

newsletter



IT4Innovations
Centrum excellence

Superpočítačové centrum IT4Innovations navštívil ministr zahraničí Karel Schwarzenberg

Ministr zahraničí, Karel Schwarzenberg, zahájil jednodenní cestu po Severní Moravě návštěvou IT4Innovations. V doprovodu rektora Vysoké školy báňské, Ivo Vondráka, a ředitele pro strategický rozvoj IT4Innovations, Martina Dudy, zhlédl prezentaci vybraných aplikací připravených pro superpočítač, konkrétně modelování rozlivu povodní a řešení inženýrských problémů.



Vážené kolegyně, vážení kolegové,

asi nejsem sám, kdo má pocit, že byl letošní rok zase o něco kratší než ten předchozí. A to přesto, nebo možná právě proto, že se řada věcí udála. Náš projekt IT4Innovations nevyjímaje.

Především jsem rád, že se nám daří stále více zapojovat do zajímavých - a věřím, že i užitečných - výzkumných projektů. Ať již se zástupci ze sféry aplikační, tak i ze sféry akademické. Před rokem jsme se například s dánskou společností DHI, zabývající se problematikou simulací snad všeho, co se týká vody a životního prostředí, dohodli na pilotním odzkoušení vzájemné spolupráce. Po roce jsme ve fázi, kdy je tato společnost připravena vložit ne zcela zanedbatelné finanční prostředky do dalšího společného vývoje aplikací. Tyto, by navíc v budoucnu měly běžet na našich výpočetních prostředcích. Je stále více zájemců o seriózní využívání našich budoucích superpočítačových kapacit, dovoluji si zmínit například centrum excellence Biomedreg.

Výzkumné úspěchy ale nejsou samy sebou. Nestačí, aby kvalitní práci odváděli jen naši vědci a IT odborníci. Tento rok se museli „zapotit“ i ti, kteří se starají o to, aby bylo i v budoucnu na čem pracovat. Proto mi je stejným potěšením Vám oznámit, že jsme před několika dny předali staveniště zhotoviteli stavby budoucího superpočítačového centra a mezi vánočními svátky předpokládáme podpis smlouvy s dodavatelem malého klastru (první části superpočítače). Další podrobnosti se dočtete v příštím čísle newsletteru.

Dovolte mi, abych Vám touto cestou popřál hodně zdraví a štěstí v novém roce, ať máme také více času a klidu k přímému setkávání se, a „k fyzické práci, námaze a odpočinku“, ne jen k online video přenosům a simulačním modelům. Život není jen o superpočítání.

Byť ...

prof. Ing. **Ivo Vondrák**, CSc.
rektor VŠB-TU Ostrava



Cenu za nejlepší příspěvek

z nejprestižnější světové konference v oboru membránových výpočtů získal výzkumník IT4I

Na každoroční světové konferenci zaměřené na membránové výpočty, jejíž 13. ročník se uskutečnil v Budapešti, byl jako nejlepší oceněn příspěvek docenta Petra Sosíka z výzkumného týmu IT4Innovations při Slezské univerzitě v Opavě. Cena za nejlepší příspěvek, tzv. Best Paper Award, mu byla udělena za práci s názvem "Limits of the power of tissue P systems with cell division".

Práce se zaměřuje na výměnu informací v organizmech. Příspěvek studuje pomocí matematických modelů, tzv. membránových systémů, výměnu informací molekul buněčnými membránami. Docent Sosík v ní ukazuje, že propojené systémy množících se buněk jsou schopny řešit zhruba stejně obtížné problémy jako moderní paralelní počítače. Jeho výzkum propojuje různé oblasti vědy. Pro pochopení, jak si příroda dokáže poradit s informacemi, je užitečný jeho pohled informatika.



„Ocenění si velice vážím, jelikož tuto konferenci navštěvují špičky v oboru,“ komentuje svůj úspěch docent Sosík. Ačkoliv se výsledky výzkumu membránových výpočtů objevují na celé řadě dalších světových vědeckých fór, tato konference je jediná, která je výhradně zaměřena na tento obor. Účastníci konference se sjíždějí ze všech koutů světa, ale těžiště výzkumu zůstává v Evropě.



1. Výroční konference IT4Innovations

Ve dnech 22. a 23. října 2012 proběhla první výroční konference výzkumného centra IT4Innovations. Zástupci výzkumných

programů a projektových partnerů na ní představili své dosavadní výsledky a hlavní směry svého bádání.



Členství v HiPEAC prohloubí spolupráci s evropskými výzkumnými centry



IT4Innovations se prostřednictvím svého ředitele Martina Palkoviče stalo členem HiPEAC (European Network of Excellence on High Performance and Embedded Architecture and Compilation), evropské sítě výzkumných center, financované ze 7. rámcového programu. HiPEAC se soustředí na posílení evropského výzkumu vysoce výkonných a zabudovaných výpočetních systémů a prohlubování spolupráce mezi akademickými pracovníky a průmyslem.

Síť HiPEAC je založena na osobní spolupráci. Propojuje vedoucí pracovníky jak akademických pracovišť, tak průmyslových vývojářských skupin. Pod záštitou společného virtuálního centra excelence jim umožňuje spolupracovat na společných výzkumných úkolech. „Prostřednictvím HiPEAC můžeme utvářet budoucnost výpočetních systémů v Evropě,“ komentuje Martin Palkovič.

Síť HiPEAC koordinuje pracovní skupiny složené z členů a partnerů z různých zemí, které se zabývají společnými výzkumnými úkoly. Dále HiPEAC pořádá širokou škálu konferencí, stáží, seminářů a letních škol a rovněž vydává publikace a newslettery, které slouží ke sdílení informací. Tyto jsou přístupné všem členům, a také jejich mateřským organizacím.



Výpočetní prostředky PRACE získalo **již 6 projektů** z České republiky



V soutěžích o výpočetní prostředky PRACE uspělo po loňském úspěchu týmu docenta Reného Kaluse v rámci PRACE preparatory access dalších pět výzkumných projektů z České republiky. Ve všech případech se jedná o projekty pracovníků IT4Innovations. Celkově získali téměř 31,5 miliónu corehours na strojích v celé Evropě. Při přepočtu na finanční prostředky lze hovořit o úspěchu v řádu desítek miliónů korun. Získané výpočetní prostředky využijí k naplňování svých dlouhodobých výzkumných cílů v oblasti molekulových simulací a vývoje škálovatelných algoritmů v inženýrství.

MODELOVÁNÍ TERMODYNAMICKÝCH A STRUKTURÁLNÍCH VLASTNOSTÍ SHLUKŮ MOLEKUL VODY

Řešitelé: **Aleš Vítek, Martin Stachoň, René Kalus**

Projekt je zaměřen na modelování termodynamických a strukturálních vlastností malých shluků několika až desítek molekul vody. V posledních dvou desetiletích bylo vydáno mnoho teoretických studií na téma termodynamických vlastností, nicméně téměř všechny se zaměřují na případ, kdy je konstantní objem a teplota resp. objem a energie. Pouze několik prací popisuje chování shluků molekul při nenulovém tlaku. Cílem projektu je tuto mezeru zaplnit. Výstupem budou úplné fázové $p - T$ diagramy. Celkem získali možnost využití Tier-1 systémů ve výši 2 352 000 corehours.

METODY FETI Z KATEDRY APLIKOVANÉ MATEMATIKY USPĚLY HNED DVAKRÁT

Řešitelé: **David Horák, Václav Hapla, Michal Merta, Martin Menšík**

Jedny z neúspěšnějších metod pro paralelní řešení rozsáhlých inženýrských úloh jsou tzv. FETI metody. Pomocí nich lze výpočetní oblast (např. model motoru auta, důlní výztuže apod.) rozdělit na předem daný počet podoblastí, z nichž každá je pak přidělena jednomu procesoru. Toto rozdělení práce, nejenže urychluje výpočet úměrně počtu využitých výpočetních jader, ale také umožňuje spočítat mnohem větší úlohy, protože nejsme omezení pamětí jednoho počítače. Další výhodou metod FETI je možnost tzv. dualizace, kdy se celá úloha převede pouze na hranici mezi jednotlivými podoblastmi. Tímto podstatně zmenšíme počet neznámých a obdržíme snadněji řešitelný problém.

Tato skupina se zabývá zejména využitím tzv. Total-FETI metody vyvinuté na Katedře aplikované matematiky Vysoké školy báňské. Tu lze v kombinaci se škálovatelnými algoritmy vyvíjenými skupinou prof. Dostála využít např. i k paralelnímu řešení kontaktních úloh mezi dvěma či více tělesy. Spolehlivé řešení těchto problémů má velké využití v inženýrské praxi. Naše knihovna FLLOP je schopna využít tisíců výpočetních jader k vyřešení úloh s desítkami miliónů neznámých. Hlavním cílem projektů je její testování na reálných inženýrských problémech, její optimalizace a nalezení nejlepší strategie pro škálovatelné řešení úloh se stovkami miliónů neznámých.

Díky projektům HPC-Europa2 a PRACE-DECI v současnosti využíváme zejména superpočítač Hector, který se nachází ve Velké Británii a disponuje více než 90 tisíci výpočetními jádry. V rámci PRACE Preparatory Access jsme získali také přístup na nejvýkonnější evropské superpočítače Curie ve Francii a Hermit v Německu.

Příklady podpořených projektů PRACE:

VÝZKUM ELEKTRONOVÝCH OBALŮ KLASTRŮ ATOMŮ INERTNÍCH PLYNŮ POMOCÍ SIMULACÍ NA SUPERPOČÍTAČI

Řešitelé: **René Kalus, Martin Stachoň, Aleš Vítek, Ivan Janeček**

Dalším úspěchem je 16 000 000 hodin výpočetního času na superpočítači Hermit (HLRS, Stuttgart) pro účely simulací elektronových obalů klastrů atomů inertních plynů. Tento projekt se podílí na základním výzkumu chování těchto systémů a má možné využití v praktických aplikacích, například v oblasti medicíny. Pro představu, kdybychom chtěli tyto výpočty, postavené na pravidlech kvantové fyziky, provést na v současnosti nejvýkonnějším počítači VŠB-TUO, trvaly by přibližně něco mezi deseti a patnácti lety.

Cílem tohoto komplexního výzkumu je vyvinout metody, jež by umožňovaly zkoumat srážkové procesy se zahrnutím elektronových excitací. V blízké budoucnosti by tyto metody mohly umožnit realistické modelování takových systémů, jakým je například heliová plazma, která je velmi účinná při sterilizaci chirurgických či jiných lékařských nástrojů a dokonce i ran.

Budeme rádi, zašlete-li nám své komentáře a případné návrhy na: klara.janouskova@vsb.cz

Vysoká škola báňská

Technická univerzita Ostrava
17. listopadu 15/2172, 708 33 Ostrava-Poruba

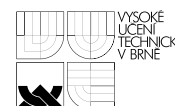
www.it4innovations.cz
facebook.com/it4innovations



OP Výzkum
a vývoj pro inovace



EVROPSKÁ UNIE
EVROPSKÝ FOND PRO REGIONÁLNÍ ROZVOJ
INVESTICE DO VAŠÍ BUDOUCNOSTI



OSTRAVA!!!