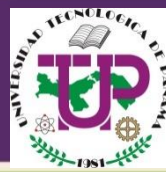


III TALLER DE APLICACIONES DE SIMULACIONES Y PROGRAMACIÓN CUDA: ESTUDIOS A ESCALA ATÓMICA, FENÓMENOS CLIMÁTICOS Y ÓPTICOS”.

HORARIO	LUNES 9
9:00 AM – 9:30 AM	Bienvenida Dr. Reinhardt Pinzón Proyecto FID16-275
9:30 AM – 10:30 AM	Introducción y práctica a Linux, Programación CUDA Aplicaciones de modelos climáticos Dr. Javier Sánchez-G Todos los participantes y facilitadores
10:30 AM – 10:45 AM	RECESO/REFRIGERIO
10:50 AM – 11:50 AM	El HPC de la UTP: capacidades, detalles y estado actual – en el marco del FID16-275 MSc. Xavier Trujillo Todos los participantes y facilitadores
11:55 AM – 12:55 PM	RECESO/ALMUERZO
01:00 PM – 02:00 PM	VISITA A LAS INSTALACIONES DEL HPC, EDIFICIO 1, CVLS CAMPUS Todos los participantes y facilitadores
02:00 PM – 04:00 PM	Dinámica Molecular (Teoría) Dr. Eduardo Bringa Todos los participantes y facilitadores





**PROYECTO, FID2016-275,
“TRANSFERENCIA DE
TECNOLOGÍA HPC: ESTUDIO
DE LOS ASPECTOS A NIVEL
ATÓMICO DE LOS EFECTOS
QUE SE PRODUCEN EN LOS
MATERIALES DEBIDO A LA
IRRADIACIÓN CON
LÁSERES E IONES”**

DR. REINHARDT PINZÓN
Centro de Investigaciones
Hidráulicas e Hidrotécnicas (CIHH)



TRANSFERENCIA DE TECNOLOGÍA HPC: ESTUDIO DE LOS ASPECTOS A NIVEL ATÓMICO DE LOS EFECTOS QUE SE PRODUCEN EN LOS MATERIALES DEBIDO A LA IRRADIACIÓN CON LÁSERES E IONES

PROGRAMA DE FOMENTO A LA INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO (I+D): COLABORACIÓN INTERNACIONAL

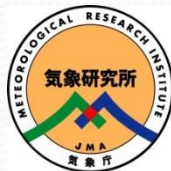
*Proyecto: FID16-275
B/.120,000.00*

Iberogun



UNIVERSIDAD DE MÁLAGA

uma.es



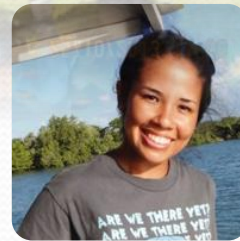
TECHNISCHE UNIVERSITÄT KAISERSLAUTERN



Contenido

- **COLABORADORES CIHH**
- **ANTECEDENTES**
- **JUSTIFICACIÓN**
- **BENEFICIOS/BENEFICIARIOS**
- **OBJETIVOS**
- **REUNIONES DE COORDINACIÓN**
- **ALGUNOS COMENTARIOS...**
- **UN AVANCE DEL ESTRENO...**

COLABORADORES DEL CIHH-UTP



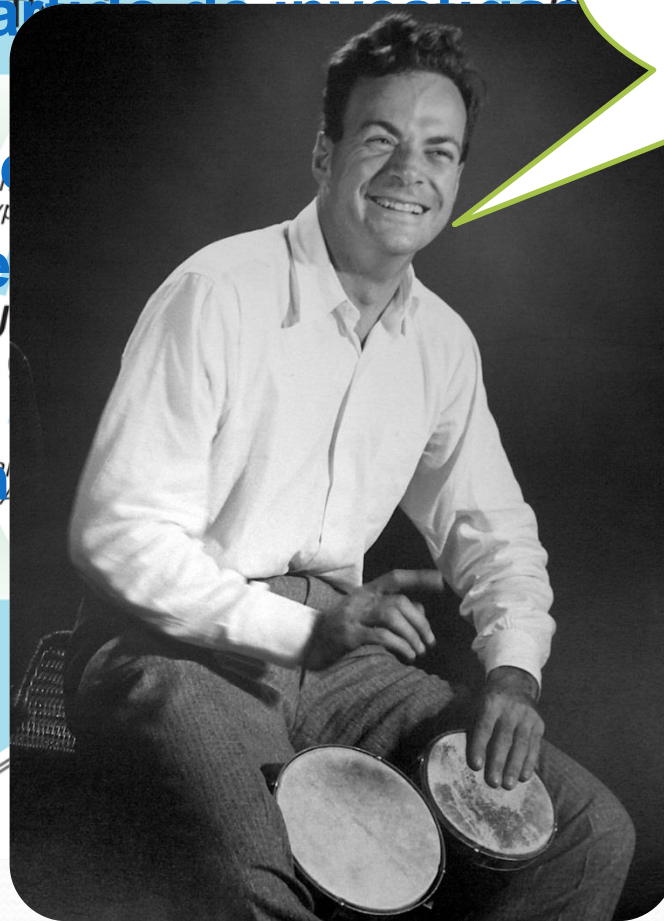
ANTECEDENTES: CONTEXTO COMÚN

Richard Feynman (Imagen de : richard-fey
Premio Nobel en Física 1959

Modelo compartido de investigación y
planificación

HPC (High-Performance Computing)

HDA (High-Dimensional Analysis)

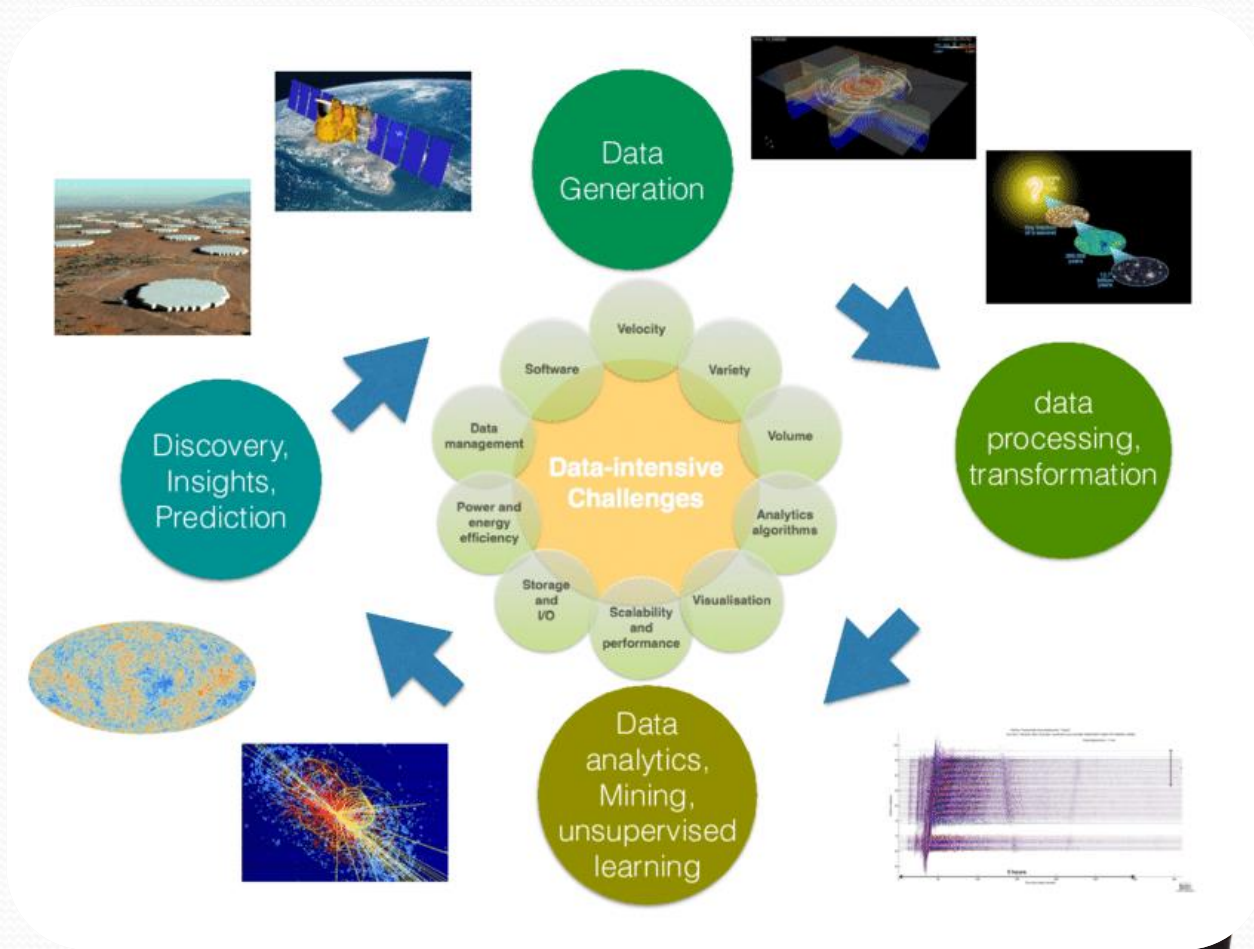


Hacemos más observaciones para ver si las
consecuencias predichas coinciden con la
realidad que encontramos

Computación de

Análisis de Datos

ANTICIPEDENTES CASI SIMULACIONES CASI vs SUPERCOMPUTADORAS



learning
unsupervised
learning



ANTECEDENTES: COLABORACIÓN INTERNACIONAL



TECHNISCHE UNIVERSITÄT
KAISERSLAUTERN



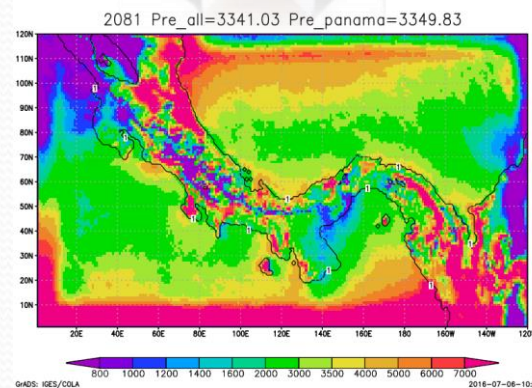
UNIVERSIDAD
DE MÁLAGA

uma.es



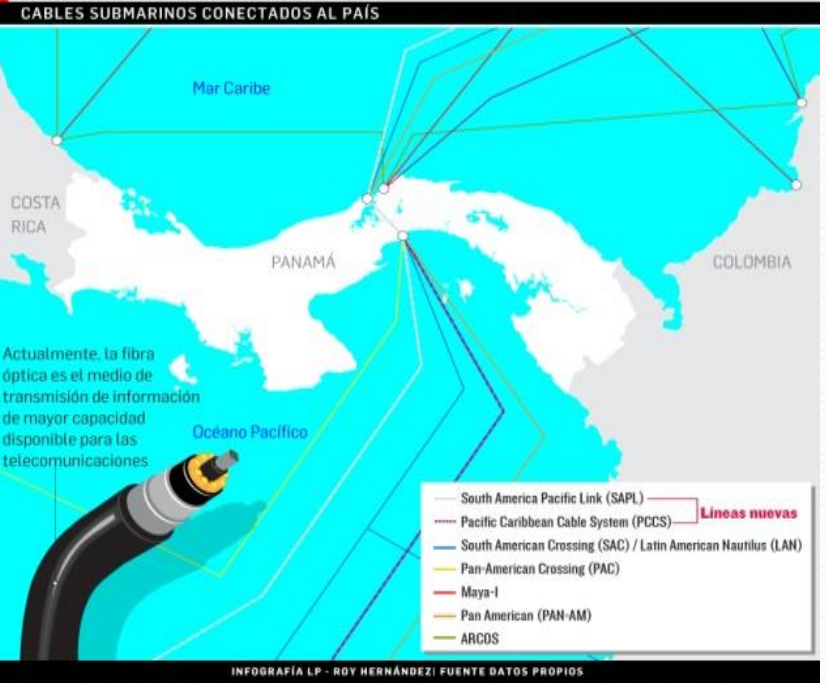
- Interacción de partículas con superficies
- Propiedades del material a nanoescala
- Dinámica de gas
- Física de plasma
- Ablación con láser de superficies

- Aceleración en GPU del procesamiento de imágenes
- Aplicaciones biomédicas
- Computación evolutiva.

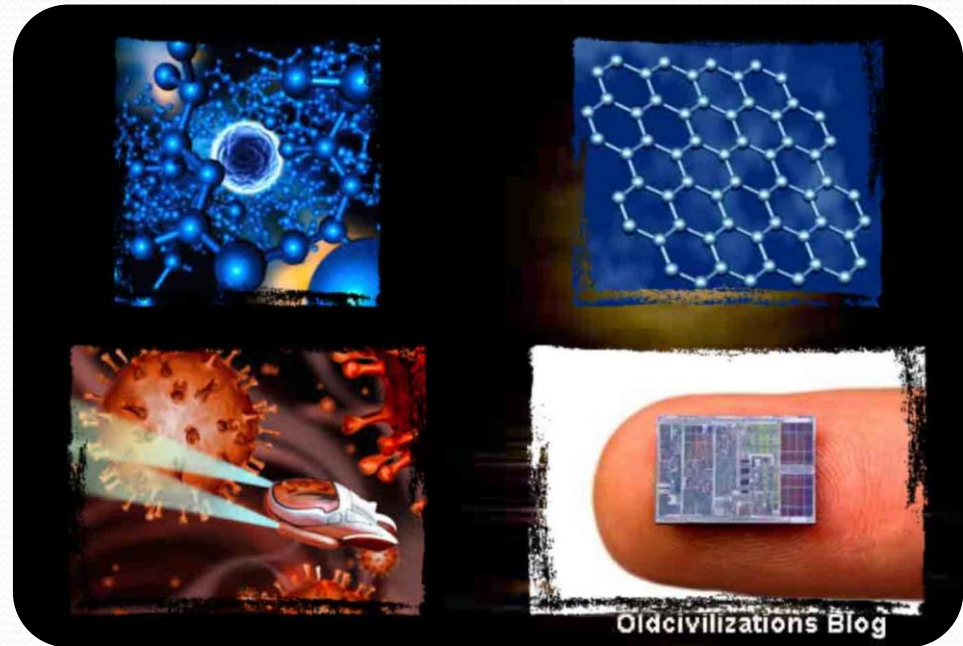
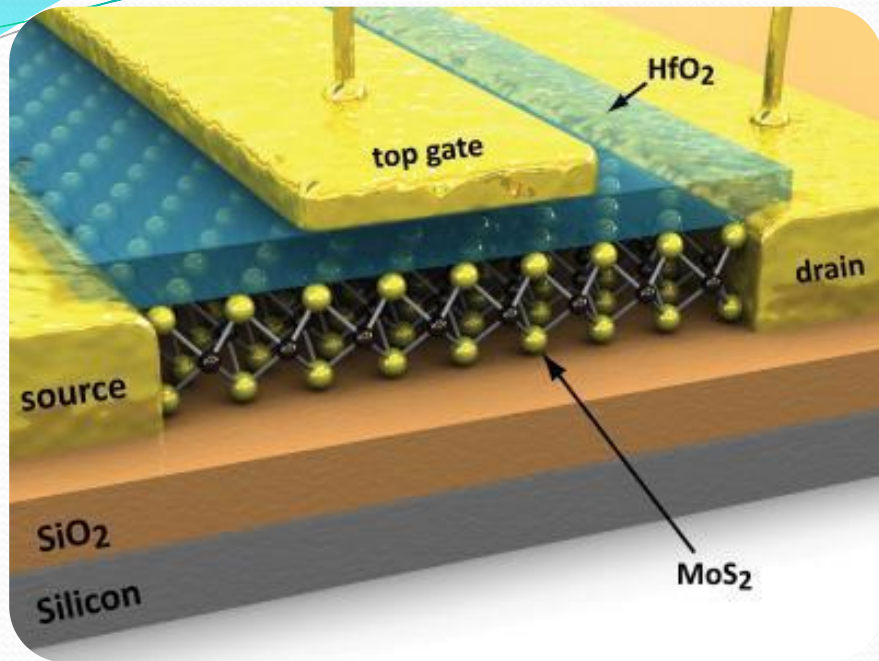


ANTECEDENTES: PANAMÁ CENTRO DE COMUNICACIONES

Trazados de fibra óptica que pasan por Panamá



JUSTIFICACIÓN



Desarrollo de materiales – dígame capas finas en metales, nanomateriales, nanotecnología, y semiconductores prometen un enorme crecimiento de potencialidades generadas por la aplicación de interacciones energéticas discretas y/o coherentes sobre los mismos.

BENEFICIOS/BENEFICIARIOS

- ✓ Generará un conocimiento nacional en un área estratégica como lo es simulación y modelización, la cual es potencialmente desarrollable en el futuro.
- ✓ *Show how*: un camino de interacción entre industria y el sector académico a través del perfeccionamiento de una *expertise* científica.
- ✓ La experiencia adquirida sobre sistemas HPC se transmitirá a otras áreas de conocimiento: medicina, geología, meteorología, ambiente, entre otras.
- ✓ Consecución en nuestro país de un Centro de Investigación y Simulación Asistida por Computadoras a diferentes escalas y fenómenos en la materia condensada, ciencias de los materiales, bioinformática, ecohidrología, cambio climático y sus aplicaciones.
- ✓ *Know how* sobre herramientas de trabajo en materia de colaboración internacional, el cual puede usarse por nuestro sistema educativo.

Proyecto FID16- 275

Objetivo general:

Desarrollar una infraestructura nacional sostenible de conocimiento para HPC; estudiando por medio de simulaciones atómicas asistidas por computadoras los fuertes efectos de no equilibrio que ocurren después que un sólido es irradiado con intensos haces ya sea de láseres o de iones.

Proyecto FID16- 275

Objetivo Específicos:

- **Desarrollar e implementar un código en CUDA (Arquitectura Unificada de Dispositivos de Computo) para una arquitectura clúster de GPUs (Unidades de Procesamiento Gráficos);**

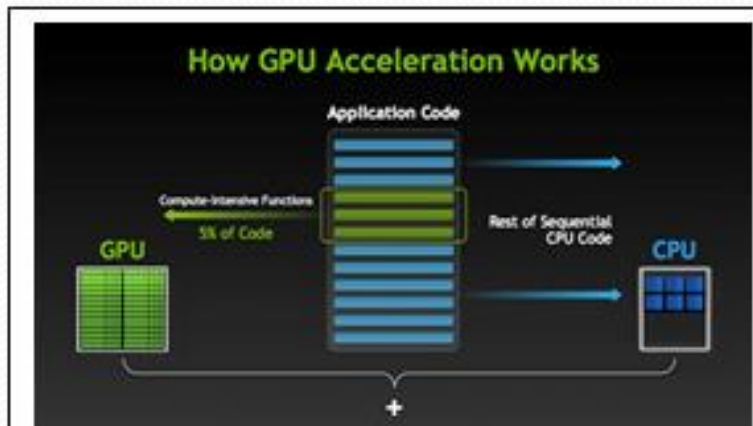


Figura 1

<http://www.nvidia.com/object/what-is-gpu-computing.html>

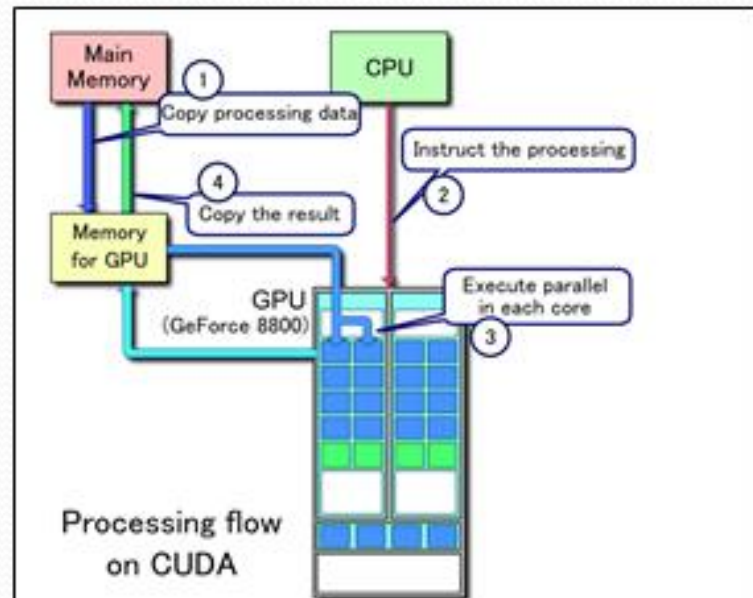
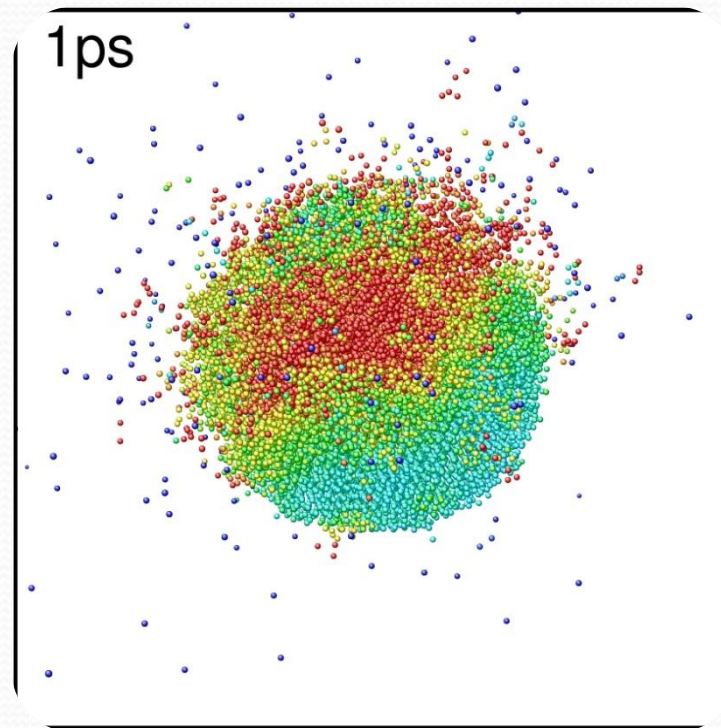


Figura 2

Proyecto FID16- 275

Objetivo Específicos:

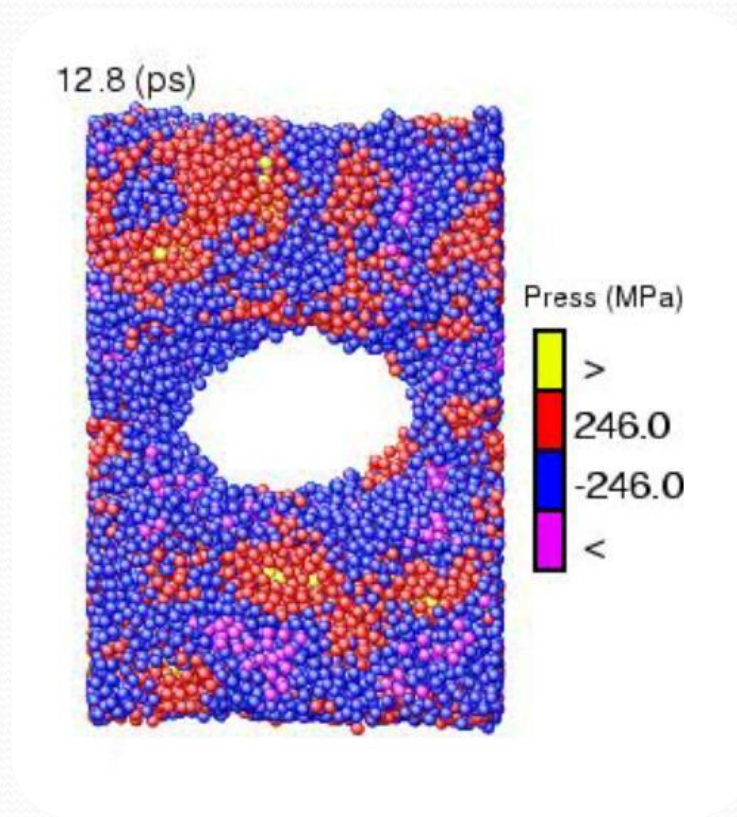
- **Estudiar los aspectos atómicos en la formación de la topografía de la superficie bajo impacto iónico;**



Proyecto FID16- 275

Objetivo Específicos:

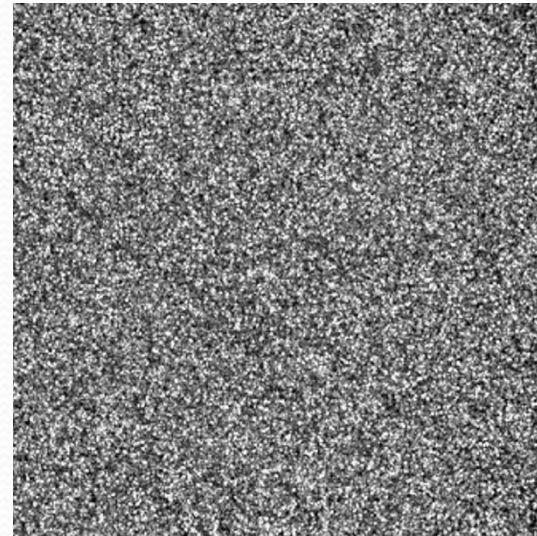
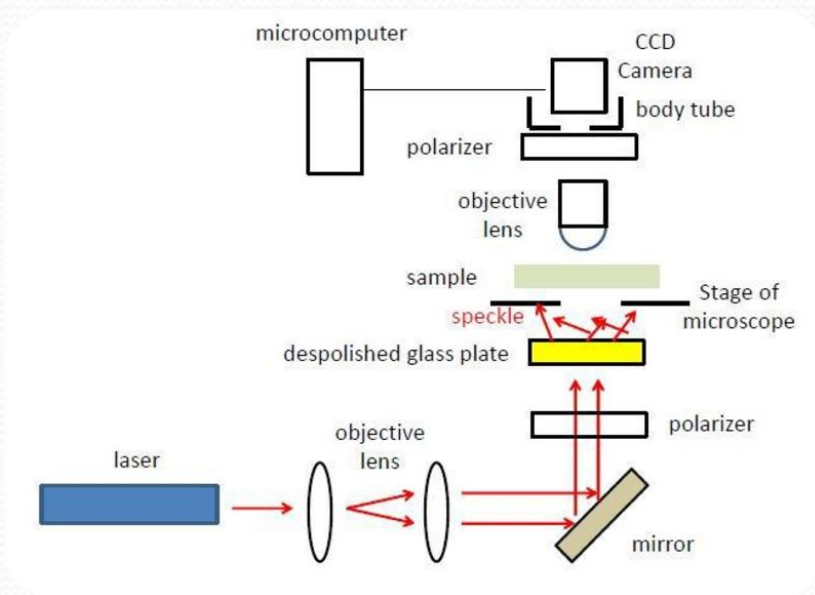
- Analizar la dinámica atómica y de electrón acoplado en metales sometidos a irradiación intensa de láseres ultrarrápidos;



Proyecto FID16- 275

Objetivo Específicos:

- **Analizar experimentalmente propiedades ópticas y eléctricas superficiales del papel (u otros materiales) utilizando el análisis de la textura del patrón de speckle y otras técnicas experimentales; además de caracterizaciones morfológicas y estructural;**



Interferometría speckle para evaluar la flexión de una barra de aluminio; Rev. mex. fís. E vol.62 no.2 México dic. 2016

Proyecto FID16- 275

Objetivo Específicos: • **Divulgación de los resultados obtenidos;**



UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE PANAMÁ

PHYSICAL REVIEW B

covering condensed matter and materials physics

Highlights Recent Accepted Authors Referees Search Press About

Implantation and damage under oblique low-energy Si self-bombardment

Reinhardt Pinzón and Herbert M. Urbasser
Phys. Rev. B **63**, 093801 (2001)

www.hpc-simulations.utp.ac.pa

Article References Citing Articles (7) PDF Export Citation



ABSTRACT

Using molecular-dynamics simulation, we study the bombardment of low-indexed crystalline Si surfaces—(111), (110), and dimer-reconstructed (100) (2×1)—with 100 eV Si atoms for incidence polar angles of 30° and 60° . We find that even at this low energy, ranges are considerably enhanced for incidence along a $\langle 110 \rangle$ channel. Damage and atom relocation, on the other hand, are less affected by channeling. The total numbers of defects created and of relocated atoms depend only slightly on the incidence polar angle. For more oblique incidence, however, they are concentrated more towards the surface. A strong azimuth dependence is observed for the anisotropic, atomically rough (110) and (100) (2×1) surfaces.



UNIVERSIDAD DE MÁLAGA | uma.es



Proyecto FID16- 275

Objetivo Específicos:

- **Prospectar áreas interesadas en simulaciones numéricas en Panamá y Latinoamérica.**

PROYECTO - FID16-275: III TALLER DE APLICACIONES DE SIMULACIONES Y PROGRAMACIÓN CUDA: ESTUDIOS A ESCALA ATÓMICA, FENÓMENOS CLIMÁTICOS Y ÓPTICOS’.

TEMARIO

-Inducción y práctica a Linux

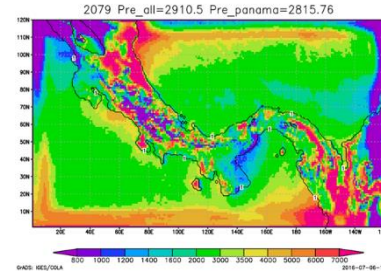
Programación CUDA

Aplicaciones de Modelos Climáticos

Dinámica Molecular: LAMMPS, herramientas OVITO

Cambio Climático: DDS, climate analogues: Panama Case

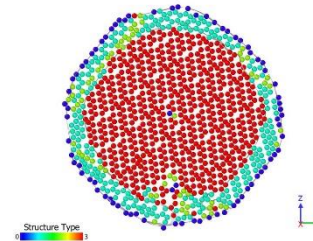
Modelos Climáticos y sus aplicaciones: estudios en el agro.



```
CUDA C
```

Standard C Code	Parallel C Code
<pre>void saapy_serial(int n, float a, float *x, float *y) { for (int i = 0; i < n; ++i) y[i] = a*x[i] + x[i]; } // Perform SAAPY on 3M elements saapy_serial(4096*756, z-0, x, y);</pre>	<pre>@kernel void saapy_parallel(int n, float a, float *x, float *y) { int i = blockIdx.x*blockDim.x + threadIdx.x; if (i < n) y[i] = a*x[i] + x[i]; } // Perform SAAPY on 3M elements saapy_parallel(4096*756, z-0, x, y);</pre>

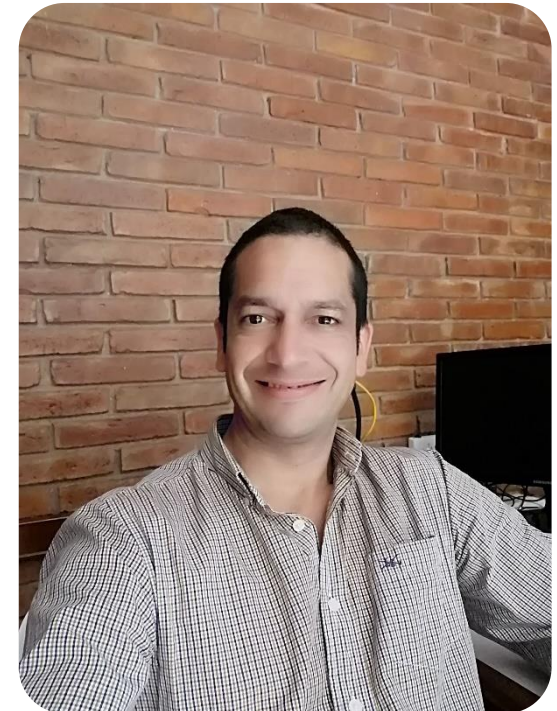
<http://developer.nvidia.com/cuda-lookit>



III TALLER DE APLICACIONES DE SIMULACIONES Y PROGRAMACIÓN CUDA: ESTUDIOS A ESCALA ATÓMICA, FENÓMENOS CLIMÁTICOS Y ÓPTICOS”.



Dr. Eduardo Bringa



Dr. Diego Tramontina



Cada vez que la ciencia abre una puerta. El hombre encuentra a Dios detrás.

A. Einstein

GRACIAS

¿Preguntas?

