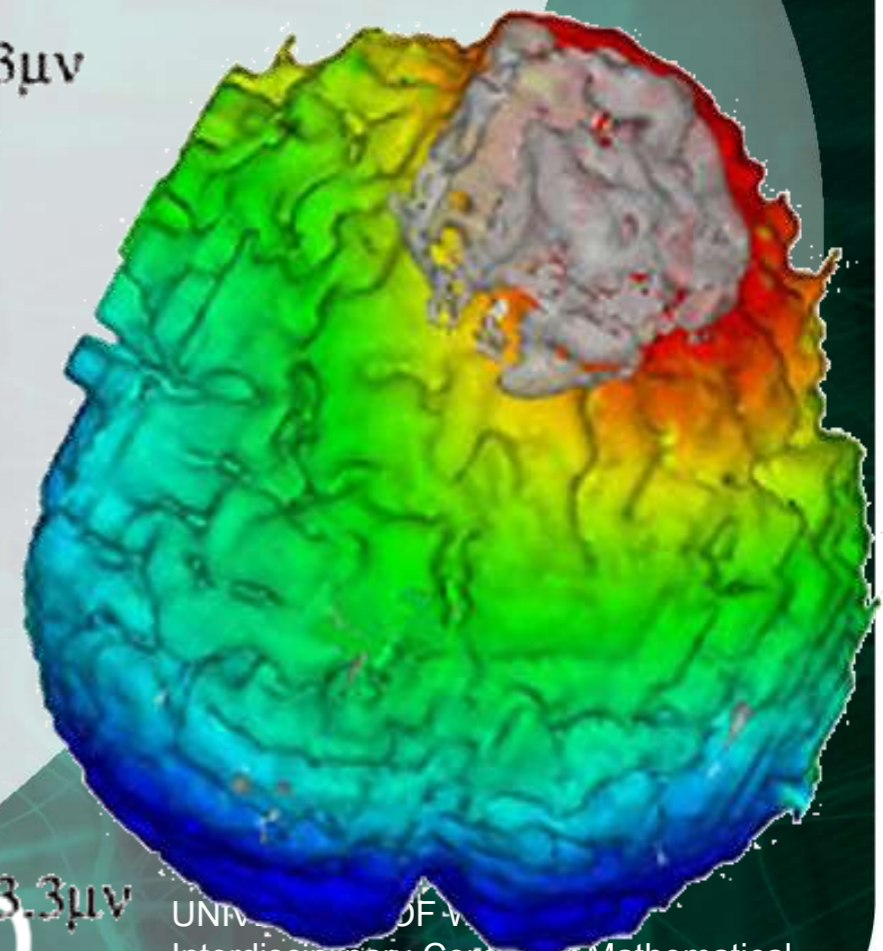
effective vs. real medium computational model



2.3 μ v



-3.3 μ v

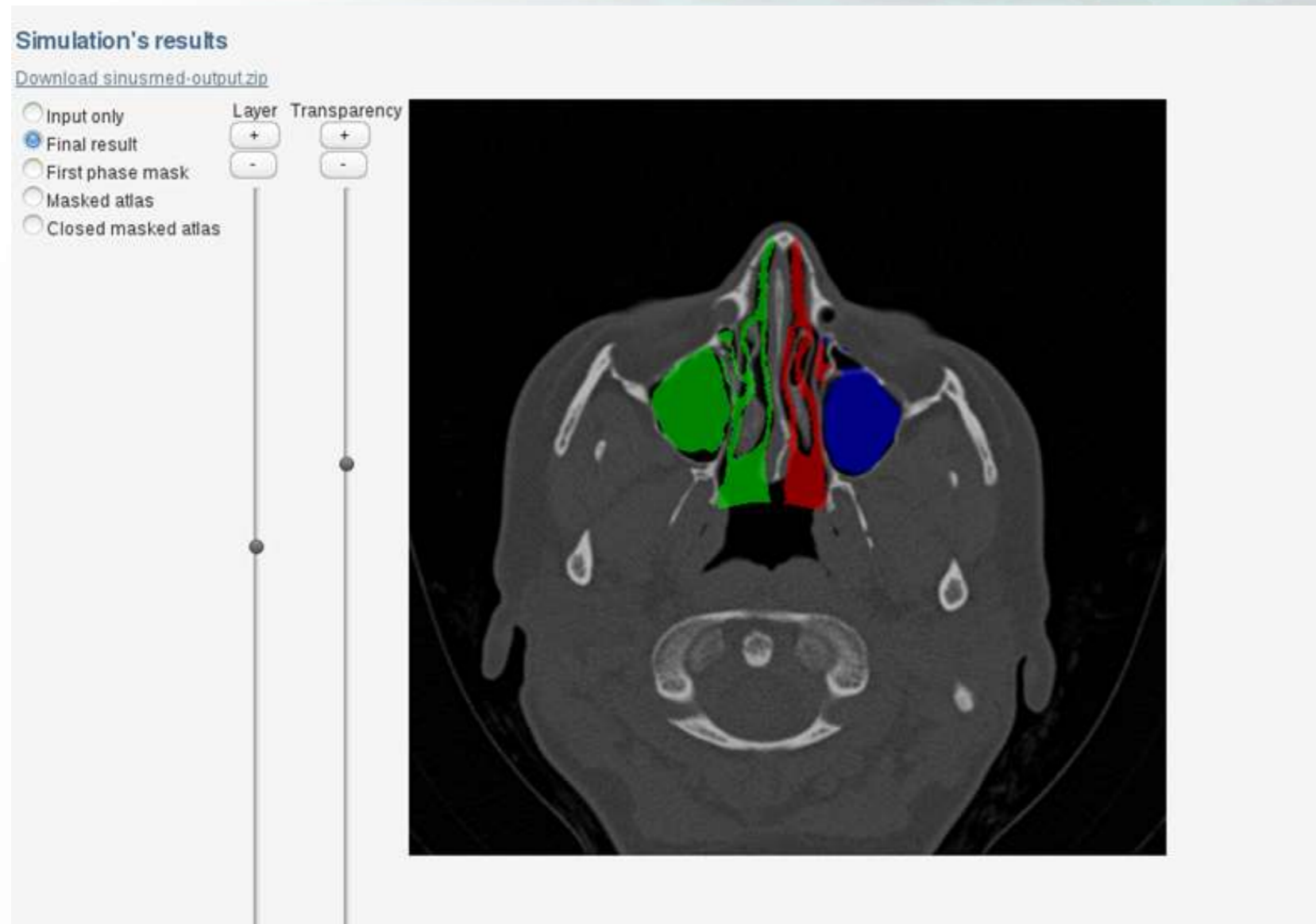


icm

UNIVERSITY OF WROCLAW
Interdisciplinary Centre for Mathematical
and Computational Modelling
www.icm.edu.pl

Przykład rozwiązań dostępowych do zasobów HPC

- Interfejs www (portal) dla laryngologów
 - analiza obszarów zatokowych na podstawie danych CT



Rozwój oprogramowania **VisNow**

- **Generyczna platforma wizualizacji**

- Modułarna
- Oparta o przepływ danych
- Rozszerzalna

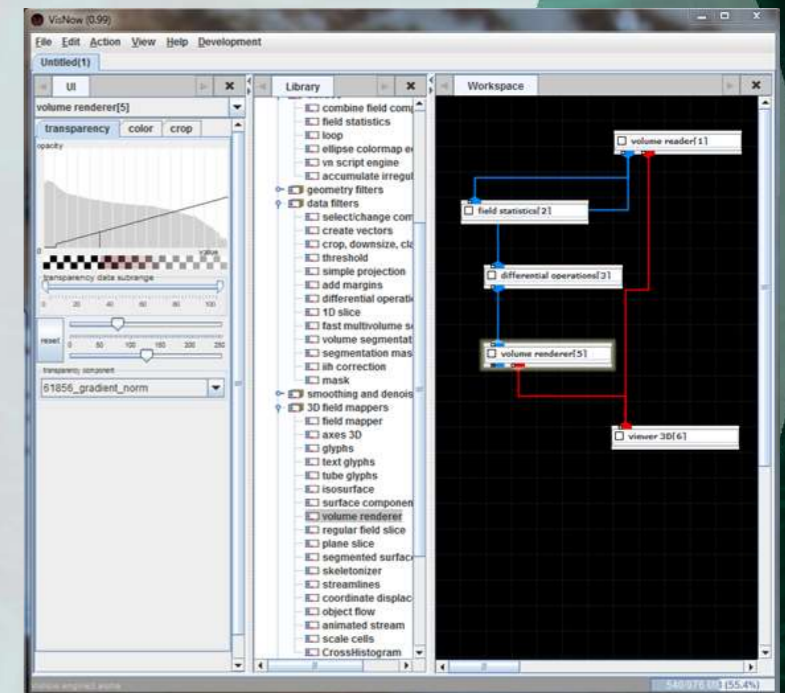


- **Filozofia VisNow**

- Wczytaj-i-oglądaj – natychmiastowa wizualizacja
- Wielofunkcyjne moduły
- Powiązanie funkcjonalne moduł-obiekt-GUI
- Rozsądne wartości domyślne

- **Rozwijana od podstaw w ICM:**

- Środowisko Java
- Open source (GPL Classpath Exception license)



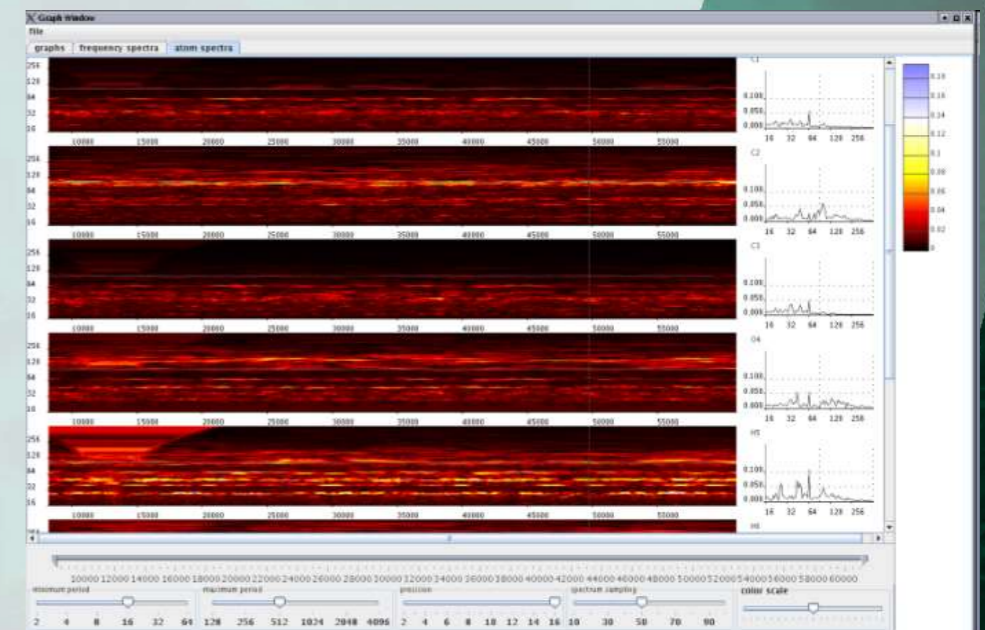
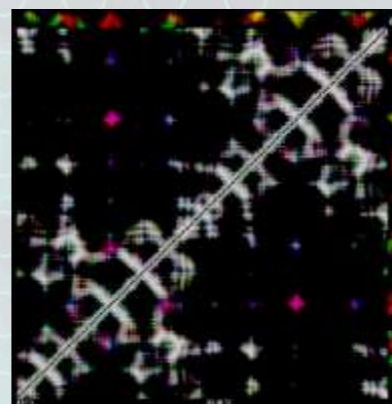
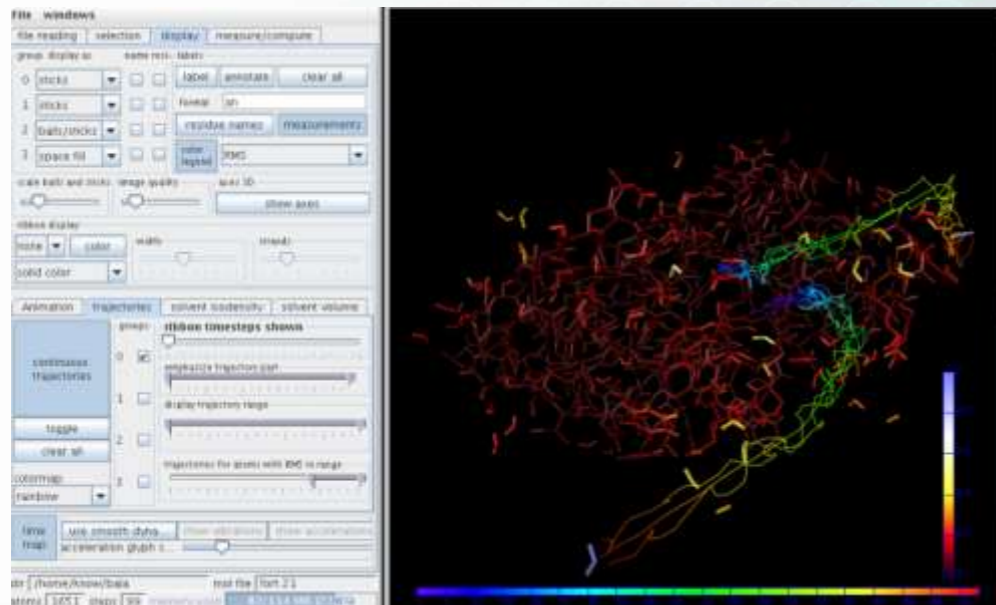
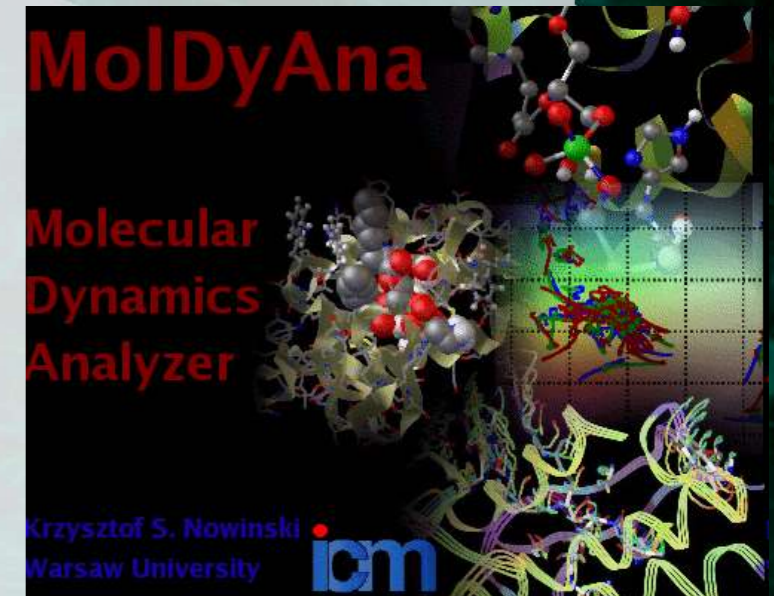
<http://visnow.icm.edu.pl>



MolDyAna

- Interaktywny zbiór narzędzi do analizy danych dynamiki molekularnej i wizualizacji (bio & solid)
- Animacje dynamiki
- Pomiar geometryczny
- Wykresy gęstości
- Analiza trajektorii
- Analiza spektralna

<http://moldyana.icm.edu.pl>



Przykładowe projekty: obliczenia

ICM: wiodące obszary badań wspieranych obliczeniami

× **Fizjologia człowieka:**

- × Ku medycynie precyzyjnej: układ krążenia
- × Procesy wieloskalowe: od skali komórkowej w górę

× **Nauki i inżynieria materiałowa:**

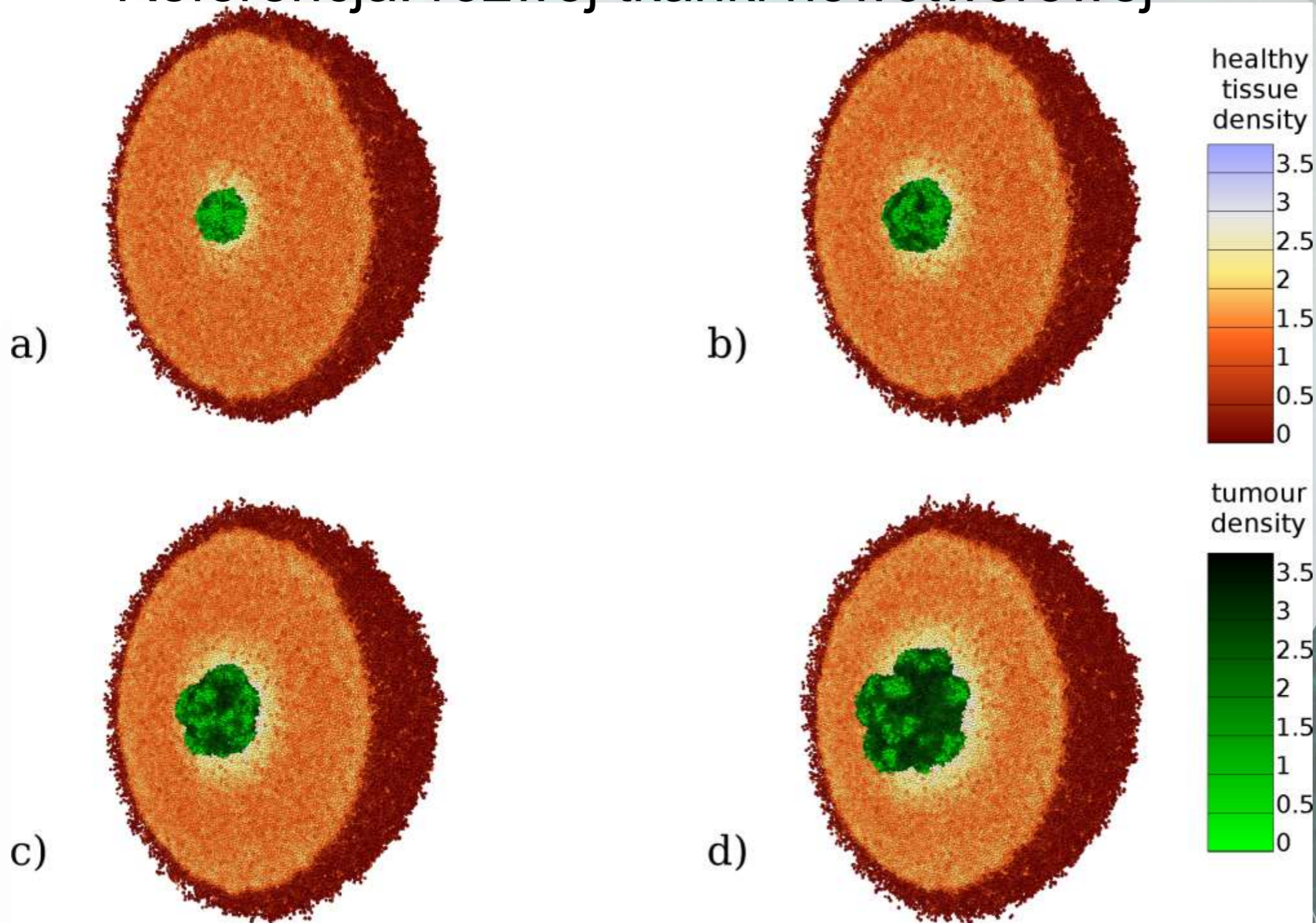
- × Projektowanie nowych materiałów funkcjonalnych i biomateriałów do nanoskali: charakteryzacja i modelowanie procesowe

× **Metodologia:**

- × Nowe koncepcje algorytmów obliczeniowych i struktur danych dla przyszłych architektur (ku exaskali)
- × Nieliniowa dynamika procesów nieliniowych o wysokiej złożoności:
 - × Rozwój struktury przestrzennej w układach o złożonej/zmiennej geometrii/topologii, zastosowania do dynamiki populacji
 - × Zjawiska nieodwracalne i nielocalne
 - × Podejmowanie decyzji i sterowanie w wielu skalach czasowych
 - × Sieci stochastyczne

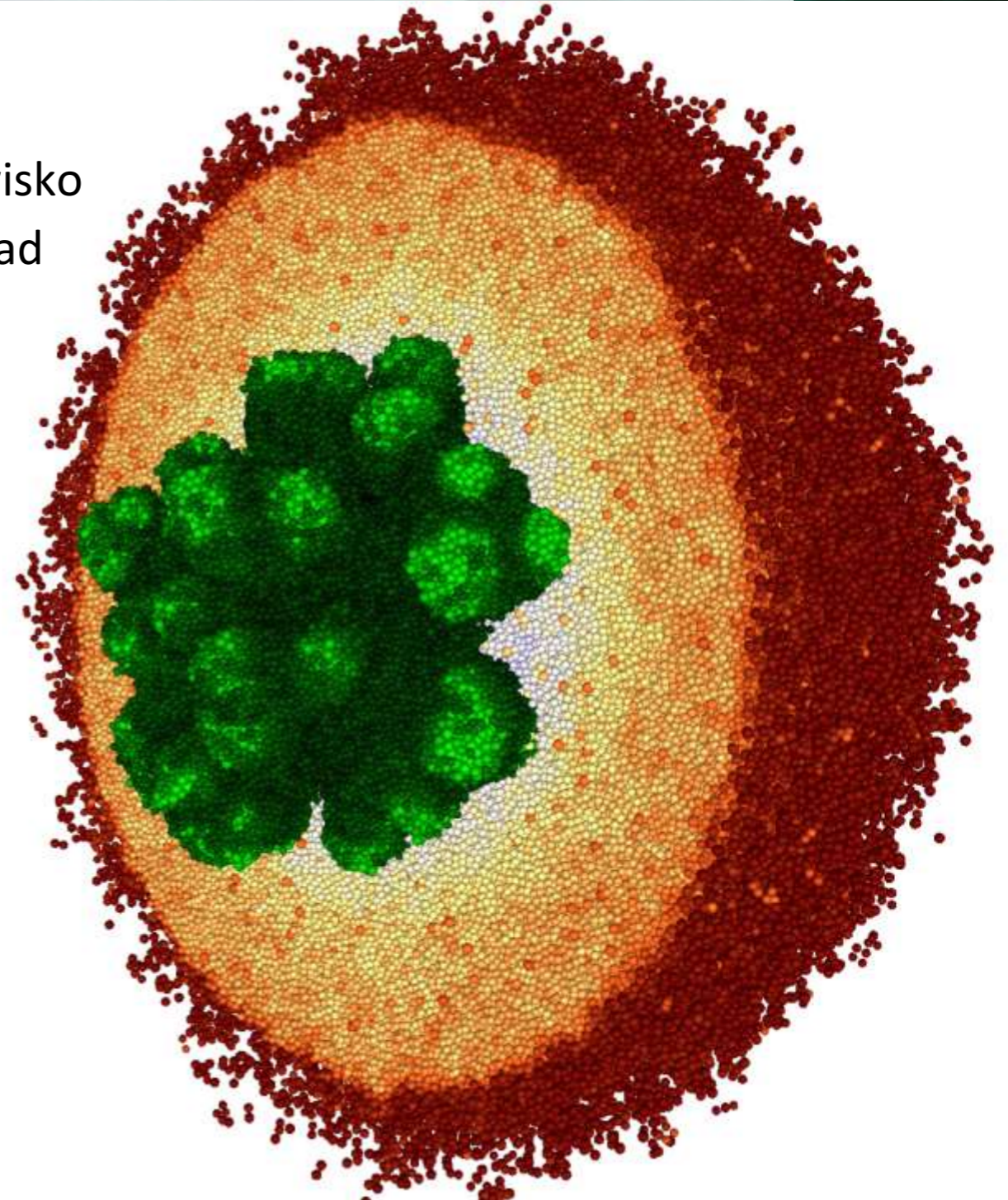
Symulacja dynamiki procesów

× Referencja: rozwój tkanki nowotworowej



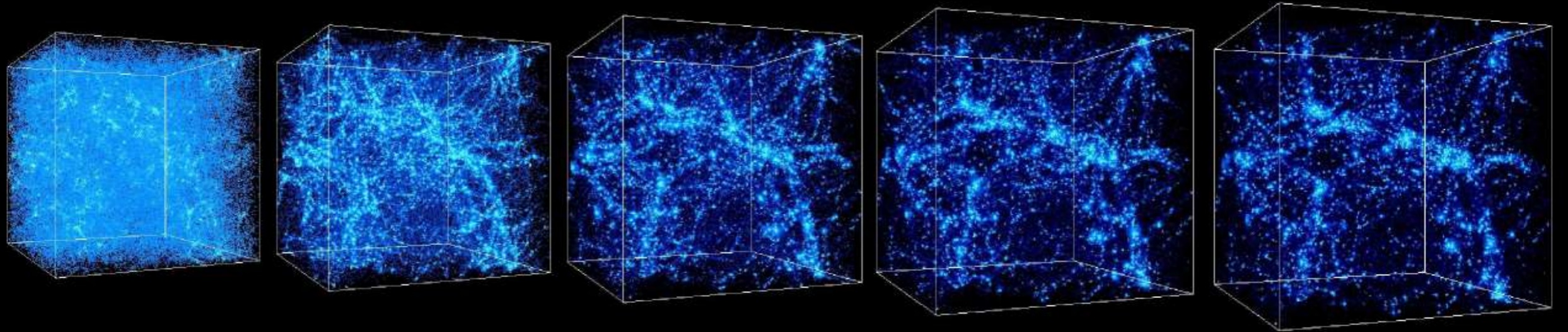
Symulacje procesów w komórkowych populacjach biologicznych – skala tkankowa

- × **Modele wieloskalowe:** komórka – tkanka – środowisko
- × **Hybrydowy model obliczeniowy:** bezsiatkowy układ wielociałowy, przybliżenie gęstościowe procesów
- × **Wyzwanie:** symulacje w skalach wykrywalnych klinicznie (10^9 komórek = 1cm^3 tkanki)
- × <http://timothy.icm.edu.pl>
(licencja Open Source)



Modele rozwoju struktur kosmologicznych

- × Symulacje wielkoskalowe z kodami wielociałowymi (Gadget3, GotPM)
- × **Warsaw Universe Simulation**, 2048^3 cząstek

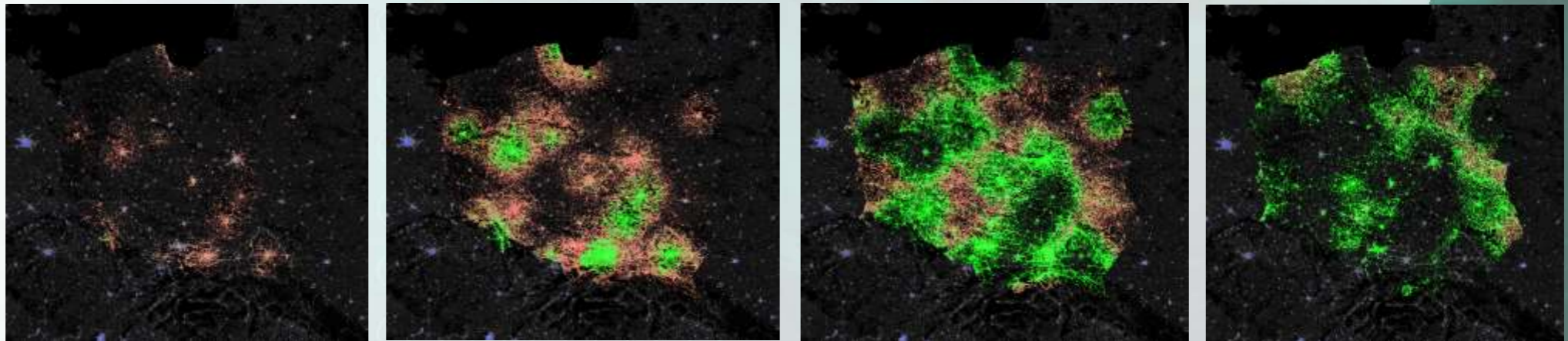


Propagacja epidemii na terenie Polski: model generyczny

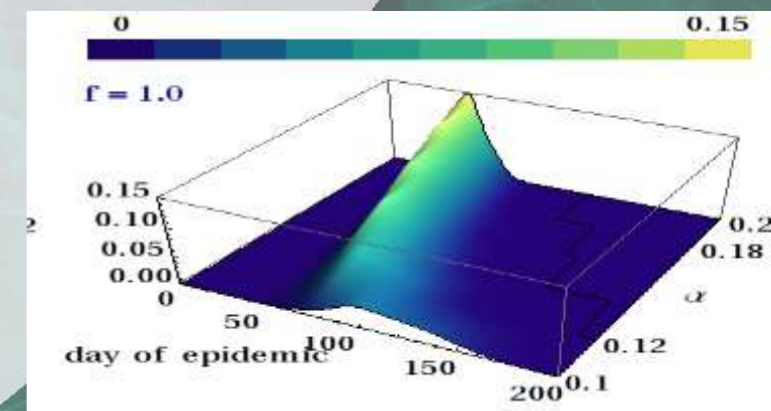


Wieloagentowy model dynamiki populacji I jego prognozy

Podkład: wirtualna struktura społeczno-ekonomiczna, modele mechanizmów infekcji

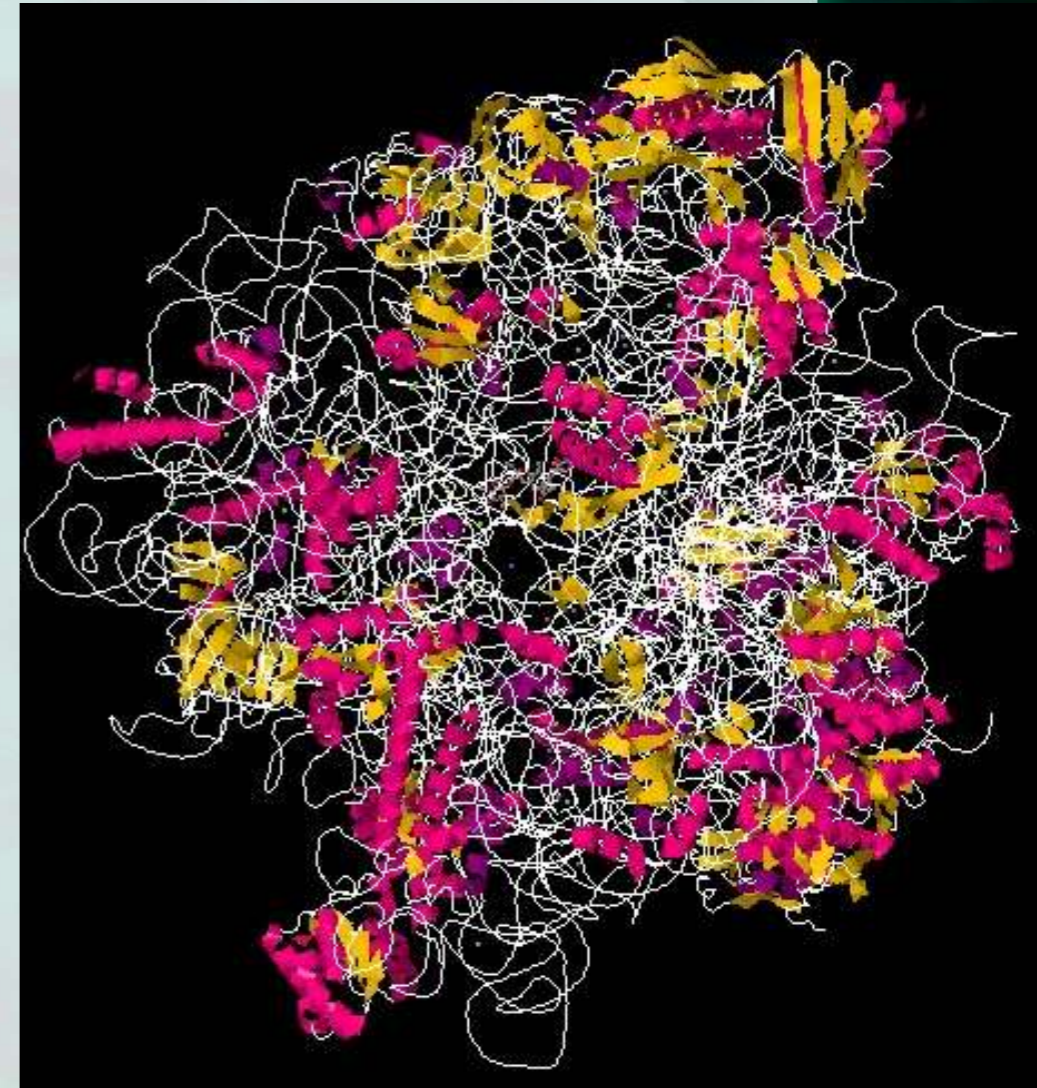


Prognozy: lokalizacja ognisk pierwotnych wtórnych, lokalizacja kulminacji, wygasania



Funkcjonalnie i terapeutycznie istotne struktury RNA: modelowanie wysokoprzepustowe

- × Projektowanie nowych targetów terapeutycznych bazujących na RNA
- × Zautomatyzowane generowanie przestrzennych modeli RNA z ich fragmentów strukturalnych
- × Walidacja oprogramowania *RNAComposer* rozwiniętego w ICM



Nowe scenariusze badań w obszarze nauk obliczeniowych

× **Wiele skal przestrzennych we wspólnym modelu:**

- × Modele fenomenologiczne (do poziomu makroskali) zintegrowane z modelami na bazie I zasad

× Uwzględniana **wysoka złożoność** modeli:

- × Obok wielkich relatywnie jednorodnych układów, układy o wysokiej heterogeniczności (w tym wieloskalowe złożone sieci operacyjne)

× **Wirtualne eksperymenty:**

- × Ekstremalnie złożone układy interaktywne
- × Ograniczenie konieczności eksperymentów rzeczywistych o wysokim ryzyku
- × Wynik: odkrycia bazujące na danych

× Referencja: **przepływy przez ośrodki porowate**

Referencja: modelowanie przepływów przez ośrodki porowate

× Kontekst:

- × Modelowanie przepływów w skali porów
- × Szeroki zakres prędkości
- × Upscaling do skali poru: parametry efektywne i kalibracja modelu
- × Efekty inercyjne w skali poru (modele nie wpisujące się w ramy Darcy)
- × Modelowanie procesów zatykania się porów i ich wpływ na parametry w skali rdzenia
- × Obliczenia dla realistycznych geometrii (mikroobrazowanie z użyciem rentgenowskiej mikrotomografii obliczeniowej)

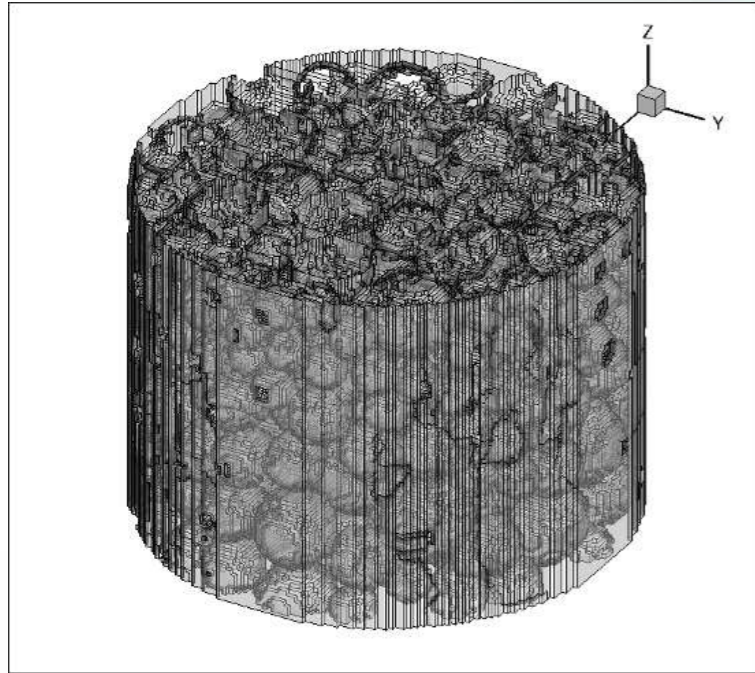
× Wirtualne laboratorium ośrodków porowatych:

- × Skala poru
- × Upscaling i kalibracja 2-skalowego modelu

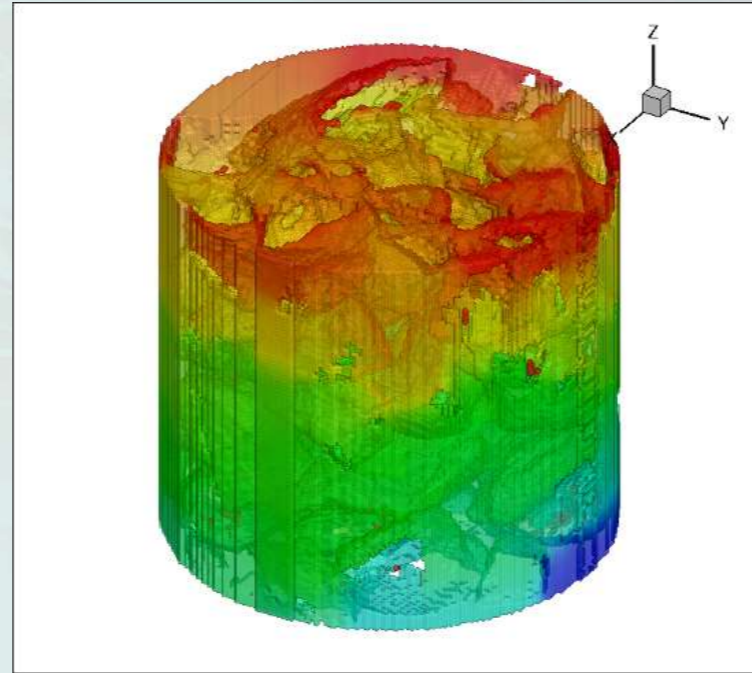
Komputerowe modelowanie przepływów w ośrodkach porowatych

- × Dostępne zasoby obliczeniowe umożliwiają symulowanie przepływu, transportu oraz innych procesów zachodzących w ośrodkach porowatych z punktu widzenia skali porowej
- × Informacja o **geometrii ośrodków w skali porowej** jest otrzymywana za pomocą technik mikroobrazowania, w **szczególności rentgenowskiej mikrotomografii komputerowej**
- × Wykonywanie symulacji w obszarach obliczeniowych zbudowanych na bazie próbek rzeczywistych ośrodków stanowi wyzwanie ze względu na **duże rozmiary zagadnień obliczeniowych**:
 - × Duże rozmiary danych mikroobrazowych (1000x1000x600);
 - × Rozdzielczość pomiarów (zależy od parametrów sprzętu, rozmiarów próbki, itd.); 6-20 μm
 - × Na podstawie danych konstruuje się siatki obliczeniowe, w oparciu o które prowadzi się symulacje przepływu
- × Zagadnienia do **60 milionów komórek obliczeniowych**

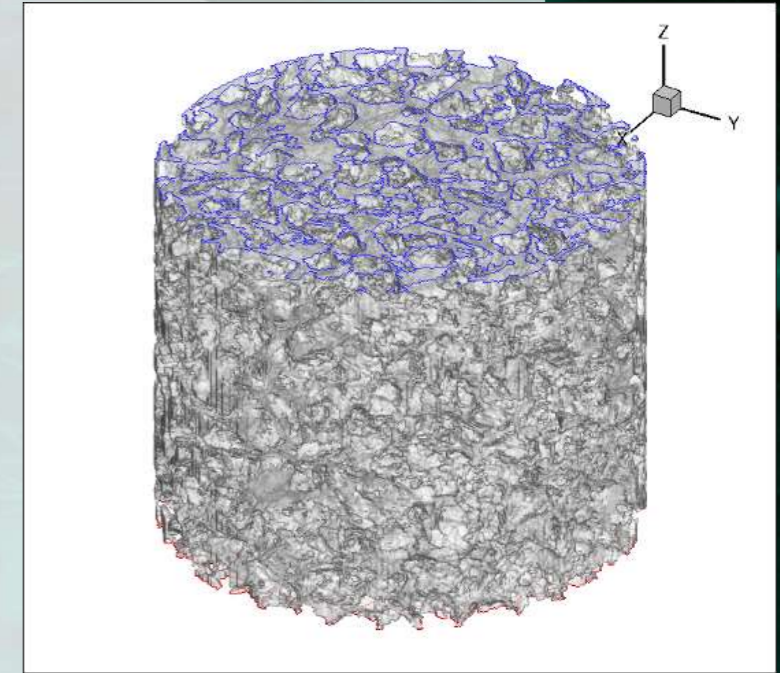
3D symulacje w skali poru: wielkość obliczeń!



Glass beads¹



Tuff²



Sandstone³

- Złożoność: ↑30M komórek, 10Gb zbiory, wyzwania wizualizacji i post-processingu
- Konieczna redukcja siatki obliczeniowej (redukcja danych)

1[DWildenschild], 414x414x300, max: 30Mcells, 9Gb, voxel 34 μ .

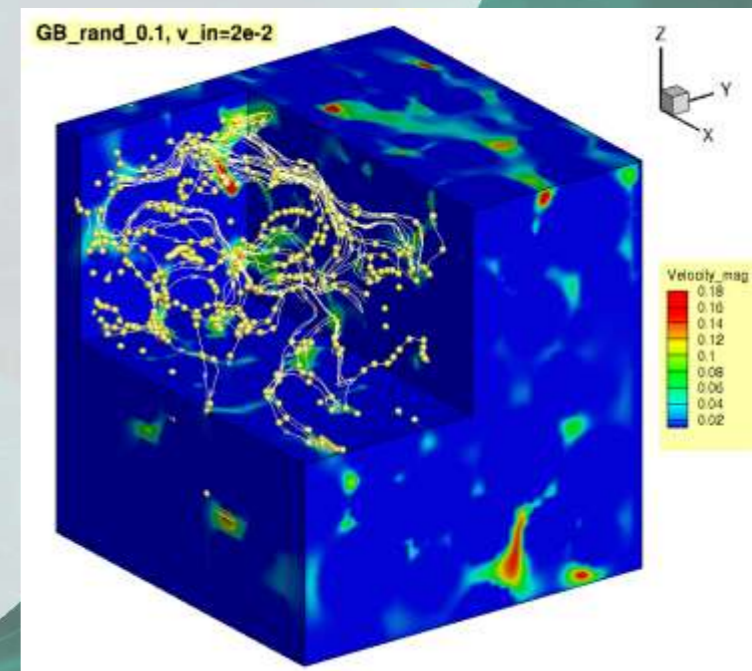
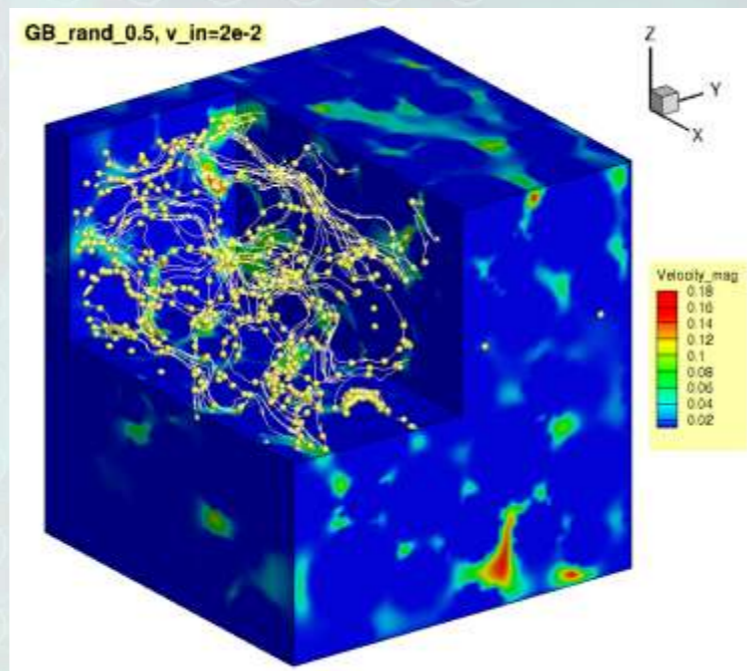
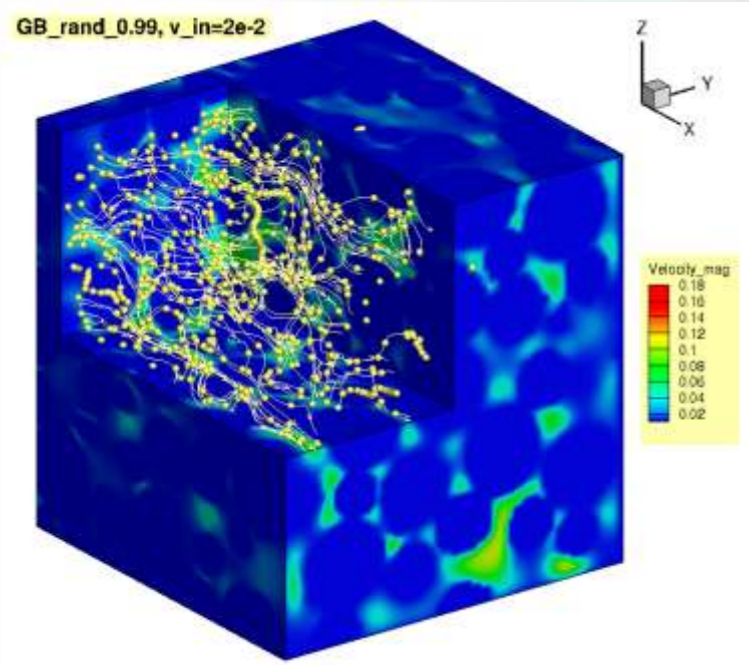
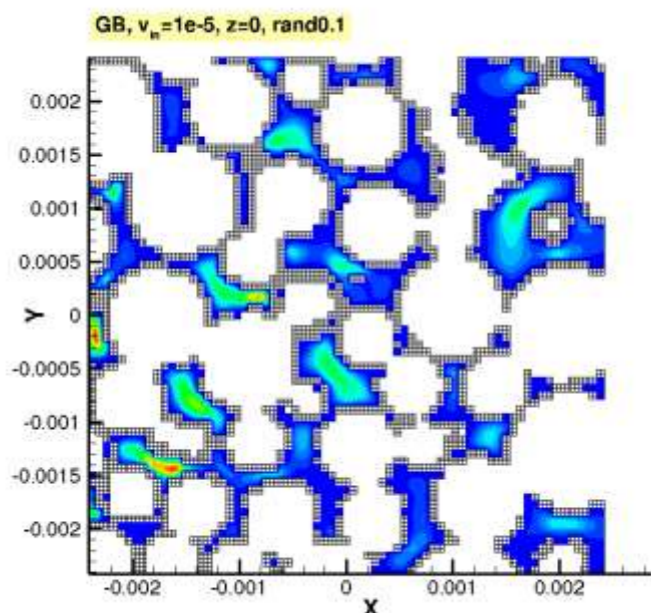
2[DWildenschild], 431x436x380, 23Mcells,

3[B.Lingquist], 731x731x600, max 8Gb, 27Mcells, voxel=16 μ .

Efekt zatykania się przestrzeni porów (nieodwracalnego) na parametry rdzenia

44

- Zmiany geometrii porów: wzrost biofilmów, przepływy reaktywne, sedymentacja
- Istotne zmiany przepuszczalności wskutek procesów zatykania
- Fig.: losowy model procesu zatykania



A. Trykozko, M. Peszyńska: *Pore-scale simulations of pore clogging and upscaling with large velocities*, GAKUTO, Mathematical Sciences and Applications, Tokyo, Vol. 36 (2013), 277-300.

Wirtualne laboratorium ośrodków porowatych - składowe

- × Geometria próbki w mikroskali
 - × Realistyczne geometrie 3D otrzymane za pomocą technik mikroobrazowania
- × Numeryczne rozwiązywanie równania przepływu
 - × Równania Naviera-Stokesa
 - × Metoda Objętości Skończonych (ANSYS/Fluent)
 - × Niestrukuralne siatki obliczeniowe (elementy sześciennie)
- × Algorytmy skalowania – parametry modelu w większej skali
- × Dopasowanie modelu w skali laboratoryjnej

Przykład zastosowania – do badania izolacji wysypisk odpadów

- × Wysypiska odpadów stanowią zagrożenie przenikania zanieczyszczeń do systemu przepływu wód podziemnych i ich rozprzestrzeniania się na dużych obszarach.
- × W celu izolowania stosuje się bariery złożone z mieszanek złożonych z piasku i gliny.
- × Prowadzone są badania własności barier izolujących w funkcji ich składu.
- × Badane są próbki złożone z piasku i gliny w różnych proporcjach.
- × W szczególności prowadzone są symulacje przepływu w skali porowej.



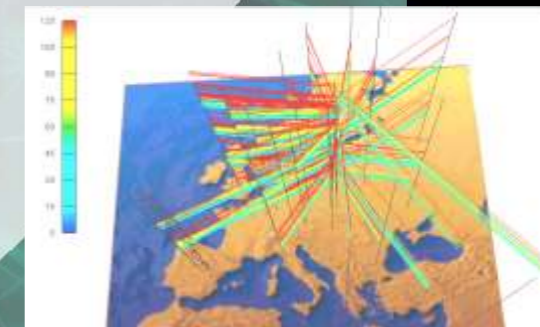
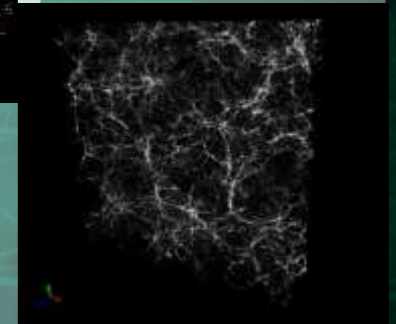
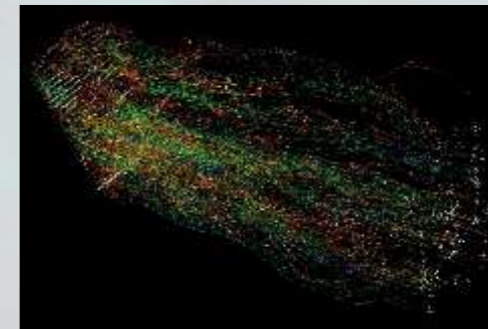
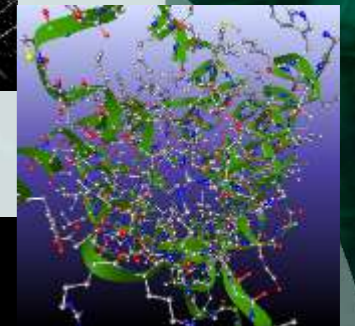
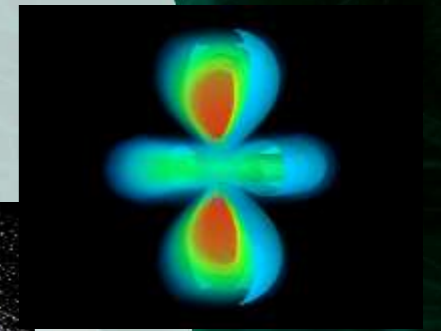
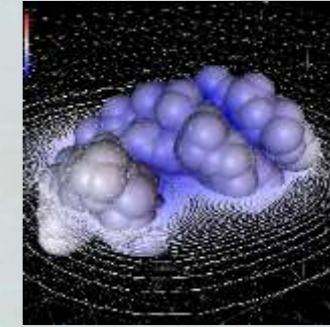
ICM: przykładowe projekty badawcze i B&R



UNIWERSYTET WARSZAWSKI
Interdyscyplinarne Centrum Modelowania
Matematycznego i Komputerowego
www.icm.edu.pl

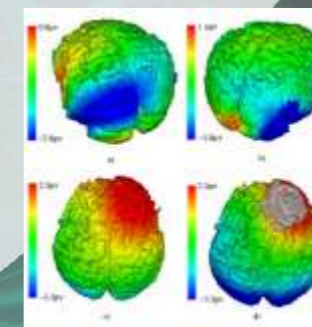
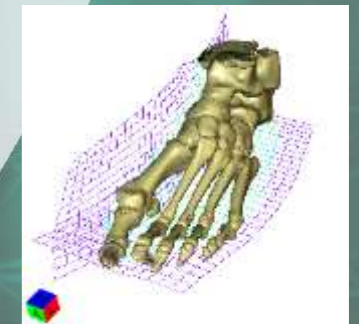
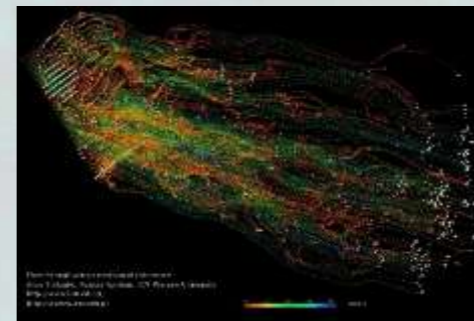
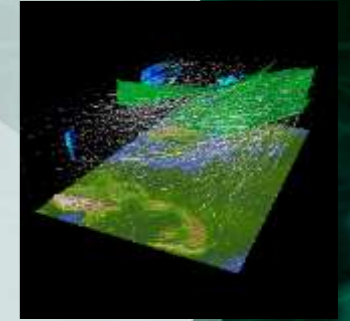
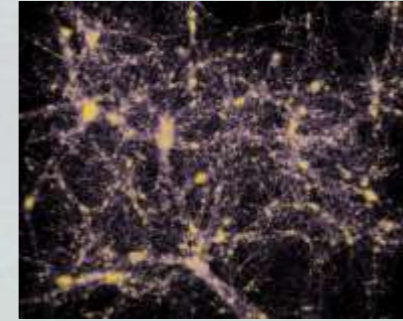
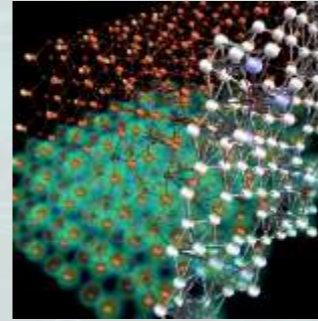
Czym się zajmujemy?

- × **Badania i wdrożenia** w zakresie metod wizualnej prezentacji danych
- × **Tworzenie oprogramowania i usług** do przetwarzania danych, wizualizacji i analizy wizualnej
- × **Tworzenie procedur** analizy wizualnej (workflows)
- × **Tworzenie wizualizacji** – prezentacja graficzna
- × **Analiza** wizualna – wydobywanie ukrytej informacji, zrozumienie zjawisk, interaktywność
- × **Modelowanie** wizualne
- × Przetwarzanie i **analiza obrazów**
- × **Projektowanie interfejsów** człowiek-komputer



Obszary tematyczne

- × Fizyka ciała stałego
- × Modelowanie przepływów
- × Mechanika molekularna
- × Klimat i meteorologia
- × Informacja geoprzestrzenna
- × Kosmologia
- × Mechanika
- × **Medycyna**
 - × Wizualizacja medyczna
 - × Analiza danych obrazowych (CT, MR, USG, etc.)
 - × Narzędzia diagnostyczne
 - × Wspomaganie komputerowe w radiologii
 - × Wspomaganie komputerowe w planowaniu zabiegów operacyjnych i interwencyjnych
 - × Telemedycyna
 - × Biomechanika ruchu



PCJ – Obliczenia równoległe w środowisku Java

- × Wykorzystanie Javy do obliczeń HPC
- × Model programowania PGAS (Partitioned Global Address Space)
 - × Analogiczny do X10 czy XScalableMP
 - × Prosty i wygodny z punktu widzenia programisty
- × pcj.icm.edu.pl
 - OpenSource, licencja BSD
 - Biblioteka i dokumentacja dostępne od 11.11.2013
 - Kod źródłowy dostępny od 26.09.2014 na GitHub
 - Kurs programowania w PCJ z wykorzystaniem komputerów HPC (pierwsze zajęcia dla UKSW w bieżącym semestrze)
 - Projekt CHIST-ERA (3 lata od 1.10.2014)
 - ICM, partnerzy: IBM Zurich, QUB, Bilkent
 - **HPC Challenge class 2 Award – Supercomputing Conference 2014 (New Orleans, USA)**

PCJ – obliczenia równoległe w środowisku Java

- × Zastosowanie do szerokiej klasy problemów
 - × FFT, algebra liniowa (HPL, mnożenie macierzy, macierze rzadkie), grafy, algorytmy genetyczne
- × Instalacja na nowych architekturach (BlueGene, Power8,...),
- × Skalowalność (aktualnie 2048 korów)
- × Niezawodność (fault tolerance)
- × Przetwarzanie dużych danych, streaming danych
- × Zastosowania BigData (PCJ jako warstwa komunikacyjna
Apache Spark – prace prowadzone wspólnie z IBM Zurich)

Ułatwienie dostępu do zasobów HPC

- × Interfejs www (portal) dla obliczeń materiałowych
- × VASP
- × QuantumEspresso (wkrótce)

The image displays a web-based interface for VASP simulations. On the left, a Jmol viewer shows a 3D model of a crystal structure within a unit cell. The unit cell parameters are listed as follows:

```
P 1 [P 1] #1  
a=3.248Å  
b=3.248Å  
c=40.000Å  
α=90.000°  
β=90.000°  
γ=120.000°
```

On the right, a 'Grid directory' window shows a list of files generated during the simulation:

NAME	EXT	SIZE	MODIFIED	ACTIONS
PCDAT		234 By	2014-10-27 07:24	
stderr		372 By	2014-10-27 07:24	
INCAR		541 By	2014-10-27 07:23	
POSCAR		932 By	2014-10-27 07:23	
IBZKPT		957 By	2014-10-27 07:23	
stdout		1491 B	2014-10-27 07:24	
TSl_script_file_1182		2211 B	2014-10-27 07:23	
vasprun.xml	xml	16 kBy	2014-10-27 07:24	
OUTCAR		30 kBy	2014-10-27 07:24	

The interface also includes a 'Submit VASP Simulation' button and a 'Simulation Name' field containing 'testSimulation?'.

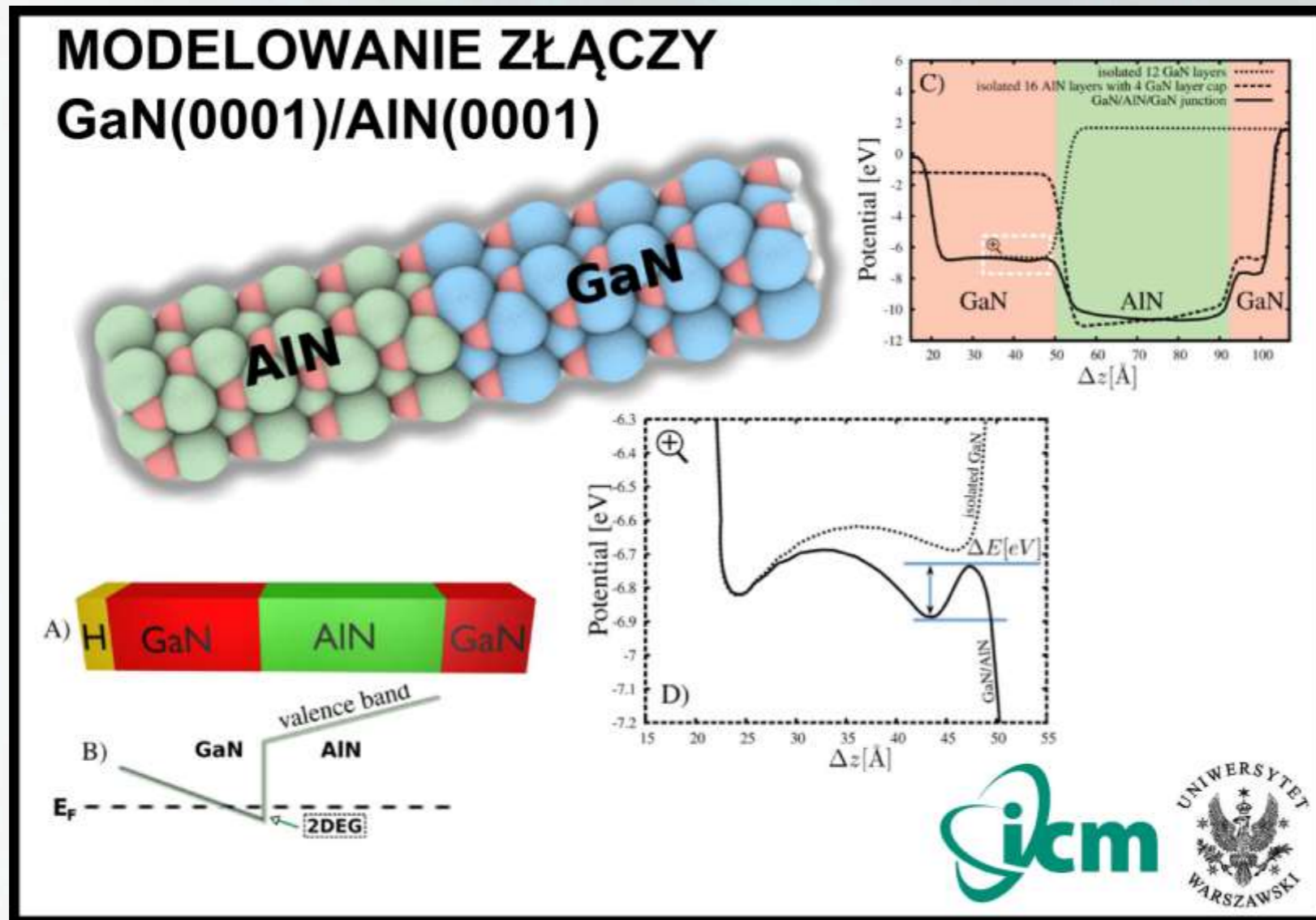
Badania materiałów: nowe materiały i technologie, Optoelektronika

- × ICM wspólnie z innymi instytucjami naukowymi (np. WIM PW, ITME, WF UW, IF PAN, IChF PAN, UNIPRESS) uczestniczy w badaniach i realizuje usługi obliczeniowe mające na celu opracowanie technologii otrzymywania nowoczesnych materiałów półprzewodnikowych
- × Grafen, węgiel krzemu (SiC), azotek galu (GaN) i tlenek cynku (ZnO) są jednymi z najbardziej perspektywicznych materiałów do zastosowań w obszarze elektroniki. Wdrożenie rezultatów prowadzonych badań przyczyni się do wzrostu konkurencyjności polskich przedsiębiorstw w zakresie urządzeń elektronicznych w warunkach działania na wspólnotowym rynku UE



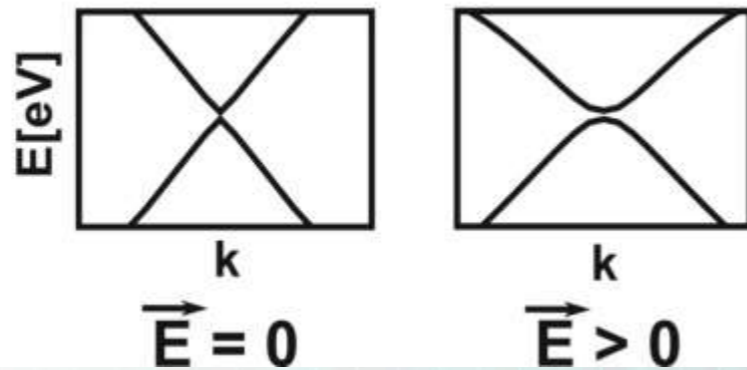
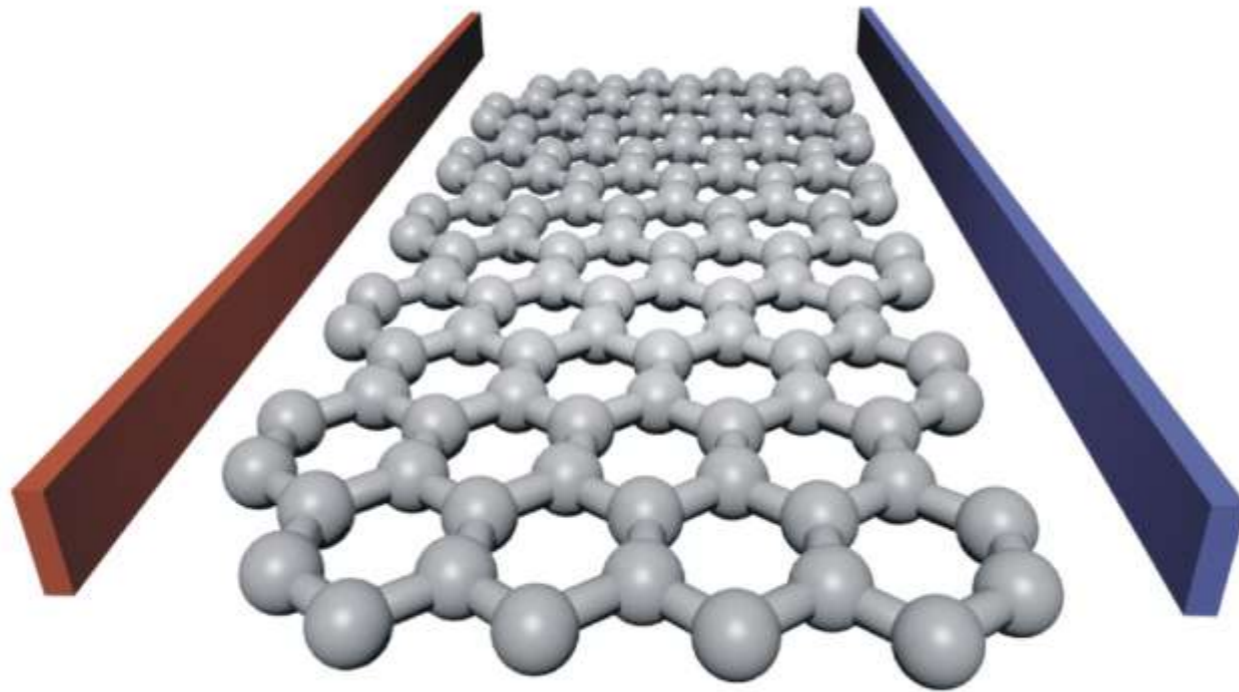
UNIWERSYTET WARSZAWSKI
Interdyscyplinarne Centrum Modelowania
Matematycznego i Komputerowego
www.icm.edu.pl

Badania materiałów: nowe materiały i technologie, Optoelektronika



Model sensora AlN/GaN, modelowanie potencjału (pola elektrycznego) na złączu, powstawanie dwuwymiarowego gazu elektronowego (2DEG)

Badania materiałów: nowe materiały i technologie, Optoelektronika



Model elektrycznie sterowanego dirakowskiego przyrządu elektronicznego, zbudowanego na jedno- lub wielowarstwowym grafenie

Zapraszamy!!!

Zespół ICM



UNIWERSYTET WARSZAWSKI
Interdyscyplinarne Centrum Modelowania
Matematycznego i Komputerowego
www.icm.edu.pl

Kontakt:

Marek Niezgódka: marekn@icm.edu.pl

(Robert Sot: rsot@icm.edu.pl)

www.icm.edu.pl



UNIWERSYTET WARSZAWSKI
Interdyscyplinarne Centrum Modelowania
Matematycznego i Komputerowego
www.icm.edu.pl