

VŠB TECHNICKÁ
UNIVERZITA
OSTRAVA

IT4INNOVATIONS
NÁRODNÍ SUPERPOČÍTAČOVÉ
CENTRUM

PŘEHLED ROKU 2019



ÚVODNÍ SLOVO ŘEDITELE IT4INNOVATIONS	5
VÝZNAMNÉ UDÁLOSTI V ROCE 2019	6
PŘEDSTAVENÍ IT4INNOVATIONS	10
Historie	11
Členství	12
Organizační struktura	13
FINANČNÍ PŘEHLED	16
Zdroje financování	16
Provozní a investiční náklady	17
Souhrnný výčet všech grantů	18
SUPERPOČÍTAČOVÉ SLUŽBY	20
Technické parametry superpočítačů	21
Přidělování výpočetního času	22
Uživatelé výpočetních zdrojů	27
Projekty v oblasti superpočítačových služeb	28
VÝZKUM A VÝVOJ	30
Vlajkové lodě ve vědě a výzkumu	31
Laboratoř vývoje paralelních algoritmů	33
Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace	34
Laboratoř modelování pro nanotechnologie	35
Laboratoř pro big data analýzy	36
Laboratoř pro výzkum infrastruktury	37
Projekty v oblasti výzkumu a vývoje	38
Spolupráce s komerční sférou	45
VZDĚLÁVACÍ A VÝUKOVÉ AKTIVITY	46
Studijní programy	46
Vzdělávací aktivity	46
PRACE Summer of HPC	47
Projekty v oblasti vzdělávání	48



Úvodní slovo ředitele IT4Innovations

Vážení čtenáři,

bez nadsázky se dá říci, že rok 2019 se jistě zařadí mezi ty velmi významné a úspěšné roky v historii našeho centra. Dařilo se na poli výzkumu, rozvoje výpočetní infrastruktury, spolupráce s průmyslem i ve vzdělávání, což jsou hlavní pilíře naší činnosti. A mě velice těší, že se s vámi mohu o naše úspěchy na stránkách Přehledu za rok 2019 podělit.

Chloubou každého superpočítačového centra jsou jeho výpočetní systémy. U nás v IT4Innovations během roku 2019 přibýly hned dva a po pěti letech se tak počet našich superpočítačů rozrostl ze dvou rovnou na čtyři. Prvním z nich byl velmi výkonný systém specializovaný pro výpočty na výkonných GPU a umělé inteligenci – NVIDIA DGX-2, jež byl instalován na jaře. Na podzim pak přišla dlouho očekávaná modernizace našeho prvního superpočítače Anselm v podobě instalace technologicky nejmodernějšího superpočítače Barbora. Ten se se svým výkonem 849 TFlop/s zařadil na pomyslnou druhou příčku v našem interním výkonnostním žebříčku. Tyto systémy tedy již máme. Nám se ale v minulém roce podařilo v budování výpočetních infrastruktur významně uspět i na mezinárodním poli. V celoevropské soutěži o hostitelství tzv. „EuroHPC petascale systémů“, která byla vyhlášena společným podnikem EuroHPC JU, jsme uspěli s projektem „IT4Innovations centrum pro evropskou vědu a průmysl“, pracovním nazvaném EURO_IT4I. Tento systém umožní našim i zahraničním vědcům, jakož i průmyslovým partnerům přístup ke špičkovému superpočítači světové úrovně. Jeho špičkový teoretický výkon se bude pohybovat okolo 13 PFlop/s, což by jej mělo zařadit do 10. místa v Evropě

a do 50. místa na světě. A to není vše! Zároveň jsme se totiž stali členy tzv. LUMI konsorcia (Large Unified Modern Infrastructure) sdružujícího 10 evropských států, které budou společně s Evropskou komisí pořizovat a poté i provozovat zřejmě nejvýkonnější evropský superpočítač, tzv. EuroHPC pre-exascalový systém. Superpočítač LUMI, jež bude umístěn ve finském Kajaani a který bude bezesporu patřit mezi absolutní světovou špičku, tak bude přístupný i českým vědcům a průmyslu.

IT4Innovations má dlouholeté silné mezinárodní vazby a je aktuálně zapojeno v řadě prestižních mezinárodních organizací, infrastruktur a iniciativ jako je PRACE, ETP4HPC či EuroHPC JU. Členství jsme v loňském roce rozšířili o další významné evropské organizace, kterými jsou BDVA (Big Data Value Association) a EUDAT CDI (Collaborative Data Infrastructure).

Co by ale byly superpočítače bez projektů, které je pro své výzkumné cíle využívají. Hrdí jsme nejen na desítky národních projektů, ale především na mezinárodní projekty financované zejména z programu EU Horizont 2020. Počátkem roku 2019 se rozběhl náš momentálně nejvýznamnější projekt LEXIS, který sdružuje 16 členů napříč Evropou a jehož cílem je vytvořit pokročilou softwarovou platformu podporující řešení velmi složitých inženýrských problémů a využívající moderní IT technologie v oblasti vysokovýkonnostních výpočtů, velmi rozsáhlých dat a cloudových služeb. Jedná se o vůbec první projekt tohoto významu koordinovaný VŠB – Technickou univerzitou Ostrava. Za zmínku v oblasti výzku-

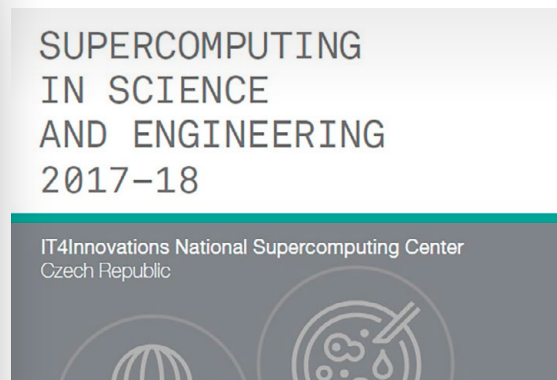
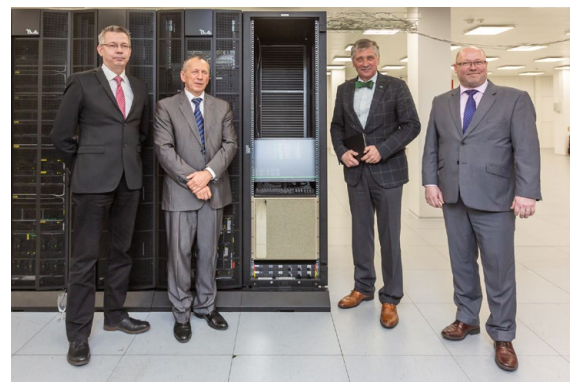
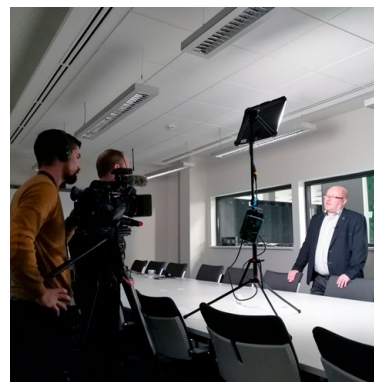
mu a vývoje rovněž stojí úspěchy našich kolegů v publikační činnosti – hned několik z nich uspělo ve špičkových mezinárodních časopisech, získali jsme nejedno ocenění za nejlepší poster či jsme prezentovali náš výzkum na prestižních mezinárodních konferencích, za což jsem velmi rád.

Posílili jsme také naše vazby v oblasti spolupráce s průmyslovými podniky, a to především rozvíjením aktivit v rámci digitálního inovačního hubu. Aktivita v roce loňském směřovaly k vytvoření Digitálního inovačního hubu Ostrava, který spojuje aktivity IT4Innovations s Moravskoslezským inovačním centrem Ostrava (MSIC). Strategickým cílem DIH Ostrava je podpora zavádění a využívání pokročilých digitálních inovací ve firmách i ve společnosti. Máme dobré předpoklady stát se i jedním z tzv. Evropských digitálních inovačních hubů.

Jsem hrdý na to, že díky tomu, co se nám v roce uplynulém podařilo, může být IT4Innovations považováno za špičkové výzkumné centrum v oblasti HPC celoevropského formátu a svým uživatelům a partnerům může nabízet širší portfolio služeb či větší množství výpočetních zdrojů. Hlavní díky patří našim zaměstnancům, partnerům a podporovatelům, bez kterých bychom úspěchů popsaných výše i podrobněji na dalších stranách této publikace nedosáhli.

Vít Vondrák

ředitel IT4Innovations
národního superpočítačového centra



LEDEN

- > Start projektu **LEXIS**, jehož je IT4Innovations koordinátorem. Jedná se o první projekt Horizont 2020 koordinovaný VŠB-TUO. Cílem projektu je vytvořit pokročilou inženýrskou platformu, a to s využitím moderních technologií, jako jsou vysoko-výkonnostní počítání, velmi rozsáhlá data a cloudové služby.
- > Hostili jsme **Fiji Hackathon** zaměřený na paralelizaci a HPC. Letos poprvé se tak konal v České republice.
- > Evropskou komisí jsme evidováni jako **Digitální inovační hub** pro spolupráci s průmyslem v oblasti HPC a pokročilých datových analýz.
- > Úspěšně jsme obhájili výsledky projektu **ANTAREX**.
- > Spolu s Centrem ENET jsme zapojeni do **Národního centra pro energetiku** (NCE).

ÚNOR

- > Úspěšné zakončení projektu **ExCAPE**, jehož cílem bylo vyvinout počítačové programy, které dokážou najít nové léky s pomocí exascale výpočetních systémů.
- > Televizní stanice **Euronews** u nás natáčela reportáž v rámci programu Inteligentní regiony, jenž přináší zpravodajství o významných projektech s vysokou hodnotou pro občany Evropské unie.

BŘEZEN

- > Spustili jsme výpočetní systém **NVIDIA DGX-2** pro výpočty umělé inteligence. Jedná se o první instalaci tohoto typu ve střední a východní Evropě.
- > Stali jsme se členem mezinárodní neziskové organizace **Big Data Value Association** (BDVA).
- > Proběhl u nás seminář Digitální revoluce sdružení **CzechInno**.
- > Zúčastnili jsme se **Kariéry PLUS**, veletrhu pracovních nabídek, který organizuje VŠB – Technická univerzita Ostrava.
- > Proběhlo setkání partnerů projektu **InnoHPC** (Superpočítače pro efektivní inovace v Podunají).

DUBEN

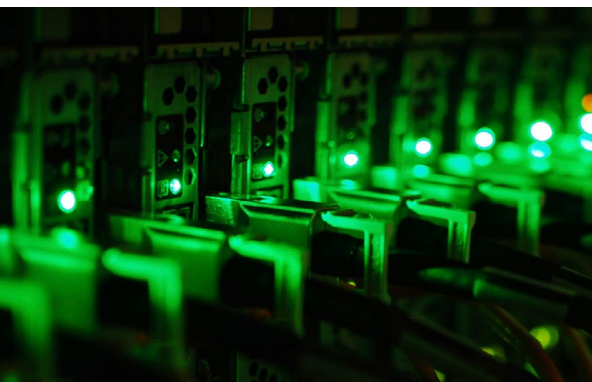
- > Vydali jsme sborník **Supercomputing in Science and Engineering 2017-18**, který zahrnuje 51 příspěvků uživatelů našich výpočetních systémů.
- > Připojili jsme se k **EUDAT Collaborative Data Infrastructure**. Jedná se o evropskou e-infrastrukturu integrující datové služby a zdroje na podporu výzkumu.

KVĚTEN

- > Pořádali jsme konferenci **High Performance Computing in Science and Engineering** (HPCSE).
- > Nově jsme součástí výzkumného konsorcia v oblasti personalizované medicíny – **Národního centra kompetence PerMed**.
- > Nejlepší poster konference **PRACEdays19** získal náš kolega Martin Golasowski s příspěvkem „Distributed Environment for Traffic Simulations“.
- > Oficiálně byla zahájena v pořadí již **6. implementační fáze projektu PRACE** (Partnership for Advanced Computing in Europe).
- > Zasedala u nás komise soutěže o **Cenu Josepha Fouriera**.

ČERVEN

- > Uspěli jsme v celoevropské soutěži o hostitelství tzv. **EuroHPC petascale superpočítačového systému**, který bude v EU vybudován v rámci implementace společné technologické iniciativy EuroHPC. Pořizovaný systém se svými parametry zařadí mezi nevykonnější superpočítače v Evropě. Souběžně jsme uspěli v soutěži o EuroHPC pre-exascale superpočítačový systém, a to jako člen **LUMI** (Large Unified Modern Infrastructure) konsorcia tvořeného koordinujícím Finskem a Belgií, ČR, Dánskem, Estonskem, Nizozemím, Norskem, Polskem, Švédskem a Švýcarskem. Slavnostní oznámení o hostitelství proběhlo 13. června 2019 za účasti zástupce generálního ředitele Evropské komise pro komunikační sítě, obsah a technologie Khalila Rouhany.
- > Účastnili jsme se **Veletrhu vědy** v Praze, který pořádá Akademie věd ČR.
- > Náš kolega Tomáš Martinovič, který prezentoval výzkum na téma „HPC Oriented Algorithm for Computation of Recurrence Quantitative Analysis“ získal ocenění **Nejlepší výzkumný poster na ISC 2019**.



ČERVENEC

- > V rámci projektu **e-INFRA CZ** jsme se spojili s dalšími dvěma výzkumnými infrastrukturami – sdružením CESNET a CERIT-SC provozovaného Masarykovou univerzitou. e-INFRA CZ je plně transparentním prostředím nabízejícím komplexní kapacity a zdroje pro přenos, ukládání a zpracování vědeckých dat všem subjektům zabývajícím se výzkumem, vývojem a inovacemi napříč odvětvími.

SRPEN

- > Již posedmé jsme se zapojili do programu **PRACE Summer of HPC** a během letní stáže jsme hostili dva zahraniční studenty. Program je určen studentům evropských univerzit a je zaměřen na projekty HPC v superpočítačových centrech, zapojených do projektu Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE).
- > **Budova IT4Innovations** oslavila 5 let.

ZÁŘÍ

- > Startuje další z projektů HORIZONT 2020 – **OPENQKD**, který implementuje a testuje pilotní kvantovou komunikační infrastrukturu v několika evropských zemích.
- > Pavel Moravec z Laboratoře pro náročné datové analýzy a simulace získal ocenění **Best paper** na konferenci **CISIM 2019** v Bělehradě v Srbsku.
- > Účastnili jsme se festivalu **Art&Science, Dnů NATO** a přivítali jsme přes 700 návštěvníků v rámci **Noci vědců**.

ŘÍJEN

- > Proběhl slavnostní ceremoniál ke spuštění nového superpočítače, jež dostal jméno **Barbora**.
- > Startuje projekt **Doktorská škola** pro vzdělávání v oblasti matematických metod a nástrojů v HPC.
- > Barbora Kacerovská z Laboratoře modelování pro nanotechnologie zvítězila v soutěži Lady Business v kategorii **Výjimečná studentka MS kraje**.
- > Organizovali jsme **Česko-francouzský workshop** v oblasti nanotechnologií.
- > Podíleli jsme se na organizaci **konference DS-RT** (Distributed Simulation and Real Time Applications), Cosenza, Itálie.

LISTOPAD

- > Ve Štrasburku se uskutečnil **slavnostní podpis smluv** o hostování EuroHPC pre-exascale a petascale systémů za přítomnosti zástupců zemí, ve kterých budou tyto systémy umístěny.
- > Proběhla **3. konference uživatelů IT4Innovations** a **8. výroční konference Centra excellence IT4Innovations**.
- > Digitální inovační hub IT4Innovations vyhlášen **DIHem měsíce listopadu**, DIHnet EU.
- > IT4Innovations nechybělo mezi vystavovateli na **Supercomputing Conference** (SC19) v Denveru, USA. Na konferenci byly publikovány dva články Jakuba Beránka, zabývající se přenosem výpočtů na síťové karty a návrhem rozhraní pro komunikaci FPGA. U příležitosti 20letého výročí konání Supercomputing Conference byl v rámci výstavy milníků konference vybrán projekt **HyperLoom**.

PROSINEC

- > Řešitelský kolektiv prof. Zelinky z VŠB-TUO a kolegové z Laboratoře pro big data analýzy získali čestné ocenění odborné poroty soutěže **Vizionáři 2019** za mobilní aplikaci Chiméra pro šifrovanou komunikaci.

PŘEDSTAVENÍ IT4INNOVATIONS

IT4Innovations národní superpočítačové centrum při VŠB – Technické univerzitě Ostrava je předním výzkumným, vývojovým a inovačním centrem v oblasti vysoce výkonného počítání (HPC) a datových analýz (HPDA), 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 uvedena v Ces- tovní mapě velkých výzkumných infra- struktur České republiky pro výzkum, experimentální vývoj a inovace, kterou sestavuje Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

IT4Innovations poskytuje nejmodernější superpočítačové technologie a služby jak českým, tak i zahraničním výzkumným týmům z akademické i soukromé sféry. V současné době provozuje IT4Innovati- ons čtyři superpočítače – Anselm s výko- nem 94 TFlop/s instalován na jaře 2013, Salomon s výkonem 2 PFlop/s uveden do provozu v létě 2015, Barbora s výkonem 849 TFlop/s zprovozněný v létě 2019 a specializovaný systém pro výpočty umělé inteligence NVIDIA DGX-2 s výko- nem 130 TFlop/s (a pro AI až 2 PFlop/s) spuštěn na jaře 2019.

IT4Innovations se zabývá excelentním výzkumem v oblasti vysoce výkonného počítání (HPC), datových analýz (HPDA) a umělé inteligence (AI). Stěžejními té- maty výzkumu IT4Innovations jsou zpra- cování a analýza rozsáhlých dat, strojové učení, vývoj paralelních škálovatelných algoritmů, řešení náročných inženýr- ských úloh, pokročilá vizualizace, virtu- ální realita, modelování pro nanotech- nologie a vývoj nových materiálů.

Výzkumné aktivity IT4Innovations se realizují v pěti laboratořích:

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

Nedílnou součástí aktivit IT4Innovations je spolupráce s průmyslovými podniky, díky níž získalo IT4Innovations statut Digitálního inovačního hubu registrova- ného na úrovni Evropské komise, a je čle- nem evropské sítě digitálních inovačních hubů DIHnet EU. Digitální inovační huby jsou založeny na regionální spolupráci mezi více partnery, jako jsou výzkumné organizace, průmyslová sdružení, inku- bátory/akcelératory či konkrétní firmy. V této souvislosti navázalo IT4Innovati- ons partnerství s Moravskoslezským ino- vačním centrem Ostrava.

IT4Innovations se nezaměřuje pouze na poskytování přístupu ke špičkovým vý- početním systémům či aktivity ve vědě a výzkumu, ale nabízí také širokou škálu odborných školení, zaměřených na zís- kání znalostí potřebných k efektivnímu využívání superpočítačové infrastruk- tury. IT4Innovations se taktéž podílí na vzdělávání odborníků v HPC, HPDA a AI v rámci doktorského studijního progra- mu Výpočetní vědy. Program je garanto- ván společně IT4Innovations a Fakultou elektrotechniky a informatiky VŠB-TUO. Zaměstnanci centra dále participují na výuce ve výpočetně zaměřených stu- dijních programech, které nabízí VŠB- TUO od bakalářských až po doktorské studijní programy, jako jsou výpočetní a aplikovaná matematika, nanotech- nologie, aplikovaná mechanika a aplikova- ná fyzika.

Historie

2011

- > založení IT4Innovations
- > členství v PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe)

2013

- > zprovoznění superpočítače Anselm

2014

- > slavnostní otevření budovy IT4Innovations

2015

- > zprovoznění superpočítače Salomon

2016

- > členství v ETP4HPC (European Technology Platform for High- Performance Computing)

2018

- > Česká republika se připojila k EuroHPC JU (podpora vybudování evropského exascalového superpočítače). IT4I se aktivně podílí na aktivitách EuroHPC.

2019

- > spuštění specializovaného systému NVIDIA DGX-2 pro výpočty umělé inteligence
- > spuštění superpočítače Barbora
- > rozhodnutí o instalaci petascalového výpočetního systému v roce 2020 s pracovním názvem EURO_IT4I a výkonem okolo 13,6 PFlop/s
- > úspěch v soutěži o EuroHPC pre-exascale superpočítačový systém, a to jako člen LUMI (Large Unified Modern Infrastructure) konsorcia
- > členství v BDVA (Big Data Value Association) a EUDAT CDI

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.



Členství

IT4Innovations se významně podílí na aktivitách společného podniku EuroHPC a je členem v klíčových evropských infrastrukturách, iniciativách a sdruženích v oblasti HPC a HPDA:

PRACE

Partnership for Advanced Computing in Europe

ETP4HPC

European Technology Platform for High-Performance Computing

I4MS

ICT Innovation for Manufacturing SMEs

EUDAT

Collaborative Data Infrastructure

BDVA

Big Data Value Association

EuroHPC Joint Undertaking

ORGANIZAČNÍ STRUKTURA



Vědecká rada	Ředitel		
Kancelář ředitele			Oddělení komunikace
ÚSEK ADMINISTRATIVY		ÚSEK VÝZKUMU A VÝVOJE	ÚSEK SUPERPOČÍTAČOVÝCH SLUŽEB
Útvar hlavního ekonoma		Laboratoř vývoje paralelních algoritmů	Útvar provozu a správy HPC
Útvar veřejných zakázek		Laboratoř pro datové analýzy a simulace	Útvar hardwaru a infrastruktury
Útvar provozně-správní		Laboratoř modelování pro nanotechnologie	Oddělení architektury a rozvoje HPC
		Laboratoř pro big data analýzy	Oddělení školení a vzdělávání
		Laboratoř pro výzkum infrastruktury	

Vedení
laboratoří
IT4Innovations

Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.

Laboratoř vývoje
paralelních algoritmů

Ing. Jan Martinovič, Ph.D.

Laboratoř pro náročné datové
analýzy a simulace

prof. Ing. Jaromír Pištora, CSc.

Laboratoř modelování
pro nanotechnologie

prof. Ing. Miroslav Vozňák, Ph.D.

Laboratoř pro big data analýzy

Ing. Lubomír Říha, Ph.D.

Laboratoř pro výzkum infrastruktury



Vědecká rada
IT4Innovations

PŘEDSEDA

doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

ČLENOVÉ

Interní

prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.

Mgr. Branislav Janský, Ph.D.

Ing. Jan Martinovič, Ph.D.

Ing. Lubomír Říha, Ph.D.

Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.

prof. Ing. Jaromír Pištora, CSc.

prof. Ing. Miroslav Vozňák, Ph.D.

Externí

prof. Ing. Jan Holub, Ph.D.

Fakulta informačních technologií
České vysoké učení technické v Praze

doc. Ing. Jiří Jaroš, Ph.D.

Fakulta informačních technologií
Vysoké učení technické v Brně

prof. Ing. Pavel Tvrdlík, CSc.

Fakulta informačních technologií
České vysoké učení technické v Praze

doc. RNDr. Stanislav Hledík, Ph.D.

Filozoficko-přírodovědecká fakulta
Slezská univerzita v Opavě

prof. RNDr. Jaroslav Pokorný, CSc.

Matematicko-fyzikální fakulta
Univerzita Karlova

Také v roce 2019 pokračovala spolupráce IT4Innovations s partnery projektu Centrum excelence IT4Innovations – Ostravskou univerzitou, Slezskou univerzitou v Opavě, Vysokým učením technickým v Brně a Ústavem geoniky Akademie věd ČR. Od roku 2016 společně řeší projekt IT4Innovations Excellence in Science, jenž je financován z Národního programu udržitelnosti II. Dozor nad tímto projektem, ale i nad udržitelností projektu Centra excelence IT4Innovations, zajišťuje správní rada IT4Innovations.

Správní rada
Centra excelence
IT4Innovations

PŘEDSEDA

Ing. Evžen Tošenovský, Dr.h.c.

MÍSTOPŘEDSEDA

doc. Mgr. Pavel Drozd, Ph.D.

ČLENOVÉ

prof. Ing. Ivo Vondrák, CSc.

prof. Ing. Petr Noskiewiż, CSc.

Ing. Miroslav Murin, FCCA

prof. Dr. Ing. Pavel Zemčık

Ing. Leoš Dvořák

doc. Ing. Pavel Tuleja, Ph.D.

prof. Ing. Miroslav Tůma, CSc.

Poradní orgán
výzkumné
infrastruktury
IT4Innovations
národního
superpočítačového
centra / Vědecká rada
Centra excelence
IT4Innovations

PŘEDSEDA

doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

ČLENOVÉ

prof. Jean Christopher Desplat

Irish Centre for High-End Computing

prof. Ing. Petr Berka, CSc.

Vysoká škola ekonomická v Praze

doc. Ing. Petr Cintula, Ph.D.

Ústav informatiky Akademie věd ČR

prof. Dr. Kenneth Ruud

The Arctic University of Norway

prof. Dr. hab. Ing Roman Wyrzykowski

Czestochowa University of Technology

prof. Dr. Arndt Bode

Leibniz Supercomputing Centre
of the Bavarian Academy of Sciences

prof. Dr. Vahtang Jandieri

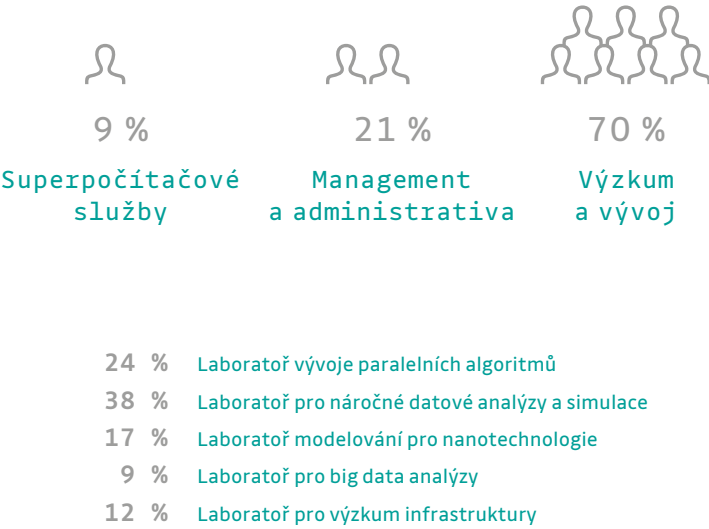
University of Duisburg-Essen

prof. DrSc. Svetozar Dimitrov Margenov

Bulgarian Academy of Sciences

Zaměstnanci
IT4Innovations

Zaměstnanci IT4Innovations podle úseků po přepočtu na ekvivalent plného pracovního úvazku (FTE), celkem 135,78 FTE, z toho:



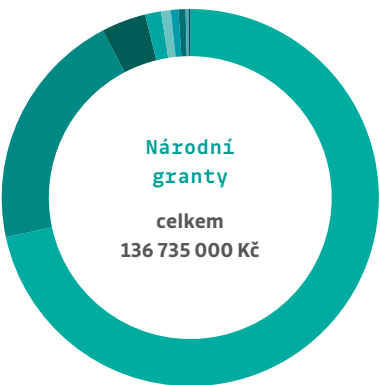
FINANČNÍ PŘEHLED

Zdroje financování

V roce 2019 hospodařilo IT4Innovations se zdroji ve výši 315 603 000 Kč. Největší podíl na zdrojích financování provozních výdajů měly národní granty (granty Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy, Technologické agentury ČR, Grantové agentury ČR, Ministerstva průmyslu a obchodu a Ministerstva vnitra). Dále se na zdrojích financování provozních výdajů podílely strukturální fondy, vlastní prostředky, mezinárodní granty, prostředky na rozvoj výzkumné organizace, smluvní výzkum a pronájem výpočetního času, specifický výzkum a ostatní zdroje.



- 38,6 % LEXIS
- 12,6 % POP2
- 12,2 % PRACE 6IP
- 9,5 % ExaQute
- 6,4 % Expertise
- 5,8 % PRACE 3IP
- 4,5 % Cloudifactoring
- 3,2 % PRACE 5IP
- 2,6 % InnoHPC
- 2,3 % Superheroes4Science
- 1,4 % TETRAMAX
- 0,5 % OPENQKD
- 0,2 % READEX
- 0,2 % ANTAREX



- 71,7 % Projekty velkých infrastruktur pro VaVal – MŠMT
- 20,7 % Národní program udržitelnosti II – MŠMT
- 3,8 % Centra kompetence – TAČR
- 1,4 % TRIO – MPO
- 0,9 % Standardní projekty – GAČR
- 0,6 % Mezinárodní grantové projekty hodnocené na principu LEAD Agency – GAČR
- 0,6 % Program na podporu aplikovaného výzkumu a experimentálního vývoje EPSILON – TAČR
- 0,3 % Bezpečnostní výzkum České republiky – MV
- 0,1 % Podpora mobility výzkumných pracovníků a pracovníc v rámci mezinárodní spolupráce ve VaVal – MŠMT

- 43,3 % Národní granty
- 31,6 % Strukturální fondy
- 9,2 % Vlastní prostředky
- 7,6 % Mezinárodní granty
- 4,6 % Prostředky na rozvoj výzkumné organizace
- 1,9 % Smluvní výzkum a pronájem výpočetního času
- 0,9 % Specifický výzkum
- 0,9 % Ostatní



Provozní a investiční náklady

Celkové náklady IT4Innovations činily 311 218 000 Kč. Z této částky byly neinvestiční (provozní) náklady 70,1 %, investiční (kapitálové) náklady 29,9 %. Nejvyšší část provozních nákladů tvořily mzdové výdaje, služby (náklady za spotřebu el. energie, servis provozovaných systémů a podpůrné infrastruktury, technickou a systémovou podporu atd.), režijní výdaje a členské poplatky (do mezinárodních organizací a konsorcií PRACE, ETP4HPC, EUDAT, BDVA, LUMI).



- 34,4 % Mzdové výdaje – výzkumné týmy
- 17,8 % Služby
- 17,2 % Mzdové výdaje – řízení, administrativa a superpočítačové služby
- 12,6 % Režijní výdaje
- 12,2 % Poplatky
- 3,9 % Zahraniční a domácí pracovní cesty (vč. zvaných přednášejících)
- 0,7 % Drobný dlouhodobý hmotný majetek
- 0,6 % Spotřební materiál
- 0,5 % Stipendia



- 93,3 % Dlouhodobý hmotný majetek – stroje a zařízení
- 6,0 % Dlouhodobý nehmotný majetek
- 0,7 % Dlouhodobý hmotný majetek

Národní granty

Projekty podpořené
Ministerstvem školství,
mládeže a tělovýchovy

Projekt velkých infrastruktur
pro VaVaI

- IT4Innovations národní
superpočítačové centrum

Projekt Národního programu
udržitelnosti II

- IT4Innovations Excellence
in Science

Dotace na specifický
vysokoškolský výzkum pro rok
2019 – SGS

- Nekoherentní jevy ve
vrstevnatých strukturách
s laterální periodicitou
- Pokročilé optické modelování
materiálů a multiúrovňově
modulovaných nanostruktur
- Aplikace kvantifikačních
a kvalifikačních nástrojů
dynamických systémů
- Extension of HPC platforms for
executing scientific pipelines

- Internacionalizace doktorského
vzdělávání v oblasti molekulové
fyziky II
- Výzkum infrastruktury a vývoj
HPC knihoven a nástrojů
- Nasazení HPC pro řešení
problémů inženýrské praxe

Podpora mobility výzkumných
pracovníků a pracovníc v rámci
mezinárodní spolupráce ve
VaVaI

- Modelování interakcí chladného
plazmatu na bázi vzácných
plynů se vzduchem
- Rozhraní grafén-kov – základ
nových spintronických
materiálů
- Vysvětlení a pochopení
magnetostrikce v Fe-Ti slitinách
pomocí výpočtu z prvních
principů
- Fyzika fononových interakcí v
pevných látkách pro generaci
terahertzového záření

Projekty Operačního programu
Výzkum, vývoj a vzdělávání

- IT4Innovations národní
superpočítačové centrum –
cesta k exascale

- SUPERPOČÍTAČOVÉ SLUŽBY
- VÝZKUM A VÝVOJ
- VZDĚLÁVACÍ A VÝUKOVÉ AKTIVITY

- Doktorská škola pro vzdělávání
v oblasti matematických metod
a nástrojů v HPC
- Technika pro budoucnost
- Technika pro budoucnost 2.0
- Umělá inteligence a uvažování
- Věda bez hranic

Projekty podpořené
Grantovou agenturou
České republiky

- Nové materiály paliv pro
jaderné reaktory IVté generace
- Prostorovo-časové metody
hraničních prvků pro řešení
rovnice vedení tepla

Projekty podpořené
Technologickou
agenturou České
republiky

- Paralelizovaný reakčně-
transportní model šíření
kontaminace v podzemních
vodách

- Centrum kompetence pro
molekulární diagnostiku
a personalizovanou medicínu
- Personalizovaná medicína –
diagnostika a terapie
- Optimalizace provozních
parametrů elektrické
distribuční soustavy s využitím
umělé inteligence
- Bezkontaktní detektor
částečných výbojů pro
distribuční vedení VN
- Národní centrum pro
energetiku (NCE)
- Chytrý systém pro řízení
energie energetických sítí

Podpora Ministerstva
průmyslu a obchodu

- Vtokové a výtokové objekty
čerpacích a turbínových stanic
- Digitální dvojče produktu
v rámci výrobních závodů
Siemens

Podpora
Ministerstva vnitra

- Zapojení umělé inteligence do
příjmu tísňového volání

Mezinárodní granty

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

- PRACE-5IP – Partnership for
Advanced Computing in Europe,
5. implementační fáze
- EXPERTISE – Experiments and
High-Performance Computing
for Turbine Mechanical Integrity
and Structural Dynamics in
Europe
- TETRAMAX – Technology
Transfer via Multinational
Application Experiments
- CloudiFacturing – Cloudification
of Production Engineering
for Predictive Digital
Manufacturing

- ExaQute – Exascale
Quantifications of Uncertainties
for Technology and Science
Simulation
- POP2 – Performance
Optimisation and Productivity 2

- **NOVÝ** LEXIS – Large-scale EXecution
for Industry & Society

- **NOVÝ** OPENQKD – Open European
Quantum Key Distribution
Testbed

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

Projekt Dunajského
nadmárodního programu
Interreg (fondy EU)

- InnoHPC – High-Performance
Computing for Effective
Innovation in the Danube
Region

Mezinárodní
visegrádský fond

- Superhrdinové vědy

SUPERPOČÍTAČOVÉ SLUŽBY

IT4Innovations provozuje čtyři superpočítače: Anselm (94 TFlop/s, instalovaný v létě 2013), Salomon (2 PFlop/s, instalovaný v létě 2015), Barbora (849 TFlop/s, instalovaný na podzim 2019) a specializovaný systém pro výpočty umělé inteligence NVIDIA DGX-2 130 TFlop/s a 2 PFlop/s pro AI, instalovaný na jaře 2019). Dva nejnovější superpočítače provozované IT4Innovations byly pořízeny v rámci **projektu IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale**, jenž je realizován z Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR.

V roce 2019 začalo IT4Innovations aktivně participovat v EuroHPC JU, v rámci něhož bude v roce 2020 instalován také **nový petascalový výpočetní systém** s pracovním názvem EURO_IT4I a výkonem okolo 13,6 PFlop/s. Tento superpočítačový systém se svými parametry zařadí mezi nevýkonnější superpočítače v Evropě. Systém bude navržen tak, aby uceleně pokryl uživatelské požadavky při řešení komplexních vědeckých i průmyslových problémů zahrnujících klasické numerické simulace i rozsáhlé datové analýzy nebo využití umělé inteligence.

IT4Innovations souběžně uspělo i v soutěži o tzv. EuroHPC pre-exascale superpočítačový systém, a to jako člen **LUMI (Large Unified Modern Infrastructure) konsorcia** tvořeného koordinujícím Finskem, Belgií, ČR, Dánskem, Estonskem, Nizozemím, Norskem, Polskem, Švédskem a Švýcarskem. Systém bude koncem roku 2020 nainstalován ve finském Kajaani a stane se jedním z nejvýkonnějších v Evropě i ve světě.



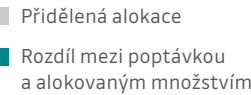
Technické parametry superpočítačů

	Anselm	Salomon	NVIDIA DGX-2	Barbora
Uvedení do provozu	jaro 2013	léto 2015	jaro 2019	podzim 2019
Teoretický výkon	94 TFlop/s	2 011 TFlop/s	130 TFlop/s 2 PFlop/s pro AI	849 TFlop/s
Operační systém	RedHat Linux 64bit 6.x	CentOS 64bit 7.x	CentOS 64bit 7.x	CentOS 64bit 7.x
Operační uzly	209	1 008	1	201
CPU na uzel	2 x Intel SandyBridge, osmijádrový, 2,3 / 2,4 GHz, celkem 3 344 jader	2 x Intel Haswell, dvanáctijádrový, 2,5 GHz, celkem 24 192 jader	2 x Intel Xeon Platinum, dvacetitřijádrový, celkem 48 jader	2 x Intel Cascade Lake, osmnáctijádrový, 2,6 GHz
RAM na uzel	64 GB / 96 GB / 512 GB	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
GPU akcelerátory	23 x NVIDIA Tesla K20 (Kepler)	N/A	16 x NVIDIA Tesla V100 / 32 GB HBM2	32 x NVIDIA Tesla V100
MIC akcelerátory	4 x Intel Xeon Phi 5110P	864 x Intel Xeon Phi 7120P	N/A	N/A
Úložný prostor	320 TiB / home (rychlost 2 GB/s), 146 TiB / scratch (rychlost 6 GB/s)	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)
Síť	Infiniband QDR 40 Gb/s	Infiniband FDR 56 Gb/s	8 x Infiniband nebo 8 x 100 GbE	Infiniband HDR 200 Gb/s

Přidělování
výpočetního času

Výpočetní kapacita IT4Innovations je určenaprořešeníúlohvevýzkumuavývo-
ji především pro akademická pracoviště
a další výzkumné instituce. Nevyužitá
část kapacity může být uvolněna pro
rozvoj spolupráce mezi akademickou
sférou a průmyslovými partnery, či pro
čistě komerční využití.

Veřejné grantové
výzvy v roce 2019



Veřejné grantové soutěže

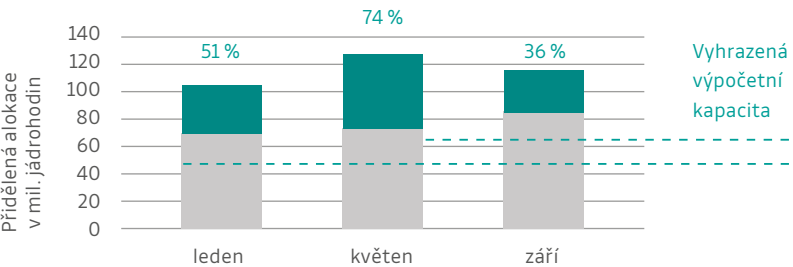
O výpočetní čas si instituce mohou za-
žádat v rámci veřejných grantových
soutěží. Ty IT4Innovations vypisuje tři-
krát ročně. V roce 2019 bylo ve prospěch
české vědy mezi 190 výzkumných pro-
jektů v rámci tří Veřejných grantových
soutěží rozděleno více než 233 milionů
jádrohodin.

Vyhrazená výpočetní kapacita pro jed-
notlivá kola Veřejné grantové výzvy se
vzhledem ke vzrůstající poptávce a díky
pořízení nových superpočítačových
systémů během roku postupně zved-
la ze 48 až na 66 milionů jádrohodin.

V roce 2019 poskytlo IT4Innovations vý-
početní čas 190 projektům v rámci Veřej-
né grantové soutěže a dále 39 projektům
na základě rozhodnutí ředitelství. Celko-
vě bylo přiděleno 253 412 910 jádrohodin,
z čehož 94 % jádrohodin bylo přiděleno
v rámci tří Veřejných grantových soutěží
a 6 % jádrohodin na základě rozhodnutí

ředitelství. Do celkové alokace výpočet-
ních prostředků na základě rozhodnutí
ředitelství patří alokace jak v rámci ini-
ciativy PRACE prostřednictvím programu
DECI, tak i alokace v komerční sféře.

Jádrohodina označuje počet
procesorových jednotek (jader) použitých
ke spuštění simulace vynásobené dobou
trvání úlohy v hodinách.



V celkovém součtu se vyhrazená kapaci-
ta v průběhu roku zvedla ze 144 milionů
na 180 milionů jádrohodin. V roce 2017
činil převis poptávky nad vyhrazenou
kapacitou více než 39 %, v roce 2018 byl
roven téměř 70 % a v roce 2019 dosáhl
96 %.

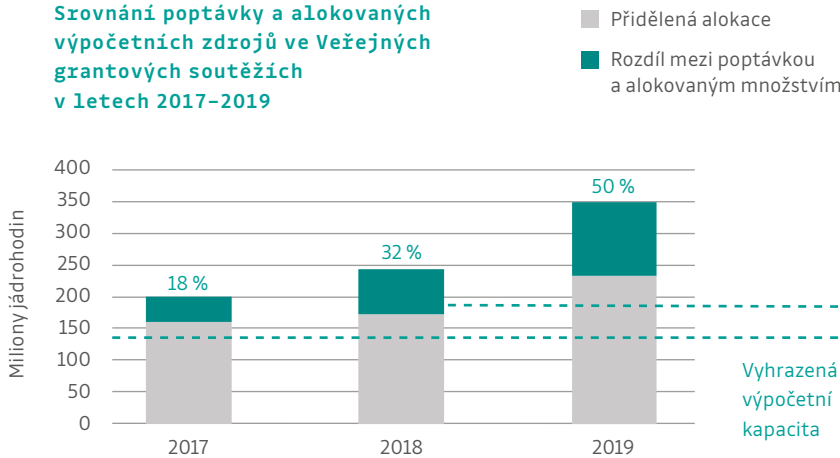
V posledních třech letech bylo ve Veřej-
ných grantových soutěžích přerozděleno
mezi 496 projektů téměř 856 milionů
jádrohodin. Nejvíce výpočetních zdro-
jů tj. 50,5 % bylo přiděleno projektům
z oblasti materiálové vědy a biovědy.

Alokační komise shledala většinu žádos-
tí podaných v roce 2019 jako vědecky
i technicky velmi dobře připravené.
Z důvodu nedostačující výpočetní ka-
pacity však byla nucena výpočetní čas
projektům krátit. Rozdíl mezi poptávkou
a výpočetní kapacitou vyhrazenou pro
Veřejné grantové soutěže bývá kom-
penzován rezervami ředitelství a správy
systémů IT4Innovations. V roce 2019 či-
nil rozdíl mezi poptávkou a alokovaným
množstvím přibližně 54 %.



- 94 % VGS
- 2 % Komerční projekty
- 4 % PRACE DECI

Srovnání poptávky a alokovaných
výpočetních zdrojů ve Veřejných
grantových soutěžích
v letech 2017–2019



Rok	Vyhrazená kapacita (jádrohodiny)	Rozdíl mezi poptávkou a vyhrazenou kapacitou	Rozdíl mezi poptávkou a alokovaným množstvím
2017	144 milionů	39 %	25 %
2018	144 milionů	70 %	42 %
2019	180 milionů	96 %	54 %

Výsledky Veřejných grantových soutěží v roce 2019

Celkem 55 projektů žadatelů z VŠB –
Technické univerzity Ostrava získalo
v rámci Veřejných grantových soutěží
v roce 2019 výpočetní zdroje ve výši
přibližně 52 milionů jádrohodin. 12 pro-
jektů vedli vědci z Fakulty stavební, Fa-
kulty elektrotechnicky a informatiky,
Centra nanotechnologií, Fakulty strojní
a z Fakulty materiálově-technologické.

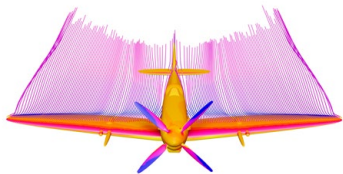
Zbývajících 43 projektů bylo pod vede-
ním výzkumných pracovníků z vysoko-
školského ústavu IT4Innovations.

Z externích výzkumných institucí
využili infrastrukturu IT4Innovations
nejvíce vědci z Akademie věd České re-
publiky. Celkem 44 projektům žadatelů
z 10 ústavů této instituce bylo přiděleno

57,6 milionů jádrohodin. Nejvíce výpo-
četních zdrojů bylo přiděleno projektům
Ústavu organické chemie a biochemie
a Ústavu fyzikální chemie J. Heyrov-
ského. Celkové alokace ve výši téměř
10 milionů jádrohodin či více získaly také
další instituce: CEITEC, Univerzita Karlo-
va, Česká zemědělská univerzita v Praze
nebo Masarykova univerzita.



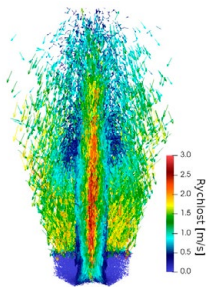
Výsledky 15. veřejné grantové soutěže v Newsletteru Q1/2019



Projekt Vývoj knihoven a nástrojů Laboratoře pro výzkum infrastruktury a projekt Ing. Petra Strakoše, Ph.D. a Ing. Lubomíra Říhy, Ph.D. z IT4Innovations



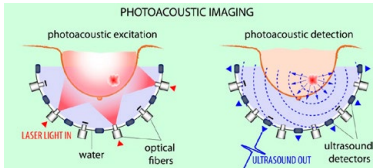
Strojové učení v biometrii a biomedicině a projekt Ing. Jana Tinky z Vysokého učení technického v Brně



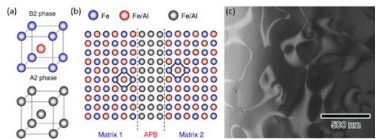
Fluidní režimy ve fluidním protahovacím zařízení typu Wurster a projekt Ing. Jiřího Koláře z Vysoké školy chemicko-technologické v Praze



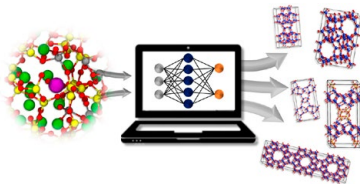
Výsledky 17. grantové soutěže v Newsletteru Q4/2019



Fotoakustická tomografie prsu a projekt doc. Ing. Jiřího Jaroše, Ph.D. z Vysokého učení technického v Brně



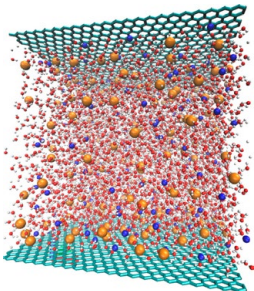
Od antifázových hranic k novým magnetům bez vzácných zemin a projekt prof. RNDr. Mojmíra Šoba, DrSc. z CEITEC, Masarykovy univerzity



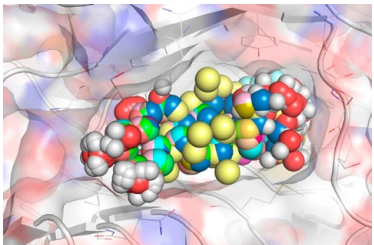
Potenciál neuronové sítě pro vývoj zeolitů „in silico“ a projekt RNDr. Lukáše Grajiara, Ph.D. z Univerzity Karlovy



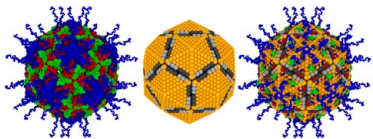
Výsledky 16. grantové soutěže v Newsletteru Q2/2019



Molekulární a mesoskopické simulace vodných roztoků v nehomogenním prostředí a projekt Ing. Barbory Plankové, Ph.D. z Akademie věd ČR



Virtuální screening lidských a rostlinných hormonů a projekt Mgr. Ing. Václava Bazgiera, Ph.D. z Univerzity Palackého v Olomouci



Mechanismus uvolnění genomu neobalených virů a projekt Mgr. Lukáše Sukeníka z CEITEC, Masarykovy univerzity

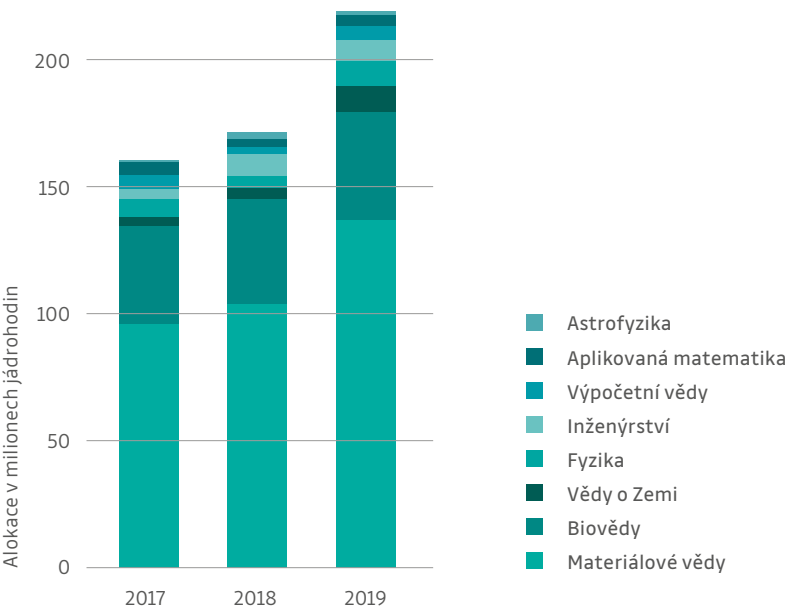


25,3 %	Akademie věd ČR
21,4 %	VŠB-TUO
14,8 %	CEITEC
13,5 %	Univerzita Karlova
7,9 %	ČVUT v Praze
5,7 %	Masarykova univerzita
3,4 %	VUT v Brně
3,2 %	VŠCHT v Praze
2,8 %	Ostravská univerzita
2 %	Ostatní



62,4 %	Materiálové vědy
19,4 %	Biovědy
4,7 %	Vědy o Zemi
4,5 %	Fyzika
3,8 %	Inženýrství
2,6 %	Výpočetní vědy
2,0 %	Aplikovaná matematika
0,5 %	Astrofyzika

Alokace výpočetních zdrojů v roce 2017 až 2019 dle vědních oborů



Rozhodnutí ředitelství

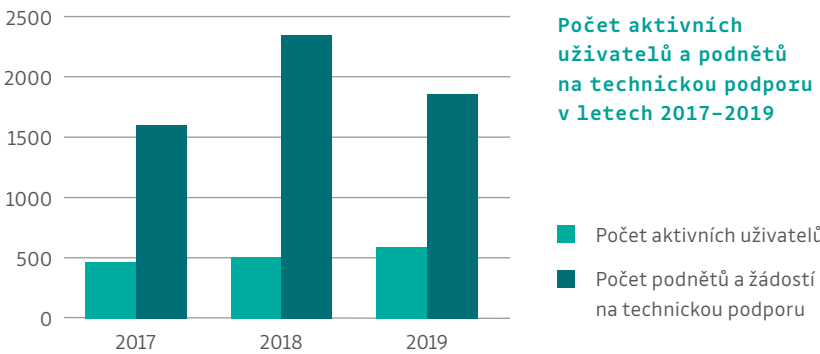
IT4Innovations rovněž přiděluje 6 % svých výpočetních kapacit projektům na základě tzv. rozhodnutí ředitelství. Žádost lze podat kdykoliv. Jedná se o nepravidelné přidělování výpočetního času na základě posouzení vedením IT4Innovations. Ucházet se mohou subjekty z nekomerční sféry, a to v takových případech, kdy nelze využít Veřejné grantové soutěže. V roce 2019 bylo na základě rozhodnutí ředitelství přiděleno více než 15 milionů jádrohodin celkově 39 projektům. Mezi tyto projekty patří také subjekty z komerční sféry, které si mohou výpočetní čas pronajmout. V roce 2019 uzavřelo 9 firem komerční smlouvy ve výši přibližně 4,9 milionů jádrohodin.



Uživatelé výpočetních zdrojů

Počet aktivních uživatelů v roce 2019 byl 591. Ve srovnání s údajem za rok 2018 se toto číslo zvýšilo o 16 %.

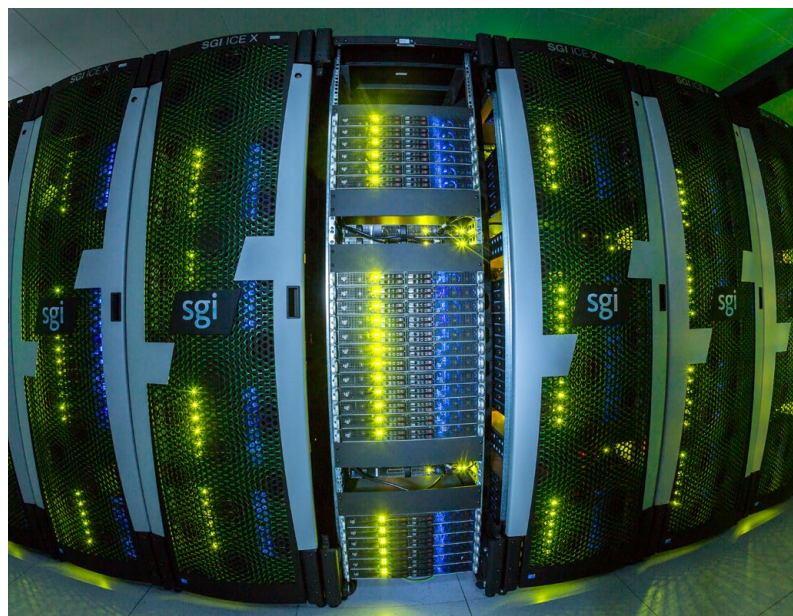
Technická podpora IT4Innovations obdržela v roce 2019 celkem 1 839 podnětů a žádostí. Interní reakční doba (24 hodin na první odpověď) byla dodržena u 99,95 % podnětů. Interní doba prvního uzavření, která nesmí být větší než 30 dnů, byla dodržena u 99,30 % podnětů.



Projekty v oblasti superpočítačových služeb

Provoz a rozvoj superpočítačové infrastruktury pomáhá IT4Innovations zabezpečit několik národních i mezinárodních grantů. Tím nejvýznamnějším pro provoz stávajících systémů byl grant Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky (MŠMT) – IT4Innovations národní superpočítačové centrum, který je financován z prostředků určených na podporu velkých infrastruktur pro výzkum, experimentální vývoj a inovace. Modernizace výpočetních kapacit IT4Innovations je financována

z Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání MŠMT konkrétně projektu IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale. Významnými mezinárodními projekty, do nichž se IT4Innovations díky členství v evropské infrastruktuře Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) zapojuje, jsou stejnojmenné infrastrukturní projekty financované z dotačního titulu Evropské komise Horizont 2020. V roce 2019 byla započata v pořadí již 6. fáze projektu s názvem PRACE-6IP.



Národní granty

Projekty podpořené Ministerstvem školství mládeže a tělovýchovy ČR

IT4Innovations národní superpočítačové centrum (2016–2019)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU
LM2015070 (Projekt velkých infrastruktur pro výzkum, experimentální vývoj a inovace)

ŘEŠITEL doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

Cílem projektu je provozovat nejvýkonnější a nejmodernější superpočítačové systémy v ČR a poskytovat otevřený přístup k těmto zdrojům na základě výzkumné excelence.

Nezbytnou součástí poskytování výpočetních kapacit je i provoz související infrastruktury (napájení, chlazení, bezpečnost, protipožární ochrana apod.), jakož i uživatelská podpora a správa výpočetních i podpůrných systémů. Součástí projektu jsou i výzkumné aktivity, které zefektivňují provoz výpočetních systémů a rozšiřují možnosti jejich využití uživateli. K efektivnímu využití infrastruktury rovněž přispívají vzdělávací a školicí aktivity, jež jsou otevřené pro širokou vědeckou komunitu ČR.

IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale (2017–2021)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU
EF16_013/0001791 (výzva č. 02_16_013 Výzkumné infrastruktury)

ŘEŠITEL Mgr. Branislav Jansík, Ph.D.

Hlavním cílem projektu je rozšíření a modernizace výzkumné infrastruktury IT4Innovations tak, aby byla minimálně 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 pořízením superpočítače Barbora). V roce 2021 bude pořízen superpočítač, který svou kapacitou několikanásobně předčí Salomon, dosud nejvýkonnější systém IT4Innovations. V rámci projektu bude rovněž podpořen kvalitní výzkum široké akademické komunity ČR a rozšíření stávajících výzkumných aktivit v IT4Innovations v oblasti modelování fotonických a spinofotonických 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.

Mezinárodní granty

PRACE-5IP – Partnership for Advanced Computing in Europe, 5. implementační fáze (2017–2019)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU
730913 (výzva H2020-EINFRA-2016-1)

ŘEŠITEL doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

NOVÝ PRACE-6IP – Partnership for Advanced Computing in Europe, 6. implementační fáze (2019–2021)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU
823767 (výzva H2020-INFRAEDI-2018-2020)

ŘEŠITEL doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

Cílem projektů PRACE (Partnership For Advanced Computing in Europe) je navázat na úspěšné předešlé projekty PRACE, jejichž úkolem bylo implementovat evropskou HPC infrastrukturu a pokračovat v rozvíjení spolupráce na poli supercomputingu pro posílení konkurenceschopnosti evropské vědy, výzkumu a průmyslu.



InnoHPC – High Performance Computing for Effective Innovation in the Danube Region (2017–2019)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU
DTP1-1-260-1.1 (INTERREG/Danube region programme, 1. výzva)

ŘEŠITEL Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.

Cílem projektu InnoHPC je vyvinout nadnárodní HPC platformu pro rozvoj spolupráce výzkumných institucí s malými a středními podniky. Podnikům bude umožněn přístup k superpočítačovým infrastrukturám. Výzkumné instituce získají díky tomuto projektu možnost spolupracovat na reálných úkolech a využít svůj podnikatelský potenciál.

IT4Innovations realizuje excelentní výzkum v oblasti velmi náročných výpočtů, zpracování rozsáhlých dat a umělé inteligence.

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.

IT4Innovations je výzkumným a vývojovým centrem se silnými mezinárodními vazbami a jako takové je významně zapojeno ve všech aktivitách společného evropského podniku EuroHPC a v řadě prestižních mezinárodních organizací (PRACE, ETP4HPC, BDVA, I4MS, HiPEAC či EUDAT CDI). Podílí se na řešení více než 10 mezinárodních projektů financovaných zejména z programu Horizont 2020. IT4Innovations je koordinátorem projektu H2020 LEXIS, členem H2020 Cen-

tra excellence POP2 a FETHPC projektu ExaQute. 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.



■	71,3 %	NANO
■	14 %	PAR
■	9,3 %	ADAS
■	2,8 %	INFRA
■	2,6 %	BIG DATA

Výzkum v IT4Innovations je soustředěn do pěti laboratoří:

LABORATOŘ VÝVOJE PARALELNÍCH ALGORITMŮ

LABORATOŘ PRO NÁROČNÉ DATOVÉ ANALÝZY A SIMULACE

LABORATOŘ MODELOVÁNÍ PRO NANOTECHNOLOGIE

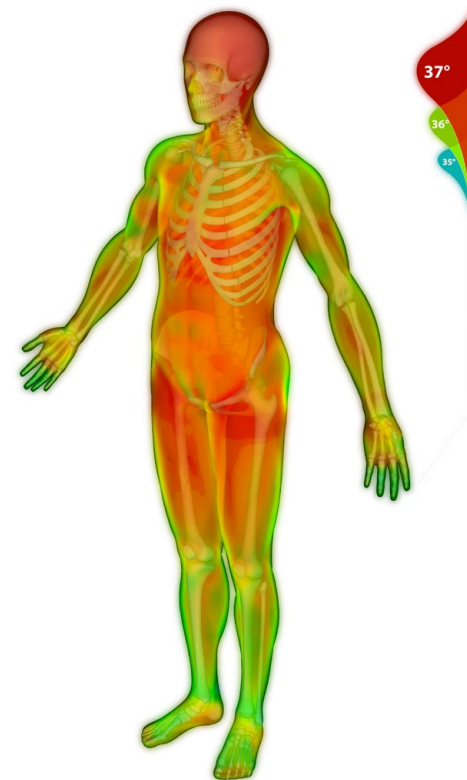
LABORATOŘ PRO BIG DATA ANALÝZY

LABORATOŘ PRO VÝZKUM INFRASTRUKTURY

V roce 2019 bylo 42 projektům výzkumných laboratoří IT4Innovations přiděleno v rámci Veřejných grantových soutěží více než 55 milionů jádrohodin, což je 23 % celkového alokovaného množství. Nejvíce projektů podali zaměstnanci Laboratoře vývoje paralelních algoritmů a nejvíce výpočetních zdrojů získala Laboratoř modelování pro nanotechnologie.

Vlajkové lodě ve výzkumu a vývoji

V roce 2019 pokračoval výzkum v rámci tzv. vlajkových lodí ve výzkumu a vývoji IT4Innovations, jež byly vybrány Vědeckou radou Centra excellence IT4Innovations v roce 2018 a které reprezentují vědeckou excelenci IT4Innovations. Vlajkovými loděmi IT4Innovations jsou tři projekty:



ESPRESSO, 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 tohoto flagshipu 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 ESPRESSO 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 flagshipu 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

ŘEŠITEL
Ing. Jan Martinovič, Ph.D.
a Ing. Stanislav Böhm, Ph.D.

Hlavním cílem většiny superpočítačových center je snížení vstupních bariér do světa vysoko-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 tohoto flagshipu 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 vysokovýkonné 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 vysoko-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 software HyperLoom). V neposlední řadě je cílem také zpřístupnit výsledky a maximalizovat tak jejich potenciální dopad.

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

Laboratoř vývoje paralelních algoritmů

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

VEDOUcí LABORATOŘE:
Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.

POČET ZAMĚŠTNANCŮ: 23

Významné události

- > Digitální inovační hub IT4Innovations vyhlášen **DIHem** měsíce listopadu, **DIHnet EU**.
- > Ukončení a úspěšné obhájení projektu **InnoHPC**, jehož cílem bylo vyvinout nadnárodní HPC platformu pro rozvoj spolupráce výzkumných institucí s firmami, se zaměřením na malé a střední podniky.
- > **Smluvní výzkum** s firmami ING Corporation, spol. s r.o., Glass Service a.s., Siemens s.r.o.

Významné publikace

- > Brzobohatý T., Jarošová M., Kučera R., Šátek V. Path-Following Interior Point Method: Theory and Applications for the Stokes Flow with a Stick-Slip Boundary Condition. *Advances in Engineering Software*, roč. 2019, č. 129, s. 35-43. ISSN 0965-9978. DOI: 10.1016/j.advengsoft.2018.06.010, IF: 4.194
- > Van de Steen, C., Benhenni, M., Kalus, R., Čosić, R., Gadea, F.X., Yousfi, M., Mobility and Dissociation of Electronically Excited Kr^{+}_{2} Ions in Cold Krypton Plasma. *Plasma Source Sci. Technol.* DOI: 10.1088/1361-6595/ab3a17, IF: 4.128
- > Van de Steen, C., Benhenni, M., Kalus, R., Čosić, R., Iléssová, S., Gadea, F.X., Yousfi, M., Calculations of Cross-Sections, Dissociation Rate Constants and Transport Coefficients of Xe^{2+} Colliding with Xe. *Phys. Chem. Chem. Phys.* DOI: 10.1039/c9cp00338j, IF: 3.567
- > Zapoměl, J., Ferrecki, P., Kozánek J.: The Mathematical Model for Analysis of Attenuation of Nonlinear Vibration of Rigid Rotors Influenced by Electromagnetic Effects, *Journal of Sound and Vibration*, Volume 443, 17 March 2019, 167-177. DOI: 10.1016/j.jsv.2018.11.008, IF: 3.123
- > Kravčenko, M., Merta, M., Zapletal, J.: Distributed Fast Boundary Element Methods for Helmholtz Problems. *Applied Mathematics and Computation*. DOI: 10.1016/j.amc.2019.06.017, IF: 3.092



Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace

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

VEDOUcí LABORATOŘE:

Ing. Jan Martinovič, Ph.D.

POČET ZAMĚSTNANCŮ: 36

Významné události

- > Start projektu **LEXIS**, jehož je IT4Innovations koordinátorem. Cílem projektu je vytvořit pokročilou inženýrskou platformu, a to s využitím moderních technologií, jako jsou vysoko-výkonnostní počítání, velmi rozsáhlá data a cloudové služby. Přínosy projektu LEXIS budou demonstrovány ověřením využití platformy ve třech pilotních řešeních vhodných pro průmyslová odvětví jako například letectví, počasí a podnebí, zemětřesení a tsunami.
- > Zapojení do aktivit **Big Data Value Association** a **Private Public Partnership** prostřednictvím projektu LEXIS.
- > Aktivní spolupráce s partnery v rámci **EUDAT Collaborative Data Infrastructure**.
- > Zapojení do jednání a aktivit Research and Innovation Advisory Group v rámci **EuroHPC JU**.
- > Přijetí projektu **BLENDED** pro Evropskou kosmickou agenturu (ESA). Hlavním cílem projektu je prozkoumat možnosti a podat zprávu o synergickém využití technologií Blockchain a Deep Learning pro vesmírná data.
- > Úspěšné ukončení H2020 projektu **ANTAREX** zaměřeného na samo-adaptivní přístup pro aplikace spouštěné na superpočítačích a publikování dosažených výsledků.
- > Tomáš Martinovič získal ocenění **Nejlepší výzkumný poster na ISC 2019** za příspěvek „HPC Oriented Algorithm for Computation of Recurrence Quantitative Analysis“.
- > **Dva články** Jakuba Beránka zabývající se přenosem výpočtů na síťové karty a návrhem rozhraní pro komunikaci FPGA byly publikovány na konferenci SC19.

Významné publikace

- > Ueda, H.R., Ertürk, A., Chung, K. et al. Tissue Clearing and its Applications in Neuroscience. *Nat Rev Neurosci* 21, 61–79 (2020) DOI: 10.1038/s41583-019-0250-1, IF: 33.162
- > Kožusznik, J., Bainer, P., Klímová, K., Krumnikl, M., Moravec, P., Svatoň, V., Tomančák, P. *SPIM Workflow Manager for HPC, Bioinformatics, Volume 35, Issue 19, 1 October 2019, Pages 3875–3876, DOI: 10.1093/bioinformatics/btz140, IF: 4.531*
- > Haase, R., Royer, L.A., Steinbach, P. et al. CLIJ: GPU-Accelerated Image Processing for Everyone. *Nat Methods* 17, 5–6 (2020) DOI: 10.1038/s41592-019-0650-1, IF: 4.170
- > Brkić, D.; Praks, P. Short Overview of Early Developments of the Hardy Cross Type Methods for Computation of Flow Distribution in Pipe Networks. *Appl. Sci.* 2019, 9, 2019. DOI: 10.3390/app9102019, IF: 2.217
- > Brkić, D.; Praks, P. Accurate and Efficient Explicit Approximations of the Colebrook Flow Friction Equation Based on the Wright ω -Function. *Mathematics* 2019, 7, 34. DOI: 10.3390/math7010034, IF: 1.105



Laboratoř modelování pro nanotechnologie

Laboratoř je zaměřena na optickou diagnostiku, design nových materiálů, vývoj speciálních povrchů pro nanooptiku a modelování a design nanokompozitů.

VEDOUcí LABORATOŘE:

prof. Ing. Jaromír Pištora, CSc.

POČET ZAMĚSTNANCŮ: 16

Významné události

- > Organizace **Česko-francouzského workshopu** v oblasti nanotechnologií, který se konal v IT4Innovations.
- > Barbora Kacerovská zvítězila v soutěži **Lady Business** v kategorii Výjimečná studentka MS kraje.
- > Realizován **smluvní výzkum** se společností Continental v oblasti návrhu a aplikace nových materiálů.
- > Získání nového projektu H2020 s názvem **s-NEBULA**, který se bude zabývat vývojem nových funkčních bloků využívajících spinové vlastnosti elektronů pro generaci a detekci terahertzových vln a pokročilé terahertzové aplikace.

Významné publikace

- > Fu, Z. H., Wang, N., Legut, D., Si, Zhang, Q.F., Du, S.Y., Germann, T.C., Francisco, J.S., Zhang, R. F.: Rational Design of Flexible Two-Dimensional MXenes with Multiple Functionalities. *CHEMICAL REVIEWS* 119, no. 23, (2019). DOI: 10.1021/acs.chemrev.9b00348, IF: 54.301.

- > Zhang, R.F., Zhang, S.H., Guo, Y.Q., Fu, Z.H., Legut, D., Germann, T.C., Veprek, S.: First-Principles Design of Strong Solids: Approaches and applications. *PHYSICS REPORTS-REVIEW SECTION OF PHYSICS LETTERS* 826, (2019). DOI: 10.1016/j.physrep.2019.09.004, IF: 28.295
- > Xiao, J.W., Zhou, G.M., Chen, H.T., Feng, X., Legut, D., Fan, Y.C., Wang, T.S., Cui, Y., Zhang, Q.F.: Elaboration of Aggregated Polysulfide Phases: From Molecules to Large Clusters and Solid Phases. *NANO LETTERS* 19, no. 10, (2019). DOI: 10.1021/acs.nanolett.9b03297, IF: 12.279
- > Chen, H.T., Handoko, A.D., Xiao, J.W., Feng, X., Fan, Y.C., Wang, T.S., Legut, D., Seh, Z.W., Zhang, Q.F.: Catalytic Effect on CO₂ Electroreduction by Hydroxyl-Terminated Two-Dimensional MXenes. *ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES* 11, (2019). DOI: 10.1021/acsami.9b09941, IF: 8.456
- > Guo, Y.Q., Zhang, S.H., Zhan, B., Beyerlein, I.J., Legut, D., Shang, S.L., Liu, Z.K., Zhang, R.F.: Synergetic Effects of Solute and Strain in Biocompatible Zn-Based and Mg-Based Alloys. *ACTA MATERIALIA* 181, (2019). DOI: 10.1016/j.actamat.2019.09.059, IF: 7.293
- > Nguyen-Huu, N., Pištora, J., Cada, M.: Dual Broadband Infrared Absorbance Enhanced by Magnetic Polaritons Using Graphene-Covered Compound Metal Gratings. *Optics Express* 27, (2019), DOI: 10.1364/OE.27.030182, IF: 3.561
- > Viček, J., Pištora, J., Lesňák, M.: Design of Plasmonic-Waveguiding Structures for Sensor Applications. *Nanomaterials* 9, (2019), DOI: 10.3390/nano9091227, IF: 4.034



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.

VEDOUcí LABORATOŘE:

prof. Ing. Miroslav Vozňák, Ph.D.

POČET ZAMĚSTNANCŮ: 8

Významné události

- > Zahájení projektu **OPENQKD**. Cílem projektu je vytvoření testbedu vysoce zabezpečené sítě využívající pro distribuci klíčů principy kvantové mechaniky. Tříletý projekt je dosud nejrozsáhlejším nasazením QKD (Quantum Key Distribution) v Evropě.
- > Řešitelský kolektiv Ivana Zelinky získal čestné ocenění odborné poroty soutěže **Vizionáři 2019** za mobilní aplikaci Chiméra pro šifrovanou komunikaci.
- > **Smluvní výzkum** pro Národní úřad pro kybernetickou a informační bezpečnost.

Významné publikace

- > Skanderova, L., Fabian, T., Zelinka, I. Self-Adapting Self-Organizing Migrating Algorithm (2019) *Swarm and Evolutionary Computation*, 51, art.no.100593. DOI: 10.1016/j.swevo.2019.100593, IF: 6.33
- > Chamorro, H.R., Sanchez, A.C., Pantoja, A., Zelinka, I., Gonzalez-Longatt, F., Sood, V.K. A Network Control System For Hydro Plants to Counteract the Non-Synchronous Generation Integration (2019) *International Journal of Electrical Power and Energy Systems*, 105, pp. 404-419. DOI: 10.1016/j.ijepes.2018.08.020, IF: 4.418
- > Chamorro, H.R., Riaño, I., Gerndt, R., Zelinka, I., Gonzalez-Longatt, F., Sood, V.K. Synthetic Inertia Control Based on Fuzzy Adaptive Differential Evolution (2019) *International Journal of Electrical Power and Energy Systems*, 105, pp. 803-813. DOI: 10.1016/j.ijepes.2018.09.009, IF: 4.418

- > Keles, H.Y., Rozhon, J., Gokhan Ilk, H., Voznak, M. DeepVoCoder: A CNN Model for Compression and Coding of Narrow Band Speech (2019) *IEEE Access*, 7, art. no. 8730308, pp. 75081-75089. DOI: 10.1109/ACCESS.2019.2920663, IF: 4.098
- > Huynh, V.-V., Nguyen, H.-S., Hoc, L.T.T., Nguyen, T.-S., Voznak, M. Optimization Issues for Data Rate in Energy Harvesting Relay-Enabled Cognitive Sensor Networks (2019) *Computer Networks*, 157, pp. 29-40. DOI: 10.1016/j.comnet.2019.04.012, IF: 3.03
- > Snasel, V., Kromer, P., Safarik, J., Platos, J. JPEG Steganography with Particle Swarm Optimization Accelerated by AVX (2020) *Concurrency Computation*, 32 (8), art. no. e5448. DOI: 10.1002/cpe.5448, IF: 1.167



Laboratoř pro výzkum infrastruktury

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

VEDOUcí LABORATOŘE:

Ing. Lubomír Říha, Ph.D.

POČET ZAMĚSTNANCŮ: 12

Významné události

- > **Přijetí TAČR projektu**, jehož cílem 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.
- > Organizace speciální sekce zaměřené na Tools for Energy Efficient Computing na mezinárodní konferenci **PPAM 2019**.
- > Zapojení se do mezinárodní iniciativy **PowerStack** zabývající se problematikou energetické efektivity HPC systémů.

- > Spolupráce na přípravě PRACE workshopu Energy Efficiency in HPC pořádaném v italském superpočítačovém centru CINECA.
- > Příprava PTC kurzu Parallel Visualization of Scientific Data Using Blender, spolupráce na přípravě PTC kurzu Developing Efficient HPC Applications for the Latest CPU Architectures with C++ and Fortran.
- > Publikace softwaru: Meca, O., Říha, L., Brzobohatý, T.: **Software tool MESIO**.
- > Publikace softwaru: Jaroš, M., Strakoš, P., Říha, L.: **Software tool CyclesPhi**.
- > Publikace softwaru: Peterek, I., Beseda, M., Vysocký, O.: **Software tool RADAR visualize**.

Významné příspěvky na konferencích

- > Meca O., Říha L. and Brzobohatý T. An Approach for Parallel Loading and Pre-Processing of Unstructured Meshes Stored in Spatially Scattered Fashion, 2019 *IEEE International Parallel and Distributed Processing Symposium (IPDPS)*, Rio de Janeiro, Brazil, 2019, pp. 749-760. DOI: 10.1109/IPDPS.2019.00084
- > O. Vysocký, L. Říha, A. Bartolini: Overview of Application Instrumentation for Performance Analysis and Tuning (2019) *Proceedings of The International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics, PPAM 2019*

- > Kovács L., Strakoš P., Jaroš M., Kovács R., Kovács-Sós A., Karásek T., Hajdu A. Hybrid Small Size High Performance Computing Resource for Medical Image Analysis, in Iványi P., Topping B.H.V. *Proceedings of the Sixth International Conference on Parallel, Distributed, GPU and Cloud Computing for Engineering, Civil-Comp Press, Stirlingshire, UK, Paper 28*, 2019. DOI: 10.4203/ccp.112.28
- > Jaroš M., Vysocký O., Strakoš P., Špetko M. Energy Consumption Evaluation of Blender's Image Renderer in HPC Environment, in Iványi P., Topping B.H.V. *Proceedings of the Sixth International Conference on Parallel, Distributed, GPU and Cloud Computing for Engineering, Civil-Comp Press, Stirlingshire, UK, Paper 32*, 2019. DOI: 10.4203/ccp.112.32

Národní granty

Projekty podpořené Ministerstvem školství mládeže a tělovýchovy

IT4Innovations Excellence in
Science (2016–2020)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU LQ1602

ŘEŠITEL prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.

Projekt Centrum excelence IT4Innovations společně v letech 2011 až 2015 realizovalo pět partnerů: VŠB – Technická univerzita Ostrava, Ostravská univerzita, Slezská univerzita v Opavě, Vysoké učení technické v Brně a Ústav geoniky Akademie věd ČR. Nyní spolupráce těchto subjektů pokračuje formou projektu Národního programu udržitelnosti II (IT4Innovations Excellence in Science), v rámci kterého se realizuje excelentní výzkum v oblastech vysoce výkonného počítání, pokročilého zpracování dat a kyberfyzikálních systémů.

*Podpora mobility výzkumných
pracovníků a pracovníc v rámci
mezinárodní spolupráce ve
VaVaI*

Modelování interakcí
chladného plazmatu na bázi
vzácných plynů se vzduchem
(2018–2019)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU 8J18FR031

ŘEŠITEL doc. RNDr. René Kalus, Ph.D.

Náplní projektu je provést přesné ab initio výpočty s cílem pochopit interakce ve srážkových komplexech $[\text{He}/\text{X}_2]^+$ ($\text{X} = \text{N}, \text{O}$) v základním i v excitovaných elektronových stavech a neadiabatické přechody mezi nimi. Dále je cílem vytvořit balík programů pro simulace neadiabatické molekulové dynamiky propojující hybridní dynamické přístupy s ab initio výpočty realizovanými on-the-fly. S použitím vytvořených kódů budou provedeny pilotní dynamické výpočty pro srážkové systémy He^+/X_2 ($\text{X} = \text{N}, \text{O}$), s hlavním záměrem získat účinné průřezy procesů relevantních pro navazující makroskopické modelování. Účinné průřezy budou použity ve výpočtech transportních vlastností (mobilit) iontů He^+ v X_2 ($\text{X} = \text{N}, \text{O}$). Spolehlivost použitých teoretických modelů bude porovnána s experimentálními daty.

Rozhraní grafén-kov – základ
nových spintronických
materiálů (2018–2019)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU 8J18DE004

ŘEŠITEL Ing. Dominik Legut, Ph.D.

Hlavním cílem projektu je studium magnetismu v grafénu. Ten je indukován magnetickou vrstvou např. Co, Ni, slitin Fe, např. FeCo. V rámci projektu je metodami reflexní a polarizační spektroskopie v okolí rezonanční energie uhlíkové 1s hrany získána základní optická charakteristika, tj. optické konstanty vzorků, a to jak pomocí výpočtů z prvních principů, tak experimentálně pomocí magnetooptických metod naměřených na grafénu a na vysoce orientovaném pyrolytickém grafitu (HOPG), či na různých magnetických a nemagnetických substrátech.

Vysvětlení a pochopení
magnetostriktice v Fe-Ti
slutinách (2018–2019)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU 8J18AT004

ŘEŠITEL Ing. Dominik Legut, Ph.D.

V rámci projektu je studován mechanismus zodpovědný za redukci či úplné potlačení teplotní roztažnosti dvoufázových titanových slitin vykazujících magnetostriktici. Hlavní cíl projektu spočívá v odhalení nejlepšího možného postupu pro potlačení výše zmíněných jevů. Koncepty pro kontrolu teplotní roztažnosti a magnetostriktice mohou být založeny na dvoufázovém složení slitin, dopování pomocí sp-prvků nebo antiferomagnetickém uspořádání jedné z fází ve vybraných slitinách titan-transitivní kov.

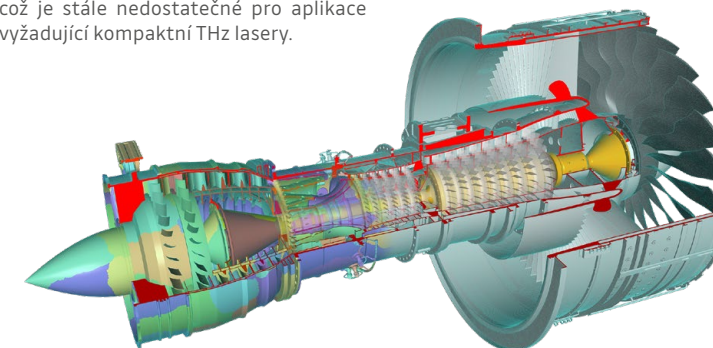
NOVÝ

Fyzika fononových interakcí
v pevných látkách pro generaci
terahertzového záření
(2019–2020)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU 8J19FR006

ŘEŠITEL Ing. Dominik Legut, Ph.D.

Nové kompaktní pevnolátkové zdroje terahertzového (THz) záření otevírají nové možnosti aplikací terahertzového záření v bezdrátových komunikačních systémech, bezpečnostních senzorech a kamerách, biomedicině a spektroskopii. Pro následující aplikace v oblasti od 100 GHz do 3 THz jsou nepostradatelné kompaktní vysoce-výkonové koherentní zdroje vyzařující při pokojové teplotě. THz kvantové kaskádové lasery (THz-QCL) nabízejí kompaktní řešení s vysokým výstupním výkonem, avšak jejich značná teplotní závislost vyžaduje provozování při kryogenních teplotách. Na druhé straně rychlý rozvoj kvantově kaskádových laserů (QCL) ve střední infračervené oblasti umožňuje mnohem účinnější čerpání THz plynových laserů, což je stále nedostatečné pro aplikace vyžadující kompaktní THz lasery.



Dotace MŠMT na specifický
vysokoškolský výzkum pro rok
2019

Nekoherentní jevy ve
vrstevnatých strukturách
s laterální periodicitou

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU SP2019/151

ŘEŠITEL Ing. Přemysl Ciompa

Projekt se zaměřuje na rozvinutí teorie nekoherentních jevů v optických periodických systémech. Dosavadní způsoby modelování nekoherentních jevů v optických systémech spočívají na statistickém středování koherentních polí, které jsou výpočetně velmi náročné a stávají se neúnosné pro složitější 2D a 3D struktury a zabraňují efektivnímu vyhodnocení experimentálních dat a optimalizaci navrhovaných struktur. Z tohoto důvodu je potřeba vyvinout nové a efektivnější přístupy k modelování nekoherentních jevů pro budoucí výzkum a optimalizaci komplexních optických komponent.

Pokročilé optické modelování
materiálů a multiúrovňově
modulovaných nanostruktur

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU SP2019/110

ŘEŠITEL Ing. Lukáš Halagačka, Ph.D.

Projekt je zaměřen na studium nového typu multiúrovňově modulovaných nanostruktur, charakterizaci jejich optických vlastností, vývoj a studium optických modelů studovaných struktur a optimalizaci připravené struktury pomocí numerického modelování. Dále se v projektu zaměřujeme na konstrukci materiálu s ohledem na typický rozsah provozních podmínek – většinou vliv teploty prostředí.

Aplikace kvantifikačních
a kvalifikačních nástrojů
dynamických systémů

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU SP2019/125

ŘEŠITEL Ing. Radek Halfar

Cílem projektu je studium dynamických vlastností systémů motivovaných reálnými aplikacemi na základě state-of-the-art; např. Bělousovova-Žabotinského chemické reakce, Fenton-Karma modelu buňky lidského srdce či aplikacemi na reálná data superpočítače Salomon. K tomuto účelu budou použity některé nástroje teorie dynamických systémů, jako jsou: rekurenční matice, aproximace entropie a 0-1 test chaosu. Důraz bude kladen na správnou identifikaci problému a dosažení nových výsledků inovovanými postupy.

**Extension of HPC platforms
for executing scientific
pipelines****IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** SP2019/108**ŘEŠITEL** Ing. Jan Křenek

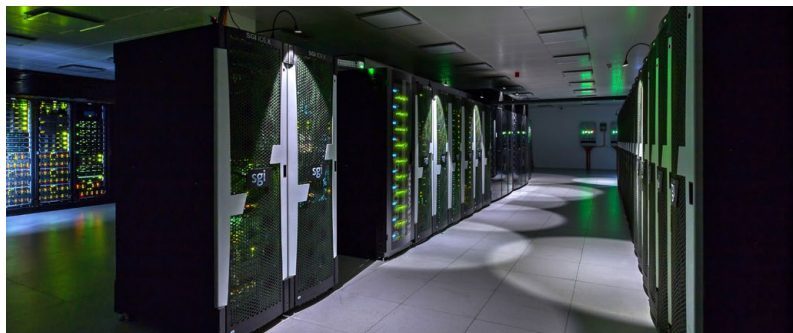
Projekt je zaměřen na rozšíření možností využití HPC infrastruktury za pomoci specializovaných služeb pro vzdálené spouštění výpočetních úloh. Toto rozšíření bude realizováno pomocí řešení HPC-as-a-Service, speciálních paralelních programových modelů a doménově specifických programovacích jazyků. Rozšíření bude zaměřeno především na úlohy z oblasti modelování dopravy, strojového učení nebo bioinformatiky. Jedním z cílů projektu je také podpora spolupráce s předními vědeckými pracovišti a vzdělávání studentů na významných mezinárodních školách a workshopech.

**Internacionalizace
doktorského vzdělávání
v oblasti molekulové fyziky II****IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** SP2019/162**ŘEŠITEL** Ing. Martin Mrovec

Projekt se zaměřuje na podporu internacionalizace doktorského vzdělávání v oblasti molekulové fyziky. Spolupráce probíhala s Universitě Toulouse III Paul Sabatier (UPS) – ab initio výpočty potenciálových nadploch s využitím softwaru Molpro a jejich reprezentací metodami strojového učení. Dalšími oblastmi výzkumu bylo řešení problémů kvantové fyziky za využití metod strojového učení a vývoj a testování nástrojů pro aplikace metod strojového učení.

**Výzkum infrastruktury a vývoj
HPC knihoven a nástrojů****IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** SP2019/59**ŘEŠITEL** Ing. Ondřej Vysocký

Projekt je zaměřen na rozvoj existujících nástrojů vyvíjených v IT4Innovations v rámci Laboratoře pro výzkum infrastruktury. Tématem je efektivnější využití infrastruktury, kterého bude dosaženo díky optimalizaci knihoven pro dosažení vyššího výkonu, zásadního zvýšení uživatelského komfortu díky novému webovému rozhraní a umožnění vizualizace vědeckých dat pomocí nejpobulárnějšího open-source nástroje pro modelování a tvorbu 3D grafiky. Konkrétně se členové projektu zaměří na implementaci nových metod do knihovny BEM4I, implementace nového I/O rozhraní nástrojů MERIC a RADAR, vytvoření nového webového rozhraní knihovny ESPRESO, vytvoření nového vizualizačního nástroje založeného na nové verzi Blender 2.8.

**Nasazení HPC pro řešení
problémů inženýrské praxe****IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** SP2019/97**ŘEŠITEL** Ing. Filip Zaoral

Projekt se věnuje výpočtovému modelování inženýrských problémů z oblasti dynamiky rotorových soustav, topologické optimalizace a modelování termoregulace člověka pomocí biokybernetického přístupu. Témata projektu spojuje to, že pro diskretizaci spojitého kontinua se použije metoda konečných prvků a pro řešení reálných úloh se musí využít HPC prostředky. V projektu jsou tři hlavní úkoly, a to: (i) vytvoření jádra programové knihovny v programovém prostředí MATLAB pro modelování rotorových soustav diskretizovaných třírozměrnými objemovými prvky, (ii) vytvoření programového balíku v programovém prostředí MATLAB pro topologickou optimalizaci pomocí metody SIMP a (iii) implementace tzv. Fialova pasivního a aktivního modelu termoregulace člověka na třírozměrný model geometrie lidského těla.

**Projekty podpořené
Grantovou agenturou
České republiky****Nové materiály paliv pro
jaderné reaktory IVté generace
(2017–2019)****IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** GA17-27790S**ŘEŠITEL** Ing. Dominik Legut, Ph.D.

Projekt spočívá v pochopení mechanických a termodynamických vlastností sloučenin jaderných paliv IV. generace reaktorů, sloučenin obsahujících f-elektrony, jmenovitě karbidy a tetrafluoridy uranu, thória a plutonia. Na základě výpočtů elektronové struktury vycházejících z prvních principů, bylo u (U/Th/Pu) C systémů určeno jejich magnetické, elastické, dynamické (fonony) a termodynamické chování. Hlavním cílem bylo vysvětlení teplotní roztažnosti aktinidových karbidů a zejména negativní teplotní roztažnosti pozorované u UC2 na atomové úrovni.

**NOVÝ
Prostoro-časové metody
hraničních prvků pro
řešení rovnice vedení tepla
(2019–2020)****IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** 19-29698L**ŘEŠITEL** Ing. Michal Merta, Ph.D.

Projekt spojuje experty ze dvou příbuzných oblastí – numerické analýzy a high performance computing, aby společně

vyvinuli rychlé a masivně paralelní metody pro obecné diskretizace prostoro-časových hraničních integrálních rovnic pro rovnici vedení tepla, které umožní adaptivní zjemňování sítě v čase i prostoru. Vyvinuté metody budou založeny na klastrování, které se již používá pro diskretizace s konstantním časovým krokem a fixní prostorovou sítí. Pro generování adaptivních sítí budeme aplikovat klasické techniky aposteriorních odhadů. Řešení globálních prostoro-časových problémů vyžaduje díky svým paměťovým nárokům použití výpočetních klastřů, ale zároveň připouští paralelizaci v prostoru i čase. Optimalizovaný a paralelizovaný kód tak bude schopen plně využít výkonu současných i budoucích superpočítačů.

**Projekty podpořené
Technologickou
agenturou České
republiky****Centrum kompetence pro
molekulární diagnostiku a
personalizovanou medicínu
(2014–2019)****IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** TE02000058**ŘEŠITEL** Mgr. Branislav Jansík, Ph.D.

Hlavním cílem projektu bylo využít a dále posílit stávající expertní zkušenosti a dosáhnout kritického množství účastníků a zkušeností v oblasti výzkumu, vývoje, výroby, ochrany duševního vlastnictví, certifikace, transferu technologií a rozvoje podnikání pro vytvoření trhem ří-

zené flexibilní národní sítě významných institucí v oblasti biomarkerů a molekulárních diagnostik.

**Paralelizovaný reakčně-
transportní model šíření
kontaminace v podzemních
vodách (2017–2019)****IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** TH02030840**ŘEŠITEL** Ing. Michal Podhorányi, Ph.D.

Cílem projektu bylo zlepšit možnosti analýzy potenciálního rizika kontaminace životního prostředí v důsledku dlouhodobého šíření radioaktivních látek z hlubinného úložiště radioaktivních odpadů okolním horninovým prostředím.

**NOVÝ
Personalizovaná medicína –
diagnostika a terapie
(2019–2020)****IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** TN01000013**ŘEŠITEL** Ing. Jan Martinovič, Ph.D.

Centrum PerMed je zaměřeno na aplikovaný výzkum v oblasti diagnostiky a terapie zřídkačových 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 interdisciplinarity kombinací 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 analýzu. Výsledky centra Per-Med budou komercializovány jednak prodejem licencí a jednak vznikem spin-off společností.

Podpora Ministerstva průmyslu a obchodu

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

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU FV30104

ŘEŠITEL Ing. Tomáš Brzobohatý, Ph.D.

Cíle projektu jsou: 1. Vývoj a ověření numerických modelů pro simulaci více-fázového 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.

NOVÝ

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

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 (Část A) výzkum a vývoj digitálního dvojčete produktu, asynchronního elektromotoru, bude probíhat v odštěpeném závodě Siemens s.r.o. Elektromotory Frenštát.

Projekty Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání

IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale (2017–2021)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU

EF16_013/0001791

ŘEŠITEL Mgr. Branislav Jansík, Ph.D.

Cílem projektu je mimo jiné rozšíření vlastního výzkumu IT4Innovations v oblasti 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.

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 – Technická univerzita Ostrava 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.



Projekty, na kterých se podílíme

NOVÝ

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

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU TJ02000157

ŘEŠITEL Ing. Jan Vysocký (Centrum ENET, VŠB-TUO)

Cílem projektu je vytvoření optimalizačního systému a strategie pro optimalizaci provozu elektrické distribuční soustavy (DS). Řídicí optimalizační systém se bude skládat z programu a interface. Program bude hledat 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 bude dosaženo např. pomocí změny topologie sítě nebo řízením lokálních zdrojů činného a jalového výkonu. Interface umožní zahrnout navržený program do stávajících struktur dispečerského řízení dané DS. Vytvořená optimalizační strategie bude popisovat veškeré inovace z oblasti hardware a software, které je potřeba provést pro maximální navýšení možností řízení dané DS.

NOVÝ

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

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU TJ02000031

ŘEŠITEL Ing. Jan Fulneček, Ph.D. (Centrum ENET, VŠB-TUO)

Cílem projektu je výzkum v oblasti bezkontaktní detekce částečných výbojů v izolaci závěsných vodičů distribučních vedení vysokého napětí. V rámci řešení bude navržen a sestrojen 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 bude 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 bude splněn do konce doby trvání projektu.

NOVÝ

Národní centrum pro energetiku (NCE) (2019–2020)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU TN01000007

ŘEŠITEL prof. Ing. Stanislav Mišák, Ph.D. (Centrum ENET, VŠB-TUO)

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.

NOVÝ

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

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU TK02030039

ŘEŠITEL prof. Ing. Stanislav Mišák, Ph.D. (Centrum ENET, VŠB-TUO)

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 platform 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 decentralních, zejména obnovitelných zdrojů energie. Cílem je v rámci 5letého 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.

NOVÝ
Zapojení umělé inteligence do příjmu tíšňového volání (2019–2022)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU
VI20192022169

ŘEŠITEL Ing. Petr Berglowiec

Projekt zkoumá nasazení umělé inteligence pro příjem tíšňových volání v průběhu mimořádných událostí pomocí hlasového chat-bota. 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.

Mezinárodní granty

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 tohoto čtyřletého projektu je vychovat vědecké pracovníky schopné

interdisciplinární spolupráce. Kooperace mezi průmyslovými partnery a vědecko-výzkumnými organizacemi urychlí rozvoj klíčových technologií v oblasti vývoje turbín a jejich rychlejší uvedení do praxe.

www.msca-expertise.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 bude implementována iniciativa „Smart Anything Everywhere“ do oblasti nízkoenergetického počítání pro kyberfyzikální systémy a internet věcí. Klíčovým záměrem iniciativy je urychlit inovace v evropském průmyslu. Iniciativa propojuje technické a aplikační know-how, což napomáhá k efektivnějšímu a účinnějšímu přijímání pokročilých digitálních technologií malými a středními podniky.

www.tetramax.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 je přispět k účinnému využívání výkonných výpočetních zdrojů evropskými malými a středními výrobními podniky, a tím zvýšit jejich konkurenceschopnost. Náplní projektu je optimalizace výrobních procesů a produktivity podniků pomocí modelování a simulací založených na využívání HPC a cloudových služeb.

www.cloudifacturing.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 tříletého projektu ExaQute je vyvinout nové metody umožňující řešení komplexních inženýrských problémů s využitím numerických simulací a budoucích exascalových systémů. V rámci projektu budou vyvinuty nové výpočetní metody a softwarové nástroje pro řešení simulací aerodynamiky pro optimalizaci geometricky složitých konstrukcí.

IT4Innovations bude zapojeno do nasazování nástrojů Hyperloom a COMPSs na vysoce výkonných výpočetních systémech, jejich konfiguraci a optimalizaci. Podílet se bude i na testování robustních algoritmů pro tvarovou optimalizaci konstrukcí zatížených větrem.

www.exaqute.eu

POP2 – Performance Optimisation and Productivity 2 (2018–2021)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU
824080 (H2020-INFRAEDI-2018-1)

ŘEŠITEL Ing. Lubomír Říha, Ph.D.

HPC centrum excellence 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.

<https://pop-coe.eu/>

NOVÝ
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, je vytvořit pokročilou inženýrskou platformu, a to využitím moderních technologií, jako jsou vysoce-výkonnostní počítání, velmi rozsáhlá data a cloudové služby. Přínosy projektu LEXIS budou demonstrovány ověřením využití platformy ve třech pilotních řešeních vhodných pro průmyslová odvětví jako například letectví, počasí a podnebí, zemětřesení a tsunami.

<https://lexis-project.eu>

NOVÝ
OPENQKD – Open European Quantum Key Distribution Testbed (2019–2022)

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.

<https://openqkd.eu/>

Spolupráce s komerční sférou

Spolupráci s komerční sférou uskutečňuje IT4Innovations především formou smluvního výzkumu. V roce 2019 se jednalo o spolupráci s těmito společnostmi:

Bayncore Labs Limited
Continental Powertrain Czech Republic s.r.o.
Glass Service a.s.
ING corporation, spol. s r.o.
K2 atmitec s.r.o.
Ministerstvo průmyslu a obchodu
Národní úřad pro kybernetickou a informační bezpečnost
Siemens s.r.o.
The German Aerospace Center

Studijní programy

IT4Innovations společně s Fakultou elektrotechniky a informatiky VŠB-TUO realizují doktorský studijní program Výpočetní vědy. Tento, v rámci České republiky, jedinečný program byl otevřen v akademickém roce 2015/2016 a je zaměřen na využití HPC, HPDA a AI ve vědě a průmyslu. Na konci roku 2019 měl studijní program 19 studentů. Doktorský studijní program Výpočetní vědy je součástí Doktorské školy MathInHPC, sdružující přední česká pracoviště zaměřená na oblast výzkumu metod HPC a jejich aplikací. Jeho studenti se tak dostanou do kontaktu s předními odborníky z partnerských institucí této doktorské školy, například z Matematicko-fyzikální fakulty UK či z Matematického ústavu AV ČR.

IT4Innovations se rovněž významně podílí na výuce v magisterském studijním programu Výpočetní a aplikovaná matematika, garantovaném Katedrou aplikované matematiky Fakulty elektrotechniky a informatiky VŠB-TUO, zejména pak v jeho specializaci Výpočetní metody a HPC.



Vzdělávací aktivity

IT4Innovations podporuje vědeckou komunitu a své uživatele pořádáním vysoce kvalitních kurzů, tutoriálů, workshopů a dalších vzdělávacích 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 a knihovny a aplikace.

V roce 2019 proběhlo v IT4Innovations 8 vzdělávacích akcí, které navštívilo 249 účastníků.

V roce 2017 se IT4Innovations stalo **ŠKOLICÍM CENTREM PRACE** (PRACE Training Center, PTC) a v roce 2019 organizovalo šest kurzů pod záštitou PRACE. Mezi tyto kurzy patřily mimo jiné:

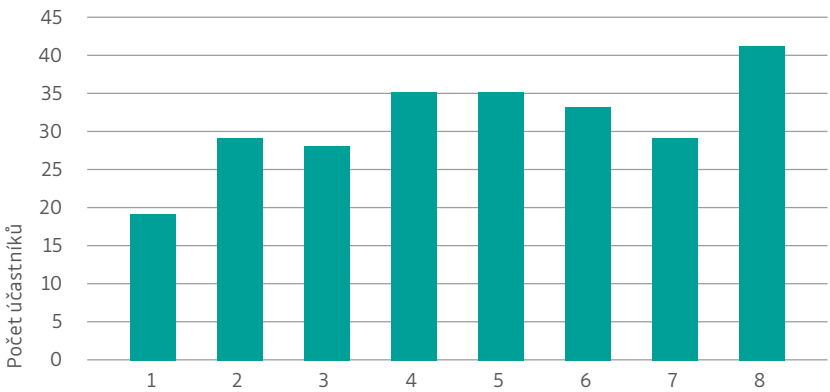
- > **PARALLEL VISUALIZATION OF SCIENTIFIC DATA USING BLENDER** (Petr Strakoš, Milan Jaroš, Alena Ješko), které byly zaměřeny na výuku základních operací populárního open-source modelovacího nástroje pro tvorbu 3D grafiky – Blender.

- > **DATA SCIENCE WITH R AND PYTHON** (Tomáš Martinovič, Stanislav Böhm), ve kterém se účastníci naučili základním až středním dovednostem pro analýzu a vizualizaci výzkumných dat v programovacích jazycích R a Python.

IT4Innovations jakožto ambasador **INSTITUTU HLUBOKÉHO UČENÍ NVIDIA** (NVIDIA Deep Learning Institute) v roce 2019 rovněž nabídl praktické kurzy vývojářům a vědeckým pracovníkům, kteří chtějí řešit náročné problémy pomocí hlubokého učení. Tyto kurzy zároveň patřily mezi nejúspěšnější.

- > **GET STARTED WITH INTEL AND NVIDIA ARTIFICIAL INTELLIGENCE TECHNOLOGIES** (Georg Zitzlsberger, Stephen Blair-Chappell). Účastníci tohoto dvoudenního kurzu se seznámili se základy Machine Learning pro efektní práci na CPU (tj. Intel Architecture), dále si mohli prakticky vyzkoušet cvičný model Deep Learning, nasadit ho do cílové aplikace Intel Movidius Compute Stick a samostatně spustit.
- > **FUNDAMENTALS OF DEEP LEARNING FOR COMPUTER VISION** (Georg Zitzlsberger). V tomto kurzu, zaměřeném na základy hlubokého učení (Deep Learning) pomocí školení neuronových sítí se účastníci dozvěděli o implementaci pracovních postupů, použití strategií pro zvýšení výkonu a schopností hlubokého učení využitím neuronových sítí a naučili se využívat tuto metodu v praxi.

Vzdělávací akce v roce 2019



PRACE Summer of HPC

Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) umožnilo v roce 2019 již posedmé studentům vycestovat na letní stáž do superpočítačových center po celé Evropě. Příležitost absolvovat letní stáž získalo tentokrát 25 studentů, a to v 11 hostujících organizacích. IT4Innovations přivítalo dva z nich.

David Izquierdo, student bakalářského oboru Leteckého inženýrství na univerzitě Carlos III v Madridu, pracoval v rámci PRACE Summer of HPC na projektu „Analýza CFD simulací aerodynamiky vozu – studentské formule“. Jeho mentorem byl Tomáš Brzobohatý z Laboratoře vývoje paralelních algoritmů.

Pablo Lluch Romero, student bakalářského oboru Umělé inteligence a softwarového inženýrství v Edinburgu, pracoval na projektu „Rozpoznávání emocí použitím hlubokých neuronových sítí“. Jeho mentorem byl Georg Zitzlsberger z Laboratoře pro náročné datové analýzy a simulace. Pablo Lluch Romero získal za svůj projekt ocenění Ambassador Award – PRACE Summer of HPC 2019.



- 1 Developing efficient HPC applications for the latest CPU architectures with C++ and Fortran (PTC course)
- 2 Parallel visualization of scientific data using Blender (PTC course)
- 3 Parallel visualization of scientific data using Blender (VI)
- 4 Data science with R and Python (PTC course)
- 5 Fundamentals of Deep Learning for Computer Vision (PTC course)
- 6 Fundamentals of Deep Learning for Computer Vision (VI)
- 7 Productivity tools for High Performance Computing (PTC course)
- 8 Get Started with Intel and NVIDIA Artificial Intelligence Technologies (PTC course)

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
(výzva č. 02_16_018)

ŘEŠITEL doc. 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 – Technické univerzity Ostrava 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 nových programů double degree (plánováno ve spolupráci s Università della Svizzera italiana, Lugano, Švýcarsko a Université Toulouse III Paul Sabatier, Francie).

Technika pro budoucnost (2016–2020)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU
CZ.02.2.69/0.0/0.0/16_015/0002338
(výzva č. 02_16_015)

ODBORNÝ PRACOVNÍK PROJEKTU ZA IT4INNOVATIONS: doc. RNDr. René Kalus, Ph.D.

Projekt VŠB – Technické univerzity Ostrava „Technika pro budoucnost“ se zaměřuje na tvorbu či úpravu strategických studijních programů tak, aby programy reflektovaly požadavky zaměstnavatelů a připravily studenty k úspěšnému vstupu na trh práce. Projekt je zaměřen na zavádění progresivních výukových metod využívajících nejmodernější technické vybavení, spolupráci s praxí i absolventy, posilování internacionalizace univerzity, zlepšení práce se studenty s různými handicap, zlepšování systému kvality a managementu univerzity a na podporu podnikavosti studentů.

Věda bez hranic (2018–2020)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU
CZ.02.2.69/0.0/0.0/16_027/0008463
(výzva č. 02_16_027)

KOORDINÁTOR ZA IT4INNOVATIONS: prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.

Cílem projektu VŠB – Technické univerzity Ostrava je realizace 43 zahraničních mobilit, které povedou k profesnímu růstu, zvýšení odborné kvalifikace a dalších dovedností mladých i zkušených výzkumných pracovníků, k získání

a přenosu zkušeností ze zahraničí, k zajištění působení zahraničních odborníků na VŠB-TUO. Mobility umožní zapojení do mezinárodních řetězců vědeckých laboratoří a akademických institucí zejména (nikoli však výlučně) v evropském výzkumném prostoru (ERA), zvýšení intenzity navazování mezinárodních kontaktů a účasti v mezinárodních iniciativách a projektech VaV.

NOVÝ

Technika pro budoucnost 2.0 (2019–2022)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU
CZ.02.2.69/0.0/0.0/18_058/0010212
(výzva č. 02_18_058)

ODBORNÝ PRACOVNÍK PROJEKTU ZA IT4INNOVATIONS: doc. 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.



Projekt Mezinárodního visegrádského fondu

Superhrdinové vědy (2018–2020)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU 21820033

ŘEŠITEL Ing. Karina Pešatová, MBA

Společný projekt partnerů ze zemí visegrádské čtyřky (IT4Innovations národní superpočítačové centrum, Vládní agentura pro rozvoj informačních technologií, Maďarsko, Výpočetní středisko Centra společných činností Slovenské akademie věd, Poznaňské superpočítačové a síťové centrum – Institut bioorganické chemie Polské akademie věd) populární formou vysvětluje význam superpočítačů a jejich využití, které má pozitivní vliv na každodenní život člověka. Každý partner projektu zajišťuje národní superpočítačovou infrastrukturu a věnuje značné úsilí popularizačním aktivitám, které mají za cíl rozšířit povědomí o tom, co je supercomputing, proč je pro současnou společnost nezbytný a proč je to opodstatněná investice. Pochopení celé této oblasti – vědeckých témat i supercomputingu – není pro laiky úplně jednoduché. Pro zjednodušení komunikace relativně složitěho obsahu budou výsledné materiály přizpůsobeny rozličným cílovým skupinám dle věku, stupně vzdělání i odborných znalostí. Cílem projektu je nejen vzdělávat širokou veřejnost, ale také inspirovat mladou generaci visegrádských zemí ke studiu vědeckotechnických oborů.

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 podpory Velkých infrastruktur pro výzkum, experimentální vývoj a inovace v rámci projektu „IT4Innovations národní superpočítačové centrum – LM2015070“.



www.it4i.cz