

# POWIEW

23 XI 2011 Nr 2

BIULETYN

wielkiewyzwania.pl

Drugi numer biuletynu rozpoczynamy krótką prezentacją centrum kompetencji w zakresie wizualizacji. W kolejnych numerach, przedstawimy pozostałe centra kompetencji projektu **POWIEW**.

## Centrum kompetencji –wizualizacja

Centrum kompetencji projektu **POWIEW** w zakresie wizualizacji powstało głównie w oparciu o Laboratorium Analizy Wizualnej ICM UW. Zespół laboratorium, kierowany przez dr. Krzysztofa Nowińskiego, może pochwalić się wieloletnim doświadczeniem w opracowywaniu i tworzeniu metod analizy wizualnej i wizualizacji danych naukowych, jak również modelowania wizualnego. Rozwijane w tym zespole oprogramowanie **VisNow** (otwarta, generyczna platforma wizualizacji i analizy danych, [visnow.icm.edu.pl](http://visnow.icm.edu.pl)) staje się potężnym i elastycznym narzędziem do prowadzenia analiz i prezentacji wizualnej, jak również do prototypowania nowych rozwiązań.

Prace prowadzone w ramach naszego centrum to nie tylko sama prezentacja wizualna informacji, ale przede wszystkim rozwój i tworzenie nowych algorytmów przetwarzania i analizy danych, nowych metod wizualizacji i całych procesów analizy wizualnej, a także wykorzystanie tych rozwiązań

w stowarzyszonych projektach do odkrywania nowej jakości w analizie danych.

W ostatnich czasach zupełnie nowym wyzwaniem staje się problem wielkoskalowości. Bardzo znaczący wzrost możliwości obliczeniowych superkomputerów, zarówno w zakresie CPU, jak i pamięci, spowodował lawinowy wzrost ilości danych będących wynikami prowadzonych obliczeń. Dodatkowo, znacznie wolniejsze tempo rozwoju technik obrazowania (np. rozdzielczość monitorów) w sposób jeszcze istotniejszy zwiększyło przepaść pomiędzy możliwościami wizualizacyjnymi, a skalą danych, z którymi mamy do czynienia. W związku z tym najistotniejsze wyzwania, jakie stawiamy przed sobą w ramach działalności centrum kompetencji, wiążą się z opracowaniem innowacyjnych metod i narzędzi oraz doбором adekwatnego sprzętu do analizy wizualnej i wizualizacji danych wielkoskalowych – danych o dużych rozmiarach i znaczącej liczebności.

Nasze kompetencje są do dyspozycji innych zespołów, tam gdzie zakres naszych ekspertyz może zostać skutecznie wykorzystany przy pracy z danymi. Obecnie w ramach projektu **POWIEW** współpracujemy już z kilkoma innymi centrami kompetencji (np. dotyczącym kosmologii). Zachęcamy jednak wszystkich do współpracy i wykorzystania we własnych projektach wsparcia analizy wizualnej i jej szerokiach możliwości.

**Mgr Bartosz Borucki**, związany z ICM UW od 2006 roku. Specjalista w zakresie wizualizacji i analizy wizualnej, przetwarzania danych obrazowych oraz obliczeń wielkoskalowych HPC. Główne obszary badawcze: algorytmy i metody przetwarzania informacji, wizualizacja, akwizycja i przetwarzanie medycznych danych obrazowych, wspomaganie komputerowe w medycynie (CAD, CAS), akceleracja i optymalizacja kodów obliczeniowych, systemy i obliczenia rozproszone, interfejsy użytkownika, metody ochrony medycznych danych osobowych.

### POWIEW na konferencji PPAM2011

11 września 2011 roku w Toruniu podczas konferencji Parallel Processing and Applied Mathematics (PPAM) odbyło się szkolenie **POWIEW** z prowadzenia obliczeń i optymalizacji oprogramowania na systemach HPC. Projekt **POWIEW** zaprezentował też swoją ofertę na stoisku wystawienniczym. Materiały edukacyjne przygotowane dla uczestników szkolenia dostępne są na stronie projektu.

### Szkolenie dla Neurobiologów

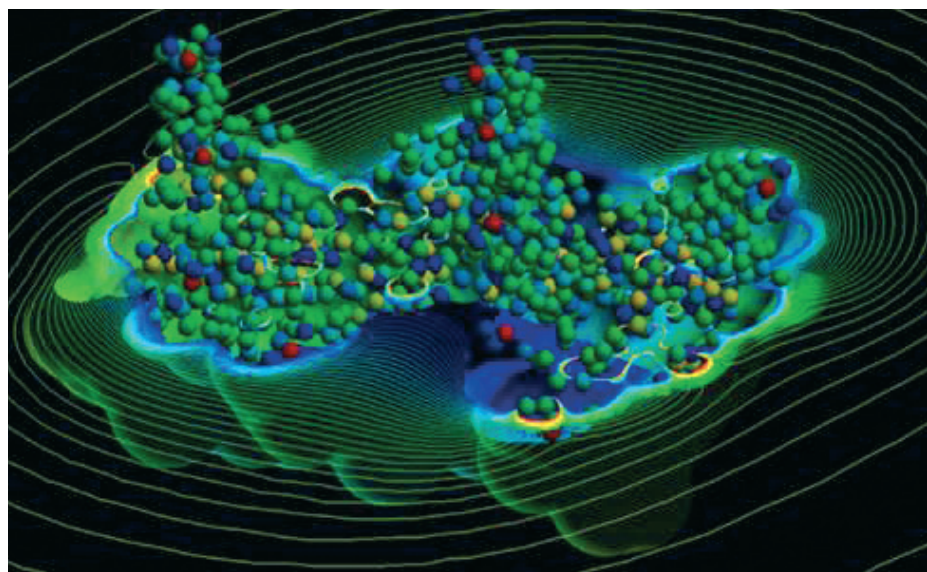
4 sierpnia 2011 roku w Będlewie przeprowadzone zostało szkolenie z użytkowania systemów HPC podas 16 edycji międzynarodowej szkoły neurobiologii: "16th Advanced Course in Computational Neuroscience 2011".

### Programowanie układów FPGA

12 oraz 13 lipca 2011 roku w Krakowie odbyło się szkolenie z języka programowania Impulse C, które pozwala w przyjazny sposób programować akceleratory obliczeń oparte na układach FPGA. Język Impulse C został udostępniony dla użytkowników w ramach zasobów projektu **POWIEW**.

### Warsztaty kosmologiczne

W dniach 12-17 lipca 2011 roku w Warszawie odbyły się warsztaty kosmologiczne "Cosmic Web Morphology and Topology". Projekt **POWIEW** był jednym z organizatorów warsztatów. W warsztatach uczestniczyło ponad czterdziestu naukowców, którzy w swojej pracy zajmują się m.in. wielkoskalowymi symulacjami wszechświata realizowanymi na komputerach równoległych.

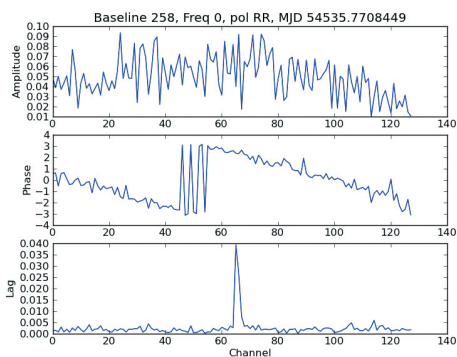


Wizualizacja struktury molekularnej oraz potencjału cząsteczki

# Uruchomienie polskiego korelatora software'owego

Z przyjemnością informujemy, że w dniu 7 września 2011 w ramach prac prowadzonych w centrum kompetencji astrofizycznych w projekcie **POWIEW** uruchomiono pierwszy działający w Polsce korelator programowy DiFX (ang. *Distributed FX software correlator*). Instalacja została uruchomiona na serwerach Poznańskiego Centrum Superkomputerowo-Sieciowego z udziałem zespołu Centrum Radioastronomii Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu.

Korelacja jest wykonywana na potrzeby eksperymentów eVLBI, podczas których sieć radioteleskopów na terenie całej Europy, obserwując równocześnie jeden obiekt, tworzy interferometr. Pozwala on uzyskać obrazy o rozdzielczości, jaką osiągnąłby jeden radioteleskop posiadający średnicę równą maksymalnej odległości między teleskopami znajdującymi się w sieci. Korelacja programowa stanowi tańszą i bardziej elastyczną alternatywę w stosunku do korelacji sprzętowej, pozwalając uzyskać wyniki obserwacji w dużo krótszym czasie. Korelator programowy będzie miał za zadanie



przetwarzać dane uzyskane z Interferometru Bałtyckiego — sieci radioteleskopów ulokowanych głównie w krajach nadbałtyckich. Jego głównym zadaniem będzie obserwacja molekuł emitujących promieniowanie na falach radiowych. Pozwoli to wnikać w fizykę gwiazd późnych typów widmowych i ich otoczek oraz badać wnętrza obłoków materii międzygwiazdowej, będących miejscem narodzin nowych gwiazd.

Na rysunku widoczny jest pierwszy listek korelacyjny (delta Diraca na trzecim wykresie), uzyskany za pomocą wspomnianej instalacji, świadczący o skorelowaniu sygnałów z dwóch odległych radioteleskopów. ▲

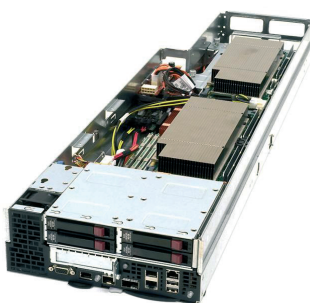
# System GPGPU w ACK Cyfronet AGH

W kwietniu 2011r. w ACK Cyfronet AGH oddany został do użytku system obliczeniowy wyposażony w układy graficzne NVIDIA. Komputer wszedł w skład największego systemu klastrowego w Polsce przyjmując nazwę Zeus GPU. Klaster będzie przeznaczony do wspomagania badań nad procesami biochemicznymi, geologicznymi, zagadnieniami z dziedziny farmakologii oraz inżynierii materiałowej. Poprzez wielokrotne skrócenie czasu obliczeń, zainstalowany system umożliwi symulacje zagadnień o znacznie większej skali niż dotychczas.

Klaster składa się z 24 węzłów, z których każdy wyposażony jest w 2 karty graficzne NVIDIA® Tesla M2050. Wydajność pojedynczego węzła wynosi 1,1 Tflops, na co składa się moc oferowana przez 12 rdzeni Intel Xeon X5670 oraz 896 rdzeni NVIDIA CUDA. Pod względem teoretycznej mocy obliczeniowej cały klaster odpowiada 176 takim samym węzłom nie zawierającym kart. Uruchomienie systemu spotkało się z żywym zainteresowaniem środowiska naukowego z uwagi na ograniczony dostęp do systemów tego typu w skali kraju.

## Paradygmat programowania

Dla każdego procesora można określić teoretyczną moc obliczeniową. Liczba ta może służyć m.in. do porównywania możliwości różnych systemów. W praktyce osiągnięta wydajność w dużej mierze zależy od konkretnej aplikacji i zbliżenie się do teoretycznej wydajności jest często niemożliwe. W przypadku kart graficznych zadanie to jest trudne ze względu na odmienną architekturę i techniki programowania. Z tego względu w ramach



Pojedynczy serwer GPGPU

projektu **POWIEW** uruchomione zostało centrum kompetencji zajmujące się efektywnym tworzeniem i uruchamianiem algorytmów wykorzystujących karty GPU.

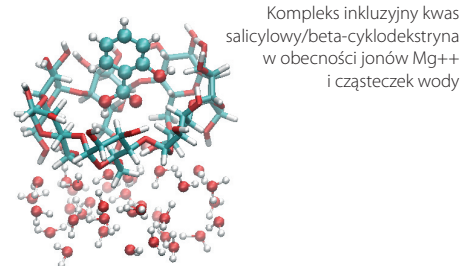
## Prace bieżące

Obecnie prowadzone prace są poświęcone głównie zagadnieniom z dziedziny chemii:

- Rozwój oprogramowania umożliwiającego przyspieszenie obliczeń kwantowo-chemicznych. Prace koncentrują się głównie na opracowaniu oprogramowania efektywnie wykorzystującego architekturę GPU.

- Symulacje teoretycznego opisu kompleksów inkluzyjnych z udziałem związków makrocyclicznych w szczególności badanie wpływu jonów na tworzenie się układów gość/gospodarz.

- Modelowanie wpływu oddziaływania barwnika ketocyjaninowego z jawnym rozpuszczalnikiem na wartości przerwy HOMO-LUMO.



## Testy wydajnościowe klastra Zeus GPU dla wybranych aplikacji

Do dyspozycji naukowców klastra Zeus GPU udostępnia popularne pakiety obliczeniowe wspierające obliczenia przy użyciu kart GPU (pełna lista dostępna na stronie [wielkiewyzwania.pl](http://wielkiewyzwania.pl)). Porównanie wydajności dla wybranego oprogramowania przedstawiają wykresy poniżej. Można zaobserwować kilkukrotne skrócenie czasu obliczeń przy wykorzystywaniu pakietu NAMD oraz ponad 100-krotne w przypadku zastosowania pakietu TeraChem.

