

**HRVATSKI CENTAR
KOMPETENCIJA
ZA HPC**

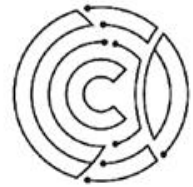
HPC IRB e-Lab korisnički slučajevi

akademik. Karolj Skala

Institut Ruđer Bošković
Centar za informatiku i računarstvo

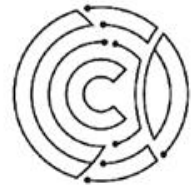


Pan EU znanstveno tehnološka infrastruktura



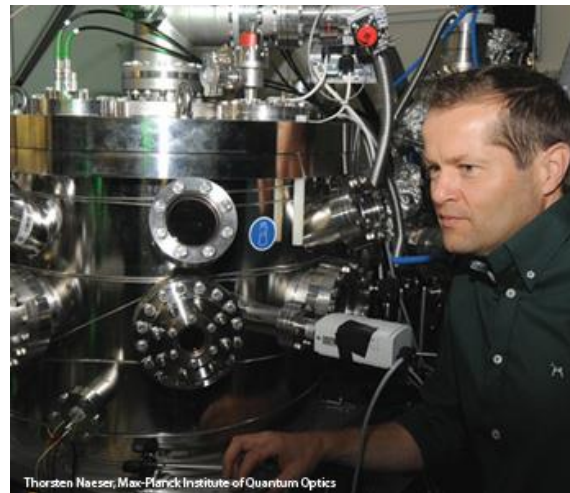
- European Strategy Forum on Research Infrastructures (ESFRI) 56 R- član i 56 priružena člana
- European Research Infrastructure Consortium (ERIC) 30
- European Open Science Cloud (EOSC) 256 organizacija
- European Digital Infrastructure Consortium (EDIC)
- Scientific Centre of Excellence 60/9 DataScience
- Digital Inovativna Hubs (DIH) 500/15
- European Digital Innovation Hub (EDIH) 150/5





Moć znanstveno tehnološke infrastrukture

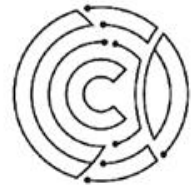
1. ERIC - European Research Infrastructure Consortium



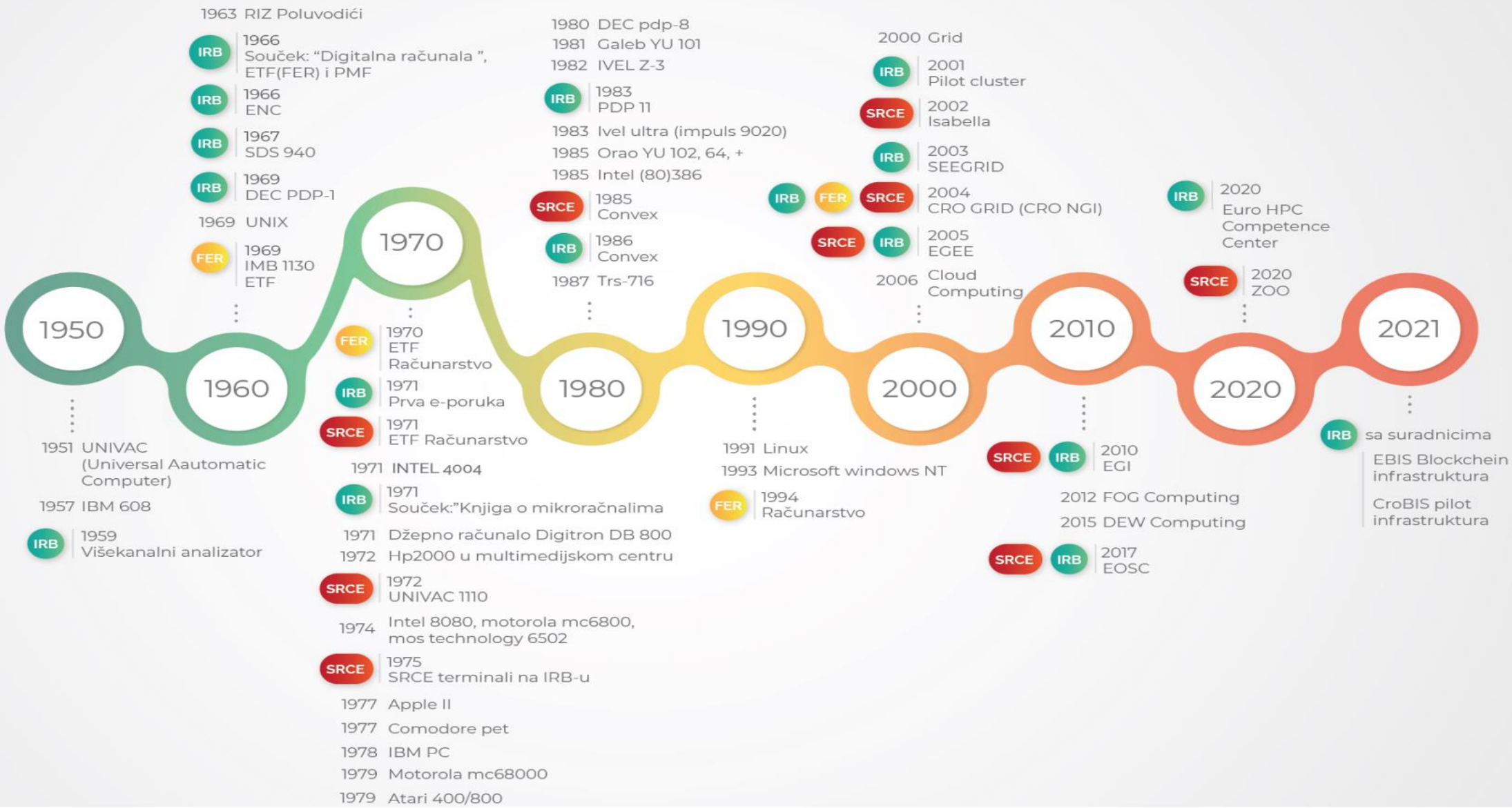
1. EDIC – European Digital Infrastructure Consortium

QC, DLT, AI





Slijed razvoja računarstva



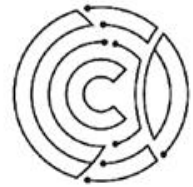
Od CROGRIDA do HR ZOOA



- 2001 IRB pilot cluster
- 2002 Izabella (DataGrid)
- 2003 IRB partnerstvo na EU FP6 SEEGRID projektu kada još nismo bili ni EU kandidati**
- 2004 CROGRID formiranje JRU
- 2005 EGEE+
- 2010 EOSC
- 2020 EuroCC (EuroHPC)
- 2023 EuroCC2
- 2023 HR ZOO



eLab 1: AMOTS

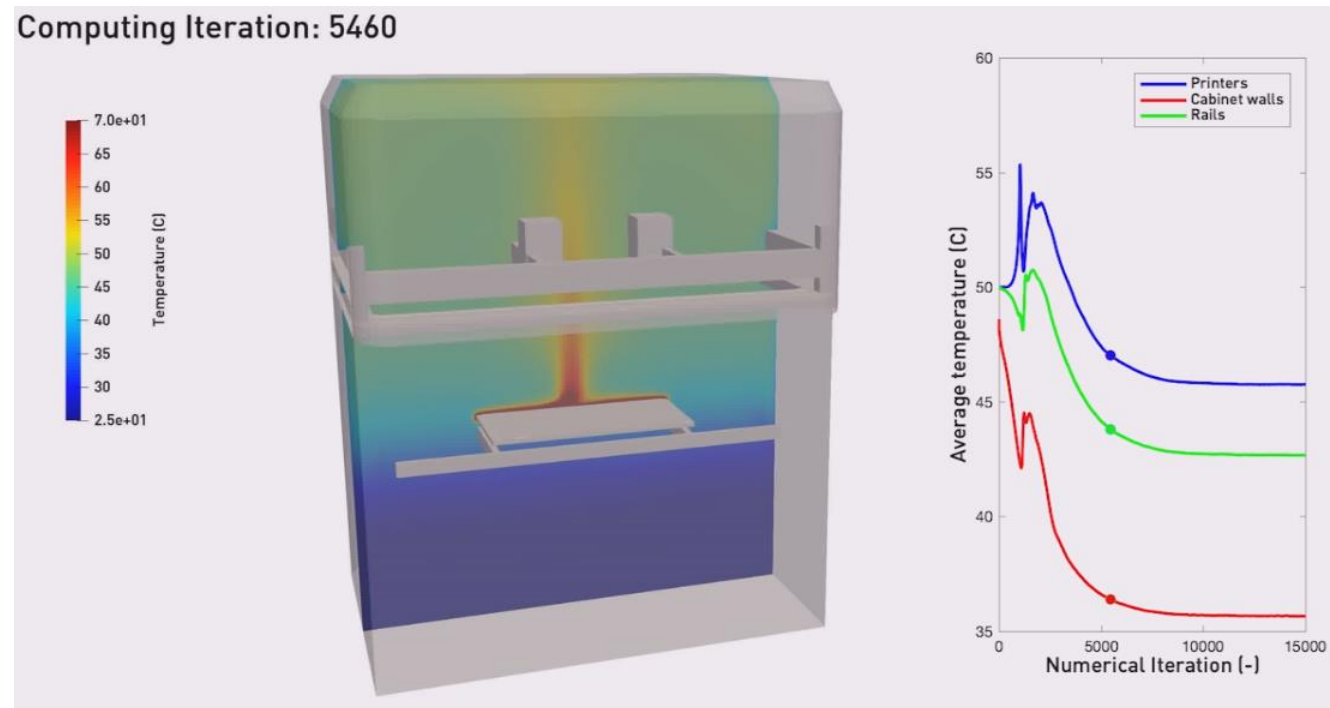


AMOTS: Multi-head Additive Manufacturing with Optimal HPC Thermal Stabilization

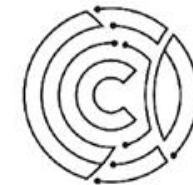
Napravljen je OpenFoam model 3D printera sa više glava.

Simulacijama modela na HPC klasteru istražen je utjecaj temperature na glavne elemente printera.

Rezultati simulacija značajno su pomogli Mikrotvornici pri izradi i optimizaciji prototipa 3D štampača.



eLab 2: 3D CPAM



Tvrtka Danit Peleg je pokrenula platformu koja omogućuje kupcima da personaliziraju i naruče prvi svjetski 3D printani odjevni predmet dostupan za online kupnju na <http://danitpeleg.com>.

3D CPAM projektom je napravljena alternativa njenom proizvodnom procesu, ubrzavajući vrijeme ispisa i omogućavajući buduću transformaciju u lokalnu proizvodnju kod kupca ili blizu njega.

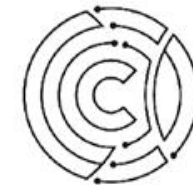


eLab 3: DrugBank Online

DrugBank Online baza sadrži podatke o poznatim lijekovima, njihovim strukturama, svojstvima i području primjene. Bazu koristi industrija lijekova, medicinski kemičari, liječnici, farmaceuti, te šira akademska zajednica.

DrugBank je bazu dao na besplatno korištenje za razvoj i rad Vini modela raka.

U okviru njihovog akademskog programa Dr. Draško Tomić iz Centra za informatiku i računarstvo Instituta Ruđer Bošković je održao pozvano predavanje u kojem je Vini predstavljen akademskoj zajednici



DRUGBANK Online

[Blog] BioTechX USA. No.1 in our Hearts [Read More!](#)

Browse Search Interaction Checker Downloads Products About

Building the foundation for better health outcomes

Access the right information at the right time, with our intelligent clinical drug data API and in-depth knowledge database.

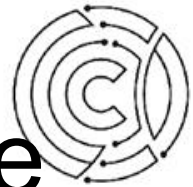
[Learn about our solutions >](#)

Search over 500,000 drugs & drug products on DrugBank Online

Tylenol

Drugs Targets Pathways Indications





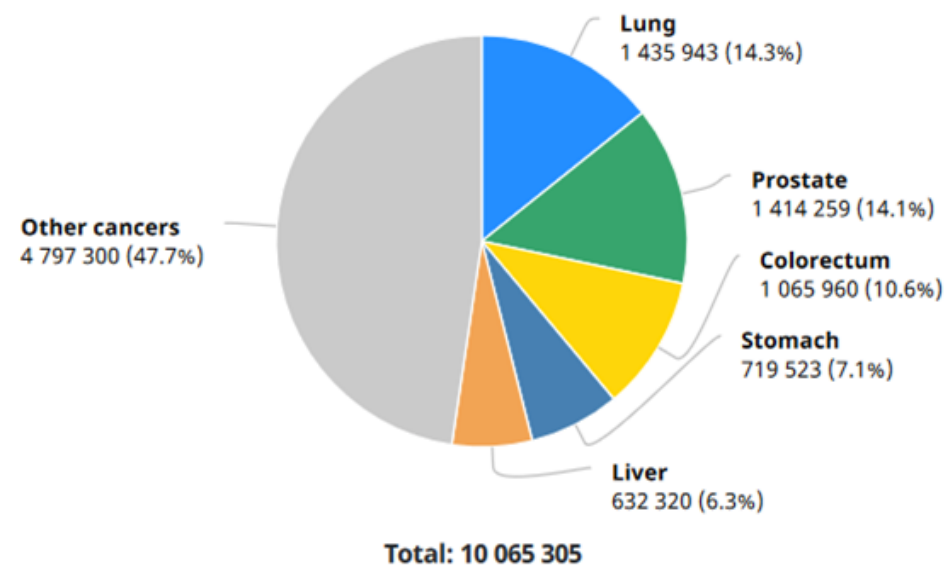
eLab 4: Traženje novih lijekova za rak prostate

Suradnjom onkologa sa KBC Sestre Milosrdnice i znanstvenika Centra za informatiku i računarstvo Instituta Ruđer Bošković dobiven je **EHPC-REG-2022R03-224** projekt za korištenje EuroHPC Regular Access resursa.

Istraživačkom timu je dano na korištenje 10.000.000 (10 miliona) jezgra sati na HPC Vega (IZUM, Maribor) superračunalu.

Te resurse Vini in silico model raka koristi za pronalaženje novih i učinkovitijih terapija za rak prostate.

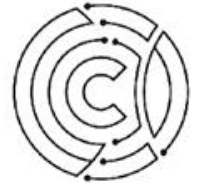
Number of new cases in 2020, males, all ages



Epidemiologija raka prostate u svijetu



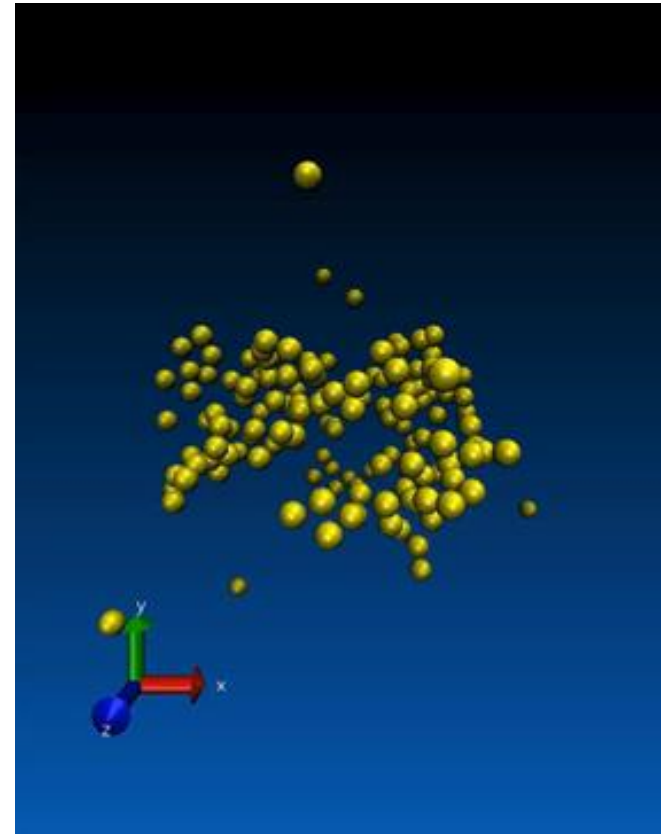
eLab 5: Coarse-grained simulacije DNA molekula



U okviru suradnje UNIRI i Centra za informatiku u računarstvo IRB napravljene su coarse-grained simulacije DNA molekula na superračunalu BURU.

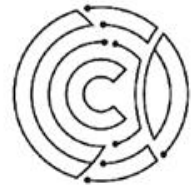
Dio tih rezultata predstavljen je na proteklom SRCE DEI 2023 događanju putem poster prezentacije.

Rezultati tih simulacija se analiziraju i biti će korišteni u prijavi na EuroHPC JU Extreme Scale resurse.



Coarse-grained (krupnozrnata) simulacija 3PT6 DNA strukture



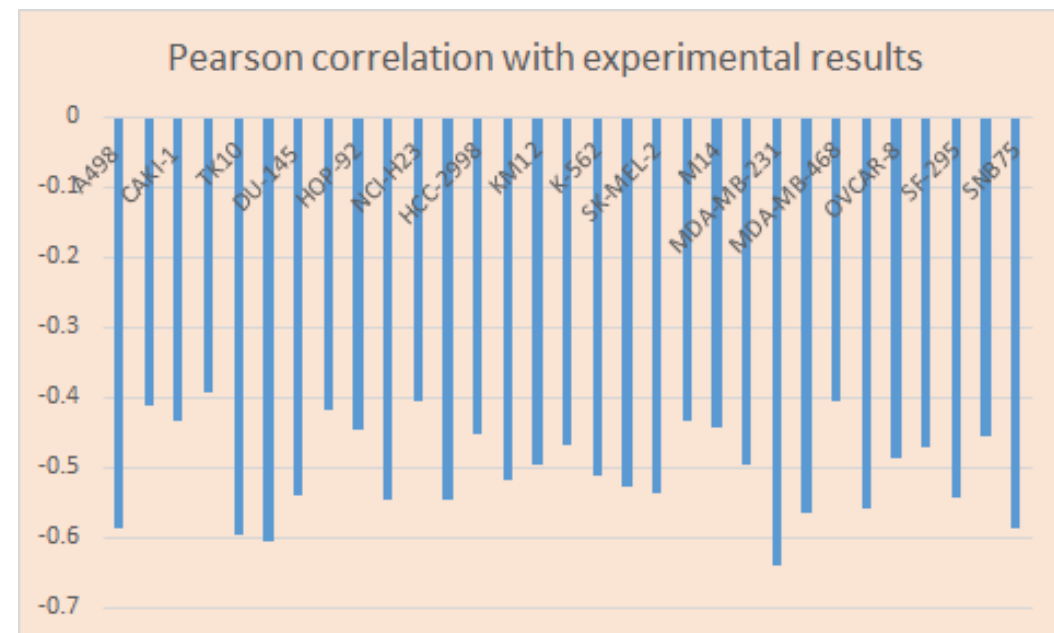


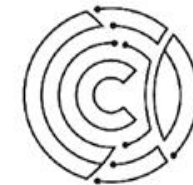
eLab 6: Vini in silico model raka

Istraživački tim Centra za informatiku Instituta Ruđer Bošković dobio je projekt **EHPC-REG-2021R0100** za korištenje EuroHPC Regular Access resursa, 2.500.000 jezgra sati.

U okviru tog projekta znanstvenici su napravili simulacije sa Vini in silico modelom na 30 raznih staničnih linija raka.

Rezultati su pokazali dobro slaganje s eksperimentalnim rezultatima iz NCI-60 baze podataka.





eLab 7: Superračunalstvo u prirodnim znanostima

Centar za informatiku i računarstvo IRB organizirao je jednodnevno događanje pod nazivom

'Superračunalstvo u prirodnim znanostima'.

Događanje je bilo namijenjeno svim znanstvenicima i istraživačima koji žele steći bolji uvid u najnovija postignuća računarstva visokih performansi (HPC) i tehnologija umjetne inteligencije (AI) u područjima molekularne medicine i biologije, računalne i medicinske kemije, te kozmologije.

Namijenjeno je svim znanstvenicima koji žele steći bolji uvid u najnovija postignuća HPC i AI tehnologija na područjima prirodnih znanosti kao što su molekularna medicina i biologija, računalna i medicinska kemija, kozmologija i druga.

» Superračunalstvo u prirodnim znanostima

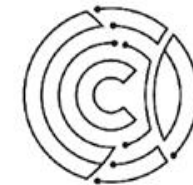
 17.05.2023.
Institut Ruđer Bošković
dvorana III. krila
10:00 - 15:30 sati.

Prijava

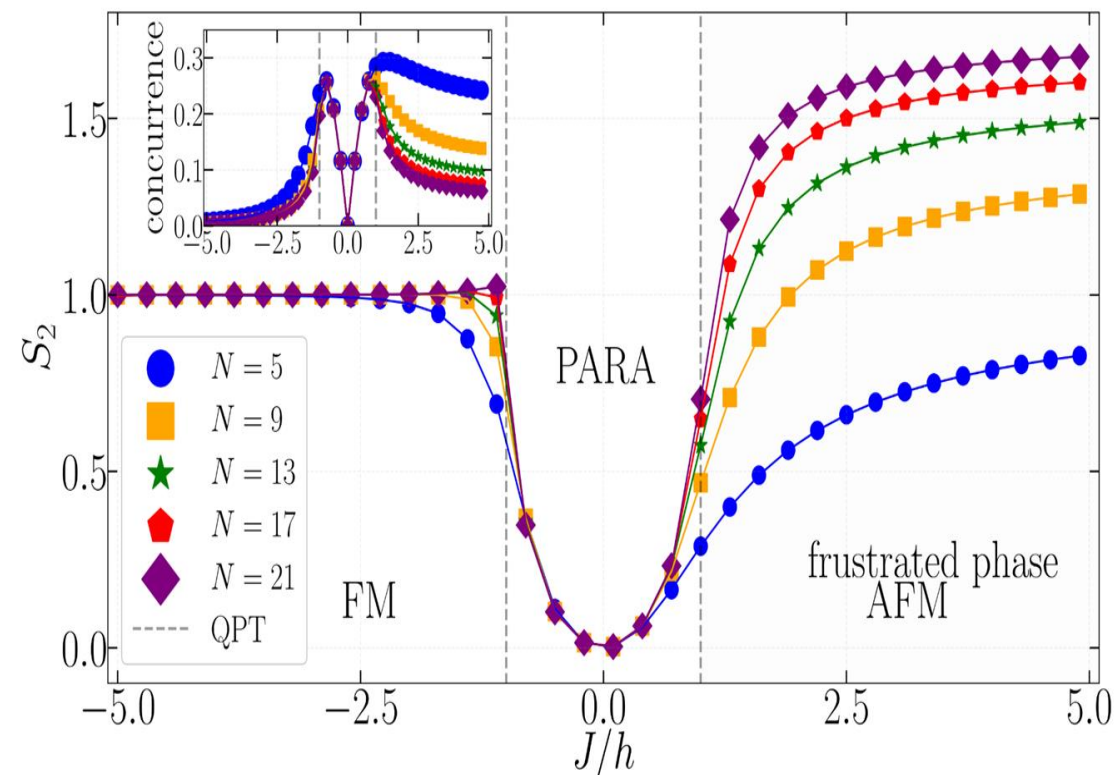
IRB
centar za informatiku i računarstvo
EURO
DATACROSS
CROATIAN COMPETENCE CENTRE FOR HPC



eLab 8: Svojstva kvantne isprepletenosti



- Suradnja s Grupom za fiziku kondenzirane tvari i statističku fiziku, ZTF, IRB
- Cilj: proučiti robusnost isprepletenosti u odnosu na lokalne spin operacije*
- IRB: razvoj paralelnog algoritma te priprema i pokretanje simulacija na klaster i super-računalima (Vega, SuperMUC i lokalni klaster)
- 35x ubrzanje u odnosu na paralelnu CPU verziju



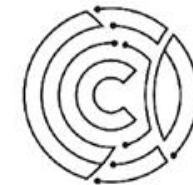
eLab 9: Atmosferski Čerenkovljevi teleskopi

- suradnja sa znanstvenicima sa Sveučilišta u Lodzu, Poljska
- istraživanje utjecaja smanjenje atmosferske transmisije* (u prisustvu oblaka) na atmosferske Čerenkovljeve teleskope
- razvoj modela korekcije podatka obuhvaćenih utjecajem oblaka
- konkretno za potrebe Cherenkov Telescope Array (CTA) opservatorija (uskoro CTA ERIC)

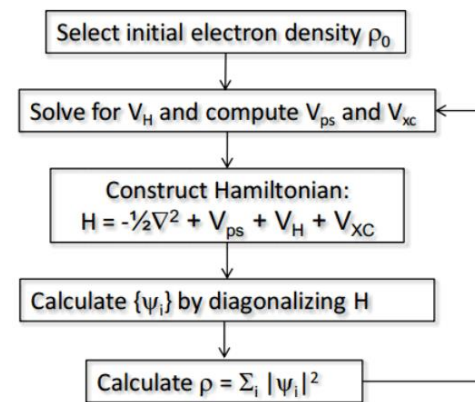
* Pecimotika *et al* JCAP06(2023)011



eLab 10: Rješavanje velikih linearnih sustava s primjenom u DFT izračunima



- Suradnja:
 - Jülich superračunalni centar
 - RIKEN istraživački centar
- Cilj: razvoj novih skalabilnih algoritama za rješavanje sustava lin. jednadžbi i svojstvenih vrijednosti na ARM arhitekturama
- Pristup superračunalu Fugaku

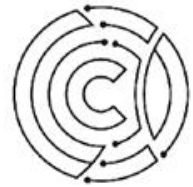


Flowchart of Kohn-Sham equation¹



¹ Picture taken from "Electronic and Vibrational Properties of Single Layer Transition Metal Dichalcogenides (TMDC)", Rasidul Islam et al.

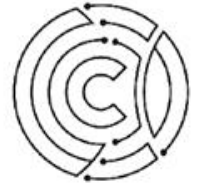
eLab 11: Benchmarking na LUMI superračunalu - EHPC-BEN-2023B11-013



- U okviru nastavka suradnje na području istraživanja DNA metilaza, tim znanstvenika sa UNIRI i IRB je prijavio i dobio EuroHPC EHPC-BEN-2023B11-013 projekt na LUMI superračunalu.
- Tim projektom im je za potrebe istraživanja dodijeljeno 896.000 jezgra sati.
- Rezultati ovog projekta će se koristiti za all-atom simulacije DNA struktura u okviru Extreme Scale Access poziva.



Epilog IRB/CIR EuroCC eLab misije



IRB CIR usustavio je eLab model akceleracije i suporta primjene HPC-a i kontinuirano djeluje na unapređenje kvalitete i kvantiteta znanosti unutar EuroCC2 centra kompetentnosti.

Stojimo na raspolaganju i hvala na pažnji !

