

Přehled roku 2021

Naše superpočítače
pomáhají vědě, průmyslu
a společnosti.

Obsah

4	ÚVODNÍ SLOVO ŘEDITELE IT4INNOVATIONS
8	PŘEDSTAVENÍ IT4INNOVATIONS
10	HISTORIE
11	MISE, VIZE, HODNOTY A ČLENSTVÍ
12	ORGANIZAČNÍ STRUKTURA
16	VÝZNAMNÉ UDÁLOSTI V ROCE 2021
20	FINANČNÍ PŘEHLED
20	PROVOZNÍ A INVESTIČNÍ NÁKLADY
21	ZDROJE FINANCOVÁNÍ
24	SOUHRNNÝ VÝČET PROJEKTŮ
26	SUPERPOČÍTAČOVÉ SLUŽBY
28	TECHNICKÉ PARAMETRY SUPERPOČÍTAČŮ
32	PŘIDĚLOVÁNÍ VÝPOČETNÍHO ČASU
36	VÝZKUM A VÝVOJ
38	VLAJKOVÉ LODĚ VE VÝZKUMU A VÝVOJI
40	PŘEHLED VÝSLEDKŮ VĚDY A VÝZKUMU V ROCE 2021
52	LABORATOŘ PRO NÁROČNÉ DATOVÉ ANALÝZY A SIMULACE
53	LABORATOŘ PRO VÝZKUM INFRASTRUKTURY
54	LABORATOŘ VÝVOJE PARALELNÍCH ALGORITMŮ
55	LABORATOŘ MODELOVÁNÍ PRO NANOTECHNOLOGIE
58	LABORATOŘ PRO BIG DATA ANALÝZY
60	VZDĚLÁVACÍ A ŠKOLICÍ AKTIVITY
60	VZDĚLÁVACÍ AKTIVITY
61	ŠKOLICÍ AKTIVITY
62	PRACE SUMMER OF HPC
64	SEZNAM PROJEKTŮ
64	NÁRODNÍ PROJEKTY
64	Projekty v oblasti superpočítačových služeb
66	Projekty v oblasti vědy a výzkumu
73	Projekty v oblasti vzdělávání
75	Projekty VŠB-TUO, na kterých se podílíme
77	MEZINÁRODNÍ PROJEKTY
77	Projekty v oblasti superpočítačových služeb
77	Projekty v oblasti vědy a výzkumu
81	Projekty v oblasti vzdělávání
82	SEZNAM ZKRATEK

Úvodní slovo ředitele IT4Innovations

Vážení čtenáři, příznivci superpočítačového centra IT4Innovations, dostává se vám do rukou publikace, která shrnuje dění v našem superpočítačovém centru za uplynulý rok. Tento rok byl zcela jistě výjimečný v tom, že náš ústav a naše superpočítačové centrum oslavilo deset let od svého založení. Ačkoliv nám velkolepé oslavy za přítomnosti významných osobností překazila koronavirová krize, oslavit tuto událost se nám podařilo alespoň v kruhu zaměstnanců IT4Innovations. Takové výročí si vyžaduje i novou grafickou podobu této publikace, která se vám, jak doufám, bude líbit pro svou přehlednost a originální zpracování.

Ovšem největší a nejsledovanější událostí minulého roku bylo uvedení superpočítače Karolina do provozu. Nejvýkonnější český superpočítač, který byl pořízen v rámci společného celoevropského podniku EuroHPC, je našim uživatelům k dispozici od srpna 2021. Se svým špičkovým výkonem 15,7 PFlop/s se po svém spuštění zařadil do první stovky nejvýkonnějších superpočítačů světa a dle žebříčku Green500 se stal dokonce osmým energeticky nejúčinnějším superpočítačem na světě!

Díky našemu zapojení v konsorciu LUMI mohli naši uživatelé poprvé počítat i na superpočítači LUMI, a sice na jeho neakcelerované části. Pilotní výzva LUMI-C, ve které byly vybrány dva české projekty, odstartovala éru, ve které čeští vědci budou moci využívat výpočetní zdroje na jednom z nejvýkonnějších superpočítačových systémů na světě s výkonem větším než půl exaflopů za sekundu. IT4Innovations se zároveň podílí také na samotném budování superpočítače LUMI a jeho provozování.

S radostí jsme našim uživatelům představili dva nové superpočítače – superpočítač Karolina a LUMI, nicméně se dvěma našimi dlouholetými členy jsme se v roce 2021 museli také rozloučit. Do křemíkového nebe odešel po sedmi letech práce superpočítač Anselm. Historicky první superpočítač v IT4Innovations se přemístil do ostravského Světa techniky, kde jej v rámci výstavní expozice obdivují tisíce návštěvníků. V prosinci svou poslední úlohu spočetl také superpočítač Salomon. Svého času 40. nejvýkonnější superpočítač provedl 8.700.000 výpočetních úloh v rámci 1.085 výzkumných projektů.

I nadále jsme vědecké komunitě a průmyslovým podnikům poskytovali výpočetní čas. Podpořeno bylo 328 projektů, kterým bylo přiděleno více než 280 milionů jádrohodin. Z projektů řešených na našich superpočítačích bych rád vyzdvihl projekt, v němž vědci z několika českých výzkumných ústavů včetně IT4Innovations jako první na světě pozorovali nerovnoměrné rozložení elektronového náboje na atomu a potvrdili tak třicet let starou teoretickou předpověď. Průlomový objev byl zveřejněn v prestižním vědeckém časopise Science.

Velmi mě také těší naše aktivní role v mezinárodních výzkumných aktivitách. Zcela ojedinělá je například naše úspěšnost v zapojení do projektů v rámcovém programu Evropské unie pro výzkum a inovace Horizont 2020, kde v minulém roce IT4Innovations figurovalo hned v šestnácti mezinárodních projektech, přičemž jeden z těchto projektů, projekt LEXIS, jsme sami koordinovali. Excelentní výzkum IT4Innovations potvrdil i výsledek evropského Inovačního radaru, kdy jsme se s počtem sedmi inovací podpořených evropskými projekty zařadili mezi klíčové inovátory České republiky.

Slibně se vyvíjí rovněž spolupráce s průmyslovými podniky, kterou se snažíme neustále rozšiřovat. Od roku 2020 jsme součástí Digitálního inovačního hubu, prostřednictvím kterého pomáháme firmám z Moravskoslezského kraje řešit jejich potřeby v oblasti digitalizace. V minulém roce jsme stáli například u vývoje inteligentního plečkovacího stroje, špičkových brýlí pro virtuální realitu, které používají výrobci automobilů, nebo u projektu, jehož cílem bylo zefektivnění vyšetření sítnic pacientů trénováním neuronových sítí.

Závěrem bych rád poděkoval všem našim zaměstnancům a partnerům, kteří i přes pokračující pandemii COVID-19 společnými silami plnili naše strategické cíle a závazky, zajišťovali chod našeho centra a podíleli se na jeho dalším rozvoji. Svým kolegyním a kolegům, i vám všem ostatním, přeji v nadcházejícím období vše dobré.



Vít Vondrák

ředitel IT4Innovations národního
superpočítačového centra



↔ Budova IT4Innovations byla slavnostně otevřena v roce 2014.

1

Představení IT4Innovations

IT4Innovations národní superpočítačové centrum, které je součástí Vysoké školy báňské – Technické univerzity Ostrava (VŠB-TUO), je předním výzkumným, vývojovým a inovačním centrem v oblasti vysoce výkonného počítání (HPC), datových analýz (HPDA), umělé inteligence (AI) a jejich aplikací do dalších vědeckých, průmyslových i společenských oborů, provozující nejvýkonnější superpočítačové systémy v České republice. IT4Innovations společně s institucemi CESNET a CERIT-SC tvoří strategickou výzkumnou infrastrukturu České republiky **e-INFRA CZ**. Tato infrastruktura je vedena v Cestovní mapě velkých výzkumných infrastruktur České republiky pro výzkum, experimentální vývoj a inovace, kterou sestavuje Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

IT4Innovations poskytuje od roku 2013 nejmodernější superpočítačové technologie a služby jak českým, tak i zahraničním výzkumným týmům z akademické i soukromé sféry za účelem zvýšení konkurenceschopnosti a inovativnosti české vědy a průmyslu.

V roce 2021 provozovalo IT4Innovations čtyři superpočítače:

- Salomon s výkonem 2 PFlop/s – v provozu od léta 2015 do prosince 2021,
- Barbora s výkonem 849 TFlop/s – v provozu od podzimu 2019,
- specializovaný systém pro výpočty umělé inteligence NVIDIA DGX-2 s výkonem 130 TFlop/s (pro AI až 2 PFlop/s) – v provozu od jara 2019,
- Karolina s výkonem 15,7 Pflop/s – v provozu od léta 2021.

České výzkumné komunity však mají kromě superpočítačů provozovaných v IT4Innovations od konce roku 2021 přístup také k **superpočítači LUMI**, který se instaluje ve finském Kajaani. Díky členství IT4Innovations v konsorciu LUMI tvořeném deseti evropskými zeměmi, budou moci čeští vědci počítat na jednom z nejvýkonnějších a nejmodernějších superpočítačů světa, jehož špičkový teoretický výkon by měl v roce 2022 přesáhnout 550 PFlop/s. IT4Innovations se zároveň podílí také na samotném budování superpočítače LUMI a jeho provozování.

Stěžejními tématy výzkumu IT4Innovations jsou zpracování a analýza rozsáhlých dat, strojové učení, vývoj paralelních škálovatelných algoritmů, řešení náročných inženýrských úloh, pokročilá vizualizace, virtuální realita, modelování pro nanotechnologie a vývoj nových materiálů.

Výzkumné aktivity IT4Innovations se realizují v pěti laboratořích:

- Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace,
- Laboratoř pro výzkum infrastruktury,
- Laboratoř vývoje paralelních algoritmů,
- Laboratoř modelování pro nanotechnologie,
- Laboratoř pro big data analýzy.

Nedílnou součástí aktivit IT4Innovations je spolupráce s průmyslovými podniky, díky které bylo IT4Innovations registrováno na úrovni Evropské komise coby Digitální inovační hub (DIH), a stalo se členem evropské sítě digitálních inovačních hubů DIHnet EU. V této souvislosti navázala VŠB-TUO partnerství s Moravskoslezským inovačním centrem Ostrava, aby v roce 2020 společně založily **Digitální inovační hub Ostrava**.

IT4Innovations se nezaměřuje pouze na poskytování přístupu ke špičkovým výpočetním systémům či na aktivity ve vědě a výzkumu, ale nabízí také **širokou škálu odborných školení** zaměřených na získání znalostí potřebných k efektivnímu využívání superpočítačové infrastruktury. IT4Innovations se taktéž podílí na vzdělávání odborníků v HPC, HPDA a AI, zejména v rámci doktorského studijního programu **Výpočetní vědy**. Program je garantován společně s Fakultou elektrotechniky a informatiky VŠB-TUO. Zaměstnanci centra se dále podílí na výuce ve výpočetně zaměřených studijních programech, které nabízí VŠB-TUO od bakalářských až po doktorské studijní programy, jako jsou výpočetní a aplikovaná matematika, informatika, nanotechnologie, aplikovaná mechanika či aplikovaná fyzika.

V roce 2021 se IT4Innovations stalo členem mezinárodního projektového konsorcia **EUMaster4HPC**, které připravuje první celoevropský magisterský studijní program zaměřený čistě na oblast HPC; jeho spuštění se plánuje na zimní semestr 2022.

Historie

- **2011** → založení IT4Innovations → členství v PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe)
- **2013** → spuštění superpočítače Anselm • **2014** → otevření budovy IT4Innovations • **2015** → zprovoznění superpočítače Salomon • **2016** → členství v ETP4HPC (European Technology Platform for High-Performance Computing) • **2018** → Česká republika se připojuje k EuroHPC JU, na jehož aktivitách se IT4Innovations významně podílí → IT4Innovations součástí H2020 Centra excellence POP2 a je registrováno jako DIH Evropskou komisí • **2019** → spuštění superpočítačů Barbora a NVIDIA DGX-2 → členství v BDVA (Big Data Value Association) a EUDAT CDI (EUDAT Collaborative Data Infrastructure) → vznik e-INFRA CZ → start H2020 projektu LEXIS, jehož je IT4Innovations koordinátorem • **2020** → vznik Digitálního inovačního hubu Ostrava → IT4Innovations se stává Národním centrem kompetence pro HPC • **2021** → spuštění superpočítače Karolina → ukončení provozu superpočítačů Anselm a Salomon → členství v EOSC Association

Mise, vize, hodnoty a členství

Mise Realizovat excelentní výzkum v oblasti velmi náročných výpočtů a datových analýz a provozovat přední národní superpočítačovou infrastrukturu, zprostředkovávat její efektivní využití za účelem zvýšení konkurenceschopnosti a inovativnosti české vědy a průmyslu.

Vize IT4Innovations chce být předním superpočítačovým centrem, které poskytuje profesionální služby a realizuje excelentní výzkum v oblasti velmi náročných výpočtů a zpracování rozsáhlých dat ku prospěchu vědy, průmyslu i celé společnosti.

Hodnoty IT4Innovations Profesionalita · Inovativnost · Týmová spolupráce · Značka IT4Innovations

Členství IT4Innovations se významně podílí na aktivitách celoevropského společného podniku EuroHPC a je členem v klíčových evropských infrastrukturách, iniciativách a sdruženích v oblasti HPC a HPDA. Jedná se například o následující:

- BDVA/DAIRO → Big Data Value Association/Data, AI and Robotics
- EOSC → European Open Science Cloud
- ETP4HPC → European Technology Platform for High-Performance Computing
- EUDAT CDI → EUDAT Collaborative Data Infrastructure
- I4MS → ICT Innovation for Manufacturing SMEs
- LUMI → Large Unified Modern Infrastructure
- PRACE → Partnership for Advanced Computing in Europe

Organizační struktura

Organizační struktura
IT4Innovations

Vědecká rada | Ředitel | doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

Úsek výzkumu a vývoje | prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.

- Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace | Ing. Jan Martinovič, Ph.D.
- Laboratoř pro výzkum infrastruktury | Ing. Lubomír Říha, Ph.D.
- Laboratoř vývoje paralelních algoritmů | Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.
- Laboratoř modelování pro nanotechnologie | prof. RNDr. Michal Otyepka, Ph.D.
- Laboratoř pro big data analýzy | prof. Ing. Miroslav Vozňák, Ph.D.
- Oddělení školení a vzdělávání | Ing. Karína Pešatová, MBA

Úsek superpočítačových služeb | Mgr. Branislav Jansík, Ph.D.

- Oddělení provozu a správy HPC | Ing. et Ing. Radovan Pasek
- Oddělení uživatelské podpory | Ing. Petra Lyčková Navrátilová

- Oddělení komunikace | Mgr. Zuzana Červenková
- Oddělení veřejných zakázek a právních služeb | Ing. Jan Juřena
- Ekonomické oddělení | Ing. Petr Válek
- Oddělení bezpečnosti, provozu a správy budov | Ing. Helena Starková
- Oddělení rozvoje | Mgr. Martin Duda

Vědecká rada
IT4Innovations

Předseda | doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

Členové interní

- prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.
- Mgr. Branislav Jansík, Ph.D.
- Ing. Jan Martinovič, Ph.D.
- Ing. Lubomír Říha, Ph.D.
- Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.
- prof. RNDr. Michal Otyepka, Ph.D.
- prof. Ing. Miroslav Vozňák, Ph.D.

Členové externí

- prof. Mgr. Jiří Damborský, Dr. | Loschmidtovy laboratoře Masarykovy univerzity
- doc. Ing. Jiří Jaroš, Ph.D. | Fakulta informačních technologií Vysokého učení technického v Brně
- Ing. Jakub Šístek, Ph.D. | Matematický ústav Akademie věd České republiky
- doc. Ing. Pavel Jelínek, Ph.D. | Fyzikální ústav Akademie věd České republiky
- prof. RNDr. Jaroslav Pokorný, CSc. | Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy

Zaměstnanci
IT4Innovations

Počet zaměstnanců IT4Innovations po přepočtu na ekvivalent plného pracovního úvazku (FTE) činil v roce 2021 celkem 148,55 FTE, z toho tvořilo:

<p>21 % Management a administrativa</p> <p>14 % Superpočítačové služby</p> <p>65 % Výzkum a vývoj</p>	<p>42 % Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace</p> <p>14 % Laboratoř pro výzkum infrastruktury</p> <p>23 % Laboratoř vývoje paralelních algoritmů</p> <p>16 % Laboratoř modelování pro nanotechnologie</p> <p>5 % Laboratoř pro big data analýzy</p>
--	--



KAROLINA

↔ Superpočítač Karolina byl uživatelům výpočetní infrastruktury zpřístupněn v srpnu 2021.

2

Významné události

Leden

Ministerstvo průmyslu a obchodu (MPO) zveřejnilo vítěze národní výzvy na Evropská centra pro digitální inovace, která budou podporovat digitalizaci malých a středních podniků i veřejné správy. Jedním z vítězů je i Digitální inovační hub Ostrava.

Navázána spolupráce s Centrem ENET, které je součástí VŠB-TUO, na projektu Centrum energetických a environmentálních technologií (CEET).

IT4Innovations se zapojilo do projektu SCALABLE (SCALable LAttice Boltzmann Leaps to Exascale), který podporuje vývoj evropských exascalových systémů a podpoří základní výzkum díky pokročilým metodám výpočtové dynamiky tekutin.

IT4Innovations se stalo součástí projektu DICE (Data Infrastructure Capacity for EOSC), který propojuje síť výpočetních a datových center, výzkumných infrastruktur a datových úložišť s cílem vytvořit evropskou infrastrukturu pro EOSC (European Open Science Cloud) v oblasti správy dat a jejich ukládání.

IT4Innovations se zapojilo do projektu LIGATE (Ligand Generator and portable drug discovery platform AT Exascale), ve kterém budou využity evropské superpočítačové systémy za účelem zlepšení počítačového návrhu léků.

Únor

Historicky první ostravský superpočítač Anselm opustil IT4Innovations. Další využití našel v expozicích Světa techniky v ostravských Dolních Vítkovicích.

Březen

IT4Innovations vyvinulo simulaci, která pomohla při zřizování velkokapacitního očkovacího centra na Černé louce v Ostravě.

IT4Innovations se stalo součástí projektu ACROSS (HPC big data artificial intelligence cross stack platform toward exascale), který vyvine platformu sdružující HPC, Big Data a AI. Projekt podpoří aplikace v oblastech letectví, klimatu, počasí a energetiky.

Zprovozněno velkokapacitní datové úložiště PROJECT sloužící pro uchování a zálohování dat, která jsou zpracovávána nebo generována na ostravských superpočítačích.

Duben

Započal projekt IO-SEA (IO Software for Exascale Architecture), jehož součástí je i IT4Innovations. Cílem projektu je vyvinout platformu pro správu a ukládání dat s využitím nejnovějších poznatků z oblasti umělé inteligence a strojového učení pro plánování a optimalizaci datových přenosů.

Excelentní výzkum IT4Innovations potvrdil výsledek Inovačního radaru, kdy s počtem sedmi inovací podpořených evropskými projekty se IT4Innovations zařadilo mezi klíčové inovátory České republiky.

Květen

24. května uplynulo 10 let od oficiálního založení IT4Innovations.

Červen

Byla podepsána deklarace Minho Manifesto, jejímž záměrem je posílit výzkum navázaný na vysoce výkonné počítání a úžeji propojit pět superpočítačových center, která nově disponují tzv. petascale systémy. Do vznikající evropské sítě se zapojilo IT4Innovations a superpočítačová centra v Portugalsku, Slovinsku, Bulharsku a Lucembursku.

V žebříčku TOP500, který sleduje nejvýkonnější superpočítače světa, obsadil superpočítač Karolina 69. místo na světě, v Evropě se umístil na 19. příčce. Z hlediska energetické účinnosti, kterou monitoruje žebříček Green500, se superpočítač Karolina umístil na 15. místě; v žebříčku HPCG získal 38. příčku.

Červenec

V IT4Innovations proběhla diskuze o zelené budoucnosti Evropy, které předsedal místopředseda Evropské komise Frans Timmermans.

Konsorcium e-INFRA CZ, jehož součástí je IT4Innovations, realizovalo [kvantový přenos klíčů](#). Komunikace zabezpečená šifrováním prostřednictvím výměny kvantových klíčů (QKD) představuje nový posun v oblasti zabezpečení komunikace a řeší rizika spojená s nástupem kvantových počítačů.

Srpen

Po sérii testování byl superpočítač Karolina zpřístupněn uživatelům výpočetní infrastruktury.

Září

Martin Golasowski z IT4Innovations získal bronzové umístění v [Cenách Josepha Fouriera](#) za projekt zabývající se optimalizací městské dopravy pomocí inteligentní navigační služby.

[Konsorcium e-INFRA CZ](#) dosáhlo nejvyššího možného počtu bodů v rámci mezinárodního hodnocení velkých výzkumných infrastruktur ČR, které proběhlo pod záštitou MŠMT.

Georg Zitzlsberger získal další dva certifikáty instruktora programu [NVIDIA Deep Learning Institute \(DLI\)](#), a to pro následující kurzy: Building Transformer-Based Natural Language Processing Applications a Fundamentals of Deep Learning.

Listopad

Vědci z několika českých výzkumných ústavů včetně IT4Innovations jako první na světě poprvé pozorovali nerovnoměrné rozložení elektronového náboje na atomu a potvrdili tak třicet let starou teoretickou předpověď. Průlomový objev vyšel v prestižním časopisu [Science](#).

Vyšel sborník „[Supercomputing in Science and Engineering 2019–2020](#)“ představující 21 vybraných projektů, které se na ostravských superpočítačích počítaly v rozmezí 13.–19. Veřejné grantové soutěže.

V žebříčku [Green500](#) z listopadu 2021, který hodnotí superpočítače z hlediska energetické účinnosti, se superpočítač Karolina po upgradu jeho GPU akcelerované části umístil celosvětově na 8. místě. V Evropě mu patřila 3. příčka.

Proběhl pátý ročník [Konference uživatelů IT4Innovations](#).

Prosinec

Svou poslední úlohu dopočítal [superpočítač Salomon](#). Éra svého času 40. nejvýkonnějšího superpočítače skončila po šesti letech provozu.

Jakub Homola z Laboratoře pro výzkum infrastruktury si převzal [ocenění profesora Babušky](#) za vynikající práci v oboru počítačových věd za rok 2021. Odborná porota ocenila jeho diplomovou práci, ve které využíval ostravské superpočítače.

Byl [ukončen projekt LEXIS](#) (Large-scale Execution for Industry & Society), jehož koordinátorem bylo IT4Innovations. Cílem projektu bylo vytvořit pokročilou inženýrskou platformu, a to využitím moderních technologií, jako jsou vysoce výkonné počítání, velmi rozsáhlá data a cloudové služby.



↔ NVIDIA-DGX2

Superpočítačová infrastruktura IT4Innovations byla na jaře 2019 rozšířena o specializovaný výpočetní systém NVIDIA DGX-2. Systém je navržen tak, aby řešil nejnáročnější úlohy umělé inteligence, při kterých dosahuje špičkového výkonu 2 PFLOP/s.

3

Finanční přehled

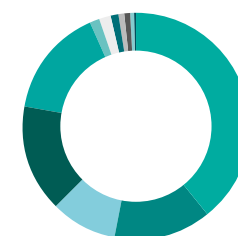
Provozní a investiční náklady

Celkové náklady IT4Innovations činily 497.097.000 Kč. Z této částky byly provozní (neinvestiční) náklady rovny 41 %, investiční (kapitálové) náklady tvořily 59 %.

Nejvyšší část provozních nákladů tvořily mzdové výdaje, služby (náklady za spotřebu elektrické energie, servis provozovaných systémů a podpůrné infrastruktury, technickou a systémovou podporu atd.) a režijní výdaje projektů.

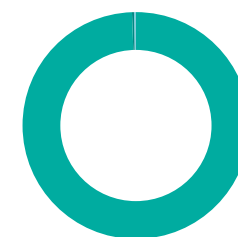
V porovnání s rokem 2020 došlo k výraznému nárůstu investičních nákladů, a to z 19.918.000 Kč (rok 2020) na 291.833.000 Kč (rok 2021). Za tímto zvýšením stojí zejména náklady spojené s pořízením nového EuroHPC petascalového superpočítače Karolina.

Skladba provozních nákladů Celkem 205.264.000 Kč | 41 %



- 39,3 % Mzdové výdaje – výzkumné laboratoře
- 13,8 % Mzdové výdaje – management a administrativa
- 9,5 % Mzdové výdaje – superpočítačové služby
- 15,4 % Služby
- 15,4 % Režijní výdaje projektů
- 1,5 % Členské poplatky do mezinárodních organizací a konsorcií
- 1,5 % Zahraniční a domácí pracovní cesty (vč. zvaných přednášejících)
- 1,1 % Drobný dlouhodobý hmotný majetek
- 1,0 % Stipendia
- 0,7 % Spotřební materiál
- 0,6 % Odpisy
- 0,2 % Ostatní náklady

Skladba investičních nákladů Celkem 291.833.000 Kč | 59 %



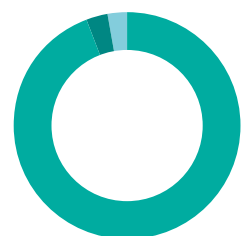
- 99,5 % Dlouhodobý hmotný majetek – stroje a zařízení
- 0,3 % Dlouhodobý hmotný majetek – stavby
- 0,2 % Dlouhodobý nehmotný majetek

Zdroje financování

V roce 2021 hospodařilo IT4Innovations se zdroji ve výši 505.033.000 Kč. Investiční náklady představovaly 58 % z celkových zdrojů financování, neinvestiční dosáhly 42 %. Uvedené prostředky mimo jiné obsahují rozdíl tvorby a čerpání fondu účelově určených prostředků z předchozích let a zisk před zdaněním. Největší podíl na zdrojích financování měly strukturální fondy následované národními projekty. Třetím nejdůležitějším zdrojem financování IT4Innovations byly mezinárodní projekty. Dále následovaly: dlouhodobý koncepční rozvoj výzkumné organizace, vlastní prostředky, smluvní výzkum a pronájem výpočetního času a ostatní zdroje.

Zdroje financování – investiční náklady

Celkem 291.833.000 Kč



- 94,2% Strukturální fondy (projekty Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání a projekty Operačního programu Podnikání a inovace pro konkurenceschopnost)
- 3,1% Vlastní prostředky
- 2,7% Dlouhodobý koncepční rozvoj výzkumné organizace

Zdroje financování – neinvestiční náklady

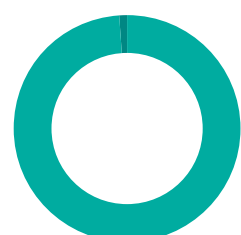
Celkem 213.200.000 Kč



- 38,7% Národní projekty
- 26,9% Mezinárodní projekty
- 12,2% Strukturální fondy
- 9,2% Dlouhodobý koncepční rozvoj výzkumné organizace
- 8,3% Vlastní prostředky
- 2,4% Smluvní výzkum a pronájem výpočetního času
- 2,3% Ostatní

Strukturální fondy

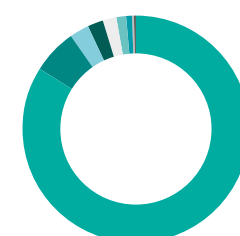
Celkem 301.085.000 Kč



- 99,1% Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání – MŠMT ČR
- 0,9% Operační program Podnikání a inovace pro konkurenceschopnost – MPO ČR

Národní projekty

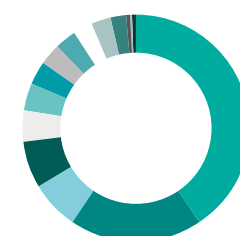
Celkem 82.478.000 Kč



- 84,1% Projekty velkých infrastruktur pro VaVal – MŠMT ČR
- 6,3% TREND – TAČR
- 2,7% Standardní projekty – GAČR
- 2,3% Bezpečnostní výzkum České republiky – Ministerstvo vnitra ČR
- 2,0% Centra kompetence – TAČR
- 1,3% Mezinárodní grantové projekty hodnocené na principu LEAD Agency – GAČR
- 0,8% Projekty programu TRIO – MPO ČR
- 0,3% Podpora vědy a výzkumu v Moravskoslezském kraji – MSK
- 0,1% Podpora mobility výzkumných pracovníků a pracovníků v rámci mezinárodní spolupráce ve VaVal – MŠMT ČR
- 0,1% Individuální dotace – MSK

Mezinárodní projekty

Celkem 57.294.000 Kč



- 40,6% EUROCC
- 18,9% LEXIS
- 7,1% POP2
- 6,7% PRACE 6IP
- 4,3% LIGATE
- 3,9% EVEREST
- 3,3% ACROSS
- 3,1% s-NEBULA
- 3,0% SCALABLE
- 2,9% IO-SEA
- 2,7% ExaQute
- 2,2% OPENQKD
- 0,6% Cloudifactoring
- 0,4% TETRAMAX
- 0,3% Sctrain

Souhrnný výčet projektů

Národní projekty

Projekty podpořené Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy

Projekt velkých infrastruktur pro výzkum, experimentální vývoj a inovace

→ e-Infrastruktura CZ

Projekty Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání

→ IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale

→ e-INFRA CZ: Modernizace

→ Doktorská škola pro vzdělávání v oblasti matematických metod a nástrojů v HPC

→ Technika pro budoucnost 2.0

→ Umělá inteligence a uvažování

→ Věda bez hranic 2.0

→ Modelování srážkových procesů v nízkoteplotním plazmatu

→ Vývoj nástroje pro zpracování a vizualizaci vědeckých dat ve VR s podporou více uživatelů

→ Nové zdroje THz záření emitovaného pomocí spintronických jevů

→ Vývoj výpočetních algoritmů pro řešení nelineárních úloh strukturální dynamiky s využitím numerické knihovny ESPRESO

Podpora mobility výzkumných pracovníků a pracovníků v rámci mezinárodní spolupráce ve VaVal

→ Víceúrovňový design nových permanentních magnetů bez prvků vzácných zemin

Projekty podpořené Moravskoslezským krajem

Individuální dotace

→ Digitální inovační hub – pilotní ověření

Podpora vědy a výzkumu v Moravskoslezském kraji

→ Podpora talentovaných studentů doktorského studia na VŠB-TUO

Projekty podpořené Grantovou agenturou České republiky

Mezinárodní grantové projekty hodnocené na principu LEAD Agency

→ Prostorovo-časové metody hraničních prvků pro řešení rovnice vedení tepla

Standardní grantové projekty

→ Modifikace teplotní stability slitin na bázi W-Cr pro aplikaci ve fúzních reaktorech

Projekty podpořené Technologickou agenturou České republiky

Program Národní centra kompetence

→ Personalizovaná medicína – diagnostika a terapie

Mezinárodní projekty

Program TREND

- Vývoj expertního systému pro automatické vyhodnocování patologií ze snímku oka
- Výzkum a vývoj funkčního vzorku železničního vozidla se schopností sběru dat a softwaru – simulátoru se schopností generování dat pro trénování detekce překážek v simulovaných podmínkách
- Vytvoření modelu pro hodnocení dopadů změn parametrů daňově-dávkového systému na socioekonomickou situaci rodin s dětmi v České republice

Projekty podpořené Ministerstvem průmyslu a obchodu

Projekty programu TRIO

→ Vtokové a výtokové objekty čerpacích a turbínových stanic

Projekty Operačního programu Podnikání a inovace pro konkurenceschopnost

→ Digitální dvojče produktu v rámci výrobních závodů Siemens

→ SmartFleet – software na bázi AI pro plnohodnotné využití elektromobilů v podnicích a maximalizaci jejich podílu ve vozovém parku

→ Hologramy s aktivními bezpečnostními prvky

Projekty jiných součástí univerzity, na jejichž řešení se podílíme

→ Zapojení umělé inteligence do příjmu tísňového volání (projekt podpořen Ministerstvem vnitra ČR)

→ Optimalizace provozních parametrů elektrické distribuční soustavy s využitím umělé inteligence (projekt podpořen TAČR)

→ Bezkontaktní detektor částečných výbojů pro distribuční vedení VN (projekt podpořen TAČR)

→ Národní centrum pro energetiku (NCE) (projekt podpořen TAČR)

→ Chytrý systém pro řízení energie energetických sítí (projekt podpořen TAČR)

→ CEET – Centrum energetických a environmentálních technologií (projekt podpořen TAČR)

Projekty 8. rámcového programu pro výzkum a inovace Evropské unie – Horizont 2020

→ EUROCC – National Competence Centres in the framework of EuroHPC

→ LEXIS – Large-scale EXecution for Industry & Society

→ POP2 – Performance Optimisation and Productivity 2

→ PRACE-6IP – Partnership for Advanced Computing in Europe, 6. implementační fáze

→ LIGATE – LIgand Generator and portable drug discovery platform AT Exascale

→ EVEREST – dEsign enVironmEnt foR Extreme-Scale big data analyTics on heterogeneous platforms

→ ACROSS – HPC big dAta artifiCial intelligence cross stack platfoRm tOwardS exaScale

→ s-NEBULA – Novel Spin-Based Building Blocks for Advanced TeraHertz Applications

→ SCALABLE – SCALable LAttice Boltzmann Leaps to Exascale

→ IO-SEA – IO Software for Exascale Architecture

→ ExaQUte – Exascale Quantifications of Uncertainties for Technology and Science Simulation

→ OPENQKD – Open European Quantum Key Distribution Testbed

→ CloudiFacturing – Cloudification of Production Engineering for Predictive Digital Manufacturing

→ TETRAMAX – Technology Transfer via Multinational Application Experiments

→ EXPERTISE – Experiments and High-Performance Computing for Turbine Mechanical Integrity and Structural Dynamics in Europe

→ DICE – Data Infrastructure Capacity for EOSC

Erasmus+ projekty

→ SCtrain – Supercomputing knowledge partnership

4

Superpočítačové služby

IT4Innovations provozuje nejvýkonnější superpočítačové systémy v České republice, které využívají především akademická pracoviště a výzkumné instituce. Část kapacity je rovněž vyhrazena pro rozvoj spolupráce mezi akademickou sférou a průmyslovými partnery, či pro samostatné využití smluvními partnery formou komerčního pronájmu.

V roce 2021 IT4Innovations provozovalo čtyři superpočítače – superpočítače Salomon (2 PFlop/s), Barbora (849 TFlop/s), specializovaný systém pro výpočty umělé inteligence NVIDIA DGX-2 (130 TFlop/s a 2 PFlop/s pro AI) a Karolina (15,7 PFlop/s).

Petascalový systém Karolina byl instalován v průběhu první poloviny roku a plně zprovozněn v létě 2021. Pořízen byl v rámci celoevropského společného podniku EuroHPC, přičemž 35 % jeho výpočetní kapacity je k dispozici uživatelům z členských zemí EuroHPC. Ihned po svém spuštění se zařadil mezi nejvýkonnější HPC systémy v Evropě. V žebříčku TOP500, který sleduje superpočítače z hlediska jejich výkonnosti, se v roce 2021 superpočítač Karolina celosvětově umístil na 69. pozici, v Evropě obdržel 19. příčku. V žebříčku Green500 energeticky nejúčinnějších superpočítačů obsadil 8. místo a v Evropě bronzovou příčku; v žebříčku HPCG se umístil na 38. místě.

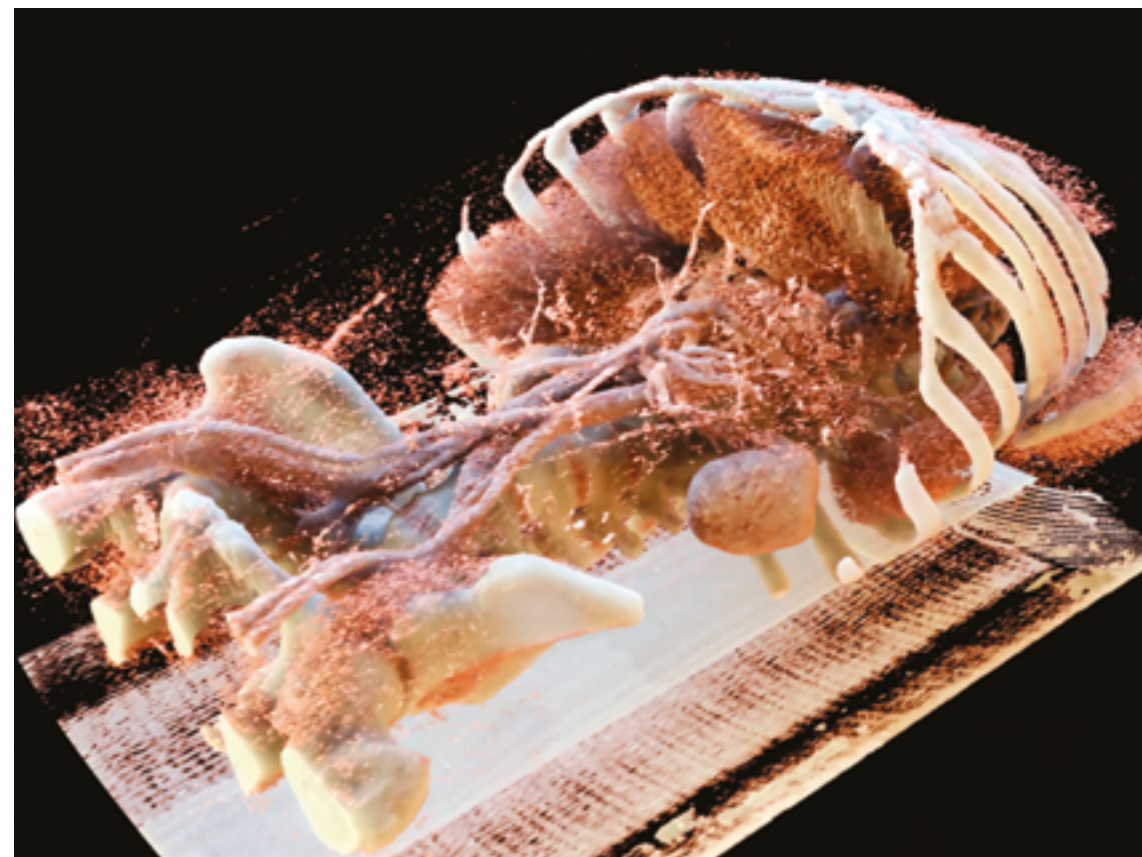
V pořadí pátý ostravský superpočítač, který dodala společnost Hewlett Packard Enterprise, byl navržen tak, aby uceleně pokryl uživatelské požadavky při řešení komplexních vědeckých i průmyslových problémů zahrnujících jak klasické numerické simulace, tak rozsáhlé datové analýzy nebo i využití umělé inteligence.

Na začátku roku došlo také k ukončení provozu historicky prvního ostravského superpočítače Anselm. Za dobu svého provozu na něm bylo spuštěno více než 2,6 milionů

výpočetních úloh v rámci 725 výzkumných projektů. Nyní je superpočítač Anselm součástí výstavní expozice Svět civilizace v Dolních Vítkovicích v Ostravě.

V roce 2021 se pokračovalo s instalací jednoho z nejvýkonnějších superpočítačů v Evropě i ve světě, **pre-exascale superpočítače LUMI**, který bude v průběhu roku 2022 uveden do provozu ve finském Kajaani. Díky členství IT4Innovations v LUMI konsorciu tvořeném koordinujícím Finskem a dále Belgií, ČR, Dánskem, Estonskem, Islandem, Nizozemím, Norskem, Polskem, Švédskem a Švýcarskem, budou moci na superpočítači LUMI počítat i vědecké týmy z České republiky. IT4Innovations se zároveň podílí také na samotném budování superpočítače LUMI a jeho provozování.

Další novinkou roku 2021 bylo zprovoznění velkokapacitního **datového úložiště PROJECT**. Úložiště s kapacitou 15 petabajtů staví na nejmodernějších technologiích, konkrétně na řešení Spectrum Scale od společnosti IBM. Řešení slibuje dostatek kapacity, spolehlivý a rychlý provoz a obsluhuje nejen specifické datové potřeby stávajících superpočítačů, ale díky své modulární architektuře umožňující následné aktualizace a rozšiřování, nabídne své kapacity i jejich nástupcům.



↔ Zpracování medicínských dat

Ve spolupráci s lékaři Fakultní nemocnice Ostrava IT4Innovations vyvíjí nástroje na automatickou segmentaci a 3D rekonstrukci modelů tkání ze snímků z počítačové tomografie a magnetické rezonance.

Technické parametry superpočítačů

	Salomon	NVIDIA DGX-2	Barbora	Karolina	LUMI-C
Uvedení do provozu	léto 2015	jaro 2019	podzim 2019	léto 2021	podzim 2021
Teoretický výkon	2 PFlop/s	130 TFlop/s, 2 Pflop/s pro AI	849 TFlop/s	15,7 PFlop/s	6,3 PFlop/s
Operační systém	CentOS 64bit 7.x	CentOS 64bit 7.x	CentOS 64bit 7.x	Centos 64 bit 7.x	Custom Cray
Operační uzly	1.008	1	201	831	1.536
CPU na uzel	2x Intel Haswell, dvanáctijádrový, 2,5 GHz, celkem 24.192 jader	2x Intel Xeon Platinum, dvacetičtyřjádrový, celkem 48 jader	2x Intel Cascade Lake, osmnáctijádrový, 2,6 GHz, celkem 7.236 jader	720x 2x AMD 7H12, šedesátičtyřjádrový, 2,6 GHz, celkem 92.160 jader 72x 2x AMD 7763, šedesátičtyřjádrový, 2,45 GHz, celkem 9.216 jader 72x 8x NVIDIA A100 GPU, celkem 576 GPU 32x Intel Xeon-SC 8628, dvacetičtyřjádrový, 2,9 GHz, celkem 768 jader 36x 2x AMD 7H12, šedesátičtyřjádrový, 2,6 GHz, celkem 4.608 jader 2x 2x AMD 7452, třicetidvoujádrový, 2,35 GHz, celkem 128 jader	1376x AMD EPYC 7763, 2,45/3,5 GHz, 128-jádrový (2x64 vláken), celkem 176.128 jader 128x AMD EPYC 7763, 2,45/3,5 GHz, 128-jádrový (2x64 vláken), celkem 16.384 jader 32x AMD EPYC 7763, 2,45/3,5 GHz, 128-jádrový (2x64 vláken), celkem 8.192 jader
RAM na uzel	128 GB, 3,25 TB (výpočetní uzel UV)	1,5 TB DDR4, 512 GB HBM2 (16 x 32 GB)	192 GB 6 TB tlustý uzel	256 GB / 1 TB (GPU) / 24 TB tlustý uzel 320 GB HBM2 (8 x 40 GB) GPU	256 GB / 512 GB / 1.024 GB
GPU akcelerátory	N/A	16x NVIDIA Tesla V100 32 GB HBM2	32x NVIDIA Tesla V100	576x NVIDIA A100	N/A
MIC akcelerátory	864x Intel Xeon Phi 7120P	N/A	N/A	N/A	N/A
Úložný prostor	500 TB / home (6 GB/s), 1.638 TB / scratch (30 GB/s)	30 TB NVMe	29 TB / home, 310 TB / scratch (28 GB/s)	30,6 TB / home (1,93GB/s zápis, 3,10GB/s čtení), 1.361 TB / scratch (NVMe, 730,9 GB/s zápis, 1.198,3 GB/s čtení)	80 PB (/home + /project + /scratch) 240 GB/s
Síť	Infiniband FDR 56 Gb/s	Infiniband FDR 56 Gb/s	Infiniband HDR 200 Gb/s	Infiniband HDR 200 Gb/s	200 Gb/s Slingshot-11



↔ V roce 2021 provozovalo IT4Innovations čtyři superpočítače: Salomon, Barbora, NVIDIA-DGX2 a Karolina.

Přidělování výpočetního času

Poskytování výpočetního času je jedním z hlavních posláních IT4Innovations. Superpočítače jsou k dispozici českým vědeckým komunitám a průmyslovým podnikům nepřetržitě od roku 2013, kdy byl zprovozněn superpočítač Anselm. Od této doby do konce roku 2021 bylo celkem využito **1.424.682.320** jádrohodin, které se rozdělily mezi **1.582** projektů z různých vědeckých oblastí, od vývoje nových materiálů či léků, přes objevování fyzikálních zákonitostí, inženýrské úlohy, rendering a vizualizaci vědeckých dat, až po projekty řešící kybernetickou bezpečnost či pokročilé datové analýzy.

Poptávka po výpočetních zdrojích je rok od roku vyšší a každá další vyhlášená grantová soutěž utvrzuje v tom, že vědecká komunita v České republice na výkonné superpočítače spoléhá a svou vědeckou práci na nich staví.

Výpočetní čas na superpočítačích v IT4Innovations lze získat jedním z následujících způsobů:

→ Největší podíl výpočetního času se rozděluje v rámci tzv. **Veřejných grantových soutěží**, které IT4Innovations vypisuje třikrát ročně. Veřejné grantové soutěže jsou určeny výzkumníkům a akademickým pracovníkům z České republiky. Podané projekty schvaluje alokační komise na základě předchozího odborného hodnocení z hlediska vědecké excelence, výpočetní připravenosti a socioekonomického dopadu.

→ **Rozhodnutím ředitelství** – žádosti se podávají průběžně, a to pouze v případech, kdy nelze využít Veřejných grantových soutěží. Jedná se o nepravidelné přidělování výpočetního času, které schvaluje vedení IT4Innovations.

→ **Pronájmem výpočetních zdrojů** – jedná se o placený přístup k výpočetním kapacitám provozovaných superpočítačů, který se účtuje v tržních cenách dle aktuálního sazebníku IT4Innovations.

→ Přístup k ostravské výpočetní infrastruktuře lze získat také prostřednictvím dvou typů **evropských grantových soutěží**, které vyhlásují celoevropský společný podnik EuroHPC a výzkumná infrastruktura PRACE.

Počet aktivních projektů v roce 2021 byl 328. Výpočetní čas, který tyto projekty získaly, dosáhl celkové hodnoty 282.197.957 jádrohodin. 91 % výpočetního času vyčerpaly projekty vzešlé z Veřejných grantových soutěží, méně než 2 % připadlo na projekty schválené ředitelstvem a téměř 6 % z celku se využilo v rámci grantových soutěží vyhlášených EuroHPC JU a PRACE. Nejméně výpočetního času, 1,5 %, se spotřebovalo v rámci placeného pronájmu.

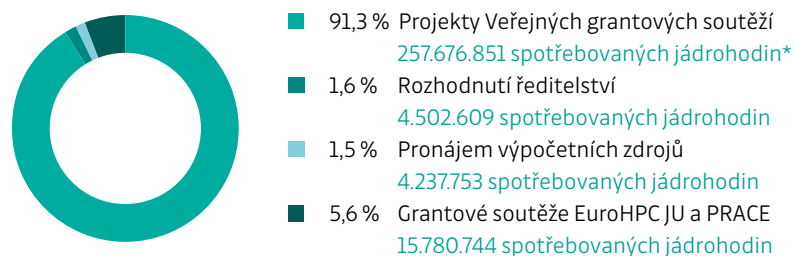
Výpočetní čas se přiděluje v normovaných hodinách výpočetního jádra – tzv. jádrohodinách. Určí se jako počet procesorových jednotek (jader) použitých ke spuštění výpočtu vynásobené dobou trvání úlohy v hodinách.



↔ Barbora

Na podzim roku 2019 se datový sál IT4Innovations rozrostl o dalšího člena – superpočítač Barbora, který byl rozšířením historicky prvního superpočítače v IT4Innovations – Anselm. Stejně jako u ostatních ostravských superpočítačů vzešlo jméno Barbora z anket, do které se zapojila široká veřejnost.

Rozdělení výpočetního času v roce 2021



*Spotřebované jádrohodiny dávají představu o tom, kolik výpočetního času bylo v roce 2021 skutečně spotřebováno. Celkovou hodnotu zde tvoří veškeré výzkumné projekty, které se reálně v tomto roce v IT4Innovations počítaly.

Veřejné grantové soutěže 21., 22., 23. kolo

V roce 2021 byly vyhlášeny tři **Veřejné grantové soutěže**, ve kterých se podpořilo 188 výzkumných projektů. Konkrétně se jednalo o 21., 22. a 23. kolo. Dle harmonogramu jednotlivých kol získali úspěšní žadatelé přístup k výpočetním kapacitám v průběhu roku 2021.

Na konci roku 2021 byla rovněž vyhlášena Mimořádná výzva: GPU Testing and Benchmarking 24. Veřejné grantové soutěže. Její výsledky budou uvedeny v Přehledu roku 2022 společně se standardním 24. kolem Veřejné grantové soutěže.

Nejvíce výpočetního času získaly projekty z oblasti **materiálových věd**, a to 66 %. Na druhém místě s 13 % skončily projekty z oborů biověd a bronzovou příčku s 9 % obsadily projekty z oblasti inženýrství.

Dle institucí na superpočítačích IT4Innovations počítali nejvíce vědci a vědkyně z **Vysoké školy báňské – Technické univerzity Ostrava** (31 %), po nich následovali řešitelky a řešitelé z Akademie věd České republiky (26 %). O třetí příčku se s 8 % dělily Univerzita Karlova a České vysoké učení technické v Praze.

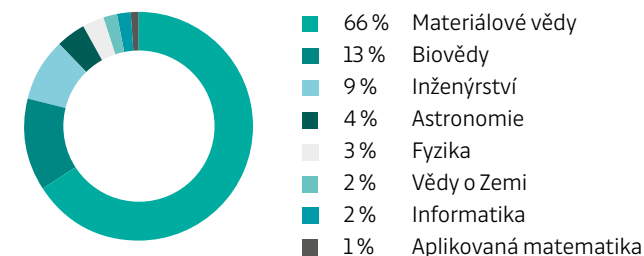
V těchto třech kolech Veřejných grantových soutěží výzkumníci žádali o celkem **350 milionů jádrohodin**. S ohledem na vysoký zájem o výpočetní čas v poměru k nabízeným zdrojům přistoupila alokační komise ke snížení alokací hodnocených projektů. Redukce se úměrně dotkla všech projektů. Celkově bylo projektům v těchto kolech Veřejné grantové soutěže přiděleno 292 milionů jádrohodin, což je o 20 % výpočetních zdrojů méně než jaké bylo poptávané množství.

Srovnání poptávky a přidělených výpočetních zdrojů ve Veřejných grantových soutěžích (VGS) v letech 2018–2021

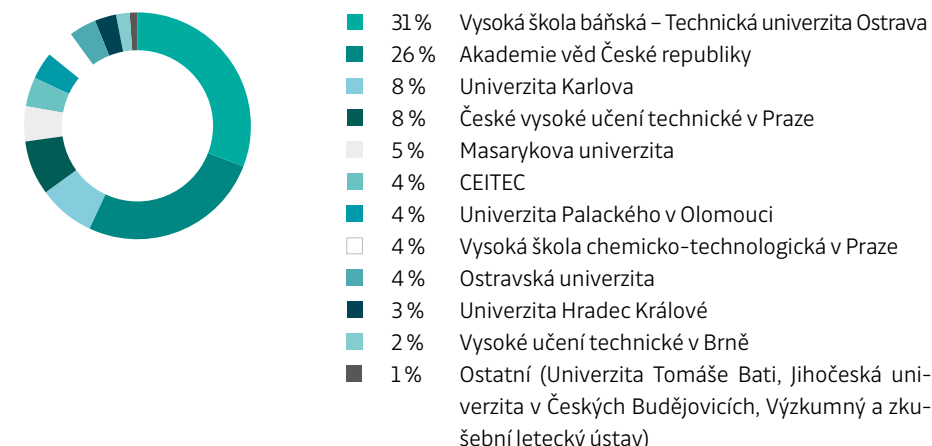
Rok vyhlášení – kola VGS	Počet podpořených projektů	Přidělené výpočetní zdroje (v jádrohodinách)	Poptávané výpočetní zdroje (v jádrohodinách)	Uživatelé žádali o
2018 – 12.–14. VGS	164	172.000.000	243.000.000	41 % více
2019 – 15.–17. VGS	190	227.000.000	348.000.000	53 % více
2020 – 18.–20. VGS	187	237.000.000	376.000.000	59 % více
2021 – 21.–23. VGS	188	292.000.000	350.000.000	20 % více

*Pro úplnost je třeba uvést, že přidělený výpočetní čas se od toho spotřebovaného liší. Spotřebovaný výpočetní čas je takový, který se reálně spotřebovuje; přidělený značí, kolik výpočetního času může daný projekt maximálně spotřebovat.

Výpočetní zdroje přidělené ve Veřejných grantových soutěžích v roce 2021 dle vědních oborů



Výpočetní zdroje přidělené ve Veřejných grantových soutěžích v roce 2021 dle institucí



Rozhodnutí ředitelství

V roce 2021 bylo na základě rozhodnutí ředitelství podpořeno **28 projektů**, které celkově spotřebovaly více než 4,5 milionů jádrohodin.

Pronájem výpočetních zdrojů

Výpočetní zdroje, které byly spotřebovány v rámci placeného pronájmu, dosáhly v roce 2021 celkem **4,2 milionů jádrohodin**. Jednalo o komerční projekty následujících společností: AIRMOBIS a.s., Bonmedix s.r.o., DHI a.s., Sotio a.s., Ullmanna s.r.o., Ústav pro hospodářskou úpravu lesů Brandýs nad Labem a Varroc Lighting systems, s.r.o.

Grantové soutěže EuroHPC JU a PRACE

V roce 2021 bylo v rámci těchto soutěží spotřebováno téměř **16 milionů jádrohodin**, o které se podělilo 9 projektů. Z toho 5 projektů (486.372 jádrohodin) se uskutečnilo v rámci výzvy EuroHPC JU a 4 projekty (15.294.372 jádrohodin) v rámci PRACE.

Uživatelé výpočetních zdrojů

Počet aktivních uživatelů výpočetní infrastruktury IT4Innovations se v roce 2021 meziročně zvýšil o 42 % a vyšplhal se na 863. Technická podpora, kterou IT4Innovations svým uživatelům nabízí, obdržela celkem 1.608 podnětů a žádostí. Interní reakční doba (24 hodin na první odpověď) byla dodržena u 99,7 % podnětů. Interní doba prvního uzavření, která nesmí být větší než 30 dnů, byla dodržena u 94,6 % podnětů.

Výzkum a vývoj

Stěžejními tématy výzkumu a vývoje IT4Innovations je oblast velmi náročných výpočtů, zpracování a analýza rozsáhlých dat, strojové učení, vývoj paralelních škálovatelných algoritmů, řešení náročných inženýrských úloh, pokročilá vizualizace, virtuální realita, modelování pro nanotechnologie a vývoj nových materiálů.

IT4Innovations je výzkumným a vývojovým centrem se silnými mezinárodními vazbami, je zapojeno ve všech aktivitách celoevropského společného podniku EuroHPC a v řadě prestižních mezinárodních organizací (PRACE, ETP4HPC, I4MS, EUDAT, BDVA/DAIRO, EOSC). V roce 2021 se podílelo na řešení šestnácti mezinárodních projektů financovaných z programu Horizont 2020, přičemž jeden z těchto projektů, LEXIS (Large-scale Execution for Industry & Society), koordinovalo. IT4Innovations je dále Národním centrem kompetence pro HPC v rámci evropského projektu EuroCC a členem H2020 Centra excellence POP2.

IT4Innovations se také podílí na vývoji internetové platformy Evropské vesmírné agentury (European Space Agency, ESA) nazvané Urban Thematic Exploitation Platform a v minulosti se účastnilo celé řady projektů podpořených z programů FP7 a H2020 jako například PRACE, EXA2CT, HARPA, ExCAPE, ANTAREX, READEX, SESAME NET a další.

Výzkum v IT4Innovations je soustředěn do pěti laboratoří:

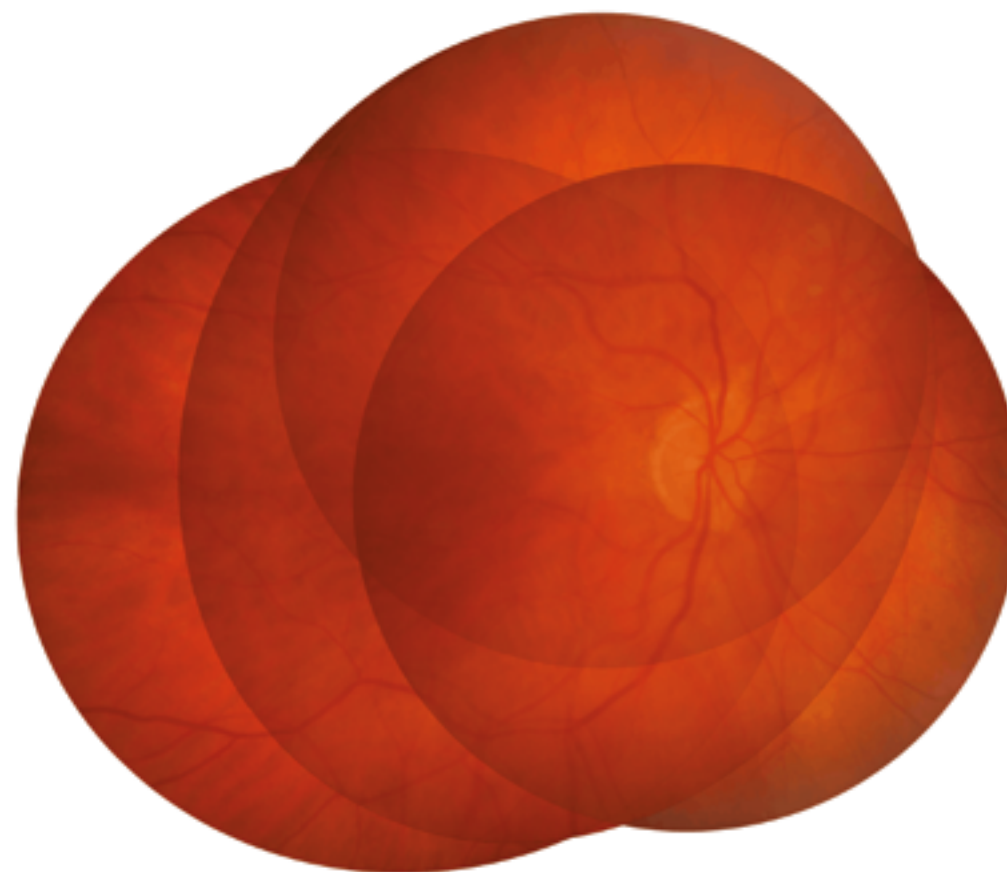
- Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace,
- Laboratoř pro výzkum infrastruktury,
- Laboratoř vývoje paralelních algoritmů,
- Laboratoř modelování pro nanotechnologie,
- Laboratoř pro big data analýzy.

Výzkumné laboratoře IT4Innovations získaly v rámci 21. až 23. Veřejné grantové soutěže výpočetní čas pro 59 vědeckých projektů, na které bylo alokováno přes 86 milionů jádrohodin, což představuje 29 % z celkové přidělené alokace všech podpořených projektů. Nejvíce projektů podali zaměstnanci Laboratoře pro náročné datové analýzy a simulace a nejvíce výpočetních zdrojů získala Laboratoř modelování pro nanotechnologie.

Využití výpočetních zdrojů IT4Innovations výzkumnými laboratořemi v roce 2021 (přidělené alokace)



- 55 % Laboratoř modelování pro nanotechnologie
- 21 % Laboratoř vývoje paralelních algoritmů
- 14 % Laboratoř pro výzkum infrastruktury
- 9 % Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace
- 1 % Laboratoř pro big data analýzy



↔ Zefektivnění vyšetření sítnice

Záměrem projektu, na kterém IT4Innovations spolupracuje se společností Bonmedix, je vyvinout novou službu umožňující násobně navýšit preventivní i kontrolní vyšetření sítnice s cílem zachytit onemocnění nebo progresi co nejdříve a tím snížit následné náklady na další léčbu pacientů.

Vlajkové lodě ve výzkumu a vývoji

V roce 2021 pokračoval výzkum v rámci tzv. vlajkových lodí ve výzkumu a vývoji IT4Innovations, které byly vybrány Vědeckou radou Centra excellence IT4Innovations v roce 2018 a které reprezentují vědeckou excelenci IT4Innovations.

ESPRESO, knihovna masivně paralelních řešičů pro inženýrské aplikace

→ Řešitel: Ing. Tomáš Brzobohatý, Ph.D.

Nejnovější technologický pokrok v oblasti výpočtů přinesl významnou změnu v koncepci návrhu nových produktů, řízení výroby nebo autonomních systémů. V posledních několika letech jsme byli svědky výrazného přechodu k virtuálnímu prototypování a postupného tlaku na integraci velké části průmyslového sektoru do tzv. čtvrté průmyslové revoluce. Hlavním cílem této vlajkové lodi je vytvořit robustní open-source balíček použitelný pro širokou škálu komplexních inženýrských simulací v oblastech jako je strojírenství, stavebnictví, biomechanika a energetika. Open-source řešení umožňuje vytvářet automatizované simulační řetězce založené na modelu „HPC jako služba“ (HPC-as-a-Service), jako jsou automatizované systémy pro tvarovou nebo topologickou optimalizaci. Při vývoji nových komponent knihovny ESPRESO jsou používány vysoce škálovatelné metody umožňující plné využití výpočetních kapacit nejmodernějších superpočítačů.

Návrh materiálů – blíže realitě prostřednictvím exascalových výpočtů

→ Řešitel: Ing. Dominik Legut, Ph.D.

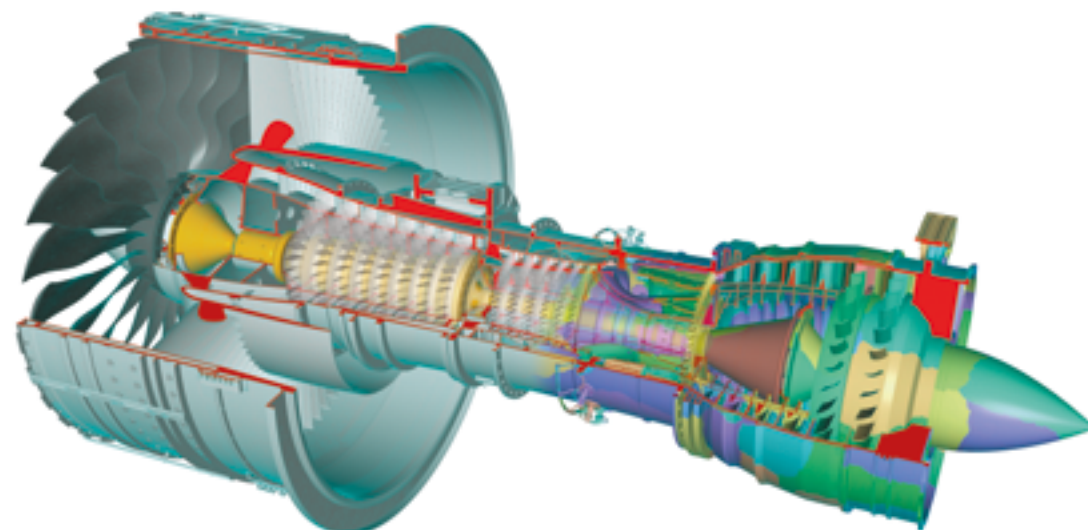
Od pokroku v HPC hraje v našem životě klíčovou roli simulace chování materiálů. Tato skutečnost byla ještě výraznější, jakmile byl objeven způsob, jak provádět kvantové mechanické výpočty, aby se získala elektronická struktura materiálů a její chování k vazbě na mnoho fyzikálních a chemických vlastností. Výpočty prvních principů (ab initio) jsou v současné době přístupem bez parametrů pro i) ověřování experimentů, ii) pro simulaci podmínek nebo výpočet vlastností materiálů, které nejsou přímo přístupné nebo měřitelné a iii) pro návrh nových materiálů. V rámci této vlajkové lodi se zabýváme základními a nejmodernějšími tématy jako je navrhování jaderných palivových materiálů z radioaktivních sloučenin pro jaderné reaktory IV. generace, ultrarychlá magnetická dynamika pro ukládání nových dat, komplexní spintronická zařízení využívající multiferroitu a návrh použitelných materiálů při hraničních teplotách a tlaku, např. nové permanentní magnety.

HPC platformy pro spouštění vědeckých úloh

→ Řešitelé: Ing. Jan Martinovič, Ph.D., Ing. Stanislav Böhm, Ph.D. a Ing. Václav Svatoň, Ph.D.

Hlavním cílem většiny superpočítačových center je snížení vstupních bariér do světa vysoce výkonného počítání (HPC) pro všechny uživatele z výzkumných institucí, průmyslové sféry, nemocnic, institucí státní správy aj., aniž by došlo ke snížení rychlosti provádění výpočtů. Výzkumný tým sdružený v rámci této vlajkové lodi se zabývá vývojem konceptu HPC jako služba (HPC-as-a-Service, HaaS), který pro superpočítačová centra představuje komplexní řešení dostupnosti jejich HPC služeb pro mnohem širší

okruh uživatelů. V IT4Innovations se konkrétně vyvíjí platforma High-End Application Execution Platform (HEAppE Platform). Nezaměřuje se na jeden konkrétní typ hardwaru pro současné vysoce výkonné a budoucí exascalové výpočetní systémy, nýbrž k využití na různých systémech a v různých superpočítačových centrech. Jejím prostřednictvím mohou všichni uživatelé využívat technologie, aniž by museli vynakládat investice na pořízení hardwaru. Velkou část pracovní zátěže vysoce výkonných výpočetních systémů také představují výpočetní plány (pipelines) pro řešení vědeckých úloh vytvářené oborovými specialisty, kteří nemají hlubší znalosti a zkušenosti s HPC technologiemi. Záměrem výzkumného týmu je tedy pokračovat ve vývoji jak programovacích modelů, díky nimž dokážou uživatelé jednoduše definovat závislosti mezi výpočetními úlohami, tak i runtime vrstev umožňujících vytvoření výpočetního plánu, který pak uživatelé mohou spustit v rozsáhlých distribuovaných prostředích (např. vlastní sada nástrojů HyperTools). V neposlední řadě je cílem také zpřístupnit výsledky a maximalizovat tak jejich potenciální dopad.



↔ Numerické simulace

IT4Innovations vyvíjí simulační nástroj pro řešení rozsáhlých úloh inženýrské praxe, jako je například přestup tepla, strukturální mechanika, vibrace nebo šíření hluku.

Přehled výsledků vědy a výzkumu v roce 2021

Výsledky vědy a výzkumu za rok 2021 dle metodiky RIV 2017+

V této podkapitole jsou představeny výsledky vědy a výzkumu IT4Innovations v roce 2021.

Shrnutí dosažených výsledků vědy a výzkumu IT4Innovations v roce 2021

Výsledky v členění dle metodiky RIV 2017+	Počet
Jimp – článek v databázi Web of Science	106
JSC – článek v databázi SCOPUS	5
Jost – recenzované články ostatní	1
B – odborná kniha	0
C – kapitola v odborné knize	1
D – stať ve sborníku	21
P – patent	0
F – užitný vzor, průmyslový vzor	1
Z – poloprovoz, ověřená technologie	0
G – prototyp, funkční vzorek	2
H – výsledky promítnuté do norem, směrnic	0
N – metodika, specializovaná mapa	0
R – software	18
V – výzkumná zpráva	0

Časopisecké publikace typu Jimp a Jsc za rok 2021 dle jednotlivých laboratoří a umístění

Výsledky v členění dle metodiky RIV 2017+	D1	Q1/D1	Q2	Q3	Q4	Celkem
Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace	6	7	4,5	0	1	18,5
Laboratoř pro výzkum infrastruktury	1	1	1	0	0	3
Laboratoř vývoje paralelních algoritmů	5	5	3,5	3	0	16,5
Laboratoř modelování pro nanotechnologie	32	24	3	0	0	59
Laboratoř pro big data analýzy	4	4	4	2	0	14
Celkem	48	41	16	5	1	111

Rozdělení časopisů do kategorií D1, Q1, ..., Q4 je dáno jejich nejlepším umístěním v oborových kategoriích v databázích Web of Science a Scopus.

Počet časopiseckých publikací za rok 2021 dle jednotlivých laboratoří



18,5	Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace
3	Laboratoř pro výzkum infrastruktury
16,5	Laboratoř vývoje paralelních algoritmů
59	Laboratoř modelování pro nanotechnologie
14	Laboratoř pro big data analýzy

Seznam publikací v D1 seřazených dle jednotlivých laboratoří

Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace

- Zitzlsberger Georg, Podhorányi Michal, Svatoň Václav, Lazecký Milan, Martinovič Jan. *Neural Network-Based Urban Change Monitoring with Deep-Temporal Multispectral and SAR Remote Sensing Data*. Remote Sensing, roč. 13, č. 15, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.3390/rs13153000, IF 4.848 (JIMP D1).
- Vitali E., Gadioli D., Palermo G., Golasowski Martin, Bispo J., Pinto P., Martinovič Jan, Slaninová Kateřina, Cardoso J., Silvano C. *An Efficient Monte Carlo-based Probabilistic Time-Dependent Routing Calculation Targeting a Server-Side Car Navigation System*. IEEE Transactions on Emerging Topics in Computing, roč. 9, č. 2, s. 1006–1019, 2021. DOI 10.1109/TETC.2019.2919801, IF 7.691 (JIMP D1).
- Lampart Marek, Zapoměl Jaroslav. *Motion of an Unbalanced Impact Body Colliding with a Moving Belt*. Mathematics, roč. 9, č. 9, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.3390/math9091071, IF 2.258 (JIMP, D1).
- Danca Marius-F., Lampart Marek. *Hidden and self-excited attractors in a heterogeneous Cournot oligopoly model*. Chaos, Solitons & Fractals, leden 2021.
- Tomčala Jiří. *Towards optimal supercomputer energy consumption forecasting method*. Mathematics, roč. 142, č. leden, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.1016/j.chaos.2020.110371, IF 5.944 (JIMP D1).
- Lampart Marek, Zapoměl Jaroslav. *Chaos identification of a colliding constrained body on a moving belt*. Nonlinear Dynamics, roč. 1, č. 104, s. 2723–2732, 2021. DOI 10.1007/s11071-021-06383-6, IF 5.022 (JIMP D1).

Laboratoř pro výzkum infrastruktury

- Jaroš Milan, Říha Lubomír, Strakoš Petr, Špeřko Matej. *GPU Accelerated Path Tracing of Massive Scenes*. ACM Transactions on Graphics, roč. 40, č. 2, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.1145/3447807, IF 5.414 (JIMP D1).

Laboratoř vývoje paralelních algoritmů

- Zapletal Jan, Watschinger Raphael, Of Günther, Merta Michal. *Semi-analytic integration for a parallel space-time boundary element method modelling the heat equation*. Computers & Mathematics with Applications, roč. 103, č. 1, s. 156–170, DEC 2021. DOI 10.1016/j.camwa.2021.10.025, IF 3.476 (JIMP D1).
- Dostál Zdeněk, Brzobohatý Tomáš, Vlach Oldřich. *Schur complement spectral bounds for large hybrid FETI-DP clusters and huge three-dimensional scalar problems*. Journal of Numerical Mathematics, roč. 29, č. 4, s. 289–306, 2021. DOI 10.1515/jnma-2020-0048, IF 3.778 (JIMP D1).
- Dostál Zdeněk, Horák David, Brzobohatý Tomáš, Vodstrčil Petr. *Bounds on the spectra of Schur complements of large H-TFETI-DP clusters for 2D Laplacian*. Numerical Linear Algebra with Applications, roč. 28, č. 2, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.1002/nla.2344, IF 2.109 (JIMP D1).
- Haslinger Jaroslav, Kučera Radek, Motyčková Kristina, Šátek Václav. *Numerical modeling of the leak through semipermeable walls for 2D/3D Stokes flow: experimental scalability of dual algorithms*. Mathematics, roč. 9, č. 22, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.3390/math9222906, IF 2.258 (JIMP D1).
- Šofer Michal, Šofer Pavel, Ferfecki Petr, Molčan Michal, Stryja Jakub. *Lamb Wave Mode Scattering Analysis on Adhesively Bonded Single Lap Joint using Modal Decomposition Method*. Applied Mathematical Modelling, roč. 89, č. 08-2020, s. 413–427, 2021. DOI 10.1016/j.apm.2020.08.017, IF 5.129 (JIMP D1).

Laboratoř modelování pro nanotechnologie

- Wdowik Urszula Danuta, Buturlim V., Havela L., Legut Dominik. *Effect of carbon vacancies and oxygen impurities on the dynamical and thermal properties of uranium monocarbide*. Journal of Nuclear Materials, roč. 545, č. neuveden, s. nestránkováno, březen 2021. DOI 10.1016/j.jnucmat.2020.152547, IF 2.936 (JIMP D1).
- Mallada Benjamin, Blonski Piotr, Langer Rostislav, Jelinek Pavel, Otyepka Michal, de la Torre Bruno. *On-Surface Synthesis of One-Dimensional Coordination Polymers with Tailored Magnetic Anisotropy*. ACS applied materials & interfaces, roč. 13, č. 27, s. 32393–32401, 2021. DOI 10.1021/acsmi.1c04693, IF 9.229 (JIMP D1).
- Legut Dominik, Kadzielawa Andrzej Piotr, Pánek Petr, Marková Kristýna, Váňová Petra, Konečná Kateřina, Langová Šárka. *Inhibition of steel corrosion with imidazolium-based compounds – Experimental and theoretical study*. Corrosion Science, roč. 191, č. OCT 2021, s. 109716, 2021. DOI 10.1016/j.corsci.2021.109716, IF 7.205 (JIMP D1).
- Nguyen-Huu N., Pištora Jaromír, Čada Michal, Nguyen-Thoi T., Ma Y., Yasumoto K., Rahman B. M. A., Wu Q., Ma Y., Ngo Q. H., Jie L., Maeda H. *Ultra-wide Spectral Bandwidth and Enhanced Absorption in a Metallic Compound Grating Covered by Graphene Monolayer*. IEEE Journal on Selected Topics in Quantum Electronics, roč. 27, č. 1, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.1109/JSTQE.2020.2984559, IF 4.544 (JIMP D1).

- Otyepková E., Skladanová K., Pykal M., Blahová Prudilová B., Kašík J., Čépe K., Banáš P., Lazar P., Otyepka Michal. *Molecular insights from theoretical calculations explain the differences in affinity and diffusion of airborne contaminants on surfaces of hBN and graphene*. Applied Surface Science, roč. 565, č. NOV, 2021. DOI 10.1016/j.apsusc.2021.150382, IF 6.707 (JIMP D1).
- Ma Youqiao, Li Jinhua, Han Zhanghua, Maeda Hiroshi, Pištora Jaromír. *All-Dielectric Graphene-induced T-Slot Waveguide Electro-Optic Modulator With Polarization-Independent Operation*. IEEE Journal on Selected Topics in Quantum Electronics, roč. 27, č. 3, 2021. DOI 10.1109/JSTQE.2021.3050569, IF 4.544 (JIMP D1).
- Wei B., Legut Dominik, Sun S., Wang H. T., Shi Z. Z., Zhang H. J., Zhang R. F. *An improved electrochemical model for strain dependent electrochemical polarization and corrosion kinetics*. Materials and Design, roč. 202, č. neuveden, 2021. DOI 10.1016/j.matdes.2021.109555, IF 7.991 (JIMP D1).
- Shen X. P., Yao B. N., Liu Z. R., Legut Dominik, Zhang H. J., Zhang R. F. *Mechanistic insights into interface-facilitated dislocation nucleation and phase transformation at semicoherent bimetal interfaces*. International Journal of Plasticity, roč. 146, č. neuveden, 2021. DOI 10.1016/j.ijplas.2021.103105, IF 7.081 (JIMP D1).
- Mallada B., Gallardo A., Lamanec Maximilián, de la Torre B., Špirko V., Hobza Pavel, Jelinek P. *Real-space imaging of anisotropic charge of σ -hole by means of Kelvin probe force microscopy*. Science, roč. 374, č. 6569, s. 863–867, 2021. DOI 10.1126/science.abk1479, IF 47.728 (JIMP D1).
- Paloncýová M., Čechová P., Šrejber M., Kührová P., Otyepka Michal. *Role of Ionizable Lipids in SARS-CoV-2 Vaccines As Revealed by Molecular Dynamics Simulations: From Membrane Structure to Interaction with mRNA Fragments*. Journal of Physical Chemistry Letters, roč. 12, č. 45, s. 11199–11205, 2021. DOI 10.1021/acs.jpcclett.1c03109, IF 6.475 (JIMP D1).
- Kiehbardroudezhad Mohammadali, Rajabipour Ali, Čada Michal, Khanali Majid. *Modeling, design, and optimization of a cost-effective and reliable hybrid renewable energy system integrated with desalination using the division algorithm*. International Journal of Energy Research, roč. 45, č. 1, s. 429–452, 2021. DOI 10.1002/er.5628, IF 5.164 (JIMP D1).
- Lo R., Manna D., Lamanec Maximilián, Wang W., Bakandritsos Aristeidis, Dračinský M., Zbořil Radek, Nachtigallová Dana, Hobza Pavel. *Addition Reaction between Piperidine and C60 to Form 1,4-Disubstituted C60 Proceeds through van der Waals and Dative Bond Complexes: Theoretical and Experimental Study*. Journal of the American Chemical Society, roč. 143, č. 29, s. 10930–10939, 2021. DOI 10.1021/jacs.1c01542, IF 15.419 (JIMP D1).
- de la Cruz Artorix, Qasymeh Montasir, Pištora Jaromír, Čada Michal. *Electronically controlled polarization beat length in Kerr nonlinear media*. Results in Physics, roč. 25, č. JUN, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.1016/j.rinp.2021.104232, IF 4.476 (JIMP D1).



↔ Na začátku roku 2021 došlo k ukončení provozu historicky prvního ostravského superpočítače Anselm. Ten je nyní k vidění ve Světě civilizace v Dolních Vítkovicích v Ostravě.

- Gu Yitao, Wei Bo, Legut Dominik, Fu Zhongheng, Du Shiyu, Zhang Haijun, Francisco Joseph S, Zhang Ruifeng. *Single Atom-Modified Hybrid Transition Metal Carbides as Efficient Hydrogen Evolution Reaction Catalysts*. *Advanced Functional Materials*, roč. 31, č. 43, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.1002/adfm.202104285, IF 18.808 (JIMP D1).
- Wei Bo, Fu Zhongheng, Legut Dominik, Germann Timothy C, Du Shiyu, Zhang Haijun, Francisco Joseph S, Zhang Ruifeng. *Rational Design of Highly Stable and Active MXene-Based Bifunctional ORR/OER Double-Atom Catalysts*. *Advanced Materials*, roč. 33, č. 40, 2021. DOI 10.1002/adma.202102595, IF 30.849 (JIMP D1).
- Wei B., Legut Dominik, Sun S., Wang H. T., Shi Z. Z., Zhang H. J., Zhang R. F. *Synergistic effect of solute and strain on the electrochemical degradation in representative Zn-based and Mg-based alloys*. *Corrosion Science*, roč. 188, č. nevedeno, s. 109539, 2021. DOI 10.1016/j.corsci.2021.109539, IF 7.205 (JIMP D1).
- Cruz Artorix de la, Čada Michal, Pištora Jaromír, Diaz-Chang Tamara. *Asymptotic variational approach to study light propagation in a nonlocal nonlinear medium*. *Results in Physics*, roč. 27, č. nevedeno, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.1016/j.rinp.2021.104536, IF 4.476 (JIMP D1).
- Saini Haneesh, Kallem Parashuram, Otyepkova Eva, Geyer Florian, Schneemann Andreas, Ranc Vaclav, Banat Fawzi, Zbořil Radek, Otyepka Michal, Fischer Roland A, Jayaramulu Kolleboyina. *Two-dimensional MOF-based liquid marbles: surface energy calculations and efficient oil-water separation using a ZIF-9-III@PVDF membrane*. *Journal of Materials Chemistry A*, roč. 9, č. 41, s. 23651–23659, 2021. DOI 10.1039/d1ta05835e, IF 12.732 (JIMP D1).
- Saini H., Srinivasan N., Šedajová V., Majumder M., Dubal D. P., Otyepka Michal, Zbořil Radek, Kurra N., Fischer R. A., Jayaramulu K. *Emerging MXene@Metal-Organic Framework Hybrids: Design Strategies toward Versatile Applications*. *ACS Nano*, roč. 15, č. 12, s. 18742–18776, 2021. DOI 10.1021/acsnano.1c06402, IF 15.881 (JIMP D1).
- Olšovská Eva, Tokarský Jonáš, Michalička Jan, Mamulová Kutláková Kateřina. *Simple and fast method for determination of preferred crystallographic orientation of nanoparticles: A study on ZnS/kaolinite nanocomposite*. *Applied Surface Science*, roč. 544, č. nevedeno, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.1016/j.apusc.2021.148966, IF 6.707 (JIMP D1).
- Ma Youqiao, Li Jinhua, Čada Michal, Bian Yusheng, Han Zhanghua, Ma Yuan, Iqbal Muddassir, Pištora Jaromír. *Plasmon Generation and Routing in Nanowire-Based Hybrid Plasmonic Coupling Systems With Incorporated Nanodisk Antennas*. *IEEE Journal on Selected Topics in Quantum Electronics*, roč. 27, č. 1, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.1109/jstqe.2020.3008651, IF 4.544 (JIMP D1).
- Tokarčíková Michaela, Seidlerová Jana, Motyka Oldřich, Životský Ondřej, Drobíková Klára, Gabor Roman. *Experimental verification of regenerable magnetically modified montmorillonite and its application for heavy metals removal from metallurgical waste leachates*. *Journal of Water Process Engineering*, roč. 39, č. únor, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.1016/j.jwpe.2020.101691, IF 5.485 (JIMP D1).
- Nieves Cordones Pablo, Arapan Sergiu, Zhang S.H., Kadzielawa Andrzej Piotr, Zhang R.F., Legut Dominik. *MAELAS: MAGneto-ELASTic properties calculation via computational high-throughput approach*. *Computer Physics Communications*, roč. 264, č. červenec, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.1016/j.cpc.2021.107964, IF 4.39 (JIMP D1).
- Ma Chunrong, Hou Yang, Jiang Kai, Zhao Long, Olsen Tristan, Fan Yanchen, Jiang Jiali, Xu Zhixin, Ma ZiFeng, Legut Dominik, Xiong Hui, Yuan Xian-Zheng. *In situ cross-linking construction of 3D mesoporous bimetallic phosphide-in-carbon superstructure with atomic interface toward enhanced sodium ion storage performance*. *Chemical engineering journal*, roč. 413, č. červen, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.1016/j.cej.2020.127449, IF 13.273 (JIMP D1).
- Wang C. J, Liu Z. R, Yao B. N, Kong X. F, Legut Dominik, Zhang R. F, Deng Y. *Effects of hydrogen clusters on interface facilitated plasticity at semi-coherent bimetal interfaces*. *Scripta materialia*, roč. 190, č. nevedeno, s. 63–68, 2021. DOI 10.1016/j.scriptamat.2020.08.031, IF 5.611 (JIMP D1).
- Mayorga-Burrezo Paula, Munoz Jose, Zaoralova Dagmar, Otyepka Michal, Pumera Martin. *Multiresponsive 2D Ti3C2Tx MXene via Implanting Molecular Properties*. *ACS Nano*, roč. 15, č. 6, s. 10067–10075, 2021. DOI 10.1021/acsnano.1c01742, IF 15.881 (JIMP D1).
- Vermisoglou E. C., Jakubec P., Bakandritsos Aristeidis, Kupka V., Pykal M., Šedajová V., Vlček J., Tomanec O., Scheibe M., Zbořil Radek, Otyepka Michal. *Graphene with Covalently Grafted Amino Acid as a Route Toward Eco-Friendly and Sustainable Supercapacitors*. *ChemSusChem*, roč. 14, č. 18, s. 3904–3914, 2021. DOI 10.1002/cssc.202101039, IF 8.928 (JIMP D1).
- Jayaramulu Kolleboyina, Esclance DMello Marilyn, Kesavan Kamali, Schneemann Andreas, Otyepka Michal, Kment Štěpán, Narayana Chandrabhas, Kalidindi Suresh Babu, Varma Rajender S, Zbořil Radek, Fischer Roland A. *A multifunctional covalently linked graphene-MOF hybrid as an effective chemiresistive gas sensor*. *Journal of Materials Chemistry A*, roč. 9, č. 32, s. 17434–17441, 2021. DOI 10.1039/d1ta03246a, IF 12.732 (JIMP D1).
- Zhang Y., Melchionna M., Medved M., Błoński P, Steklý T., Bakandritsos Aristeidis, Kment Štěpán, Zbořil Radek, Otyepka Michal, Fornaserio P., Naldoni A. *Enhanced On-Site Hydrogen Peroxide Electrosynthesis by a Selectively Carboxylated N-Doped Graphene Catalyst*. *ChemCatChem*, roč. 13, č. 20, s. 4372–4383, 2021. DOI 10.1002/cctc.202100805, IF 5.686 (JIMP D1).
- Majumder M., Saini H., Dědek I., Schneemann A., Chodankar N. R., Ramarao V., Santosh M. S., Nanjundan A.K., Kment Štěpán, Dubal D., Otyepka Michal, Zbořil Radek, Jayaramulu K. *Rational Design of Graphene Derivatives for Electrochemical*

Reduction of Nitrogen to Ammonia. ACS Nano, roč. 15, č. 11, s. 17275–17298, 2021. DOI 10.1021/acsnano.1c08455, IF 15.881 (JIMP D1).

→ Alzate-Carvajal N., Park J., Pykal M., Lazar P., Rautela R., Scarfe S., Scarfe L., Ménard J.-M., Otyepka Michal, Luican-Mayer A. *Graphene Field Effect Transistors: A Sensitive Platform for Detecting Sarin*. ACS applied materials & interfaces, roč. 13, č. 51, s. 61751–61757, 2021. DOI 10.1021/acсами.1c17770, IF 9.229 (JIMP D1).

→ Dolezal Petr, Cejpek Petr, Tsutsui Satoshi, Kaneko Koji, Legut Dominik, Carva Karel, Javorsky Pavel. *Lattice dynamics in CePd2Al2 and LaPd2Al2*. Scientific Reports, roč. 11, č. 1, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.1038/s41598-021-99904-7, IF 4.38 (JIMP D1).

Laboratoř pro big data analýzy

→ Tin P. T., Phan V.-D., Nguyen T. N., Tu L.-T., Minh B.V., Vozňák Miroslav, Fazio Peppino. *Outage analysis of the power splitting based underlay cooperative cognitive radio networks*. Sensors, roč. 21, č. 22, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.3390/s21227653, IF 3.576 (JIMP D1).

→ Ševčík Lukáš, Vozňák Miroslav. *Adaptive reservation of network resources according to video classification scenes*. Sensors, roč. 21, č. 6, s. 1–31, 2021. DOI 10.3390/s21061949, IF 3.576 (JIMP D1).

→ Růžičková Kateřina, Růžička Jan, Bitta Jan, Chudasová Gabriela. *A new GIS-compatible methodology for visibility analysis in digital surface models of earth sites*. Geoscience Frontiers, roč. 12, č. 4, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.1016/j.gsf.2020.11.006, IF 6.853 (JIMP D1).

→ Gens Antonio, Alcoverro Jordi, Blaheta Radim, Hasal Martin, Michalec Zdenek, Takayama Yusuke, Lee Changsoo, Lee Jaewon, Kim Geon Young, Kuo Chia-Wei, Kuo Wan-Jung, Lin Chung-Yi. *HM and THM interactions in bentonite engineered barriers for nuclear waste disposal*. International journal of rock mechanics and mining sciences, roč. 137, č. leden, s. nestránkováno, 2021. DOI 10.1016/j.ijrmmms.2020.104572, IF 7.135 (JIMP D1).

Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace

→ Kožusznik Jan, Binar Petr, Klímová Jana, Krumnikl Michal, Moravec Pavel, Svatoň Václav, Tomančák Pavel. *SPIM workflow manager for HPC*. Bioinformatic roč. 35, č. 19, s. 3875–3876, 2019. DOI 10.1093/bioinformatics/btz140, IF 6.937 (JIMP D1).

Laboratoř pro výzkum infrastruktury

→ Jaroš Milan, Strakoš Petr, Říha Lubomír. CyclesPhi renderer. 023/09-12-2019_SW, 2019.

→ Meca Ondřej, Říha Lubomír, Brzobohatý Tomáš. Knihovna pro paralelní převod mezi formáty konečněprvkových sítí MESIO. 021/09-12-2019_SW, 2019.

→ Peterek Ivo, Beseda Martin, Vysocký Ondřej, RADAR visualizer, 022/09-12-2019_SW, 2019.

Laboratoř vývoje paralelních algoritmů

→ Koubová Lenka, Janas Petr, Markopoulos Alexandros, Krejsa Martin. *Nonlinear analyses of steel beams and arches using virtual unit moments and effective rigidity*. Steel and Composite Structures, roč. 33, č. 5, s. 755–765, 2019. DOI 10.12989/scs.2019.33.5.755, IF 5.733 (JIMP D1).

→ Van de Steen Cyril, Benhenni Malika, Kalus René, Čosić Rajko, Gadea Florent Xavier, Yousfi Mohammed. *Mobility and dissociation of electronically excited Kr_2^+ ions in cold krypton plasma*. Plasma Sources Science and Technology, roč. 28, č. 9, s. nestránkováno, 2019. DOI 10.1088/1361-6595/ab3a17, IF 3.584 (JIMP Q1).

→ Dohr Stefan, Zapletal Jan, Of Gunther, Merta Michal, Kravčenko Michal. *A parallel space-time boundary element method for the heat equation*. Computers & Mathematics with Applications, roč. 78, č. 9, s. 2852–2866, 2019. DOI 10.1016/j.camwa.2018.12.031, IF 3.476 (JIMP D1).

→ Kravčenko Michal, Merta Michal, Zapletal Jan. *Distributed fast boundary element methods for Helmholtz problems*. Applied Mathematics and Computation, roč. 362, č. DEC 2019, s. 1–15, 2019. DOI 10.1016/j.amc.2019.06.017, IF 4.091 (JIMP D1).

→ Zapletal Jan, Bouchala Jiří. *Shape optimization and subdivision surface based approach to solving 3D Bernoulli problems*. Computers & Mathematics with Application, roč. 78, č. 9, s. 2911–2932, 2019. DOI 10.1016/j.camwa.2019.02.015, IF 3.476 (JIMP D1).

→ Van de Steen Cyril, Benhenni Malika, Kalus René, Čosić Rajko, Illéssová Silvie, Gadea Florent Xavier, Yousfi Mohammed. *Cross-sections, transport coefficients and dissociation rate constants for Kr_2^+ molecular ion interacting with Kr*. Plasma Sources Science and Technology, roč. 28, č. 3, s. nestránkováno, 2019. DOI 10.1088/1361-6595/aaebe0, IF 3.584 (JIMP Q1).

→ Dostál Zdeněk, Vlach Oldřich, Brzobohatý Tomáš. *Scalable TFETI based algorithm with adaptive augmentation for contact problems with variationally consistent discretization of contact conditions*. Finite Elements in Analysis and Design, roč. 156, s. 34–43, 2019. DOI 10.1016/j.finel.2019.01.002, IF 2.972 (JIMP Q1).

Laboratoř modelování pro nanotechnologie

- Xiao Jiewen, Zhou Guangmin, Chen Hetian, Feng Xiang, Legut Dominik, Fan Yan-chen, Wang Tianshuai, Cui Yi, Zhang Qianfan. *Elaboration of Aggregated Polysulfide Phases: From Molecules to Large Clusters and Solid Phases*. Nano Letters, roč. 19, č. 10, s. 7487–7493, 2019. DOI 10.1021/acs.nanolett.9b03297, IF 11.189 (JIMP D1).
- Chen Hetian, Handoko Albertus D, Xiao Jiewen, Feng Xiang, Fan Yanchen, Wang Tianshuai, Legut Dominik, Seh Zhi Wei, Zhang Qianfan. *Catalytic Effect on CO₂ Electroreduction by Hydroxyl-Terminated Two-Dimensional MXenes*. ACS applied materials & interfaces, roč. 11, č. 40, s. 36571–36579, 2019. DOI 10.1021/acsaami.9b09941, IF 9.229 (JIMP Q1).
- Wang T., Zhai P., Legut Dominik, Wang L., Liu X., Li B., Dong C., Fan Y., Gong Y., Zhang Q. *S-Doped Graphene-Regional Nucleation Mechanism for Dendrite-Free Lithium Metal Anodes*. Advanced Energy Materials, roč. 9, č. 24, s. nestránkováno, 2019. DOI 10.1002/aenm.201804000, IF 20.368 (JIMP D1).

Laboratoř pro big data analýzy

- Skanderová Lenka, Fabián Tomáš, Zelinka Ivan. *Self-adapting self-organizing migrating algorithm*. Swarm and Evolutionary Computation, roč. 51, č. neveden, s. nestránkováno, 2019. DOI 10.1016/j.swevo.2019.100593, IF 7.177 (JIMP D1).

Počty výsledků dle jednotlivých laboratoř



■	1	Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace
■	3	Laboratoř pro výzkum infrastruktury
■	7	Laboratoř vývoje paralelních algoritmů
■	3	Laboratoř modelování pro nanotechnologie
■	1	Laboratoř pro big data analýzy



↔ [Návštěva z Evropské komise](#)

17. července do IT4Innovations dorazil místopředseda Evropské komise Frans Timmermans, aby předsedal diskuzi o zelené budoucnosti Evropy. V rámci programu si prohlédl také datový sál IT4Innovations.

Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace

Laboratoř se specializuje na pokročilé datové analýzy, výzkum a vývoj v oblasti co-designu HPC, HPDA a cloud technologií se zaměřením na podporu průmyslu a společnosti, programové modely pro HPDA, umělou inteligenci, modelování, simulace a aplikace dynamických systémů.

Vedoucí laboratoře
Počet zaměstnanců

Ing. Jan Martinovič, Ph.D.
40,63 FTE

Významné aktivity

- V roce 2021 byly zahájeny tři EuroHPC projekty – **LIGATE** koordinovaný farmaceutickou společností Dompé, **ACROSS** koordinovaný výzkumnou organizací LINKS a **IO-SEA** koordinovaný výzkumnou organizací CEA.
- Byla vydána **nová verze HEAppE middleware** umožňující spouštění dlouhotrvajících úloh, používání obecných šablon pro spouštění, podporu OpenMPI & MPI, různé úpravy a vylepšení zabezpečení. Zprovoznění nových webových stránek HEAppE (heappe.eu).
- V rámci platformy **LEXIS** byla úspěšně implementována orchestrace komplexních workflow pro HPC i cloud, což bylo hlavním cílem projektu LEXIS H2020.
- Úspěšně zahájeny práce na nástroji **HyperQueue**, který je aktivně využíván interními i externími uživateli infrastruktury IT4Innovations. Konsorcium LUMI považuje HyperQueue za hlavní nástroj pro plánování velkého množství úloh, které by nedokázaly jednotlivě využít celou kapacitu výpočetního uzlu.
- Byla vytvořena simulace **propustnosti očkovacího centra**, která byla použita pro návrh očkovacího centra na Černé louce v Ostravě.
- Pro studenty magisterských oborů VŠB-TUO byl otevřen nový studijní předmět „Úvod do kvantového počítání“.
- Martin Golasowski získal bronzové umístění v **Cenách Josepha Fouriera** za svůj projekt zabývající se optimalizací městské dopravy pomocí inteligentní navigační služby.
- Georg Zitzlsberger získal další dvě certifikace v rámci programu **NVIDIA Deep Learning Institute (DLI)** – Building Transformer-Based Natural Language Processing Applications a Fundamentals of Deep Learning.

Laboratoř pro výzkum infrastruktury

Laboratoř se specializuje na vývoj a akceleraci paralelních aplikací, analýzu kódu, optimalizaci výkonu a škálovatelnosti a energetické spotřeby HPC aplikací, rozvoj služeb pro uživatele infrastruktury, zpracování medicínských dat, vizualizaci vědeckých dat, virtuální a rozšířenou realitu.

Vedoucí laboratoře
Počet zaměstnanců

Ing. Lubomír Říha, Ph.D.
13,10 FTE

Významné aktivity

- **Registrovaný software MESIO** určený k paralelnímu načítání a převodu databází nestrukturovaných sítí získal vysoké hodnocení (2) v metodice RIV 2017+.
- Vytvořena a registrována **nová verze softwaru CyclesPhi renderer** s jedinečnou funkcí renderování obrovských scén ve sdílené paměti více GPU akceleratorů.
- Vytvoření služby **Medical-as-a-Service** pro spolupráci s Fakultní nemocnicí Ostrava pro segmentaci CT snímků s možností přeučení a zpřesnění modelů na základě zpětné vazby od uživatelů.
- Příprava a **uspořádání dvou kurzů** na MPI pro začátečníky a pokročilé v rámci PRACE Training Centre, příprava celodenního kurzu na CUDA programování v rámci mezinárodního projektu SCTrain.
- Realizace a vedení dvou předmětů magisterského studia na Katedře aplikované matematiky Fakulty elektrotechniky a informatiky VŠB-TUO.
- Jakub Homola si převzal **ocenění profesora Babušky** za vynikající práci v oboru počítačových věd za rok 2021. Odborná porota ocenila jeho diplomovou práci, ve které využíval ostravské superpočítače.
- Spolupráce v rámci mezinárodní skupiny „**Energy Efficient High Performance Computing Working Group**“, která se věnuje měření, řízení a optimalizaci spotřeby elektrické energie výpočetních infrastruktur.

Laboratoř vývoje paralelních algoritmů

Laboratoř je zaměřena primárně na podporu průmyslu. Nabízí kvalitní aplikovaný výzkum v oblasti vývoje škálovatelných algoritmů a HPC knihoven, numerické modelování a simulace v inženýrství a náročné výpočty v oblasti molekulových simulací.

Vedoucí laboratoře
Počet zaměstnanců

Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.
22,59 FTE

Významné aktivity

- V roce 2021 pokračovala spolupráce se společnostmi Siemens s.r.o. (frenštátská pobočka elektromotorů) a SVS FEM s.r.o. na projektu „Digitální dvojče produktu ve výrobních závodech Siemens“.
- Na projektu „Vtokové a výtokové objekty čerpacích a turbínových stanic“ se nadále spolupracovalo s těmito ústav: SIGMA Výzkumný a vývojový ústav, s.r.o., Centrum hydraulického výzkumu s.r.o. a Ústav termomechaniky AV ČR v. v. i.
- Pokračoval vývoj knihoven pro molekulární simulace a jejich využití při výpočtech: MULTIDYN. Dále se pracovalo na propojení dvou knihoven: LIB4NEURO a NEURON-4DYN (reprezentace molekulárních interakcí pomocí umělých neuronových sítí).

Laboratoř modelování pro nanotechnologie

Laboratoř je zaměřena na design, počítačové modelování, přípravu a experimentální charakterizaci v oblasti pokročilých nanomateriálů a nanotechnologií. Dále se věnuje vývoji speciálních povrchů pro nanooptiku a disponuje nejmodernějším experimentálním vybavením pro studium nanosystémů.

Vedoucí laboratoře
Počet zaměstnanců

prof. RNDr. Michal Otyepka, Ph.D.
15,78 FTE

Významné aktivity

- Spolupráce na průlomovém objevu, který publikoval časopis *Science*, a sice pozorování nerovnoměrného rozložení elektronového náboje na atomu, tzv. sigma-díry. Objev potvrdil třicet let starou teoretickou předpověď a dále ukázal možnost dosáhnout „subatomárního“ rozlišení metodou mikroskopie skenující sondy.
- Návrh a počítačové simulace anizotropních nanostrukturovaných spinových laserů s ultrarychlou polarizační dynamikou do THz frekvencí.
- Modelování inhibice korozních procesů a elektrochemické polarizace na čistém železe a slitinách na bázi Mg a Zn imidazoliiovými ionty, rozpuštěnými transitivitymi kovy a mechanickým napětím.
- Spolupráce na vývoji jedno-atomového katalyzátoru na povrchu nových funkcionalizovaných 2D materiálů (nitridů a karbidů transitivityních kovů) pro zefektivnění reakce vývoje vodíku. Výsledek byl publikován v časopisu *Advanced Functional Materials*.
- Vývoj kódu, který na základě ab initio výpočtů určí magnetostrikční a magneto-elastické koeficienty 3D feromagnetických materiálů.



↔ Laboratoře vizualizace a virtuální reality slouží k vizualizaci 3D obsahu pomocí nejnovějších dostupných technologií v oblastech velkoplošné 3D projekce a virtuální reality.

Laboratoř pro big data analýzy

Laboratoř se zaměřuje na bezpečnost sítí, internet věcí, analýzu velkých objemů dat, zpracování řeči a dále na aplikace umělé inteligence v komplexních systémech. Soustředí se na efektivní metody zpracování a získávání znalostí.

Vedoucí laboratoře
Počet zaměstnanců

prof. Ing. Miroslav Vozňák, Ph.D.
4,81 FTE

Významné aktivity

- Realizován první národní, ale i mezinárodní **meziměstský přenos kvantových klíčů** v ČR, a to konkrétně mezi Ostravou a polským Těšínem.
- **Atlas mobility** v době pandemie COVID-19 poskytoval řadu ukazatelů o pohybech populace v rámci ČR vč. meziokresních vyjížděk; pro jejich vytěžení byla využita anonymizovaná big data mobilní sítě.
- V rámci H2020 projektu OpenQKD byl vyvinut **demonstrátor pro kvantovou distribuční klíčů**, který byl prezentován na ECOC 2021 v Bordeaux a který je dostupný na open-qkd.eu.
- Ukončení H2020 projektu **Tetramax 2017–2021**, v rámci kterého byl mimo jiné realizován technologický transfer v oblasti IoT.



↔ Salomon

Jedná se o historicky druhý ostravský superpočítač, který byl v době uvedení do provozu, dle žebříčku TOP500, 40. nejvýkonnějším superpočítačem na světě. Během šesti let svého provozu spočítal 8.700.000 výpočetních úloh v rámci 1.085 výzkumných projektů.

6

Vzdělávací a školicí aktivity

Vzdělávací aktivity

IT4Innovations společně s Fakultou elektrotechniky a informatiky VŠB-TUO realizují doktorský studijní program Výpočetní vědy. Tento, v rámci České republiky, jedinečný program je výhradně zaměřen na využití HPC, HPDA a AI ve vědě a průmyslu. Na konci roku 2021 měl studijní program společně se stejnojmenným dobíhajícím celouniverzitním programem 23 studentů. Program je součástí Doktorské školy MathInHPC (www.mathinhpc.cz) sdružující přední česká pracoviště zaměřená na oblast výzkumu matematických metod v HPC a jejich aplikací. Jeho studentky a studenti si tak mohou vybrat ze společné nabídky předmětů zapojených institucí a také z témat disertačních prací pod společným vedením. Partneři doktorské školy jsou například Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy či Matematický ústav Akademie věd ČR.

IT4Innovations se významně podílí na výuce v magisterském studijním programu Výpočetní a aplikovaná matematika, který je garantován Katedrou aplikované matematiky Fakulty elektrotechniky a informatiky VŠB-TUO, zejména pak v jeho specializaci Výpočetní metody a HPC. Dále se významně podílí na výuce v rámci studijního programu Nanotechnologie garantovaného Fakultou materiálově-technologickou VŠB-TUO.

Nadto je IT4Innovations členem mezinárodního konsorcia, které realizuje historicky první celoevropský magisterský studijní program zaměřený čistě na oblast vysoce

výkonného počítání – EUMaster4HPC. Konsorcium vedené Lucemburskou univerzitou tvoří univerzity, výzkumná a superpočítačová centra, partneři z řad průmyslových podniků a další spolupracující instituce. Magisterské studijní programy se rozběhnou od zimního semestru 2022 na osmi evropských univerzitách. Zapojení České republiky do společného evropského podniku EuroHPC umožňuje, aby se ke studiu přihlásili i čeští studenti. Absolventi najdou profesní uplatnění v rychle se rozvíjejících oborech, jako jsou HPC, vysoce výkonné datové analýzy nebo umělá inteligence. Tento projekt je součástí širší strategie EuroHPC JU na podporu rozvoje klíčových dovedností a vzdělávání a školení v oblasti HPC pro potřeby evropské vědy a průmyslu.

Školicí aktivity

IT4Innovations podporuje vědeckou komunitu a své uživatele pořádáním kurzů, tutoriálů, workshopů a dalších školicích akcí. Hlavním cílem těchto aktivit je všestranně zvyšovat kompetence uživatelů pro efektivní využívání jedinečné výpočetní infrastruktury IT4Innovations. V širším slova smyslu usiluje IT4Innovations také o zvyšování povědomí a úrovně znalostí v oblasti HPC v celonárodním měřítku, a to pro zájemce nejen z akademické, ale i z komerční sféry. Tematicky se kurzy nabízené IT4Innovations zaměřují na počítačové systémy a architekturu, programovací techniky a nástroje, knihovny a aplikace v oblastech HPC, HPDA a AI.

Právě v oblasti umělé inteligence potvrdilo IT4Innovations své dlouholeté know-how, které může v rámci svých školicích aktivit předávat dále. Georg Zitzlsberger z Laboratoře pro náročné datové analýzy a simulace získal v roce 2021 další dva certifikáty instruktora programu NVIDIA Deep Learning Institute (DLI), a to pro kurzy Building Transformer-Based Natural Language Processing Applications a Fundamentals of Deep Learning. Rozšířil tak portfolio kurzů IT4Innovations určené vývojářům a vědeckým pracovníkům, kteří řeší náročné problémy pomocí hlubokého učení.

V roce 2021 proběhlo v IT4Innovations **osm školicích akcí a workshopů**, které navštívilo 271 účastníků. Čtyři z nich proběhly pod záštitou PRACE, jelikož IT4Innovations je od roku 2017 školicím centrem PRACE, tzv. PRACE Training Center (PTC), a tři pod hlavičkou EuroCC.

- Python and scikit-learn for HPC (PTC kurz), 25. 2. 2021, online, 33 účastníků
- Introduction to MPI (PTC kurz), 25.–27. 5. 2021, online, 28 účastníků
- Performance Analysis of GPU enabled HPC applications (PTC kurz), 15.–16. 7. 2021, online, 19 účastníků
- Advanced MPI (PTC kurz), 19.–21. 10. 2021, online, 24 účastníků
- Trainings for future cooperation of Fraunhofer and IT4Innovations, (EuroCC kurz), 26. 10. 2021, online, 10 účastníků
- Efficient multi-GPU and multi-node execution of AI applications and frameworks on the GPU nodes of Karolina supercomputer (EuroCC kurz), 3. 11. 2021, online, 44 účastníků
- Access to Karolina (EuroCC kurz), 11. 11. 2021, online, 53 účastníků
- Quantum Computing Workshop, 9. 12. 2021, online, 60 účastníků

PRACE Summer of HPC

PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) umožnilo v roce 2021 již deváté studentům zúčastnit se letní stáže PRACE Summer of HPC v evropských superpočítačových centrech, tentokrát virtuálně. Tuto příležitost využilo 66 studentů, kteří se svými mentory ve dvoučlenných týmech pracovali na 33 projektech. IT4Innovations hostilo čtyři z nich.

Na projektu „[Molecular Dynamics on Quantum Computers](#)“ pod vedením Martina Besedy a Stanislava Paláčka pracovaly Carola Ciaramelletti, studentka fyziky kondenzovaných látek z Università degli studi dell'Aquila, a Jenay Patel, která studuje chemické inženýrství na Univerzitě v Nottinghamu.

Druhý tým studentů vedl Jiří Tomčala. Na jeho projektu „[Quantum algorithms and their applications](#)“ pracovali Lucia Absalom Bautista, která studuje matematiku a statistiku na univerzitě v Seville, a Spyridon-Andreas Siskos, student počítačových věd na Krétské univerzitě.



↔ Exkurze a přednášky pro veřejnost

Nedílnou součástí aktivit IT4Innovations je informování laické veřejnosti o činnosti centra či o využívání superpočítačů. Pro školy a zájemce z veřejné i komerční sféry jsou pořádány exkurze přímo v budově superpočítačového centra.



↔ Noc vědců

IT4Innovations se zapojilo do Noci vědců. Večerní akce, během které se otevírají stovky vědeckých pracovišť, proběhla v pátek 24. září a do budovy IT4Innovations přilákala téměř 600 návštěvníků.

7

Seznam projektů

Národní projekty

Projekty v oblasti superpočítačových služeb

Projekty podpořené Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy

Projekt velkých infrastruktur pro výzkum, experimentální vývoj a inovace

e-Infrastruktura CZ (2020–2022)

→ Identifikátor projektu: LM2018140
→ Řešitel: doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

→ e-INFRA CZ je unikátní e-infrastrukturou pro výzkum, vývoj a inovace v ČR, která představuje plně transparentní prostředí poskytující komplexní kapacity a zdroje pro přenos, ukládání a zpracování vědeckých dat všem subjektům zabývajícím se výzkumem, vývojem a inovacemi, bez ohledu na to, v jakém odvětví je provádí. Vytváří komunikační, informační, úložnou a výpočetní platformu pro výzkum, vývoj a inovace, jak na národní, tak i mezinárodní úrovni, a poskytuje rozsáhlé a ucelené portfolio služeb v oblasti informačních a komunikačních technologií (ICT), bez kterých moderní výzkum, vývoj a inovace nemohou být realizovány.

Mezi hlavní složky e-INFRA CZ patří:

- vysoce výkonná národní komunikační infrastruktura,
- národní gridová a cloudová infrastruktura,
- nejvýkonnější a nejmodernější superpočítačové systémy ČR,
- velkokapacitní datová úložiště.

Nezbytnou součástí a přidanou hodnotou této e-infrastruktury jsou rovněž další nástroje a služby, jako např. řízení přístupu k ICT zdrojům, nástroje podporující

vzdálenou spolupráci nebo nástroje pro zajištění bezpečné komunikace a ochrany dat, které společně přispívají k jejímu efektivnímu a současně různorodému využití.

Projekty Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání

IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale (2017–2022)

→ Identifikátor projektu: EF16_013/0001791
→ Řešitel: Mgr. Branislav Jansík, Ph.D.

→ Hlavním cílem projektu je rozšíření a modernizace výzkumné infrastruktury IT4Innovations tak, aby byla udržena stávající technologická úroveň HPC v ČR v porovnání s rozvinutými, zejména evropskými zeměmi. Záměrem aktivit tohoto projektu bylo v roce 2018 modernizovat vybavení a stávající superpočítače doplnit technologicky pokročilejším klastrem rozsahem a určením obdobným stávajícímu systému Anselm (fyzicky proběhlo 2019 pořízení superpočítače Barбора). V roce 2021 byl pořízen superpočítač Karolina, který svou kapacitou několikanásobně předčil Salomon, dosud nejvýkonnější systém IT4Innovations.

V rámci projektu je také podpořen kvalitní výzkum široké akademické komunity ČR a rozšíření stávajících výzkumných aktivit v IT4Innovations v oblastech modelování fotonických a spinfotonických struktur, návrhu nových progresivních materiálů na základě výpočtu elektronové struktury a analýzy biologických obrazů s využitím HPC. Vlastní výzkum je pro infrastrukturu IT4Innovations důležitým zdrojem expertízy v oblasti HPC, která se promítá do služeb, jež infrastruktura poskytuje svým uživatelům.

e-INFRA CZ: Modernizace (2020–2023)

→ Identifikátor projektu: CZ.02.1.01/0.0/0.0/18_072/0015659
→ Řešitel: Mgr. Branislav Jansík, Ph.D.

→ Cílem projektu je modernizace a zajištění nezbytných kapacit v rámci konkrétních komponent e-infrastruktury tak, aby úroveň IT infrastrukturní podpory odpovídala predikovaným požadavkům uživatelské komunity pro dané období a zároveň state-of-the-art úrovni oboru. Projekt je zaměřen především na kompletní modernizaci všech vrstev společné komunikační infrastruktury a dále na upgrade prvků univerzálních e-infrastrukturních kapacit pro ukládání a zpracování dat. Nedílnou součástí řešení pak bude optimální technologické a logické provázání těchto modernizovaných kapacit s analogickými celky v evropském (GÉANT, EGI, EOSC, EuroHPC, ET-P4HPC, EUDAT, PRACE...) i globálním (GLIF) VaV prostoru a samozřejmě se souvisejícími infrastrukturami a entitami na národní úrovni.

**IT4Innovations
národní superpočítačové centrum –
cesta k exascale
(2017-2022)**

Projekty v oblasti vědy a výzkumu

Projekty podpořené Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy

Projekty Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání

→ Identifikátor projektu: EF16_013/0001791

→ Řešitel: Mgr. Branislav Janský, Ph.D.

→ Cílem projektu je mimo jiné rozšíření vlastního výzkumu IT4Innovations ve třech oblastech: 1. Modelování fotonických a spinfotonických struktur, návrhu nových progresivních materiálů na základě výpočtu elektronové struktury a analýzy biologických obrazů s využitím HPC. Vlastní výzkum je pro infrastrukturu IT4Innovations důležitým zdrojem expertízy v oblasti HPC, která se promítá do služeb, které infrastruktura poskytuje svým uživatelům. 2. Použití aproximací zahrnující vliv vícečásticovitých efektů (many-body effects – MB) u elektronů. Dále je to zahrnutí teplotních efektů do výpočtových metod, tj. zejména anharmonických efektů mřížkových vibrací, a tedy možnost studovat materiály v podmínkách blížících se realitě. V poslední řadě se jedná o možnosti a přístup studovat jevy na mesoscale úrovni, tj. zahrnutím několika desítek tisíc až milionů atomů, např. vlivu rozhraní, dislokací a jiných poruch na materiálové vlastnosti, neboť tyto poruchy existují v reálných materiálech a limitují často jejich použití. 3. Vytvoření světově unikátní platformy pro analýzu biologických a biomedicínských obrazových dat na vysoce výkonné výpočetní infrastruktuře na bázi volně dostupné open-source platformy Fiji.

**Umělá inteligence
a uvažování
(2017-2022)**

→ Identifikátor projektu: CZ.02.1.01/0.0/0.0/15_003/0000466

→ Řešitel: prof. RNDr. Václav Snášel, CSc.

→ Projekt Umělá inteligence a uvažování přináší zásadní opatření pro rozvoj informatického, robotického a kybernetického výzkumu na Českém vysokém učení technickém v Praze. Předpokládá se vybudování nové výzkumné skupiny Umělá inteligence a uvažování v rámci dotčené součásti Českého institutu informatiky, robotiky a kybernetiky (CIIRC), řešící náročné interdisciplinární úlohy vysoké odborné i společenské priority. Projekt se opírá i o národní partnery (VŠB-TUO a Západočeská univerzita v Plzni). Motivace pro jejich zapojení spočívá v důrazu na koncentraci a integraci zdrojů, sdílení znalostí i infrastruktury a v neposlední řadě na vytvoření „sjednoceného prostoru příležitostí“ pro mladé talenty v ČR.

**Modelování
srážkových procesů
v nízkoteplotním
plazmatu**

→ Identifikátor projektu: DGS/TEAM/2020-020

→ Řešitel: Ing. Martin Beseda

→ Projekt je součástí širšího výzkumu ve spolupráci s Universitě Toulouse III – Paul Sabatier (UPS), zaměřeného na výzkum nízkoteplotního plazmatu na bázi vzácných plynů (především) pro biomedicínské aplikace. Zahrnuje dvě disertační práce (Beseda, Fresnelle) vytvořené v rámci double-degree studijního programu a dvě další práce (Horáčková, Paláček). Projekt je zaměřen na modelování interakcí plazmatu se vzduchem jako první krok k pochopení interakcí mezi aktivními druhy plazmatu s biomedicínskými substráty. Tento projekt navazuje na předchozí výzkumné úsilí (jedna práce vznikla pod dvojím vedením, jedna práce vznikla v rámci double-degree studijního programu, cca jedenáct publikovaných prací).



↔ Karolina

V pořadí již pátý superpočítač IT4Innovations byl zprovozněn v létě 2021, a to v rámci celoevropského společného podniku EuroHPC, který financuje pořízení superpočítačů i v dalších evropských zemích. Karolina je aktuálně nejvýkonnějším superpočítačem v České republice a jedním z pěti EuroHPC petascale superpočítačů.

Vývoj nástroje pro zpracování a vizualizaci vědeckých dat ve VR s podporou více uživatelů

- Identifikátor projektu: DGS/TEAM/2020-008
- Řešitelka: Ing. Markéta Hrabánková
- Potřeba vizualizovat data z rozsáhlých výpočtů na HPC systémech se neustále zvyšuje. Je důležité monitorovat tyto systémy i během jejich běhu a tyto informace vhodně vizualizovat. Pro intuitivnější zkoumání dat je žádoucí používat 3D vizualizace. Za tímto účelem chceme vytvořit open-source nástroje, které umožní zpracovávat a vizualizovat data ve vysoké kvalitě a budou podporovat jejich prezentaci ve virtuální realitě (VR). Námí vyvíjené nástroje budou konkrétně zaměřeny na vizualizaci lékařských dat, monitorování běhu HPC clusterů a vizualizaci výsledků simulací z paralelních simulačních open-source nástrojů. Hlavním cílem projektu jsou vysoce kvalitní vizualizace ve VR. Dalším cílem bude posílení spolupráce mezi výzkumníky s různými specializacemi. Výzkumníci v rámci studentského grantu, kteří pocházejí z několika různých fakult univerzity, budou spolupracovat na naplnění cíle projektu. Cílem je také rozšířit spolupráci se zahraničními partnery. Půjde zejména o rozšíření spolupráce s HLRS (HPC Center Stuttgart), se kterým jsme již spolupracovali v rámci evropského projektu (POP). Stejně tak bude rozšířena spolupráce s Blender Institute, se kterým jsme spolupracovali při přípravě několika „open movie“ filmů.

V rámci projektu bude také aktivováno monitorování spotřeby zdrojů HPC clusterů IT4Innovations a jejich vizualizace. Tato funkce, kterou ocení správci i uživatelé těchto systémů, umožní navazující výzkum opírající se o získaná data, jako například výzkum plánování úloh s ohledem na spotřebu energie.

Nové zdroje THz záření emitovaného pomocí spintronických jevů

- Identifikátor projektu: DGS/TEAM/2020-027
- Řešitel: Ing. Pierre Koleják
- Terahertzové (c) spektrum má obrovský potenciál pro lékařské, bezpečnostní a telekomunikační aplikace. Proto je žádoucí vyvinout nové zdroje terahertzových vln s rychlou odezvou, intenzivním signálem, řízenými polarizačními vlastnostmi a snadnou implementací. V rámci projektu budou navrženy, vyvíjeny a charakterizovány terahertzové zdroje využívající spintronické jevy, jako jsou terahertzové spintronické emitory založené na spin-Hallově jevu a THz zdroje založené na spinovém laseru. Pro zvýšení výkonu těchto zařízení budou použity fotonické a plazmonické struktury, včetně Braggovy mřížky a plazmonických materiálů pro spintronické emitory a anizotropní 2D mřížky pro spinové lasery. K popisu spinové hybnosti a širokospektrálních optických vlastností použijeme nekonvenční charakterizační metody, včetně terahertzové spektroskopie v časové doméně a z ní získaných měření na principu „pump-probe“. Numerické simulace ultrarychlé dynamiky a přenosu spinu umožní hlubší pochopení procesů generování THz záření na bázi spinu. Projekt je vysoce interdisciplinární a zahrnuje přístupy a metody z optiky, magnetismu, inženýrství, pokročilých nanotechnologií, vysoce výkonného počítačového modelování a aplikované kvantové teorie.

Vývoj výpočetních algoritmů pro řešení nelineárních úloh strukturální dynamiky s využitím numerické knihovny ESPRESO

- Identifikátor projektu: DGS/TEAM/2020-033
- Řešitel: Ing. Michal Molčan
- Nejnovější pokroky v oblasti vysoce výkonného počítání, zejména neustále se zvyšující dostupný výkon dnešních superpočítačů, umožňují vytvářet velmi přesné výpočetní modely a určovat jejich chování v obstojném časovém horizontu. Vzhledem k problémům se škálovatelností současných výpočetních postupů je

třeba vyvinout moderní, škálovatelné algoritmy, které by plně využily potenciál HPC architektury.

Cílem navrhovaného projektu je vyvinout výpočetní postupy zaměřené na řešení nelineárních úloh strukturální dynamiky. Tyto postupy budou navíc aplikovány na výpočetní modely rotačních strojů, diskretně řešených pomocí trojrozměrných konečných prvků, za účelem analýzy jejich vibrací. V rámci tohoto projektu budou řešitelé vyvíjet postupy pro: 1. stanovení odezvy v ustáleném stavu pomocí metody harmonické rovnováhy (HBM), 2. stanovení amplitudové a frekvenční křivky odezvy pomocí metody kontinuity, 3. analýzu stability a obecné bifurkace odezvy v ustáleném stavu, 4. identifikace optimální strategie pro určení amplitudové a frekvenční křivky odezvy pomocí metody T-FETI (Total Finite Element Tearing and Interconnecting) na linearizovaný model, včetně použití vhodných předpokladiňovačů a projektorů hrubého prostoru, 5. určení přechodové odezvy modelu na základě korotační formulace konečných prvků s využitím časové integrace. Postupy budou vytvořeny a studovány na testovacích případech v softwaru MATLAB a následně implementovány v programu ESPRESO (ExaScale PaRallel FETI Solver), který byl vyvinut v rámci projektu IT4Innovations s otevřeným zdrojovým kódem a testován na reálných průmyslových případech.

Podpora mobility výzkumných pracovníků a pracovníků v rámci mezinárodní spolupráce ve VaVal

Víceúrovňový design nových permanentních magnetů bez prvků vzácných zemin (2020-2022)

- Identifikátor projektu: 8X20050
- Řešitel: Ing. Dominik Legut, Ph.D.
- Plánovaný výzkum je provázaný společnou náplní institucí – VŠB-TUO, Prešovské univerzity a Univerzity Donau-Krems. Projekt spočívá v hledání permanentních magnetů bez elementů vzácných zemin, v detailní systematické studii Fe-Ta a Fe-Hf sloučenin pomocí adaptivních genetických algoritmů. Nejlepší nalezené fáze, tj. ty které splňují jak zápornou enthalpii (indikace fázové stability), vysokou saturační magnetizaci a jednoosou symetrii struktury, jsou dále podrobeny testům, zda rovněž vykazují vysokou magnetokrystalovou anizotropii, výměnné integrály ($J's$) a teplotu (T_C) přechodu z magnetického do paramagnetického stavu. MAE a $J's$ bude získána pomocí kvantově-mechanických výpočtů na HPC infrastruktuře a následně pomocí výpočtů atomové spinové dynamiky T_C . Strukturální parametry nejvíce vyhovujících predikovaných fází budou následně předány slovenským partnerům pro jejich syntézu a změření magnetických veličin, např. magnetizace, magnetické susceptibility atd. Ve stejné době rakouský partner provede mikromagnetické simulace určující magnetické chování daných materiálů s ohledem na jejich texturu, tvar, či tloušťku a za různých teplot.

Projekty podpořené Moravskoslezským krajem

Individuální dotace

Digitální inovační hub – pilotní ověření (2020–2022)

- Identifikátor projektu: O8183/2019/RRC (S516/20-96100-01RN)
- Řešitel: Mgr. Martin Duda
- Finanční podpora Moravskoslezského kraje je určena na poskytování cenově zvýhodněných služeb spojených s využíváním výpočetních kapacit IT4Innovations. Tato podpora je určena pro malé a střední podniky se sídlem, resp. pobočkou v Moravskoslezském kraji, a je poskytována v rámci režimu de minimis, a to v období let 2020 až 2022. Cílem této podpory je umožnit progresivním malým a středním firmám, včetně start-upů, využít pro rozvoj svého podnikání superpočítačové technologie a expertízu.

Podpora vědy a výzkumu v Moravskoslezském kraji

Podpora talentovaných studentů doktorského studia na VŠB-TUO

- Identifikátor projektu: O7685/2019/RRC
- Řešitel: prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.
- Cílem tohoto projektu je podpora talentovaných studentů doktorského studia na VŠB-TUO. Podpora studentů bude ve formě vyplacení příspěvku k řádnému doktorskému stipendiu studentům. VŠB-TUO tak chce ve spolupráci s Moravskoslezským krajem přispět k lepším podmínkám studentů v jejich vědecké činnosti, zejména pak ve vztahu využití výsledků jejich vědecké práce v aplikační sféře.

Projekty podpořené Grantovou agenturou České republiky

Mezinárodní grantové projekty hodnocené na principu LEAD Agency

Prostoro-časové metody hraničních prvků pro řešení rovnice vedení tepla (2019–2021)

- Identifikátor projektu: I9-29698L
- Řešitel: Ing. Michal Merta, Ph.D.
- Projekt spojil experty ze dvou příbuzných oblastí – numerické analýzy a vysoce výkonného počítání, aby společně vyvinuli rychlé a masivně paralelní metody pro obecné diskretizace prostoročasových hraničních integrálních rovnic pro rovnici vedení tepla, které umožní adaptivní zjemňování sítí v čase i prostoru. Vyvinuté metody byly založeny na klastrování, které se již používá pro diskretizace s konstantním časovým krokem a fixní prostorovou sítí. Pro generování adaptivních sítí byly aplikovány klasické techniky aposteriori odhadů. Řešení globálních prostoročasových problémů vyžaduje díky svým paměťovým nárokům použití výpočetních klastrů, ale zároveň připouští paralelizaci v prostoru i čase. Optimalizovaný a paralelizovaný kód tak je schopen plně využít výkonu současných i budoucích superpočítačů.

Modifikace teplotní stability slitin na bázi W-Cr pro aplikaci ve fúzních reaktorech (2020–2022)

Standardní grantové projekty

- Identifikátor projektu: 20-18392S
- Řešitel: Dr. Andrzej Kaździelawa
- Projekt se zabývá fyzikálními principy, které povedou ke zvýšení oblasti fázové stability mezi tzv. teplotou nemísitelnosti a teplotou tání na příkladu žádaných slitin se samopasivační rolí pro stěny fúzního reaktoru. Za tímto účelem bude zkonstruován fázový diagram systému W-Cr pomocí metod z prvních principů a z něho určeny fyzikální vlastnosti (rychlost zvuku, teplota tání, oblast nemísitelnosti). Jak fázový diagram tak uvedené veličiny budou ověřeny experimentálně. Přidáním transitivity kovu 6. periody povede ke změnám teplot tání i teploty mísitelnosti fází. Hlavní myšlenkou projektu je určit změnu těchto teplot na základě změny akustických větví fononového spektra (elasticity) přidaného elementu. Pomocí XRD analýzy a RUS měření experimentálních vzorků budou obdržena data pro zpětnou vazbu pro teoretické modelování za účelem vyvinout slitinu odolávající „Loss of Coolant Accident“. Dále bude odvozen fyzikální model na základě Hubbardova hamiltoniánu určující vliv veličin, jako je entropie na chování oblasti nemísitelnosti.

Projekty podpořené Technologickou agenturou České republiky

Program Národní centra kompetence

Personalizovaná medicína – diagnostika a terapie (2019–2022)

- Identifikátor projektu: TN01000013
- Řešitel: Ing. Jan Martinovič, Ph.D.
- Centrum PerMed je zaměřeno na aplikovaný výzkum v oblasti diagnostiky a terapie zřídka a geneticky podmíněných onemocnění. Cílem práce centra je vyvinout personalizované diagnostické metody a zároveň látky – kandidáty léčiv, které budou pomáhat specifickým skupinám pacientů. Přístup je založen na interdisciplinárně kombinaci medicíny, chemie a biologie, genetiky a bioinformatiky. Celý výzkum je rozdělen do pracovních aktivit jako je validace vhodných molekulárních cílů, biologická chemie, preklinický vývoj, identifikace biomarkerů a DNA analýza. Výsledky centra PerMed budou komercializovány jednak prodejem licencí a jednak vznikem spin-off společnosti.

Program TREND

Vývoj expertního systému pro automatické vyhodnocování patologií ze snímků oka (2020–2022)

- Identifikátor projektu: FW2020151
- Řešitelka: Ing. Kateřina Slaninová, Ph.D.
- Hlavním cílem projektu je v souladu s cílem programu TREND zvýšit mezinárodní konkurenceschopnost uchazeče Bonmedix Holding a.s, a to především proniknutím na trhy v EU a USA s nově vyvinutou službou, která bude následně certifikována jako zdravotnický prostředek.

Výzkum a vývoj funkčního vzorku železničního vozidla se schopností sběru dat a softwaru – simulátoru se schopností generování dat pro trénování detekce překážek v simulovaných podmínkách (2020–2022)

- Identifikátor projektu: FW01010274
- Řešitel: Ing. Petr Strakoš, Ph.D.
- Cílem projektu je vyvinout funkční vzorek drážního vozidla detekujícího překážky v jízdním profilu s použitím soustavy HW čidel, sofistikovanou architekturou zpracování dat a s pomocí umělé inteligence pro jejich finální identifikaci a navazující interpretaci strojvedoucím. Součástí projektu, a jako klíčová podpora pro vývoj a optimalizaci detekčního systému, je tvorba softwarového simulátoru pro virtualizaci traťových podmínek a realizaci testovacích jízd v laboratorním prostředí.

Vytvoření modelu pro hodnocení dopadů změn parametrů daňově-dávkového systému na socioekonomickou situaci rodin s dětmi v České republice (2021–2023)

- Identifikátor projektu: TL05000184
- Řešitel: prof. RNDr. Marek Lampart, Ph.D.
- Cílem projektu je na základě hloubkové a komplexní analýzy socioekonomického postavení českých domácností podle jednotlivých typů domácností, počtu dětí, absolutního a relativního příjmu v kontextu daňově-dávkového systému, vytvořit souhrnnou výzkumnou zprávu a software pro potřeby Ministerstva práce a sociálních věcí v oblasti realizace rodinné politiky. Výstupy hloubkové analýzy budou sloužit jako podkladový materiál pro vytvoření modelu daňově-dávkového systému implementovaného do softwaru, jehož hlavním účelem bude sledovat a vyhodnocovat dopad legislativních změn aktuální české rodinné politiky v oblasti daňově-dávkového systému na socioekonomické postavení konkrétní domácnosti podle jejího příjmu, typu a počtu dětí.

Projekty podpořené Ministerstvem průmyslu a obchodu
Projekty programu TRIO

Vtokové a výtokové objekty čerpacích a turbínových stanic (2018–2021)

- Identifikátor projektu: FV30104
- Řešitel: Ing. Tomáš Brzobohatý, Ph.D.
- Cíle projektu byly: 1. Vývoj a ověření numerických modelů pro simulaci vícefázového proudění s přítomností kavitace a volné hladiny, 2. Experimentální výzkum proudění v modelových vtokových a výtokových objektech, vytvoření databáze experimentálních dat pro verifikaci numerických modelů, 3. Vývoj nové hydrauliky pro perspektivní čerpací a turbínové stanice včetně vstupních a výstupních objektů nové generace na základě tvarové optimalizace.

Hlavního cíle bude dosaženo prostřednictvím vývoje a následného klinického otestování SW prototypu expertního systému pro automatické vyhodnocování patologií ze snímku oka při diagnostice diabetické retinopatie. Expertní systém bude využívat počítačovou neuronovou síť a matematicko-statistické metody, které prokáží svou schopnost automaticky vyhodnocovat patologie na obrazových záznamech oka v obdobné kvalitě jako plně kvalifikovaný zdravotnický pracovník a tato schopnost bude následně klinicky ověřena na reálných datech.

Digitální dvojče produktu v rámci výrobních závodů Siemens (2019–2022)

Projekty Operačního programu Podnikání a inovace pro konkurenceschopnost

- Identifikátor projektu: CZ.01.1.02/0.0/0.0/17_176/0015651
- Řešitel: Ing. Tomáš Brzobohatý, Ph.D.
- Cílem projektu je výzkum a vývoj digitálního dvojčete produktu a výrobního procesu ve společnosti Siemens. Projekt bude rozdělen do dvou částí, přičemž první část, tedy výzkum a vývoj digitálního dvojčete produktu, asynchronního elektromotoru, bude probíhat v odštěpeném závodě Siemens s.r.o. Elektromotory Frenštát ve spolupráci s IT4Innovations.

SmartFleet – software na bázi AI pro plnohodnotné využití elektromobilů v podnicích a maximalizaci jejich podílu ve vozovém parku (2021–2023)

- Identifikátor projektu: CZ.01.1.02/0.0/0.0/20_321/0024896
- Řešitelka: Ing. Kateřina Slaninová, Ph.D.
- Předmětem projektu je vytvoření platformy SmartFleet umožňující optimalizaci složení a využití vozového parku firem s důrazem na maximální zapojení vozidel s alternativním pohonem (zejména elektromobilů). Řešení bude vyvíjeno jako mezioborové a open – flexibilní co se týče nových vstupů (např. umístění vodíkových stanic v budoucnu) umožňující iteraci při každé zvažované změně ve vozovém parku a řešící kompletní životní cyklus vozového parku – od plánování nákupu, denního plánování až po online monitoring a reakci na všechny denní změny.

Hologramy s aktivními bezpečnostními prvky (2021–2023)

- Identifikátor projektu: CZ.01.1.02/0.0/0.0/20_321/0024953
- Řešitel: doc. Dr. Mgr. Kamil Postava
- Cílem projektu je vyvinout pomocí společného průmyslového výzkumu firmy Optaglio a.s. a výzkumného pracoviště VŠB-TUO nové produkty v oblasti bezpečnostní holografie, které budou konkurenceschopné na světových trzích. Jedná se o zcela nové typy ochranných prvků proti padělání. Projekt se zaměří na dva originální přístupy bezpečnostní holografie kombinující vysokou technickou úroveň výroby a pokročilé metody designu nanostruktur.

Projekty v oblasti vzdělávání
Projekty podpořené Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy
Projekty Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání

Doktorská škola pro vzdělávání v oblasti matematických metod a nástrojů v HPC (2017–2022)

- Identifikátor projektu: CZ.02.2.69/0.0/0.0/16_018/0002713
- Řešitel: prof. RNDr. René Kalus, Ph.D.
- Hlavním cílem projektu je ustavení Doktorské školy pro vzdělávání v oblasti matematických metod a nástrojů v HPC integrující doktorská studia Univerzity Karlovy (Matematicko-fyzikální fakulta), Akademie věd ČR (Matematický ústav) a VŠB-TUO a navazující na jejich širší spolupráci v oblasti výzkumné. Součástí projektu je modernizace a internacionalizace jednoho z doktorských programů školy (Výpočetní vědy, VŠB-TUO) a vytvoření nového programu double degree ve spolupráci s francouzskou Universitě Toulouse III Paul Sabatier. → www.mathinhpc.cz



↔ LUMI

Česká výzkumná komunita počítá nejen na superpočítačích provozovaných v IT4Innovations, ale od konce roku 2021 i na superpočítači LUMI, který se instaluje ve finském Kajaani. Díky členství IT4Innovations v konsorciu LUMI, které tvoří deset evropských zemí, budou mít čeští vědci přístup k jednomu z nejvýkonnějších a nejmodernějších superpočítačů světa, jehož špičkový teoretický výkon by měl v roce 2022 přesáhnout 550 PFlop/s.

Technika pro budoucnost 2.0 (2019–2022)

- Identifikátor projektu: CZ.02. 2. 69/0.0/0.0/18_058/0010212
- Řešitel: prof. RNDr. René Kalus, Ph.D.

→ Projekt řeší zvýšení kvality a profilace vzdělávacích aktivit a zvýšení jejich relevance pro trh práce. Zavádí nové formy výukových metod, vytváří nové studijní programy, posiluje internacionalizaci univerzity a vazby mezi univerzitou a jejími absolventy. Zavádí metody pro zvýšení účasti studentů se specifickými potřebami a strategii práce se studenty SŠ s cílem zvýšit jejich zájem o studium na VŠ. Zvyšuje kapacity řídicích pracovníků VŠ a zvyšuje kvalitu strategického řízení VŠ. Hlavním cílem projektu je zvýšit relevanci vzdělávacích aktivit VŠB-TUO pro potřeby trhu práce. To znamená dosáhnout stavu, kdy vzdělávací aktivity univerzity jsou v souladu s potřebami a specifiky trhu MSK a všech cílových skupin.

Věda bez hranic 2.0 (2020–2023)

- Identifikátor projektu: CZ.02. 2. 69/0.0/0.0/18_053/0016985
- Řešitel: prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.

→ Projekt Věda bez hranic 2.0 umožní realizaci 26 mezinárodních mobilit výzkumných pracovníků ze zahraničí do ČR i z ČR do zahraničí. Podporí tak ne zcela dostatečnou úroveň mezinárodní spolupráce ve výzkumu a profesní růst lidských zdrojů ve výzkumu. Výzkumní pracovníci se budou rozvíjet ve svých oborech výzkumu, své poznatky přenesou na pracoviště a do výzkumných týmů VŠB-TUO. Podpora je směřována primárně na juniorské výzkumné pracovníky s potenciálem akcelerace jejich výzkumné práce.

Projekty VŠB-TUO, na kterých se podílíme

Zapojení umělé inteligence do příjmu tísňového volání (2019–2022)

- Identifikátor projektu: VI20192022169
- Řešitel: Ing. Petr Bergłowiec (Fakulta bezpečnostního inženýrství VŠB-TUO)
- Poskytovatel: MVČR

→ Projekt zkoumá nasazení umělé inteligence pro příjem tísňových volání v průběhu mimořádných událostí pomocí hlasového chatbota. Je očekáván posun v řečové analytice, sémantické analýze, managementu dialogu a v hlasové syntéze, včetně integrace geografických informací. Výstupem je funkční demonstrátor pracující s reálnými telefonními hovory v podmínkách blízkých nasazení v Integrovaném záchranném systému (IZS) a doporučení pro integraci systému a jeho další rozvoj k automatizaci IZS.

Optimalizace provozních parametrů elektrické distribuční soustavy s využitím umělé inteligence (2019–2021)

- Identifikátor projektu: TJ02000157
- Řešitel: Ing. Jan Vysocký (Centrum ENET VŠB-TUO)
- Poskytovatel: TAČR

→ Cílem projektu bylo vytvoření optimalizačního systému a strategie pro optimalizaci provozu elektrické distribuční soustavy (DS). Řídicí optimalizační systém se skládá z programu a interface. Program hledá takové nastavení různých prvků soustavy, aby provoz DS byl z mnoha pohledů optimální (např. provoz s minimálními náklady, s maximální spolehlivostí atd.). Optimální konfigurace DS bylo

dosaženo např. pomocí změny topologie sítě nebo řízením lokálních zdrojů činného a jalového výkonu. Interface umožňuje zahrnout navržený program do stávajících struktur dispečerského řízení dané DS. Vytvořená optimalizační strategie popisuje veškeré inovace z oblasti hardwaru a softwaru, které je potřeba provést pro maximální navýšení možností řízení dané DS.

Bezkontaktní detektor částečných výbojů pro distribuční vedení VN (2019–2021)

- Identifikátor projektu: TJ02000031
- Řešitel: Ing. Jan Fulneček, Ph.D. (Centrum ENET VŠB-TUO)
- Poskytovatel: TAČR
- Cílem projektu byl výzkum v oblasti bezkontaktní detekce částečných výbojů v izolaci závěsných vodičů distribučních vedení vysokého napětí. V rámci řešení byl navržen a sestaven měřicí řetězec pro testovací provoz s bezkontaktním senzorem, který bude sloužit k záznamům signálů výbojové činnosti uvnitř a na povrchu izolace závěsného vodiče. K vyhodnocení zaznamenaných obrazců z výstupu měřicího řetězce byl vytvořen algoritmus pro automatickou detekci přítomnosti obrazce částečných výbojů. Na základě aktivity výbojové činnosti z výstupu prototypu detektoru algoritmus automaticky vyhodnotí izolační stav vodiče. Tento cíl byl splněn do konce doby trvání projektu.

Národní centrum pro energetiku (NCE) (2019–2022)

- Identifikátor projektu: TN01000007
- Řešitel: prof. Ing. Stanislav Mišák, Ph.D. (Centrum ENET VŠB-TUO)
- Poskytovatel: TAČR
- Cílem Národního centra pro energetiku (NCE) je stimulace dlouhodobé spolupráce mezi předními výzkumnými organizacemi a hlavními aplikačními subjekty na trhu v oboru energetiky. Dojde ke sdílení unikátních infrastruktur a know-how odborných týmů stávajících výzkumných center prostřednictvím řešení společných projektů aplikovaného výzkumu. Výzkumná agenda NCE je v souladu s Národní RIS3 strategií a je zaměřena na nové technologie vedoucí ke zvýšení účinnosti, bezpečnosti a spolehlivosti stávajících energetických celků, účinnému nasazení a provozu decentralizovaných zdrojů energie, využití alternativních paliv pro zajištění surovinové nezávislosti a energetické soběstačnosti ČR a zvýšení spolehlivosti a bezpečnosti energetických sítí.

Chytrý systém pro řízení energie energetických sítí (2019–2023)

- Identifikátor projektu: TK02030039
- Řešitel: prof. Ing. Stanislav Mišák, Ph.D. (Centrum ENET VŠB-TUO)
- Poskytovatel: TAČR
- Cílem projektu je vývoj nového systémového řešení pro řízení toku energie v energetické platformě komplexního systému Sophisticated Energy System (SEN) na úrovni distribučních sítí pro napájení energetických platforem obcí, měst či mikroregionů. SEN budou podporovat sofistikované metody řízení a perspektivní technologie za účelem zvýšení jeho bezpečnosti, spolehlivosti, surovinové nezávislosti, energetické soběstačnosti při maximálním zapojení decentrálních, zejména obnovitelných zdrojů energie. Cílem je v rámci pětiletého řešení projektu zajistit připravenost na změnu koncepce řízení energetických soustav po implementaci zimního balíčku (EU Winter Package) v souladu s Národním akčním plánem pro chytré sítě a aktualizovanou Státní energetickou koncepcí.

Centrum energetických a environmentálních technologií (CEET) (2020–2022)

- Identifikátor projektu: TK03020027
- Řešitel: prof. Ing. Stanislav Mišák, Ph.D. (Centrum ENET VŠB-TUO)
- Poskytovatel: TAČR
- Hlavním cílem projektu je vývoj modulárního, mobilního, robustního a škálovatelného technologického řešení pro efektivní přeměnu alternativních paliv, odpadů a vedlejších produktů jako alternativních surovin na využitelné chemické látky a užitečné formy energie, jejich uložení a efektivního užití s podporou nejmodernějších metod, BIM a technologií digitálního dvojčete v souladu s principy cirkulární ekonomiky. Projekt vychází z výzkumné základny Národního centra pro energetiku, stávající výzkumné kapacity integruje do strategické dlouhodobé koncepce CEET a naplňuje požadavky Státní energetické koncepce ČR a NAP. Bez unikátního sloučení a kombinace tří logicky provázaných výzkumných programů by nikdy nedosáhl požadované synergie a rychlé tržní uplatnitelnosti.

Mezinárodní projekty

Projekty v oblasti superpočítačových služeb

Projekty 8. rámcového programu pro výzkum a inovace Evropské unie – Horizont 2020

PRACE-6IP – Partnership for Advanced Computing in Europe, 6. implementační fáze (2019–2022)

- Identifikátor projektu: 823767 (H2020 INFRAEDI-2018–2020)
- Řešitel: doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.
- Cílem projektu je navázat na úspěšné předešlé fáze projektu PRACE, jejichž úkolem bylo implementovat evropskou superpočítačovou infrastrukturu a pokračovat v rozvíjení spolupráce na poli vysoce výkonného počítání pro posílení konkurenceschopnosti evropské vědy, výzkumu a průmyslu. Již v pořadí šestý projekt na podporu celoevropské výzkumné infrastruktury PRACE a jejich uživatelů se na rozdíl od předchozích zaměřil na identifikaci a rozvoj nových aplikací s významným potenciálem využití kapacity exascalových superpočítačů. → www.prace-ri.eu

Projekty v oblasti vědy a výzkumu

Projekty 8. rámcového programu pro výzkum a inovace Evropské unie – Horizont 2020

EUROCC – National Competence Centres in the framework of EuroHPC (2020–2022)

- Identifikátor projektu: 951732 (H2020-JTI-EuroHPC-2019-2)
- Řešitel: Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.
- Projekt EuroCC propojuje odborné znalosti k vytvoření evropské sítě národních center kompetence pro oblast HPC ve 31 evropských státech k zajištění portfolia služeb pro potřeby průmyslu, akademické obce i veřejné správy. Jeho cílem je posílení odborných znalostí a dovedností v oblasti vysoce výkonného počítání, datových analýz a umělé inteligence a překlenutí stávajících rozdílů ve využití těchto technologií v jednotlivých státech. → www.eurocc-project.eu

LEXIS – Large-scale Execution for Industry & Society (2019–2021)

- Identifikátor projektu: 825532 (H2020-ICT-2018-2020)
- Řešitel: Ing. Jan Martinovič, Ph.D.
- Cílem projektu, jehož koordinátorem je IT4Innovations, bylo vytvořit pokročilou inženýrskou platformu, a to využitím moderních technologií jako jsou vysoce výkonné počítání, velmi rozsáhlá data a cloudové služby. Přínosy projektu LEXIS byly demonstrovány ověřením využití platformy ve třech pilotních řešeních vhodných pro průmyslová odvětví jako například letectví, počasí a podnebí, zemětřesení a tsunami. → www.lexis-project.eu

POP2 – Performance Optimisation and Productivity 2 (2018–2022)

- Identifikátor projektu: 824080 (H2020-INFRAEDI-2018-1)
- Řešitel: Ing. Lubomír Říha, Ph.D.
- HPC centrum excelence POP2 navazuje na projekt Performance Optimisation and Productivity 1 (POP1) a dále rozšiřuje jeho aktivity. Hlavní náplní POP2 je asistence s analýzou paralelních aplikací, identifikace problémových částí kódů a doporučení optimalizačních technik vedoucích k vyššímu výkonu a lepší škálovatelnosti dané aplikace. → www.pop-coe.eu

LIGATE – Ligand Generator and portable drug discovery platform AT Exascale (2021–2023)

- Identifikátor projektu: 956137 (H2020-JTI-EuroHPC-2019-1, EuroHPC-IA)
- Řešitel: Ing. Jan Martinovič, Ph.D.
- Snahou projektu LIGATE je integrace a společný návrh prvotřídních evropských aplikací s otevřeným zdrojovým kódem společně s patentovanými IP s cílem udržet celosvětové vedoucí postavení Evropy v oblasti řešení CADD (Computer-Aided Drug Design neboli počítačový návrh léčiv) využívajících dnešní špičkové superpočítače a budoucí exascalové zdroje, a tím i podporovat evropskou konkurenceschopnost v této oblasti. Plně integrované řešení navrhované v rámci projektu LIGATE umožní co nejrychleji a s nejvyšší přesností dosáhnout reálného výsledku procesu návrhu léku a dále provádět automatické ladění parametrů řešení tak, aby odpovídala časovým a zdrojovým omezením. → www.ligateproject.eu

EVEREST – dEsign enVironmEnt foR Extreme-Scale big data analyTics on heterogeneous platforms (2020–2023)

- Identifikátor projektu: 957269 (H2020-ICT-2018-20 / H2020-ICT-2020-1)
- Řešitelka: Ing. Kateřina Slaninová, Ph.D.
- Projekt vyvíjí celostní přístup navrhování výpočtů a komunikace ve špičkovém a především bezpečném systému pro vysoce výkonné datové analýzy. Tohoto cíle bude dosaženo zjednodušením programovatelnosti různorodě rozšířených architektur pomocí přístupu řízeného daty, využitím hardwarově zrychlené umělé inteligence a díky efektivnímu monitorování spouštění úloh dle unifikovaného konceptu spojujícího hardwarový a softwarový návrh. Projekt ověří svůj přístup prostřednictvím třech případových studií, a to u predikčního modelu založeného na analýze počasí, v aplikaci pro monitorování kvality ovzduší a ve frameworku pro modelování dopravy u smart cities. → www.everest-h2020.eu

ACROSS – HPC big dAta artificial intelli-gence cross stack platfoRm tOwardS exaScale (2021–2024)

- Identifikátor projektu: 955648 (H2020-JTI-EuroHPC-2019-1, EuroHPC-IA)
- Řešitel: Ing. Jan Martinovič, Ph.D.
- Projekt ACROSS navrhuje a rozvíjí konvergenční platformu na bázi HPC, big data (BD) a umělé inteligence (AI), která bude podporovat aplikace v oblastech letectví, klimatu a počasí a energetiky. Za tímto účelem bude ACROSS nejenom těžit z další generace pre-exascalových infrastruktur a účinných mechanismů pro snadné popsání a řízení komplexních workflows ve zmíněných vědeckých oblastech, ale bude dále připravena pro využití na exascalových systémech. V rámci projektu ACROSS se kombinují tradiční HPC metody s analytickými AI (konkrétně machine learning/deep learning) a BD metodami za účelem zlepšení výsledků dosažených při testování aplikací. → www.acrossproject.eu

s-NEBULA – Novel Spin-Based Building Blocks for Advanced TeraHertz Applications (2020–2024)

- Identifikátor projektu: 863155 (H2020-FETOPEN-2018-2020, RIA)
- Řešitel: doc. Dr. Mgr. Kamil Postava
- Projekt s-NEBULA je zaměřen na výzkum a vývoj revolučního přístupu k technologiím terahertzového (THz) záření na bázi spinu jak pro generování, tak pro detekci THz záření. Záměrem projektu je vyvinout platformu pro nové THz technologie využívající spinových vlastností elektronu při pokojové teplotě, které budou založené na inovativním spojení magnetismu a optiky. Projekt poskytne špičková řešení složitých vědeckých problémů v oblasti technologií využívajících THz záření motivovaných jednoznačnými potřebami v uvážlivě zvolených cílových aplikacích. → www.s-nebula.eu

SCALABLE – SCALable Lattice Boltzmann Leaps to Exascale (2021–2023)

- Identifikátor projektu: 956000 (H2020-JTI-EuroHPC-2019-1, EuroHPC-IA)
- Řešitel: Ing. Lubomír Říha, Ph.D.
- Projekt SCALABLE spojuje významné průmyslové a akademické partnery za účelem zvýšení výkonu, škálovatelnosti a energetické účinnosti průmyslového softwaru pro výpočty dynamiky tekutin (Computational Fluid Dynamics, CFD) na bázi metody Lattice-Boltzman (LBM), která dnes představuje spolehlivou alternativu ke konvenčním CFD přístupům. Obecně je LBM vhodná pro využití pokročilých superpočítačových architektur, jelikož umožňuje masivní paralelizaci. Projekt má přímý dopad na evropský průmysl a zároveň přispívá k základnímu výzkumu. → www.scalable-hpc.eu

IO-SEA – IO Software for Exascale Architecture (2021–2024)

- Identifikátor projektu: 955811 (H2020-JTI-EuroHPC-2019-1, EuroHPC-RIA)
- Řešitel: Ing. Jan Martinovič, Ph.D.
- Cílem projektu IO-SEA je poskytnout novou platformu pro správu a ukládání dat pro potřeby exascalových výpočtů založenou na hierarchické správě úložiště a poskytování služeb ukládání dat na vyžádání. Platforma bude efektivně využívat vrstvy úložiště sahající od NVMe a NVRAM až po páskové technologie. V projektu IO-SEA budou vyvinuty pokročilé instrumentační a monitorovací funkce IO, které využijí nejnovějších poznatků v oblasti umělé inteligence a strojového učení k systematické analýze telemetrických záznamů za účelem chytrého rozhodování týkajícího se umístění dat. → www.iosea-project.eu

ExaQute – Exascale Quantifications of Uncertainties for Technology and Science Simulation (2018–2021)

- Identifikátor projektu: 800898 (H2020-FETHPC-2016-2017)
- Řešitelé: Ing. Tomáš Karásek, Ph.D. a Ing. Jan Martinovič, Ph.D.
- Cílem projektu ExaQute bylo vyvinout nové metody umožňující řešení komplexních inženýrských problémů s využitím numerických simulací a budoucích exascalových systémů. V rámci projektu byly vyvinuty nové výpočetní metody a softwarové nástroje pro řešení simulací aerodynamiky pro optimalizaci geometricky složitých konstrukcí. IT4Innovations bylo zapojeno do nasazování nástrojů Hyperloom a COMPSs na vysoce výkonných výpočetních systémech, jejich konfiguraci a optimalizaci. Podílelo se i na testování robustních algoritmů pro tvarovou optimalizaci konstrukcí zatížených větrem. → www.exaquite.eu

OPENQKD – Open European Quantum Key Distribution Testbed (2019–2023)

- Identifikátor projektu: 857156 (H2020-SU-ICT-2018-2020)
- Řešitel: prof. Ing. Miroslav Vozňák, Ph.D.
- Cílem projektu je vytvoření testbedu vysoce zabezpečené sítě využívající pro distribuci klíčů principy kvantové mechaniky. Jedná se o dosud nejrozsáhlejší nasazení QKD (Quantum Key Distribution) v Evropě. Role IT4Innovations je především ve třech oblastech. První je realizace případu užití HPC přes QKD mezi IT4Innovations a PSNC (Poznaň). Druhou oblastí je participace na vývoji a implementaci správy klíčů. Třetí doménou jsou simulace realizovaných případů nasazení QKD u všech partnerů v projektu a zároveň vylepšení QKD simulátoru, který je v Ostravě vyvíjen jako open-source. Při simulacích jsou využívány výpočetní zdroje IT4Innovations. → www.openqkd.eu

CloudiFacturing – Cloudification of Production Engineering for Predictive Digital Manufacturing (2017–2021)

- Identifikátor projektu: 768892 (výzva H2020-FOF-2017)
- Řešitel: Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.
- Posláním projektu bylo přispět k účinnému využívání výkonných výpočetních zdrojů evropskými malými a středními výrobními podniky, a tím zvýšit jejich konkurenceschopnost. Náplní projektu byla optimalizace výrobních procesů a produktivity podniků pomocí modelování a simulací založených na využívání HPC a cloudových služeb. → www.cloudifacturing.eu

TETRAMAX – Technology Transfer via Multinational Application Experiments (2017–2021)

- Identifikátor projektu: 761349 (výzva H2020-ICT-2016-2)
- Řešitel: prof. Ing. Miroslav Vozňák, Ph.D.
- V rámci projektu byla implementována iniciativa „Smart Anything Everywhere“ do oblasti nízkenergetického počítání pro kyber-fyzikální systémy a internet věcí. Klíčovým záměrem iniciativy bylo urychlit inovace v evropském průmyslu. Iniciativa propojila technické a aplikační know-how, což napomohlo efektivnějšímu a účinnějšímu přijímání pokročilých digitálních technologií malými a středními podniky. → www.tetramax.eu

EXPERTISE – Models, Experiments and High Performance Computing for Turbine Mechanical Integrity and Structural Dynamics in Europe (2017–2021)

- Identifikátor projektu: 721865 (výzva H2020-MSCA-ITN-2016)
- Řešitel: prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.
- Cílem projektu bylo vychovat vědecké pracovníky schopné interdisciplinární spolupráce. Kooperace mezi průmyslovými partnery a vědecko-výzkumnými organizacemi urychlila rozvoj klíčových technologií v oblasti vývoje turbín a jejich rychlejší uvedení do praxe. → www.msca-expertise.eu

DICE – Data Infrastructure Capacity for EOSC (2021–2023)

- Identifikátor projektu: 101017207 (H2020-INFRAEOSC-2018-2020, RIA)
- Řešitel: Ing. Filip Staněk
- Konsorcium projektu DICE propojuje síť výpočetních a datových center, výzkumných infrastruktur a datových úložišť s cílem vytvořit evropskou infrastrukturu pro EOSC v oblasti správy dat a jejich ukládání, která bude výzkumné komunitě poskytovat standardní služby a základní moduly pro ukládání, vyhledávání, přístup a zpracování dat konzistentním a trvalým způsobem. → www.dice-eosc.eu

Projekty v oblasti vzdělávání Erasmus+ projekty

SCTrain – Supercomputing knowledge partnership (2020–2023)

- Identifikátor projektu: 20-203-075975 (KA203-6E6A1FFC)
- Řešitel: prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.
- Posláním projektu je metodický přístup k doplnění mezer v současných vysokoškolských kurzech a zvýšení povědomí o HPC pro budoucí odborníky v oblasti vědy, techniky, inženýrství a matematiky. → <https://sctrain.eu>

Seznam zkratek

AI	Umělá inteligence (Artificial Intelligence)	MVČR	Ministerstvo vnitra České republiky
ACROSS	HPC big data artificial intelligence cross stack platform towardS exaScale	NCE	Národní centrum pro energetiku
BD	Big data, velká data	NVIDIA DLI	NVIDIA Deep Learning Institute
BDVA/DAIRO	Big Data Value Association/Data, AI and Robotics	OPENQKD	Open European Quantum Key Distribution Testbed
CEET	Centrum energetických a environmentálních technologií	POP2	Performance Optimisation and Productivity 2
CloudiFacturing	Cloudification of Production Engineering for Predictive Digital Manufacturing	PRACE	Partnership for Advanced Computing in Europe
CT	Počítačová tomografie (Computed Tomography)	PRACE-6IP	Partnership for Advanced Computing in Europe, 6. implementační fáze
DICE	Data Infrastructure Capacity for EOSC	PTC	PRACE Training Center
DIH	Digitální inovační hub	QKD	Výměna kvantových klíčů (Quantum Key Distribution)
DIHnet EU	Evropská síť digitálních inovačních hubů	SCALABLE	SCALable LAttice Boltzmann Leaps to Exascale
DOI	Unikátní mezinárodní identifikátor digitálního objektu v elektronickém prostředí (Digital Object Identifier)	SCTrain	Supercomputing knowledge partnership
DS	Distribuční soustava	SMEs	Malé a střední podniky (Small and medium-sized enterprises)
ECOC	European Conference on Optical Communication	s-NEBULA	Novel Spin-Based Building Blocks for Advanced TeraHertz Applications
EOSC	European Open Science Cloud	SŠ	Střední škola
ESA	Evropská vesmírná agentura, European Space Agency	SW	Software
ETP4HPC	European Technology Platform for High-Performance Computing	TAČR	Technologická agentura České republiky
EUDAT CDI	EUDAT Collaborative Data Infrastructure	TETRAMAX	Technology Transfer via Multinational Application Experiments
EUMaster4HPC	Magisterský studijní program zaměřený na oblast vysoce výkonného počítání (European Master For High Performance Computing)	THz záření	Terahertzové záření
EUROCC	National Competence Centres in the framework of EuroHPC	VaV	Věda a výzkum
EuroHPC JU	Společný evropský podnik EuroHPC	VaVal	Výzkum, vývoj a inovace
EVEREST	dSign enVironmEnt foR Extreme-Scale big data analyTics on heterogeneous platforms	VGS	Veřejná grantová soutěž
ExaQUte	Exascale Quantifications of Uncertainties for Technology and Science Simulation	VR	Virtuální realita
EXPERTISE	Experiments and High-Performance Computing for Turbine Mechanical Integrity and Structural Dynamics in Europe	VŠ	Vysoká škola
FP7	7. rámcový program pro výzkum a technologický rozvoj (Seventh Framework Programme)	VŠB-TUO	Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava
FTE	Ekvivalent plné pracovní doby (full-time equivalent)		
GAČR	Grantová agentura České republiky		
GPU	Jednotka grafického zpracování (Graphics Processing Unit)		
H2020	Horizon 2020		
HPC	Vysoce výkonné počítání (High-Performance Computing)		
HPDA	Vysoce výkonná analýza dat (High Performance Data Analytics)		
HW	Hardware		
I4MS	ICT Innovation for Manufacturing SMEs		
ICT	Informační a komunikační technologie		
IF	Impakt faktor, ukazatel, který reflektuje kvalitu vědeckých publikací		
IO-SEA	IO Software for Exascale Architecture		
IoT	Internet věcí (Internet of Things)		
IZS	Integrovaný záchranný systém		
LEXIS	Large-scale Execution for Industry & Society		
LIGATE	Ligand Generator and portable drug discovery platform AT Exascale		
LUMI	Large Unified Modern Infrastructure		
MPI	Message Passing Interface, programovací model		
MPO	Ministerstvo průmyslu a obchodu České republiky		
MSK	Moravskoslezský kraj		
MŠMT	Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy České republiky		

**VŠB TECHNICKÁ
UNIVERZITA
OSTRAVA**

**IT4INNOVATIONS
NÁRODNÍ SUPERPOČÍTAČOVÉ
CENTRUM**

www.it4i.cz

© IT4Innovations národní superpočítačové centrum Ostrava 2021

Poštovní adresa

VŠB – Technická univerzita Ostrava
17. listopadu 2172/15
708 00 Ostrava

E-mail info@it4i.cz

Tel. +420 597 329 500

Adresa

IT4Innovations národní superpočítačové centrum
Studentská 6231/1b
708 00 Ostrava

Tato publikace byla podpořena Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy z účelové podpory projektu Velké výzkumné infrastruktury „e-INFRA CZ - LM2018140“.



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY