



NEWSLETTER Q1/2019

VŠB TECHNICKÁ
UNIVERZITA
OSTRAVA

IT4INNOVATIONS
NÁRODNÍ SUPERPOČÍTAČOVÉ
CENTRUM

Výzkum umělé inteligence dostává zelenou – naši infrastrukturu jsme rozšířili o technologii NVIDIA	5
Spustili jsme výpočetní systém NVIDIA DGX-2. Jedná se o první instalaci tohoto typu ve střední a východní Evropě.	
Zahájili jsme první projekt Horizontu 2020 koordinovaný VŠB-TUO: LEXIS	8
Záměrem projektu je vytvořit pokročilou platformu s využitím moderních technologií a přístupů, mezi které patří vysoce výkonné počítání, velká data a cloudové služby.	
Získali jsme certifikát bezpečnosti informací ISO 27001	10
Certifikát ISO jsme získali v oborech poskytování služeb národní superpočítačové infrastruktury, řešení výpočetně náročných úloh, realizace pokročilých datových analýz a simulací a zpracování rozsáhlých datových sad.	
Dvanáctidenní FIJI hackathon	12
Hostili jsme FIJI hackathon zaměřený na paralelizaci a HPC. Letos poprvé se tak konal v České republice. Organizátora Pavla Tomančáka a dvou zvaných přednášejících jsme se zeptali na pár otázek.	
Vyhodnocení 15. veřejné grantové soutěže	17
V lednu jsme mezi 71 projektů rozdělili téměř 70 milionů jádrohodin. Dohromady 20 projektů získalo alokace vyšší než 1 milion jádrohodin. Představujeme vám vybrané projekty, které získaly výpočetní čas.	
Pokračujeme ve spolupráci s Evropskou kosmickou agenturou	23
Evropská kosmická agentura zahájila v roce 2014 program „EO Exploitation Platforms“, jehož cílem je vytvořit vzájemně propojené tematicky orientované platformy. My jsme zapojeni do vývoje jedné z nich.	
O centru excelence zaměřeném na optimalizaci výkonu a produktivitu aplikací (POP2)	25
Se 7 partnery dále pokračujeme v analýzách paralelních aplikací a doporučeních optimalizačních technik pro vyšší výkon a lepší škálovatelnost aplikací.	
Úspěšné zakončení projektu ExCAPE, jehož cílem bylo vyvinout počítačové programy, které dokážou najít nové léky s pomocí exascale výpočetních systémů	27
V projektu jsme se podíleli na vývoji moderních škálovatelných algoritmů a jejich vhodných implementacích.	
Televizní stanice Euronews u nás natáčela reportáž	29
V únoru u nás natáčela reportáž na téma Inteligentní regiony panevropská televizní stanice Euronews. Součástí reportáže byly návštěvy ve dvou firmách, kterým pomáháme inovovat.	
Kde jste nás mohli potkat a co dalšího se u nás událo	31
Hostili jsme akci Digitální revoluce CZ sdružení CzechInno, zúčastnili jsme se Kariéry PLUS, pořádali jsme setkání partnerů projektu InnoHPC a kurz Paralelní vizualizace vědeckých dat pomocí Blenderu.	

POZVÁNKY

KONFERENCE HIGH PERFORMANCE COMPUTING IN SCIENCE AND ENGINEERING (HPCSE)

20.-23. 5. 2019, Horský hotel Soláň, Beskydy

Konference HPCSE se koná jednou za dva roky a letos ji pořádáme již počtvrté. Jejím hlavním cílem je prezentace aktuálních výsledků výzkumu a výměna informací z oblasti aplikované matematiky, numerické lineární algebry, optimalizačních metod, výpočetních věd a HPC. Letošní ročník se uskuteční v termínu 20.-23. května 2019. Registrovat se můžete do 20. dubna.

hpcse.it4i.cz/HPCSE19

KURZ DATA SCIENCE WITH R AND PYTHON

24.-25. 4. 2019,
IT4Innovations

Dvoudenní kurz Data Science with R and Python proběhne na konci dubna a povedou jej naši kolegové Tomáš Martinovič a Stanislav Böhm. První den kurzu bude věnován programovacímu jazyku R a druhý den Pythonu. Registrovat se můžete do 15. dubna.

training.it4i.cz/DataSci-04-2019



KRÁTCE

BLOG EVROPSKÉ KOMISE VĚNOVANÝ JEDNOTNÉMU DIGITÁLNÍMU TRHU

Evropskou komisí jsme evidováni jako Digitální inovační hub pro spolupráci s průmyslem v oblasti HPC a pokročilých datových analýz. Kromě detailních informací v online katalogu EK najdete IT4Innovations i v příspěvku Tomáše Karáska „IT4Innovations: HPC at the Heart of a Digital Innovation Hub“ na blogu EK.

ec.europa.eu/digital-single-market/en/blogposts/it4innovations-hpc-heart-digital-innovation-hub

DALŠÍ KOLO VEŘEJNÉ GRANTOVÉ SOUTĚŽE BUDE SPUŠTĚNO V ČERVNU 2019

V červnu 2019 bude spuštěna 17. veřejná grantová soutěž, v rámci které si budete moci zažádat o výpočetní zdroje IT4Innovations. Sledujte aktuality na našich webových stránkách.

www.it4i.cz





NVIDIA DGX-2



Výzkum umělé inteligence dostává zelenou – naši infrastrukturu jsme rozšířili o technologii NVIDIA

Výpočetní systém NVIDIA DGX-2 jsme slavnostně spustili 4. března 2019 a jedná se o vůbec první instalaci tohoto typu ve střední a východní Evropě. Systém je navržen tak, aby řešil nejnáročnější úlohy umělé inteligence, při kterých dosahuje špičkového výkonu 2 PFlop/s. Jeho slavnostního spuštění se účastnili Ivo Vondrák, hejtmán Moravskoslezského kraje, Tomáš Macura, primátor města Ostravy, a Václav Snášel, rektor VŠB – Technické univerzity v Ostravě.

Systém NVIDIA DGX-2 nám dodala česká společnost M Computers a k dispozici bude uživatelům naší infrastruktury z akademických, výzkumných i komerčních institucí z České republiky i zahraničí.

„Naším hlavním posláním je umožnit českým vědcům přístup ke špičkovým technologiím. Tento nový systém jim umožní udržet krok se světem v oblasti umělé inteligence, kterou spolu se supercomputingem a digitalizací průmyslu považujeme za klíčovou pro rozvoj společnosti. Proto jsme se rozhodli pořídit toto unikátní zařízení,“ uvádí Vít Vondrák, ředitel IT4Innovations.

Systém disponuje zajímavou unikátní vnitřní propustností mezi šestnácti GPU

kartami (NVIDIA V100 Tensor Core GPU), které jsou navzájem propojeny pomocí revolučních prepínačů NVSwitch o celkové propustnosti 2,4 TB/s. V oficiálních dokumentech se hovoří o 2,4 TB/s, generální ředitel NVIDIA Jensen Huang nicméně ve své prezentaci k DGX-2 zmiňuje dokonce 14,4 TB/s a srovnává ji s přenosem HD filmu. Za jednu sekundu by DGX-2 zvládla přenést 1440 HD filmů (každý cca 10 GB).

Celková HBM2 paměť činí 512 GB. NVIDIA DGX-2 dále nabízí 30 TB interní kapacity na rychlých NVMe SSD. Připojení do okolní infrastruktury zajišťuje osm 100 GB/s Infiniband/Ethernet adaptérů.

Jeden NVIDIA DGX-2 dokáže svým výkonem nahradit pro trénování hlubokých neuronových sítí (ResNet-50) tři sta dual-socket serverů s Intel Xeon Gold procesory. NVIDIA DGX-2 je dodáván s již připraveným a vyladěným softwarovým prostředím pro provoz nejpoužívanějších frameworků pro strojové i hluboké učení s maximálním výkonem. NVIDIA DGX-2 může být také použit pro tradiční vysoko výkonnostní výpočty (High Performance Computing, HPC), kde dosahuje teoretického výpočetního výkonu 130 TFlop/s.



Rozšíření infrastruktury IT4Innovations je podpořeno Evropským fondem pro regionální rozvoj v rámci projektu IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale, CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_013/0001791, realizovaného z Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR.



EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



Slavnostní spuštění systému NVIDIA DGX-2, 4. března 2019



Large-scale EXecution for Industry & Society

PROJEKT LEXIS



Zahájili jsme první projekt Horizontu 2020 koordinovaný VŠB-TUO: LEXIS

Na VŠB – Technické univerzitě Ostrava jsme ve dnech 14.–16. ledna 2019 odstartovali projekt LEXIS (Large-scale Execution for Industry & Society) financovaný rámcovým programem Horizont 2020, jehož hlavním řešitelem je náš kolega z IT4Innovations Jan Martinovič. Jedná se o vůbec první projekt H2020 koordinovaný VŠB – Technickou univerzitou Ostrava.

První setkání konsorcia partnerů projektu LEXIS proběhlo v lednu 2019 v Ostravě, čímž byla realizace projektu oficiálně zahájena. Celkem 16 partnerů ze 7 evropských zemí připravilo plán aktivit, který musí být během 2,5 let trvání projektu splněn. Partneři projektu zúročí své rozsáhlé dovednosti a zkušenosti, aby zajistili komplexní řešení projektu, jenž předpokládá využití řady složitých technologií.

Jan Martinovič hlavní řešitel projektu LEXIS, definuje ambice a cíle projektu:

„Naším záměrem je s využitím moderních technologií a přístupů, mezi které patří vysoko-výkonnostní počítání (HPC), velká data (Big Data) a cloudové služby (Cloud), vytvořit pokročilou platformu. Přínosy projektu LEXIS budou demonstrovány využitím této platformy ve třech pilotních řešeních, v rámci kterých se budeme zabývat problematikou z oblasti leteckého průmyslu, meteorologických a klimatických modelů a zemětřesení a tsunami.“

Kombinace technologií HPC, Big Data a Cloud je klíčem k uspokojování stále rozmanitějších potřeb velkých i malých společností z komerční sféry. Důležité je usnadnit těmto podnikům přístup k výkonným výpočetním platformám, což bylo dříve obtížné nejen z technických, ale i finančních důvodů.



CERTIFIKÁT ISO 27001



TDS Brno – Sekce řízení jakosti a certifikace, p. s.
U vlečky 29/5, 617 00 Brno
Certifikační orgán pro systémy managementu č. 3105
akreditovaný Českým institutem pro akreditaci, o.p.s. podle ČSN EN ISO/IEC 17021-1:2016

CERTIFIKÁT

číslo: TDS 81/2018

TDS CERT
certifikační orgán
pro systémy managementu

potvrzuje

na základě kladného výsledku certifikačního auditu č. 315/2018,
že organizace

Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava
IT4Innovations národní superpočítačové centrum

17. listopadu 2172/15
CZ - 708 00 Ostrava

zavedla a používá systém managementu bezpečnosti
informací v souladu s požadavky

ČSN ISO/IEC 27001:2014

v oboru

Poskytování služeb národní superpočítačové infrastruktury, řešení výpočetně
náročných úloh, realizace pokročilých datových analýz a simulací a zpracování
rozsáhlých datových sad.

Prohlášení


...nosti ver. 01 ze dne 7. 12. 2018.

...ý do 12. prosince 2021.

...vaná od roku 2018.

...ifikátu a aplikovatelnosti požadavků normy
...rískat u uvedené organizace.



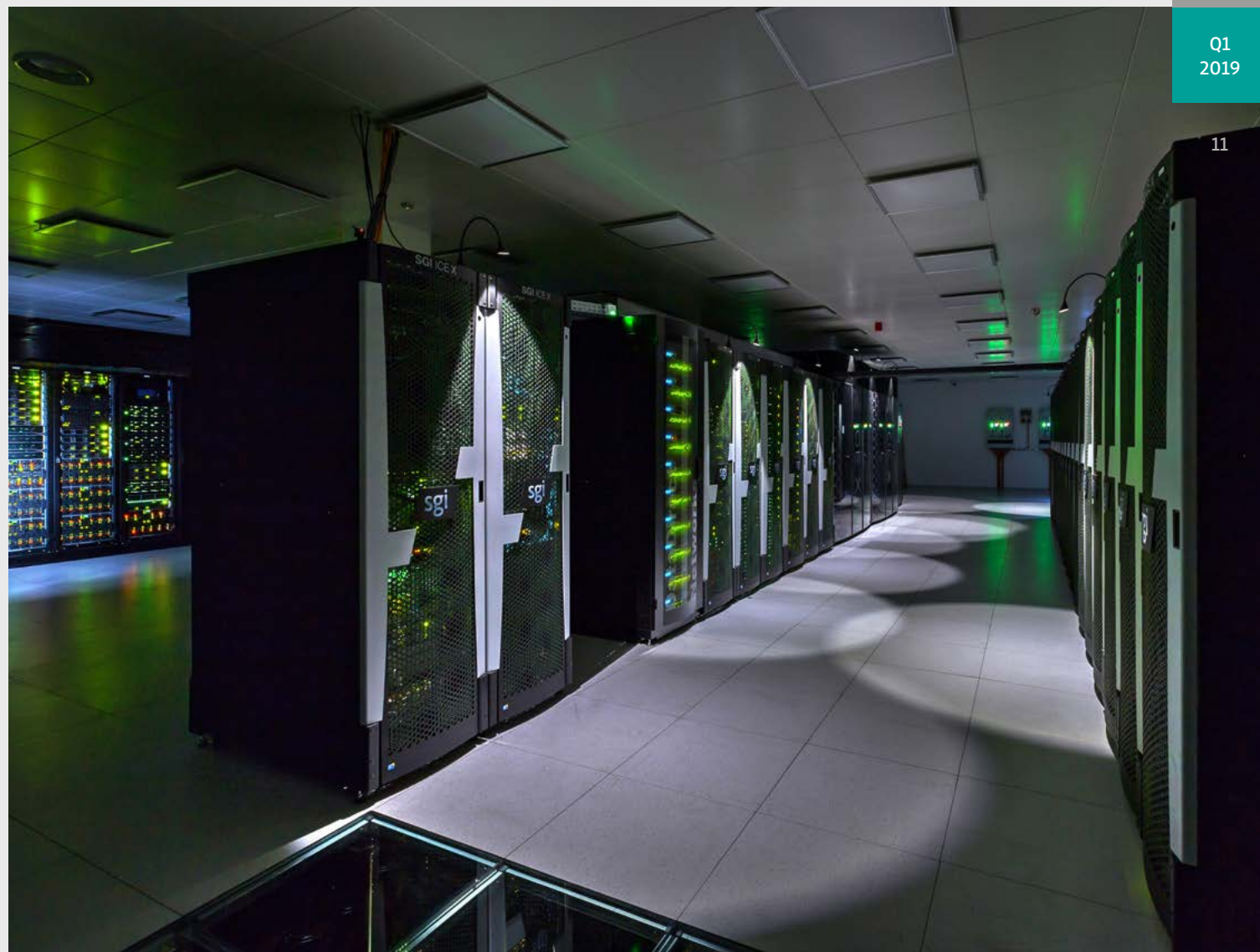

Ing. Jiří Noss
ředitel certifikačního orgánu

ZÍSKALI JSME CERTIFIKÁT BEZPEČNOSTI INFORMACÍ ISO 27001

Od prosince 2018 jsme držitelem certifikátu systému managementu bezpečnosti informací podle normy ISO 27001 (ISO/IEC 27001:2013, ČSN ISO/IEC 27001:2014). Certifikát ISO 27001 jsme získali v oborech:

- poskytování služeb národní superpočítačové infrastruktury,
- řešení výpočetně náročných úloh,
- realizace pokročilých datových analýz a simulací,
- zpracování rozsáhlých datových sad.

Certifikace dle této normy dokládá, že plánujeme, udržujeme, vyhodnocujeme a neustále zlepšujeme systém řízení bezpečnosti informací: kontinuální řízení rizik, stanovení bezpečnostních pravidel, vyhodnocování účinnosti přijatých opatření, zmírňování eventuálních dopadů, zvyšování bezpečnostního povědomí zaměstnanců, řízení vztahů s dodavateli a zajištění dalších bezpečnostních aspektů na organizačně-administrativní, personální, fyzické a kryptografické úrovni.





DVANÁCTIDENNÍ FIJI HACKATHON
V IT4INNOVATIONS

Ve dnech 17.– 29. ledna 2019 jsme hostili FIJI hackathon zaměřený na paralelizaci a HPC. FIJI je software, který využívají desítky tisíc uživatelů na celém světě pro zpracování velkých obrazových dat. Hackathon je událost, v rámci které se vědci programátoři setkávají, aby společně pracovali na zadaném problému, přičemž FIJI hackathon obvykle trvá dva týdny. Díky vývojářské práci v nerušivém prostředí a díky velkému nasazení se daří i v tak krátkém časovém období platformu vyvíjet efektivněji a rychleji.

Pavel Tomančák



FIJI hackathony jsou organizovány pravidelně od roku 2007 a předchozí ročníky se konaly například ve Spojených státech amerických, Německu, Švýcarsku a ve Francii. Letos poprvé se konal v České republice a zúčastnilo se jej 28 lidí.

Rozhovory s organizátorem a přednášejícími na FIJI hackathonu

Zeptali jsme se Pavla Tomančáka, který hackathon v Ostravě organizoval:

Jste duchovním otcem FIJI, můžete nám popovídat o jeho původu a o tom, jak se myšlenka na takový software zrodila?

„Jsem biolog a v roce 2008 jsem chtěl pro zobrazení embryí octomilky používat pokročilou metodu tzv. light sheet mikroskopie. Takovýto mikroskop jsme k dispozici měli, ale data musela být zpracována na počítači, přičemž algoritmy buď nebyly snadno dostupné, nebo neexistovaly vůbec. Algoritmy jsem proto musel vyvinout. Najal jsem studenty se znalostmi výpočetních věd, kteří to zvládli (oba mají nyní vlastní výzkumné laboratoře). Vzhledem k tomu, že nejsem počítačový expert a programování je spíše mým koníčkem, pokládal jsem si otázku: „Co se stane, když tito studenti opustí mou skupinu? Bude software, který vyvinuli, stále funkční?“ Řešením bylo vložit tento software do větší platformy, která již má vybudovanou komunitu vývojářů, jež by software dlouhodobě udržovala. Tenkrát byla platforma ImageJ jasnou volbou. Používalo ji

mnoho biologů a byla, a je, bezplatná. Shodou okolností navštívil tehdy mou laboratoř můj přítel Albert Cardona, který používal ImageJ v jiné oblasti zpracování obrazových dat (v elektronové mikroskopii). Společně s matematikem Johannesem Schindelinem pracovali na vývoji nové distribuce platformy ImageJ, která uměla nainstalovat a spustit na tehdejší dobu velmi komplexní program, na kterém Albert pracoval. Jelikož jsem byl hlavním řešitelem, měl jsem finance a potřeboval jsem vyvíjet software udržitelným způsobem, najal jsem Johannesse a společně s Albertem jsme začali pracovat na vývoji a propagaci FIJI. Tenkrát jsme vůbec neměli tušení, že o deset let později bude mít FIJI 75 tisíc uživatelů z celého světa. Pouze jsme se snažili vyřešit vlastní problémy.

Co se týče jména FIJI, jedná se o samoreferenční zkratku, něco, co je populární mezi tzv. geeky, myšleno počítačovými odborníky. Vychází ze spojení „FIJI Is Just ImageJ“. To vysvětluje spojitost s platformou ImageJ, jejíž použití rozšiřuje na různé náročné biologické aplikace. Toto jméno

napadlo vlastně Alberta, jenž měl tenkrát přítelkyni, která měla ostrov Fidži ráda. Společně jsme pak název s postupem času racionalizovali.“

Jaký byl hlavní účel letošního FIJI hackathonu a jak se zájemci mohou na takovouto akci přihlásit?

„Hackathony jsou co do průběhu obvykle velmi svobodné události. Účastníci přichází pracovat na určitých problémech, k jejichž řešení mohou využít znalosti ostatních. Namísto hledání informací online mohou jednoduše přijít za vývojářem té části FIJI, na které jejich projekt závisí, a díky spolupráci problém vyřešit.

Hackathon v IT4Innovations byl zaměřen na spuštění FIJI na superpočítači. V tomto směru došlo k velkému pokroku. Zatím je vše pod pokličkou, ale brzy bude uživatelům FIJI na celém světě umožněno spouštění skutečně velkých úloh s gigantickým množstvím mikroskopických dat na jejich vlastních klastrech nebo dokonce vzdáleně s využitím excelentní infrastruktury v IT4Innovations.

Hackathony jsou určeny expertům v programování. Nikdo nemá čas věnovat se vysvětlování základů, proto zveme obvykle jen zkušené vývojáře. Organizujeme také ale tzv. learnathony (zatím pouze v Drážďanech), kde se méně

pokročilí hackeři FIJI dozví ty nejnovější věci. Účastníci learnathonů se pak často účastní i hackathonů.“

Můžete stručně shrnout úspěchy letošního ročníku?

„K hlavnímu cíli hackathonů patří příležitost poznat se. Letošní ročník navštívilo mnoho nových lidí, kteří tuto šanci dostali. Samozřejmě byla vytvořena spousta kódu, který účastníci dále vyvíjí. Říkáme tomu ‚hackathon effect‘ – lidé bývají po intenzivních dvou týdnech tak nabití energií, že brzy dokončí mnoho projektů, do kterých se během hackathonu pustili. Můžete si to jednoduše zobrazit zhlédnutím

rezpozitáře kódu na GitHubu. Hackathony jsou pro komunitu FIJI opravdu významné, protože software se díky nim posouvá rychleji dopředu (například v souvislosti s HPC).

Navíc jsme tento rok objevili opravdu skvělé místo pro hackathon. Hotel byl kousek od budovy IT4Innovations, počasí bylo mrazivé a znečištění ovzduší vysoké. V podstatě se tedy nedalo dělat nic jiného než programovat. V docházkové vzdálenosti se nachází i restaurace Stračena a hospůdka Kurník Šopa. Perfektní prostředí pro hackathon. Do Ostravy se jistojistě vrátíme.“





Do programu letošního ročníku byly zařazeny i dvě přednášky zahraničních specialistů, Floriana Juga a Christiana Dietze, které byly přístupné široké veřejnosti, a to na téma Restaurace obrazů z mikroskopie pomocí strojového učení a KNIME: open-source software pro zpracování a analýzu obrazů. Pro ty, kteří se přednášek nemohli zúčastnit, jsme se Floriana Juga zeptali:

Přednášel jste o technikách restaurace obrazu CARE (content-aware image restoration), můžete nám tento výzkum přiblížit?

„Moderní mikroskopy mohou zaznamenávat mnoho hodin 3D časověných videí každé buňky ve vyvíjejících se organismech. Stejně jako u běžného fotografování, je dostatek světla vyžadován i u fluorescenční mikroskopie. A to z důvodu eliminace tmavých a zašuměných obrazů. Toto světlo však může poškodit modelové organismy, jako jsou např. červi, ryby a myši. Jedinou možností, jak se takovému poškození (tzv. ultimate sunburn) vyhnout, je buď pořizovat kratší nahrávky, nebo snížit množství světla. Biologové jsou pak nuceni pracovat s velmi zašuměnými obrazy, které není vůbec snadné vyhodnotit.“

Společně s kolegy z Centra pro systémovou biologii v Drážďanech (CSBD) a Institutu molekulární buněčné biologie a genetiky Maxe Plancka (MPI-CBG) jsme proto vyvinuli metodu obnovy obrazu – CARE (Content-aware Image Restoration) –

která je schopná zmíněné dilema řešit. CARE je založen na umělých neuronových sítích a dokáže odhalit obsah skrytý v mikroskopických snímcích s nízkou kvalitou. Pomocí naší nové metody dokáží biologové obnovit vysoce kvalitní mikroskopické snímky, i když jsou získány s 60x nižším laserovým osvětlením. To jim umožňuje provádět takové experimenty, které doposud nebyly možné. Náš vyvinutá metoda je bezplatná a můžete ji najít na GitHubu. Navrhli jsme ji tak, aby bylo snadné ji používat a také přizpůsobovat pro dané účely.“

Podělíte se s námi o nejzajímavější vzpomínky z vašeho pobytu v IT4Innovations a v Ostravě?

„Upřímně řečeno, všichni jsme si to v IT4Innovations užili. Vzhledem k tomu, že vedu výzkumnou skupinu, což je časově velmi náročné, mám velmi málo času na to si jen sednout a programovat. Tady v Ostravě jsem se cítil téměř jako postdoc, což bylo skvělé.“

Určitě nezapomenu na návštěvu uhelného dolu a prohlídku působivé infrastruktury IT4Innovations. Klastř jsem neviděl poprvé, nicméně jsem byl ohromen.

V neposlední řadě musím zmínit jídlo a pivo... Každý určitě ví, jak dobré české pivo je. Pivo, které podávali v restauracích blízko IT4Innovations bylo lepší než jakékoliv české pivo prodávané v Německu. Po návratu domů budu muset začít cvičit, abych shodil kila nabraná v Ostravě... :-)”

Zeptali jsme se také Christiana Dietze:

Vaše přednáška byla zaměřená na open-source platformu KNIME, můžete nám ji představit?

„KNIME je snadno použitelná bezplatná komplexní analytická platforma pro integraci, analýzu a průzkum dat. Je navržena pro zpracování velkého množství různorodých dat. Každý krok pracovního postupu analýzy dat může využívat více než 2 tisíce dostupných modulů (tzv. nodů), které integrují typy dat a funkčnost různých domén, včetně zpracování obrazu, chemoinformatiky či bioinformatiky. Mnoho z těchto tzv. nodů je dostupných prostřednictvím open-source integrací, např. Keras a Tensorflow pro hluboké učení, Apache Spark pro zpracování velkých dat, H2O pro vysoce výkonné strojové učení, Python a R pro skriptování a grafy, a RDKit pro chemoinformatiku.

KNIME Image Processing, rozšíření pro platformu KNIME Analytics, integruje dobře známé bezplatné nástroje pro analýzu biologických snímků (jako např. ImageJ2/ Fiji, ImgLib2, OMERO, Ilastik, BigDataViewer a CellProfiler). Díky funkčnosti, kterou KNIME Analytics nabízí, mohou uživatelé pro analýzu snímků navrhovat komplexní pracovní postupy, které dokážou zpracovávat vícerozměrné snímky a videa

ve velkém měřítku až po strojové učení, statistické analýzy a vizualizace.“

Fiji hackathony navštěvujete pravidelně od roku 2011, co vás nejvíce zaujalo na letošním ročníku v IT4Innovations?

„Podle mého názoru jsou hackathony skvělé ze dvou důvodů. Za prvé můžete pracovat s lidmi, s nimiž obvykle pracujete jen vzdáleně. Na hackathonu s nimi můžete trávit více času a poznat je blíže. Osobní setkání totiž často poskytují lepší základ pro rozvoj nových myšlenek a motivace. Za druhé se můžete zaměřit na určitý projekt a věnovat mu vymezený čas bez rušivých vlivů běžného pracovního dne (pokud si to tak tedy naplánujete).

Na hackathonu v IT4Innovations byly tyto dva body splněny. Pro mne bylo skvělou příležitostí setkat se s novými lidmi bez zkušeností v oblasti zpracování obrazových dat, ale s jedinečnými zkušenostmi v HPC. Těším se z nových kontaktů a také na budoucí spolupráci.“

Tato akce byla podpořena Evropským fondem pro regionální rozvoj (ERDF) v rámci projektu IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale (CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_013/0001791) realizovaného v rámci OP VVV.



EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY





VYHODNOCENÍ 15. VEŘEJNÉ GRANTOVÉ SOUTĚŽE



V 15. kole veřejné grantové soutěže si uchazeči zažádali téměř o 105 milionů jadrohodin. Požadované zdroje tak převýšily vyhrazenou kapacitu o 119 %. Alokační komise proto musela znovu přistoupit ke snížení alokací většiny hodnocených projektů a mezi 71 úspěšných projektů rozdělila téměř 69,3 milionů jadrohodin.

Celkově 91 % přerozdělených výpočetních zdrojů získalo 41 projektů, které prošly technickým hodnocením i hodnocením alokační komise. Nejčastějším vědním oborem jsou materiálové vědy následované biovědami a vědami o Zemi. Dohromady 20 projektů získalo alokace vyšší než 1 milion jadrohodin. Řešiteli těchto „milionových“ projektů jsou výzkumní pracovníci z 9 různých organizací, a to z IT4In-

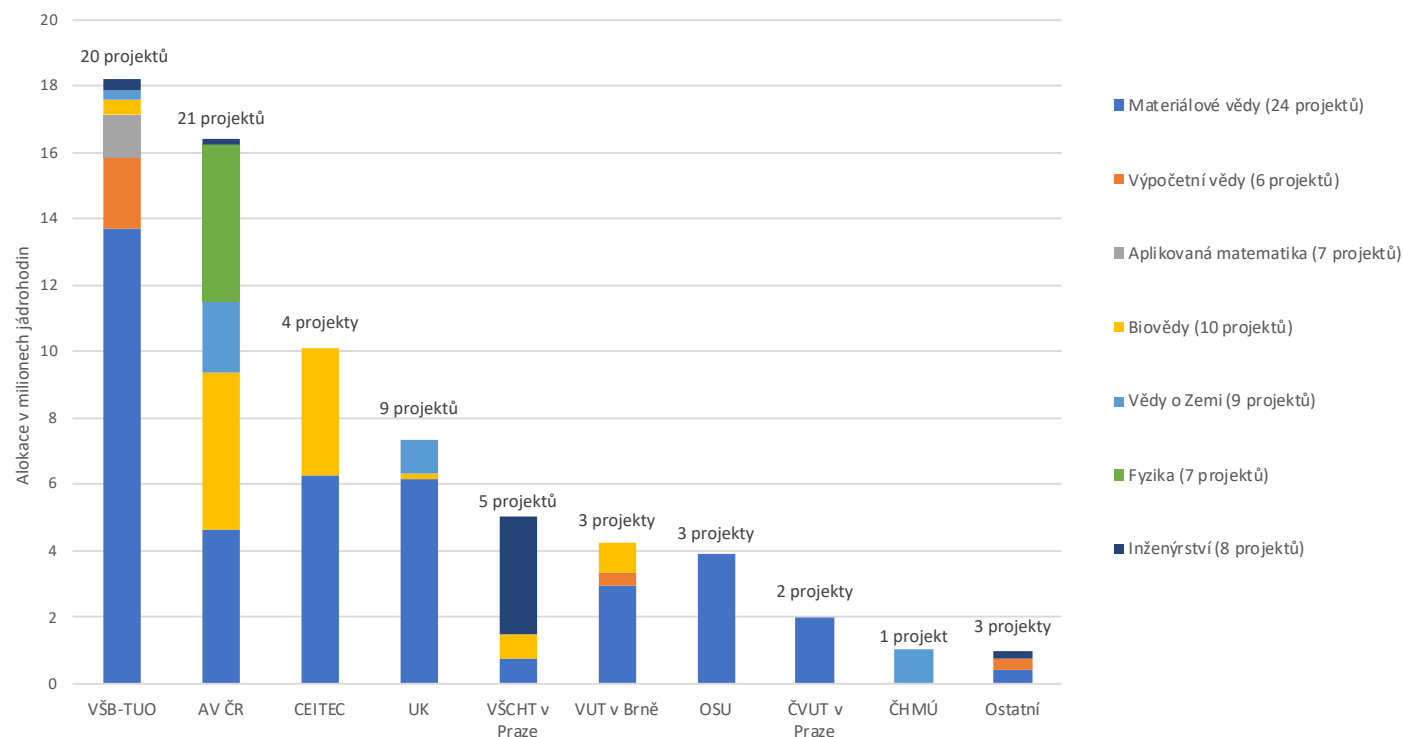
novations, CEITECu, Akademie věd ČR, Univerzity Karlovy, Ostravské univerzity, Vysoké školy chemicko-technologické v Praze, Vysokého učení technického v Brně, Českého vysokého učení technického v Praze a z Českého hydrometeorologického ústavu.

Celkem 30 projektů zájemců, kteří si zažádali o 400 tisíc jadrohodin či méně, prošlo pouze technickým hodnocením a požadované zdroje jim byly alokovány v plné výši. Přiděleno jim bylo 9 % z celkového počtu alokovaných jadrohodin. Nejvíce projektů přitom spadá, stejně jako ve 14. kole grantové soutěže, do inženýrské oblasti výzkumu (7) a aplikované matematiky (6).

Co se organizací týče, jednu čtvrtinu z celkových přerozdělených výpočetních zdrojů získaly projekty žadatelů z VŠB – Technické univerzity Ostrava (převážně z IT4Innovations). Druhou čtvrtinu získalo 7 ústavů Akademie věd ČR, které patří nejvíce úspěšných projektů. Celkem 21 projektů této veřejné výzkumné instituce získalo téměř 16,5 milionů jadrohodin.

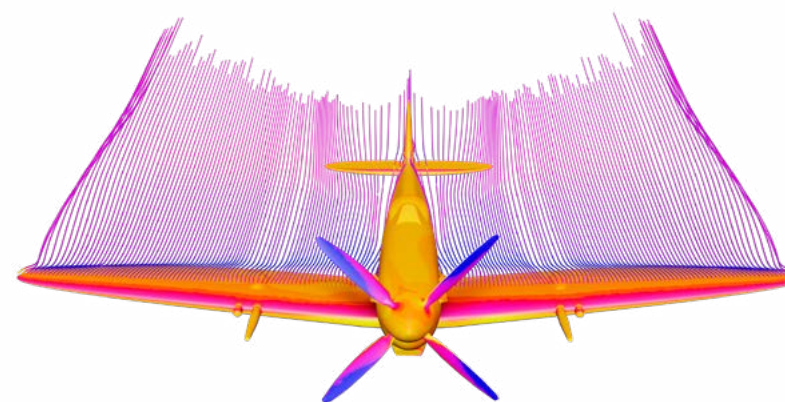
Kromě organizací uvedených v grafu, získaly výpočetní čas i projekty Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně, Univerzity Pardubice a Západočeské univerzity v Plzni.

Alokace výpočetních zdrojů
v 15. kole veřejné grantové soutěže
dle vědních oborů a institucí





Syntetický otisk prstu s ekzémem –
podlouhlé bílé oblasti narušující průběh otisku



Výstup z připravovaného a zmiňovaného nástroje
pro vizualizaci vědeckých dat v Blenderu

Ing. Jan Tinka
Vysoké učení technické v Brně

STROJOVÉ UČENÍ V BIOMETRII A BIOMEDICÍNĚ

Výpočetní zdroje ve výši téměř 1 milion jádrohodin využijí vědci z Vysokého učení technického v Brně na vývoj automatického detekčního systému pro diabetickou retinopatii a pro odstranění vlivu onemocnění kůže na rozpoznávání otisků prstů. Retinopatie je onemocnění, při kterém dochází vlivem vysokého obsahu cukru v krvi k poškození cév oční sítnice. Vyšší riziko rozvoje různých forem této nemoci mají pacienti s cukrovkou.

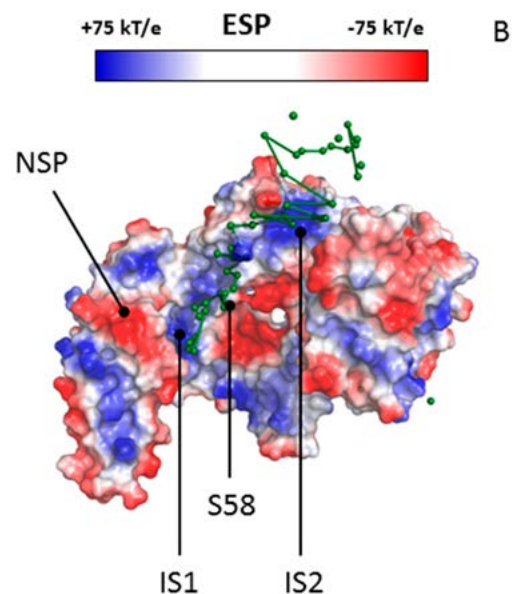
Cílem projektu Jana Tinky a jeho týmu je vytvořit detekční systém využívající algoritmy strojového učení, jehož používání bude snadné a využívat jej budou oční specialisté i pacienti. Ve spolupráci s dermatology rovněž vyvíjí systém pro detekci, lokalizaci a rozpoznání poškození otisků prstů.

Ing. Petr Strakoš, Ph.D. a Ing. Lubomír Říha, Ph.D.
IT4Innovations

VÝVOJ KNIHOVEN A NÁSTROJŮ LABORATOŘE PRO VÝZKUM INFRASTRUKTURY

Kolegové z Laboratoře pro výzkum infrastruktury IT4Innovations získali téměř 1,5 milionu jádrohodin pro vývoj nástrojů, které používají uživatelé našich superpočítačů pro výzkum. Klíčovými tématy projektu jsou energetická efektivita v HPC, vývoj numerické knihovny ESPRESO a vizualizačních nástrojů.

Přidělené výpočetní zdroje využije výzkumná skupina k analýze chování nových aplikací a jejich dynamickému ladění s cílem snížit spotřebu energie při jejich spuštění na superpočítači. U knihovny ESPRESO, vlajkové lodi našeho výzkumu, bude řešeno například vylepšení výkonu při spuštění na jednom výpočetním uzlu a nasazení na systémech s grafickými akcelerátory. Co se vizualizačních nástrojů týká, chtějí kolegové vytvořit open source nástroj pro vizualizace vědeckých dat, který bude dostupný uživatelům naší infrastruktury. Vizualizační nástroj bude založený na populární 3D sadě softwaru Blender, konkrétně na jeho verzi 2.80, která má být vydána v 1. čtvrtletí letošního roku.



Konzervovaná asociační dráha fosforylovaných partnerů do primárního vazebného místa (IS1) 14-3-3 proteinu je znázorněna zeleně. Obrázek přebrán z publikace NAGY, G., C. OOSTENBRINK, J. HRITZ a Y. Koby LEVY: Exploring the Binding Pathways of the 14-3-3 ζ protein: Structural and Free-energy Profiles Revealed by Hamiltonian Replica Exchange Molecular Dynamics with Distancefield Distance Restraints. PLOS ONE. 2017, 12(7). DOI: 10.1371/journal.pone.0180633.

RNDr. Mgr. Jozef Hritz, Ph.D.
Masarykova univerzita

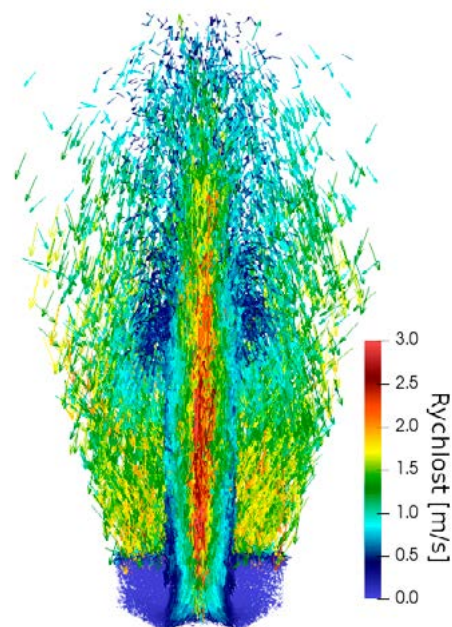
VÝPOČETNÍ CHARAKTERIZACE VOLNÝCH ENERGIÍ VYBRANÝCH PROTEINŮ II

Již sedmý projekt doktora Hritze z Masarykovy univerzity získal výpočetní zdroje IT4Innovations. Superpočítače využívá například pro studium komplexů proteinů 14-3-3 a tyrozin hydroxylázy (TH).

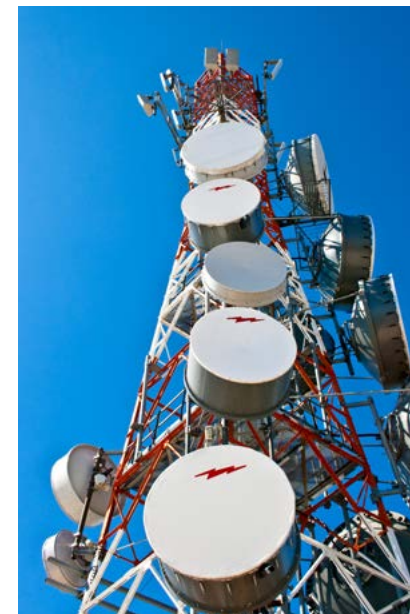
Jeho projekt podaný v 15. veřejné grantové soutěži získal více než 1,5 milionu jádrohodin. Cílem výzkumu je odhalit změny strukturální a volné energie, které jsou klíčové pro vznik komplexů proteinů. Jakékoliv narušení interakcí zásadních pro vznik těchto komplexů může vést k řadě patologických stavů.

Jeho výzkumná skupina se zaměřuje i na TH, enzym důležitý pro lidský mozek. Komplex TH/14-3-3 totiž reguluje hladinu dopaminu, látky, která je důležitá pro přenos vzruchů, a hraje významnou roli při vývoji Parkinsonovy choroby. Kombinací výpočetních simulací na superpočítači s experimentálními technikami (např. nukleární magnetická rezonance a kryoelektronová mikroskopie) lépe porozumí dynamickým vlastnostem a termodynamice shlukování proteinů.

Výzkumný tým doktora Hritze již například zjistil pomocí výpočetních metod se zesíleným vzorkováním, že 14-3-3 protein musí pro vytvoření komplexu zaujmout přechodový konformační stav, který byl do té doby neznámý. Dále zjistili konzervovanou asociační dráhu, kterou se klientské proteiny po jejich fosforylaci dostávají do své finální vazebné konformace. Tyto znalosti je možné využít jak při objasnění efektu mutací podél této asociační dráhy, tak i pro její využití jakožto cílového místa pro navrhované léčiva modulující tuto skupinu 14-3-3 komplexu.



Ukázka typického pohybu tablet
v zařízení Wurster



Ing. Jiří Kolář
Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

FLUIDIZAČNÍ REŽIMY VE FLUIDNÍM POTAHOVACÍM ZAŘÍZENÍ WURSTER

Pro potahování malých tablet se ve farmacii nejčastěji využívá fluidní potahovací zařízení typu Wurster. S jeho pomocí se na tablety nanáší různé vrstvy s rozličnými funkcemi. Některé vrstvy mohou obsahovat například aktivní farmaceutickou složku (AFS), jiné zase chrání AFS před rozkladem nebo prodlužují účinek léčiva. Při potahování tablet je však obtížné nastavit provozní parametry tak, aby byl získán produkt ve farmaceutické kvalitě.

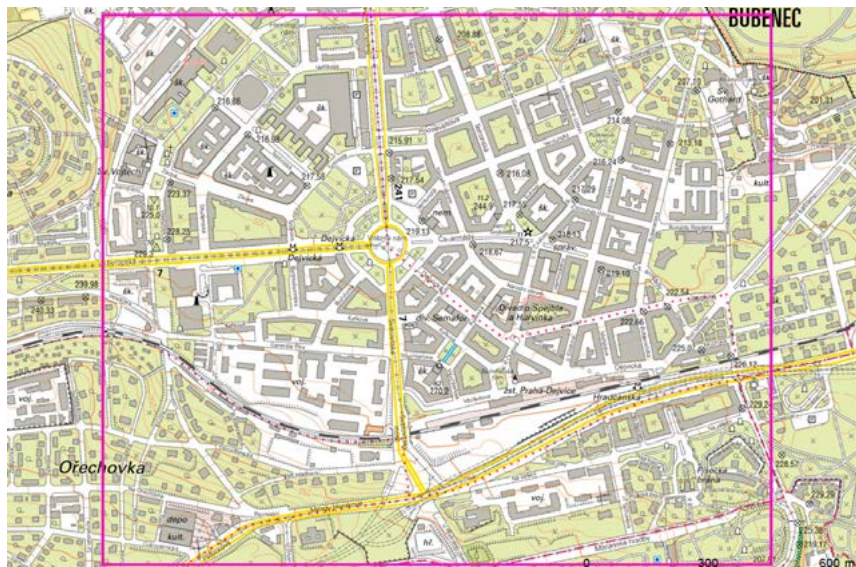
Cílem projektu Jiřího Koláře z Vysoké školy chemicko-technologické v Praze, jenž získal téměř 3 miliony jadrohodin, je analyzovat závislost fluidizačních režimů na nastavení provozních parametrů zařízení Wurster, a to pomocí výpočetně náročných simulací. Následně se pokusí najít optimální zjednodušení tohoto modelu, který by pomohl urychlit a snížit náklady na vývoj léků.

prof. Ing. Miroslav Vozňák, Ph.D.
IT4Innovations a Fakulta elektrotechniky a informatiky VŠB-TUO

ANALÝZA PŘÍČIN A PROGNÓZY UDÁLOSTÍ PCRF V SÍTÍCH 4G A 5G

Náš kolega prof. Miroslav Vozňák a jeho výzkumný tým z Fakulty elektrotechniky a informatiky VŠB – Technické univerzity Ostrava získal téměř půl milionu jadrohodin pro projekt, jehož cílem je zvýšit spolehlivost a snížit náklady na udržování nových technologií zajišťujících provoz 4G a 5G mobilních sítí. Tento výzkum probíhá na základě spolupráce s centrem kompetence pro vývoj sítí provozovaným T-Mobile Czech Republic a.s. Společně chtějí nalézt klíčové zdroje dat, shromáždit informace o technických problémech a identifikovat ukazatele výkonu právě pro zvýšení spolehlivosti sítě a zabránění problémům v síti.

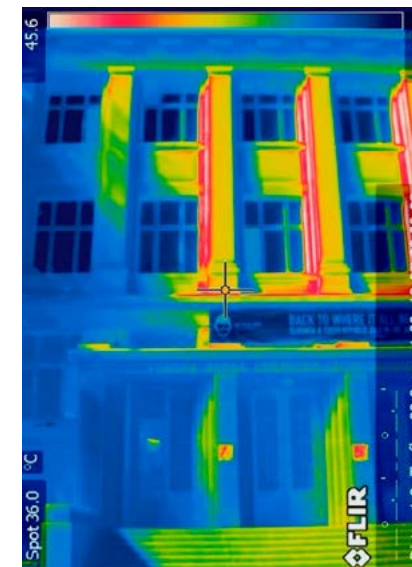
Výsledky zpracování dat pomocí superpočítače budou sloužit pro plánované využití strojového učení například pro odhalení a klasifikaci anomálií v mobilních sítích.



Výpočetní oblast modelu PALM-4U
v Praze-Dejvicích



Fotografie budovy ve viditelném
a infračerveném spektru



Mgr. Ondřej Vlček
Český hydrometeorologický ústav

VALIDACE MODELU PALM-4U S POZOROVACÍ KAMPANÍ V PRAZE-DEJVICÍCH

PALM-4U (www.palm4u.org) je mikroměřítkový model, který umožňuje provádět detailní simulace meteorologických podmínek a kvality ovzduší v městských oblastech v rozlišení jednotek metrů. S jeho pomocí je snadnější modelovat stále častější extrémně vysoké teploty v sídelních aglomeracích (efekt tepelného ostrova města) a následné zvýšené znečištění ovzduší. Kromě toho umožňuje model komplexní hodnocení dopadů urbanistických scénářů na mikroklima i kvalitu ovzduší.

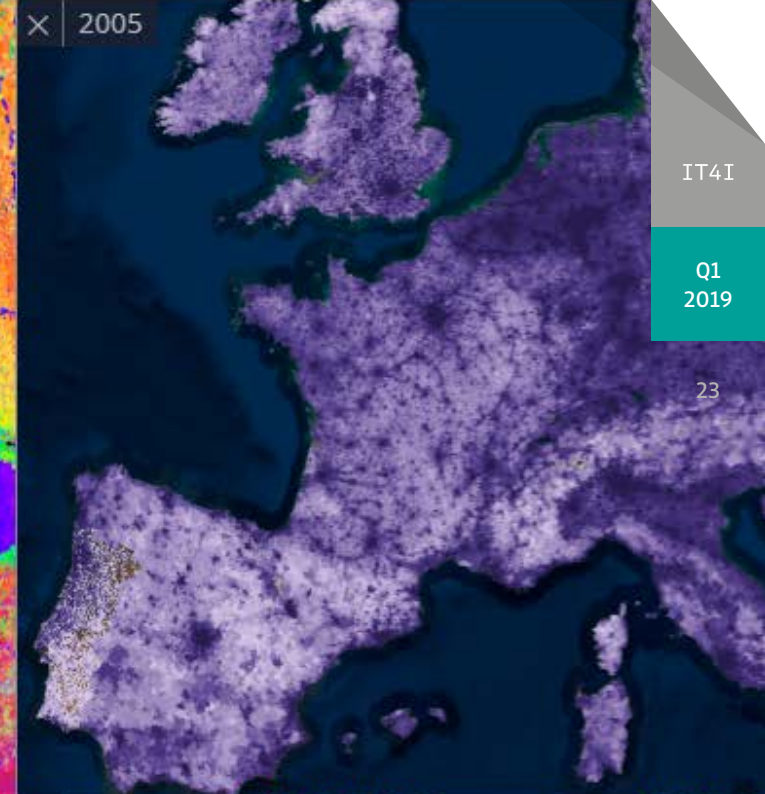
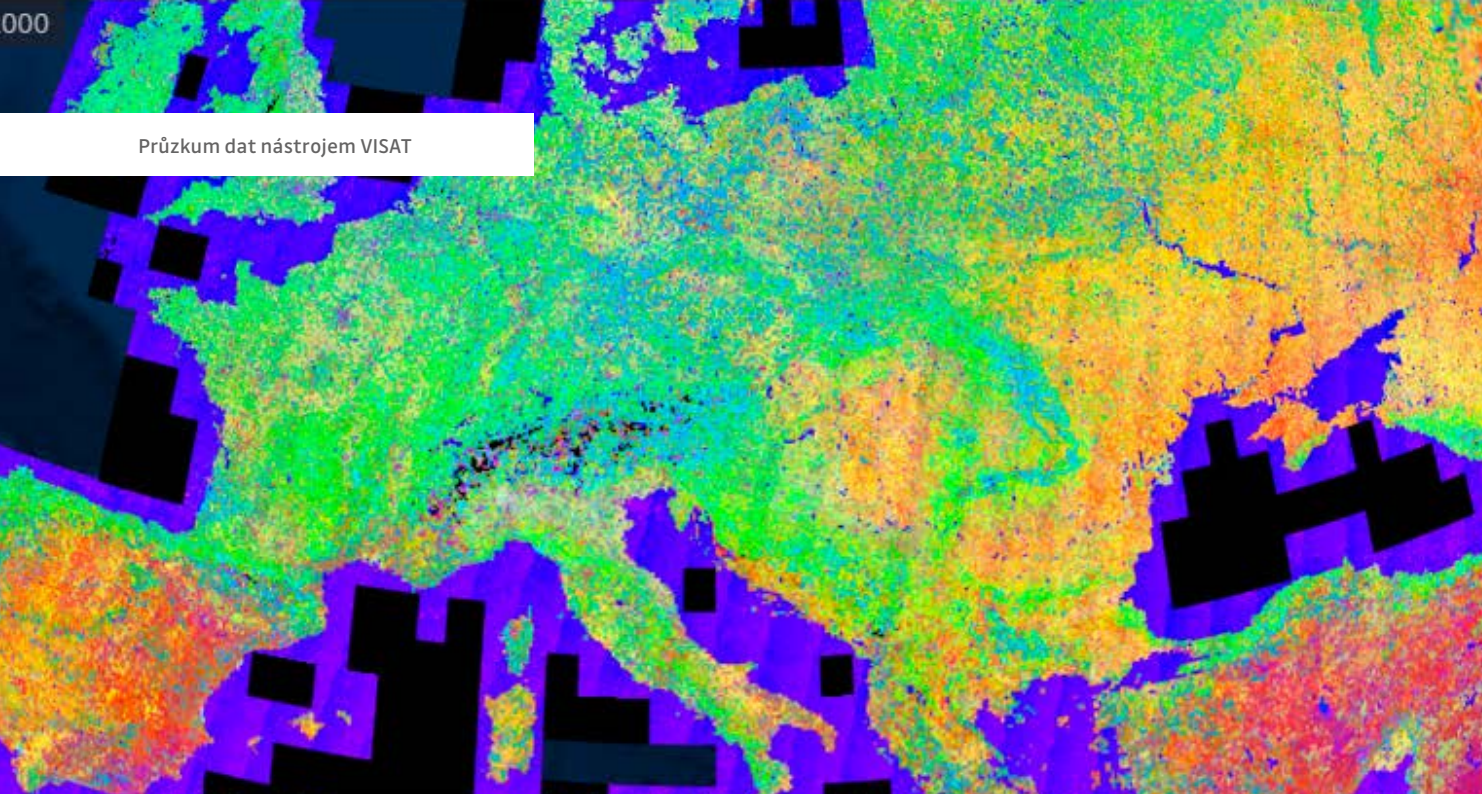
Cílem projektu Ondřeje Vlčka z ČHMÚ a jeho kolegů z Univerzity Karlovy a Akademie věd ČR je provést podrobnou validaci nejnovějšího modelu PALM-4U v podmínkách Prahy s využitím poznatků z pozorovacích kampaní v Praze-Dejvicích. Ty zajistili odborníci z ČHMÚ ve dvou čtrnáctidenních cyklech v létě a v zimě roku 2018, během kterých kromě meteorologických podmínek a kvality ovzduší v uličních kašonech měřili i teploty povrchů budov infračervenou kamerou a tepelné toky fasádami. K dispozici budou mít i data z meteorologických stanic v Praze.

Na validaci modelu spolupracují s partnery z německého projektu MOSAIK (Plánování měst založené na modelu a jeho využití v oblasti změny klimatu) a získali na ni více než 1 milion jádrohodin v naší 15. veřejné grantové soutěži.

Tento výzkum je financován z projektu Operačního programu Praha – pól růstu ČR „Urbanizace předpovědi počasí, kvality ovzduší a klimatických scénářů pro Prahu“ (CZ.07.1.02/0.0/0.0/16_040/0000383).

000

Průzkum dat nástrojem VISAT

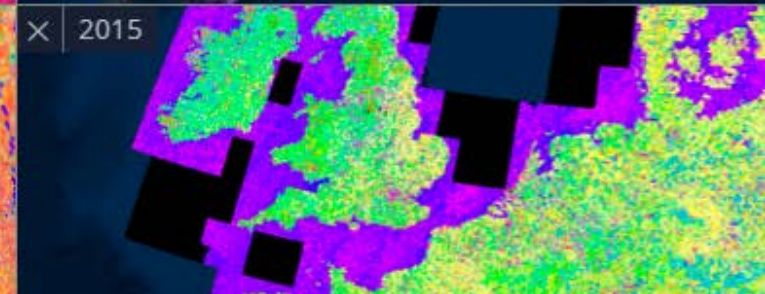
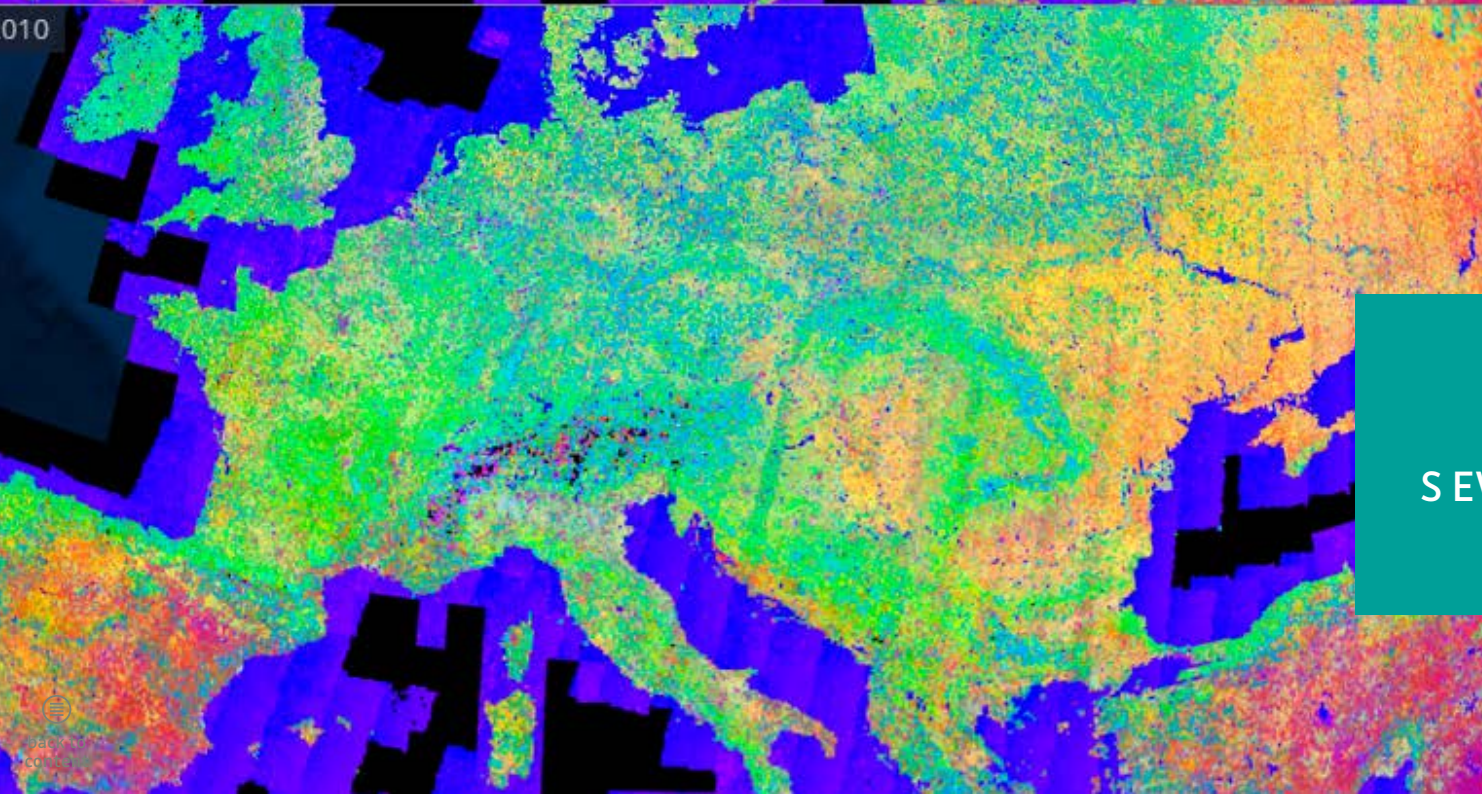


IT4I

Q1 2019

23

010



POKRAČUJEME VE SPOLUPRÁCI
S EVROPSKOU KOSMICKOU AGENTUROU

Evropská kosmická agentura (ESA) zahájila v roce 2014 program „EO Exploitation Platforms (EPs)“, jehož cílem je vytvořit vzájemně propojené tematicky orientované platformy (Thematic Exploitation Platforms, TEP). TEP reprezentuje společné virtuální prostředí s jedním uživatelským rozhraním, které poskytuje přístup k datům získaným pozorováním Země, k jejich úložištím a analytickým nástrojům pro jejich zpracování.

Jednou z platform je Urban TEP, kterou provozuje mezinárodní konsorcium pěti partnerů: Německé středisko pro letectví a kosmonautiku, společnost Brockmann Consult (BC) GmbH (Německo), Terradue Srl (Itálie), IT4Innovations národní superpočítačové centrum a firma Gisat, s.r.o. (Česká republika).

Platforma Urban TEP je zaměřena na využití moderních informačních technologií, které dokážou překlenout mezeru mezi technologicky orientovaným sektorem zabývajícím se pozorováním Země a splněním informačních potřeb environmentální vědy, plánování a politiky. Ke klíčovým součástem systému umožňujícímu

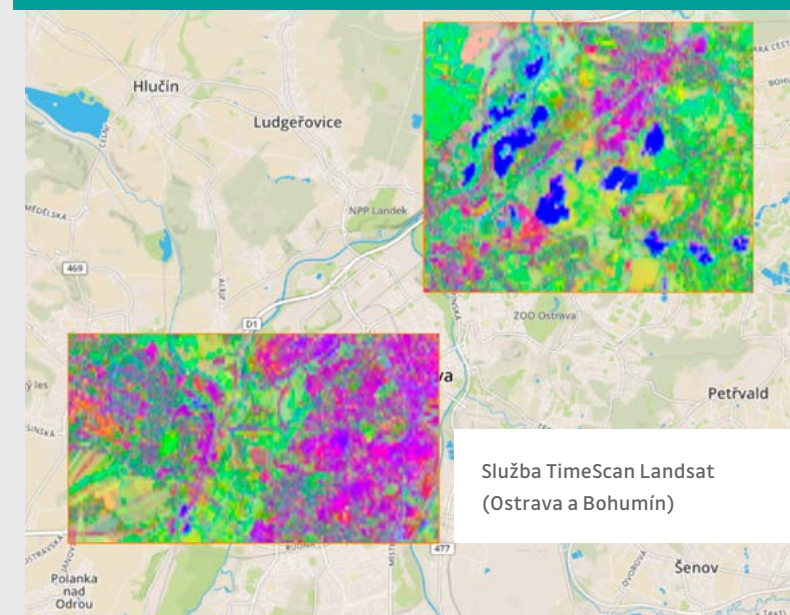
takové využití patří otevřený webový portál propojený s vysokorychlostními výpočetními infrastrukturami. Portál poskytuje přístup nejen k datům, jejich zpracování, analýze a vizualizaci, ale i k vývoji a sdílení algoritmů, produktů a službám. To vše prostřednictvím specializovaných síťových a komunikačních nástrojů. Platforma Urban TEP je jedinečná v používání dat z pozorování Země a geoprostorové analýzy – uživatelům umožňuje snadno využívat a generovat tematické informace podle jejich požadavků.

Na konci roku 2018 vstoupil projekt Urban TEP do fáze zaměřené na systematické vylepšování a zefektivňování výkonu platformy a jejích funkcí. Pro dosažení plně funkční a udržitelné platformy se projekt aktuálně zaměřuje na tvorbu nových tematických aplikací tzv. na míru, pro stávající pilotní uživatele platformy, z nichž by se v budoucnu měli stát platící zákazníci této platformy.

Případy využití zahrnují například „mapovací službu UAV“ (Unmanned Aerial Vehicle) pro Světovou banku, „vystavení obyvatel jihovýchodní Asie nebezpečí“ pro Organizaci

spojených národů, „Mapování slumových oblastí“ pro Světový potravinový program a „Modelování distribuce populace a prostorových demografických map“ pro Afriku a Asii a tým WorldPop.

urban-tep.eu





PROJEKT POP2

O centru excelence zaměřeném na optimalizaci výkonu a produktivitu aplikací (POP2)

Na konci roku 2018 začal projekt POP2 financovaný programem Evropské unie Horizont 2020. Navazuje na a rozšiřuje aktivity úspěšně realizované v rámci Centra excelence POP od roku 2015. Jeho hlavní náplní je asistence s analýzou paralelních aplikací, identifikace problémových částí kódů a doporučení optimalizačních technik vedoucích k vyššímu výkonu a lepší škálovatelnosti dané aplikace.

POP2 bude trvat do listopadu 2021 a jeho koordinátorem je Superpočítačové centrum v Barceloně (BSC). Na řešení projektu se bude podílet dalších 7 partnerů: německá Univerzita ve Stuttgartu, Forschungszentrum Jülich, Univerzita RWTH Aachen, britská firma Numerical Algorithms Group, francouzská společnost Teratec, Univerzita Versailles Saint Quentin en Yvelines a IT4Innovations národní superpočítačové centrum. Za IT4Innovations je hlavním řešitelem projektu Lubomír Říha.

pop-coe.eu



PROJEKT ExCAPE

Úspěšné zakončení projektu ExCAPE, jehož cílem bylo vyvinout počítačové programy, které dokážou najít nové léky s pomocí exascale výpočetních systémů

Vývoj nového léku je zdlouhavý a finančně náročný proces. Trvá průměrně 10 let a stojí přibližně 1 miliardu eur. Výkon superpočítačů na úrovni exascale umožní drahé a časově náročné laboratorní testy nahradit přesnějšími, rychlejšími a méně nákladnými počítačovými simulacemi. Cílem projektu ExCAPE, financovaného programem pro výzkum a inovace Evropské unie – Horizont 2020, bylo navrhnout a napsat počítačové programy, které dokážou s pomocí exascale výpočetních systémů najít nové léky.

V projektu jsme se podíleli na vývoji moderních škálovatelných algoritmů a jejich vhodných implementací.

Příslušné algoritmy byly vyvíjeny pro řešení komplexních úloh z oblasti farmakologie s ohledem na nutnost zpracování velkého množství dat potřebného pro průmyslový vývoj léčiv.

V rámci ExCAPE byl našimi kolegy vyvinut HyperLoom, software pro efektivní spouštění vědeckotechnických úloh skládajících se z mnoha navzájem propojených dílčích výpočtů na superpočítačích. Ten se dokonce dostal v roce 2018 do hledáčku iniciativy Evropské komise, jejímž cílem je identifikovat evropské inovátory a inovace a s pomocí hlasování veřejnosti vybrat finalisty soutěže o nejlepší inovaci.



Na webových stránkách programu Evropské komise „Future and Emerging Technologies“ byl publikován článek o projektu ExCAPE: www.fetfx.eu/story/supercomputer-will-discover-future-medicines

Propagační video projektu ExCAPE: vimeo.com/256141454



NATÁČENÍ PRO EURONEWS



Televizní stanice Euronews u nás natáčela reportáž

Na začátku února 2019 u nás natáčela panevropská zpravodajská televizní stanice Euronews v rámci programu Inteligentní regiony, který přináší zpravodajství o významných projektech s vysokou hodnotou pro občany Evropské unie.

Vít Vondrák, ředitel IT4Innovations, řekl pro Euronews:

„Snažíme se firmám pomoci, aby využívaly vysoce výkonné výpočetní technologie pro svůj byznys. Poskytujeme odborníky i zkušenosti a rovněž jim pomáháme v adopci těchto nových technologií pro řešení jejich problémů.“

Tomáš Kozubek, vědecký ředitel IT4Innovations, sdělil Euronews:

„S pomocí superpočítačů jsou výpočty mnohem rychlejší, což je velmi důležité pro vývoj nového produktu. Pokud chcete být inovativní, musíte být co nejrychlejší.“

Součástí reportáže bylo natáčení ve dvou firmách, kterým naše superpočítače pomáhají inovovat. Jednalo se o společnost Invent Medical Group s.r.o., které pomáháme při vývoji kraniálních ortéz, a o firmu BORCAD cz s.r.o., se kterou spolupracujeme na vývoji vlakových sedadel.

Aleš Grygar, spoluzakladatel a šéfdesignér společnosti Invent Medical Group, vysvětlil Euronews, kolik času dokáže superpočítač ušetřit:

„Všechny naše produkty jsou v podobě 3D dat v počítači. Vytváření těchto dat, či jejich kreslení, trvá 8 hodin. Superpočítač je umí vygenerovat za 8 sekund.“

Radomír Bělík, konstruktér firmy Borcad cz, řekl pro Euronews:


„Pro nás důležitou výhodou použití superpočítače je, že víme, jak změnit hlavní konstrukci sedadel a zesílit ji, jak optimalizovat proces svařování, tloušťku trubek či jednotlivé části sedadel.“



Více se dozvíte v reportáži:

www.euronews.com/2019/03/14/supercomputer-supercharging-innovation-in-the-czech-republic





KDE JSTE NÁS MOHLI POTKAT
A CO DALŠÍHO SE U NÁS UDÁLO

V pondělí 5. března 2019 u nás proběhla **Digitální revoluce sdružení CzechInno**, na které vystoupili naši kolegové například s příspěvkými zaměřenými na případové studie a HPC jako službu prostřednictvím platformy HEAppE. Akce se zúčastnilo celkem 50 lidí.



czechinno.cz/digitalni-revoluce-cz/ostrava



V polovině března jsme se zúčastnili Kariéry PLUS, veletrhu pracovních nabídek, který organizuje VŠB – Technická univerzita Ostrava. Veletrhu se účastní více než 100 firem a 3 000 návštěvníků.



Dále u nás proběhlo **setkání partnerů projektu InnoHPC** (Superpočítače pro efektivní inovace v Podunají), jehož cílem je umožnit podnikům z Podunají a akademickým i čistě výzkumným institucím rozvíjet spolupráci v oblasti vysoce výkonných výpočtů, a to v nadnárodním měřítku.

Na setkání jsme přivítali 25 účastníků ze Slovinska, Rakouska, Rumunska, Bulharska, Srbska, Chorvatska, Slovenska, Černé hory a Maďarska. Projednány byly dokončené a běžící úkoly. V rámci projektu jsme například vyvinuli webovou platformu, která umožňuje malým a

středním podnikům vzdálený přístup k HPC infrastrukturám. V září a říjnu 2018 proběhla výzva k zapojení podniků z automobilového a elektronického průmyslu do pilotního testování této platformy. S vybranými podniky z Podunají naváží poskytovatelé HPC, a tedy i IT4Innovations, spolupráci a pomohou jim řešit jejich problémy.

www.interreg-danube.eu/approved-projects/innohpc



Na konci března jsme pořádali kurz **Paralelní vizualizace vědeckých dat pomocí Blenderu**, který absolvovalo 25 účastníků. Tento kurz, vedený našimi kolegy Petrem Strakošem, Alenou Ješko a Milanem Jarošem z Laboratoře pro výzkum infrastruktury, byl zaměřen na vizualizaci velkých datových souborů ze simulací různých fyzikálních jevů (například dynamiky tekutin, strukturálních analýz apod.). Účastníci kurzu se naučili pracovat s programem Blender (jeho nejnovější verzí 2.80) a pro práci s vědeckými daty jim byl představen plug-in Covise Nodes. Kurz byl ukončen renderováním scény na superpočítači Salomon.



Nabídku našich kurzů najdete na training.it4i.cz/kurzy-it4innovations



