



Výsledky 10. Veřejné grantové soutěže

Od února 2017 do března 2017 si mohli zájemci o výpočetní čas podat žádost v rámci již 10. Veřejné grantové soutěže. Výsledky soutěže byly ohlášeny v květnu. Uchazeči z českých akademických a výzkumných institucí si zažádali celkem o 78 757 000 jádrohodin. Alokační komise rozdělila úspěšným žadatelům 55 555 000 jádrohodin výpočetní kapacity. Největší část výpočetních prostředků byla přidělena, stejně jako v předchozí veřejné grantové soutěži, projektům z oblasti materiálových věd (58 %) a biověd (22 %). Alokované zdroje jsou uživatelům k dispozici od května 2017 do února 2018.

[Číst dál](#)



Obnovení infrastruktury IT4Innovations

Nově získaný projekt IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale umožní upgradovat naši superpočítačovou infrastrukturu a podpoří také na ni navázaný výzkum.

[Číst dál](#)



Příklad úspěšného výzkumu našich uživatelů

Genu mezinárodní konference DATE 2017 za nejlepší interaktivní prezentaci získali naši uživatelé z Vysokého učení technického v Brně.

[Číst dál](#)



O konferenci High Performance Computing in Science and Engineering 2017

Rozhovor s Radkem Tezaurem, jedním ze zvaných přednášejících

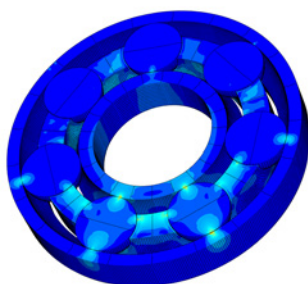
[Číst dál](#)



Reportáž z International Supercomputing Conference 2017 a zhodnocení aktuálního žebříčku TOP500

Žebříček TOP500 nejrychlejších superpočítačů na světě byl v červnu aktualizován. Jak se změnilo umístění superpočítačových center od listopadu 2016?

[Číst dál](#)



TETRAMAX a ClouDiFacturing

Představujeme vám dva nové mezinárodní projekty H2020, na kterých budeme spolupracovat.

[Číst dál](#)



IT4Innovations se stalo školícím centrem PRACE

Nabídka našich kurzů, které budou podpořeny PRACE v akademickém roce 2017/18

[Číst dál](#)



Cenu Josepha Fouriera obdržel Jan Zapletal

Náš kolega získal první místo v celonárodní soutěži o Cenu Josepha Fouriera pro nejlepší výzkum v rámci doktorského studia z oblasti informatiky a výpočetních věd.

[Číst dál](#)

#&00011#@&10101#\$110001010!@%0%\$0%\$#@##&#*!@!&00011#@&10101#\$1110001010!@%0%\$0%\$#@##&#*!@!#\$%*#&0110&\$%\$01@%\$##&#*!1011110

11. kolo veřejné grantové soutěže

Opět máte možnost požádat si o výpočetní čas na našich superpočítačích. Žádosti přijímáme do **27. července 2017**.

Celkem rozdělíme 48 000 000 jádrohodin.

Alokované zdroje budou uživatelům k dispozici od **22. září 2017 do 19. června 2018**.

[Více informací](#)

POZVÁNKY

Noc vědců

Přijďte se v pátek **6. 10. 2017 od 17:00** podívat na nejvýkonnější český superpočítač Salomon.

Představíme vám, jak funguje a také k čemu je vlastně dobrý. Hlavním tématem letošní Noci vědců je mobilita.

Podívejte se na fotografie z první **Noci vědců** u nás.

Nenechte si tuto výjimečnou událost utéct, zapište si datum **6. října 2017** do svých kalendářů a určitě nás navštivte.

Těšíme se na Vás.

KRÁTCE

01 Publikace Přehled roku 2016

02 Fotografie z konference High Performance Computing in Science and Engineering 2017

03 Hledáme nové kolegy do týmu superpočítačového centra



VÝSLEDKY 10. VEŘEJNÉ GRANTOVÉ SOUTĚŽE

Desáté kolo veřejné grantové soutěže bylo vyhlášeno na konci ledna 2017 a výsledky byly ohlášeny v květnu. Uchazeči si zažádali celkem o 78 757 000 jádrohodin. Mezi 50 úspěšných projektů bylo rozděleno 55 555 000 jádrohodin výpočetní kapacity.

Stejně jako v předchozí veřejné grantové soutěži byla největší část výpočetních prostředků, a to 44 495 000 jádrohodin, přidělena projektům z oblasti materiálových věd a biověd, což je 80 % všech v tomto kole přidělených prostředků.

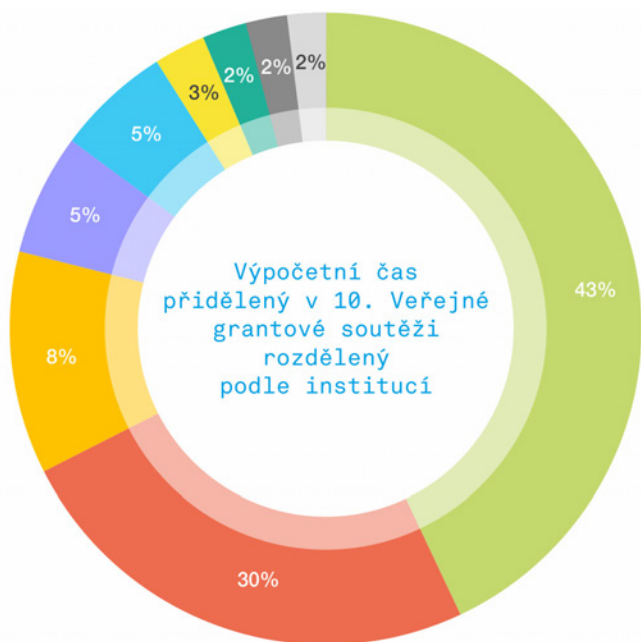
První tři největší projektové alokace spadají do oboru **materiálových věd**. Největší alokace, 11 069 000 jádrohodin, byla přidělena na výzkum našeho kolegy Dr. Dominika Leguta z oblasti nových supravodičů. prof. Pavel Hobza z Ústavu organické chemie a biochemie Akademie věd České republiky (AV ČR) získal druhou nejvyšší alokaci, 7 425 000 jádrohodin, pro výzkum léčiv. Třetí nejvyšší alokace, 5 187 000 jádrohodin, byla přidělena projektu prof. Mojmíra Šoba ze Středoevropského technologického institutu, CEITEC MU, Masarykovy univerzity v Brně, který se zabývá vývojem nových pokročilých materiálů.

Tři nejvyšší alokace z oboru **biověd** získaly projekty těchto vědců. Dr. Lubomír Rulišek z Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR získal 3 155 000 jádrohodin na výzkum z oboru výpočetní biochemie, a to struktury proteinů. Mgr. Ondřej Gutten, taktéž z Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR, obdržel na výzkum interakcí proteinů s kovovými ionty 1 730 000 jádrohodin. Projektu Dr. Jiřího Jaroše z Vysokého učení technického v Brně bylo alokováno 2 678 000 jádrohodin na výzkum predikce šíření ultrazvukových vln v biologických tkáních.

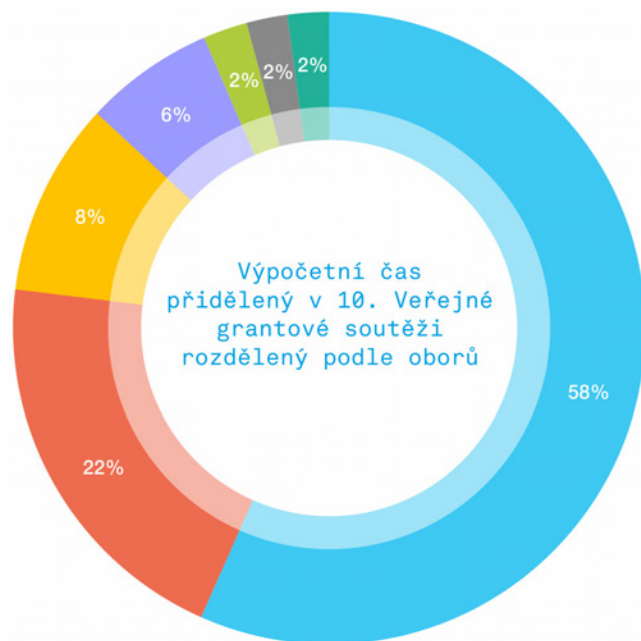
Co se týká ostatních výzkumných oborů, výpočetní čas získalo sedm projektů z oboru aplikovaná matematika (3 projekty žadatelů z IT4Innovations) a sedm projektů zabývajících se výzkumem o Zemi (5 projektů žadatelů z Univerzity Karlovy). Výpočetní čas v celkové výši 5 383 000 jádrohodin byl alokován i patnácti projektům z oblasti fyziky (3 projekty AV ČR), inženýringu (například projekt Výzkumného a zkušebního leteckého ústavu) a informatiky (dva projekty Vysokého učení technického v Brně).

Největší část výpočetních prostředků byla přidělena **Akademii věd České republiky**. Jedenácti projektům bylo alokováno 23 564 000 jádrohodin, což je téměř 43 % celkového rozděleného výpočetního času. Pracoviště AV ČR, která u nás v rámci 10. Veřejné grantové soutěže počítají, jsou Ústav organické chemie a biochemie, Ústav výzkumu globální změny, Fyzikální ústav, Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského a Ústav fyziky plazmatu. Projekty AV ČR jsou především z oboru biověd, materiálových věd a fyziky.

Celkem 12 projektů výzkumných pracovníků z **VŠB – Technické univerzity Ostrava, a především tedy z IT4Innovations**, získalo výpočetní čas ve výši 16 638 000 jádrohodin, což je 30 % rozdělovaného výpočetního času. Projekty jsou hlavně z oboru aplikované matematiky, materiálových věd a informatiky. Deset projektů žadatelů z **Univerzity Karlovy** získalo dohromady 4 586 000 jádrohodin. Polovina projektů je přitom z oboru vědy o Zemi.



- Ústavy Akademie věd České republiky (5)
- VŠB - Technická univerzita Ostrava (9 projektů řešitelů z IT4Innovations)
- Univerzita Karlova
- Vysoké učení technické v Brně
- CEITEC
- Vysoká škola chemicko-technologická v Praze
- Fakultní nemocnice Hradec Králové
- České vysoké učení technické v Praze
- Ostatní (4)



- Materiálové vědy (12 projektů)
- Biovědy (9 projektů)
- Aplikovaná matematika (7 projektů)
- Fyzika (5 projektů)
- Vědy o Zemi (7 projektů)
- Inženýring (5 projektů)
- Informatika (5 projektů)

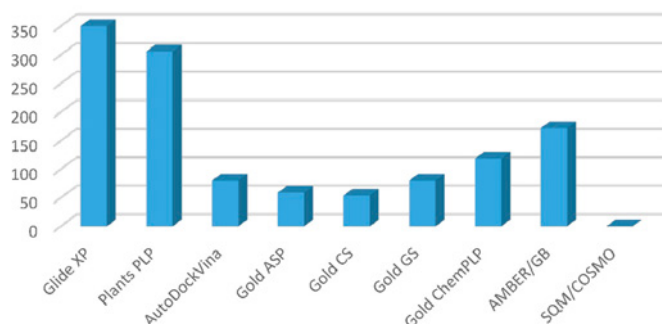
Představujeme vybrané projekty, které získaly v 10. Veřejné grantové soutěži výpočetní čas

prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc., FRSC

(Ústav organické chemie a biochemie Akademie věd ČR): Počítačové návrhy nových léků

Prof. Pavel Hobza z Ústavu organické chemie a biochemie Akademie věd České republiky se zabývá počítačovými návrhy nových léků. Jeho projekt „In silico drug design“ získal 7 425 000 jádrohodin v rámci 10. Veřejné grantové soutěže. Získané výpočetní prostředky využije tým prof. Pavla Hobzy na vývoj metod pro virtuální hledání léčiv. Tento přístup využívá molekulární modelování (dokování a skórování) k identifikování vhodných látek pro vývoj nových léčiv a je prakticky využíván farmaceutickým průmyslem. Kvůli vysokým požadavkům na rychlost výpočtů je však stále spolehlivost těchto metod nízká. S pomocí našich supervýkonných počítačů dokáží vědci z týmu prof. Hobzy předvídat pomocí přesných kvantově-chemických výpočtů jak strukturu léku v aktivním místě proteinů tak i jejich schopnost se vázat, což napovídá o jejich léčebných účincích. Nedávno publikovaný přístup je v současné době využíván ve spolupráci s předními farmaceutickými společnostmi.

Total Number of False Positives

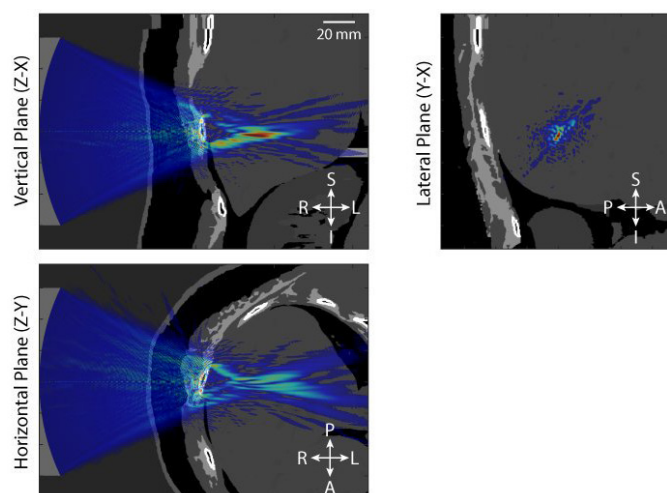


Počet falešně pozitivních výsledků pro různé komplexy proteinů s ligandy jak pro používané skórovací funkce tak i pro nově navrženou funkci založenou na kvantověchemických výpočtech (SQM/COSMO)

Ing. Jiří Jaroš, Ph.D. (Vysoké učení technické v Brně):

Experimentální ověření výpočetních simulací šíření ultrazvuku v živých tkáních za nelineárních podmínek

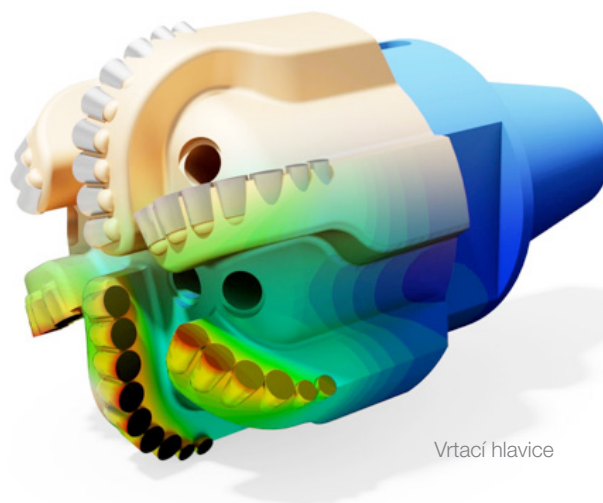
Na výzkum v oblasti výpočetních simulací šíření ultrazvuku v živých tkáních získal výzkumný tým Dr. Jiřího Jaroše 2 678 000 jádrohodin. Vědci se zabývají cíleným ultrazvukem, který nachází uplatnění v neinvazivní terapii pro léčení rakoviny a dalších nemocí. Cílený ultrazvuk pracuje na principu vysílání soustředěných paprsků ultrazvukových vln o vysoké intenzitě do živé tkáně. Lékaři tak mohou pacienta zbavit nádoru bez invazivního zákroku (chirurgické operace). Výsledky ultrazvukové operace nicméně ovlivňují mnohé faktory, jako například přítomnost kostí, velkých cév, nebo tuková vrstva obalující orgány. Tyto faktory vedou k oslabení, rozptýlení a odrazům ultrazvukové vlny, která pak nemá dost energie v požadovaném místě. Přidělenou alokaci proto využije výzkumný tým z Vysokého učení technického v Brně pro hodnocení přesnosti a optimalizaci modelů šíření ultrazvuku v živých tkáních.



Sonikace v oblasti jater, kde je vidět silná distorze způsobená žebry

**Ing. Tomáš Brzobohatý, Ph.D. (IT4Innovations):
ESPRESO FEM – Modul přenosu tepla**

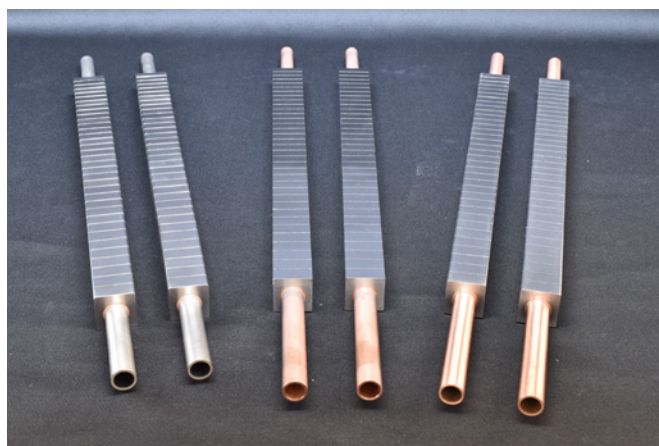
Projekt Dr. Tomáše Brzobohatého „ESPRESO FEM – Heat Transfer Module“ získal 2 425 000 jádrohodin. Výzkumný tým se bude zabývat vývojem a testováním komplexní a masivně paralelní knihovny založené na metodě konečných prvků, pro simulaci problémů přenosu tepla a jejich optimalizaci. Součástí knihovny je masivně paralelní iterační řešič ESPRESO vyvíjený na IT4Innovations.



Vrtací hlavice

**Mgr. Michael Komm, Ph.D. (Ústav fyziky plazmatu Akademie věd České republiky):
PIC simulace distribuce tepelného toku na komponenty stěn termojaderného reaktoru a experimenty v tokamaku WEST**

Vědci z Ústavu fyziky plazmatu Akademie věd České republiky se věnují výzkumu spojenému s mezinárodním dlouhodobým úsilím o ovládnutí termojaderné fúze. Projekt Dr. Michaela Komma získal 300 000 jádrohodin v rámci 10. Veřejné grantové soutěže a zabývá se modelováním depozice tepla neseného částicemi plazmatu na komponenty první stěny (plasma-facing components, doslovně části reaktoru dívající se na plazma). Výzkum je zaměřený na experimenty na tokamaku WEST, který se nachází v Cadarache v jižní části Francie, a ve kterém se budou testovat prototypy komponentů určených pro budovaný tokamak ITER. ITER by měl jako první fúzní zařízení produkovat více energie, než kolik spotřebuje, což je ovšem spojeno s extrémními tepelnými toky, které jsou na hranici materiálových možností komponent první stěny. Cílem projektu Akademie věd ČR je zjistit, zda je porozumění interakce plazmatu s komponentami první stěny dostatečně přesné pro úspěšný provoz termojaderného reaktoru.



Prototypy aktivně chlazených komponent divertoru pro tokamak ITER, které budou testovány v tokamaku WEST

Výsledky 10. kola Veřejné grantové soutěže najdete na:
<http://www.it4i.cz/jak-ziskat-vypocetni-cas/vysledky-10-kola-verejne-grantove-souteze/>

OBNOVENÍ INFRASTRUKTURY IT4INNOVATIONS

Nově získaný projekt IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale umožní upgradovat naši superpočítačovou infrastrukturu, podpoří ale také na ni navázaný výzkum.

V současnosti je IT4Innovations jedinou národní výzkumnou infrastrukturou v oblasti High Performance Computing (HPC) v České republice a máme ambice tuto roli hrát i do budoucna. Momentálně provozujeme dva superpočítače. Anselm byl instalován v létě 2013 a má teoretický výkon 94 teraflops. Salomon byl instalován v létě 2015 a jeho teoretický výkon činí 2 petaflops. Superpočítač Salomon je 78. nejvýkonnějším superpočítačem světa a nejvýkonnějším superpočítačem Evropy založeném na první generaci Intel Xeon Phi koprocesorů kódově označovaných Knights Corner (KNC).

V roce 2016 jsme v Operačním programu Výzkum, vývoj a vzdělávání podali žádost o financování projektu „IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale“, jehož cílem je modernizovat stávající superpočítače a podpořit vlastní výzkum. Letos byl projekt doporučen k financování a nyní je administrováno rozhodnutí o poskytnutí dotace. Projekt bychom měli realizovat od září 2017 do srpna 2021. Jeho předpokládané náklady činí přibližně 503 031 000 Kč.

Téměř 80 % nákladů projektu půjde na modernizaci a upgradování stávajících systémů Anselm a Salomon i s nimi související infrastruktury. Systémy budou upgradovány tak, abychom udrželi krok s průmyslově rozvinutými zeměmi na cestě k exascale superpočítačům, které jsou až tisíckrát výkonnější, než jsou současné systémy.

Díky projektu bude podpořen i výzkum vedený prof. Ing. Jaromírem Pištorou, CSc., Ing. Dominikem Legutem, Ph.D. a Mgr. Pavlem Tomančákem, Ph.D. z oblasti modelování fotonických a spinfotonických struktur, návrhu nových progresivních materiálů na základě výpočtu elektronové struktury a analýzy biologických obrazů s využitím HPC. Všechny tyto oblasti jsou velmi progresivní a vyžadují modernizované výpočetní kapacity. Simulace s využitím superpočítačů jsou v současnosti pro výzkum klíčové a jejich význam v příštích letech ještě poroste.





Ocenění mezinárodní konference DATE 2017 za nejlepší interaktivní prezentaci

PŘÍKLAD ÚSPĚŠNÉHO VÝZKUMU NAŠICH UŽIVATELŮ

Cenu mezinárodní konference DATE 2017 za nejlepší interaktivní prezentaci získali naši uživatelé z Vysokého učení technického v Brně

Prof. Ing. Lukáš Sekanina, Ph.D., doc. Ing. Zdeněk Vašíček, Ph.D., Ing. Radek Hrbáček a Ing. Vojtěch Mrázek z výzkumné skupiny Evolvable Hardware (Fakulta informačních technologií Vysokého učení technického v Brně) získali cenu mezinárodní konference Design, Automation and Test in Europe 2017 za nejlepší interaktivní prezentaci.

Konference DATE je jednou z největších a nejprestižnějších celosvětových akcí v oblasti automatizace návrhu výpočetních systémů. Na konferenci DATE 2017, která se konala v březnu 2017 v Lausanne, získala interaktivní prezentace našich uživatelů z Vysokého učení technického v Brně zmíněné ocenění ve velké konkurenci, a to mezi 90ti dalšími interaktivními prezentacemi.

Příspěvek našich uživatelů s názvem „EvoApprox8b: Library of Approximate Adders and Multipliers for Circuit Design and Benchmarking of Approximation Methods“ představil novou knihovnu aproximovaných sčítaček a násobiček, které je možné použít v nízkopříkonových obvodových architekturách např. pro neuronové sítě na čipu nebo Internet věcí. Zajímavostí je, že knihovna byla automatizovaně vygenerována metodami umělé inteligence – pomocí paralelního evolučního algoritmu. Na našich superpočítačích provedli vlastní evoluční návrh, který vyžaduje masivní výpočetní výkon.

Stránka projektu: <http://www.fit.vutbr.cz/research/groups/ehw/approxlib/index.html>



O KONFERENCI HIGH PERFORMANCE COMPUTING IN SCIENCE AND ENGINEERING 2017

Již třetí ročník konference High Performance Computing in Science and Engineering se letos konal 22. – 25. května 2017 na Soláni v Beskydech. Cílem konference byly prezentace aktuálních výsledků výzkumů z oblasti aplikované matematiky, numerické lineární algebry, optimalizačních metod, výpočetních věd a z oblasti high performance computing.

Zúčastnilo se jí téměř 100 odborníků a studentů. Někteří přednášející přijeli z opravdové dálky. Ze Spojených států amerických přijeli na konferenci Yousef Saad (Minnesotská univerzita), Ludmil Zikatanov (Pensylvánská státní univerzita), Erin Claire Carson (Univerzita New York) a Radek Tezaur (Stanfordova univerzita).

V rámci programu konference proběhla i posterová sekce prezentace výzkumů. Z dvaceti čtyř posterů byl účastníky konference hlasováním vybrán jako nejlepší poster našich kolegů Dr. M. Čermáka, Dr. V. Haply, doc. D. Horáka, Bc. J. Kružíka, Ing. M. Pechy, Ing. R. Sojky a Ing. J. Tomčaly s názvem PERMON.



ROZHOVOR S RADKEM TEZAUREM, JEDNÍM ZE ZVANÝCH PŘEDNÁŠEJÍCÍCH



Při příležitosti konání konference jsme se zeptali přednášejícího Radka Tezaura na pár otázek. Radek Tezaur vystudoval doktorský program Aplikovaná matematika na Univerzitě Colorado v Denveru ve Spojených státech amerických a nyní působí na Stanfordově univerzitě v Kalifornii.

Váš studijní i pracovní život provází matematika. Vzpomenete si, čím Vás matematika zaujala natolik, že jste se pro ni rozhodl pro své studium a kariéru?

Asi nemůžu říci, že matematika se stala jednoho dne mým osudem. Vzniklo to postupně, a zaujala mne jak její formální struktura, tak jistá míra hravosti, kterou dovoluje, a nakonec především její schopnost popsat fyzikální procesy. I z toho důvodu jsem na Matfyzu (pozn. redakce: Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy) původně studoval teoretickou fyziku, než jsem přestoupil na matematické modelování vedené profesorem Nečasem.

Po studiu na Univerzitě Karlově jste se ocitnul v Coloradu (USA). Tam jste pět let pracoval na doktorátu v oboru Aplikovaná matematika na Univerzitě Colorado v Denveru. Překvapilo Vás něco při začátcích tamního doktorského studia?

Vzhledem k tomu, že to bylo poměrně nedlouho po sametové revoluci, a byla to moje první cesta do USA, bylo pro mne nové vlastně všechno. Na samotném studiu mne překvapila neformálnost styku profesorů a studentů a flexibilita ve výběru přednášek. Jistě jsem ocenil dobré základy, které jsem si přinesl z Matfyzu, a zároveň konstatoval, že některé modernější věci i v takových standardních předmětech jako lineární algebra jsem se dozvěděl až v Coloradu. Mimo studium byla příjemným překvapením především přátelskost a usměvavost obyvatel Colorada, a snadnost, se kterou se vyřizovaly záležitosti normálního života.

Nyní pracujete na Stanfordově univerzitě v Kalifornii. Z této univerzity pochází některé průlomové technologické inovace, jako Google, Cisco a Yahoo!. Můžete nám popsat prostředí této univerzity?

Stanford byl založen jako praktický (ve smyslu aplikovaný) protipól elitním univerzitám na východním pobřeží a tomuto odkazu zůstává stále věrný. Univerzita už dlouho těží ze své polohy v Křemíkovém údolí (Silicon Valley) a nepochybně je tomu i naopak. Historiky o studentech či profesorech, kteří odešli ze Stanfordu a založili společnosti s hodnotou mnoha milionů, jsou na denním pořádku. Pořád mne ještě překvapuje kvalita studentů. Zároveň není vždy lehké si je udržet na postgraduální studia, jelikož je o ně v Křemíkovém údolí i jinde velký zájem.

Jak tedy vypadá Váš pracovní den?

Můj pracovní den začíná po souboji s provozem v Křemíkovém údolí. Většinu času strávím prací na našich projektech, vývoji našeho softwaru a práci se studenty. Scházím se s nimi pravidelně, abych se dozvěděl, jaký udělali pokrok. Nechávám jim vždy dveře otevřené. Mohou se za mnou zastavit a diskutovat o řešení momentálních problémů.

Povídáme si u příležitosti konference HPCSE organizované IT4Innovations ve vaší rodné zemi. Na konferenci HPCSE 2017 jste prezentoval výzkum vaší skupiny z oddělení Letectví a astronautiky Stanfordovy univerzity na téma snižování nákladů na aeroelastické předpovědi při zachování dobré přesnosti („Reduced order models for direct and inverse acoustic problems“).

Můžete přiblížit těm, kteří se konference nemohli zúčastnit, čím se nyní v této oblasti zabýváte?

Už řadu let se zabývám výzkumem v oblasti šíření vln, např. vln akustických. Matematické modely popisující tyto jevy byly vytvořeny relativně dávno, zlepšující se numerické metody a výkon počítačů nám umožňuje je řešit lépe a rychleji, ale stejně jsou tyto úlohy pro praktické potřeby těžko zvládnutelné. To samé platí pro mnoho aeroelastických úloh, nebo proudění jako takové. Redukované modely umožňují využít diferenciální rovnice a diskretizační metody, které vědci vyvíjeli celá staletí resp. desetiletí, a zároveň se poučit z řešení konkrétního problému, trochu v duchu strojového učení.

Zaujal Vás nějaký konkrétní výzkum prezentovaný ostatními kolegy?

Je těžké jmenovat jen několik jmen, ale tak namátkou, vzhledem k tomu, že téma mi bylo blízké: přednášky o předpodmiňování Daniela Loghina a Ludmila Zikatanova, řešení systému s 200 miliardami neznámých Lubomíra Říhy, a trochu filozofická přednáška Zdeňka Strakoše.

Na Vašich webových stránkách jsme zjistili, že rád cestujete a fotíte. Kdyby vás vůbec nic neomezovalo, kam byste se toužil podívat a co byste si chtěl vyfotit?

Kdyby mne neomezovala moje tělesná schránka, vylezl bych na řadu vysokých hor, kolem kterých rád alespoň chodím. Moji další vášni jsou pouště, a jistě se časem vydám do Namibie, Altiplana v Bolívii, a po Hedvábné stezce pouští Taklamakan v Číně.

Děkujeme za poskytnutí rozhovoru a přejeme mnoho štěstí na cestách.

Jack Dongarra, nestor HPC a světa kolem superpočítačů při návštěvě stánku IT4Innovations, ISC 2017



REPORTÁŽ Z INTERNATIONAL SUPERCOMPUTING CONFERENCE 2017 A ZHODNOCENÍ AKTUÁLNÍHO ŽEBŘÍČKU TOP500

Salomon je stále v první stovce. Momentálně na 78. místě.

Účast na International Supercomputing Conference (ISC) se pro IT4Innovations pomalu stává tradicí. Náš první stánek jsme měli na ISC v roce 2014 v Lipsku. Letos jsme tedy již po čtvrté prezentovali naši infrastrukturu a výzkum návštěvníkům této největší evropské akce zaměřené na HPC a s ním spojené technologie a výzkum. Od roku 2015 se konference koná ve Frankfurtu nad Mohanem a my jsme se zúčastnili všech tamních dosavadních ročníků. V letošním roce jsme se rovněž podíleli na prezentaci projektů Horizont 2020, ve kterých jsme zapojeni, a to ANTAREX a PRACE-5IP.

Jednou z významných událostí, které jsou každoročně součástí ISC, je vyhlášení aktuálního žebříčku nejvýkonnějších superpočítačů na světě TOP500. Na špici je stále Čína díky svým dvěma superpočítačům - Sunway TaihuLight, s výkonem 93 petaflopů a Tianhe-2 s výkonem téměř 34 petaflopů. Třetí místo patří evropskému superpočítači Piz Daint Švýcarského národního superpočítačového centra. Jeho výkon se díky upgradu zdvojnásobil na 19,6 petaflopů a posunul se tak z osmého místa na třetí. Americký superpočítač Titan, který



Vít Vondrák prezentoval IT4Innovations na stánku Intelu



Prezentace projektu ANTAREX (Horizont 2020)

má od spuštění v roce 2012 výkon 17,6 petaflopů tak spadl na čtvrté místo. V první desítku jsou další superpočítače ze Spojených států amerických a z Japonska. Nejvýkonnější český superpočítač, náš Salomon, je stále v první stovce, momentálně je na 78. místě. Od svého spuštění v létě 2015 klesl o 38 příček. V prvním žebříčku, do kterého byl zařazen v červnu 2015, byl čtyřicátý. Žebříček se

sestavuje dvakrát ročně. Jeho listopadové vydání je spojeno s největší akcí z oboru superpočítání na světě Supercomputing Conference (SC), která letos v listopadu proběhne v Denveru. I tam budeme prezentovat české superpočítání a doufat, že se Salomon stále udrží v první stovce nejvýkonnějších superpočítačů světa.

TETRAMAX A CLOUDIFACTURING, DVA NOVÉ MEZINÁRODNÍ PROJEKTY, NA KTERÝCH BUDEME SPOLUPRACOVAT

K financování rámcovým programem Evropské unie Horizont 2020 byly schváleny dva nové projekty: Technology transfer via multinational application experiments (TETRAMAX) a Cloudification of Production Engineering for Predictive Digital Manufacturing (CloudiFacturing).

TETRAMAX

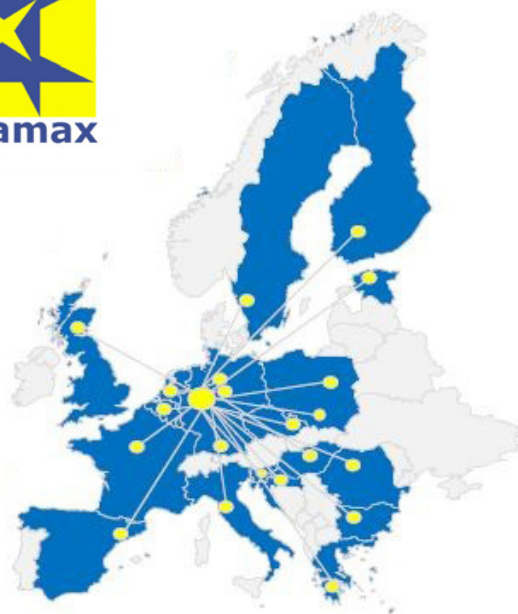
Projekt Transfer technologií skrze nadnárodní aplikační experimenty (Technology Transfer via Multinational Application Experiments, TETRAMAX) bude trvat 4 roky a jeho cílem je implementovat evropskou iniciativu „Smart Anything Everywhere“ do oblasti nízkenergetického počítání (Customized Low Energy Computing, CLEC) 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.

TETRAMAX je zaměřen na poskytování nových inovačních technologií evropskému průmyslu. Proto je náplní projektu i organizace řady akcí a školení. Celý proces transferu technologií přitom usnadní nově vybudovaná specializovaná síť kompetenčních center v oblasti nízkenergetických systémů. Tato síť bude fungovat dvěma směry. Podniky a společnosti si díky ní budou moci zažádat o přístup k pokročilým technologiím a výzkumné instituce jim budou moci aktivně a efektivně své technologie nabízet. V rámci projektu je naplánován transfer technologií prostřednictvím více než 60ti mezinárodních aplikačních experimentů.

Na projektu bude spolupracovat celkem dvacet dva účastníků. Koordinátorem projektu je největší technická univerzita v Německu Univerzita RWTH Aachen. Dalšími významnými evropskými univerzitami, které na projektu spolupracují, jsou Technická univerzita v Delftu (Nizozemí), Edinburská univerzita (Velká Británie), Univerzita v Gentu (Belgie) a Technická univerzita Mnichov (Německo). K výzkumným centřům podílejícím se na projektu patří francouzský Institut national de recherche en informatique et en automatique (INRIA) a slovenský Institut Jožefa Stefana. Partnerskými firmami projektu jsou například bulharská AMG Technology OOD, rumunská Control Data Systems SRL a polská Techmo sp. z o.o.



Konsorcium projektu TETRAMAX



V projektu TETRAMAX je klíčovou specializací IT4Innovations národního superpočítačového centra vývoj softwarů a zpracování multimediálních dat. IT4Innovations disponuje softwarovými knihovnamy a nástroji, které mohou využít podniky z automobilového i farmaceutického průmyslu a také lékaři pro zkvalitnění zdravotní péče.

Dále budeme zodpovědní za organizaci lokálních workshopů pro výzkumné partnery, průmyslové podniky a další zainteresované strany. Naším úkolem bude i shromažďování a vyhodnocování ukazatelů diseminace a komunikace výsledků projektu.

Webové stránky projektu: <https://www.tetramax.eu/>



Projekt CloudiFacturing
a digitální inovační centra

CloudiFacturing

Cílem projektu Cloudifikace výrobního inženýrství pro prediktivní digitalizovanou výrobu (Cloudification of Production Engineering for Predictive Digital Manufacturing, CloudiFacturing), který bude trvat 3,5 roku, je optimalizovat výrobní procesy a produktivitu podniků pomocí modelování a simulací založených na využívání HPC s využitím cloudových služeb. Současný trend digitalizace a s ní související trend automatizace výroby je přitom označován jako čtvrtá průmyslová revoluce (Industry 4.0) a někteří partneři projektu se na ní podílejí.

Posláním projektu je přispět k účinnému využívání výkonných výpočetních zdrojů evropskými malými a středními výrobními podniky a tím i ke zvýšení jejich konkurenceschopnosti. Malé a střední podniky budou moci těžit z podpory a odborných znalostí výzkumných pracovníků a cenově dostupných přístupů k výpočetním zdrojům. Výpočetní centra jim totiž dokáží pomoci s optimalizací produktivity a výrobních procesů v krátkodobém časovém horizontu. Technický a ekonomický dopad projektu CloudiFacturing bude demonstrován prostřednictvím více než 20ti mezinárodních aplikačních experimentů. Projekt CloudiFacturing je projektem iniciativy Evropské komise s názvem Inovace informačních a komunikačních technologií pro malé a střední výrobní podniky (ICT Innovation for Manufacturing SMEs, I4MS). Nový projekt navazuje na předešlé projekty I4MS s názvy CloudFlow a CloudSME. V nejbližší fázi I4MS usiluje o rozšíření sítě kompetenčních center a jejich propojení s digitálními inovačními centry, které budou mít klíčovou roli při zefektivňování dopadů jednotlivých aplikačních experimentů i celého projektu CloudiFacturing. Digitální inovační centra podílející se na projektu jsou z Maďarska (Innomine Group Kft), Itálie (STAM S.r.l.), Španělska (Insomnia

Consulting), Německa (DFKI-SmartFactory) i z České republiky (IT4Innovations). Kompetenčních center je v Evropě definováno sedmáct. Mezi čtyři, která vznikla v nedávné době, patří i IT4Innovations.

Na projektu bude dohromady spolupracovat celkem 33 účastníků. Koordinátorem projektu je německá Fraunhoferova společnost (Fraunhofer-Gesellschaft zur Förderung der angewandten Forschung e.V.), což je největší evropská organizace pro aplikovaný výzkum a vývoj. Z univerzit podílejících se na projektu jmenujme například britskou Univerzitu Westminster, Univerzitu Nottingham a švédskou Lundskou univerzitu. Mezi výzkumné organizace zapojené do projektu patří například německé centrum Deutsche Forschungszentrum für Künstliche Intelligenz GmbH, norská organizace Stiftelsen Sintef a rakouské centrum Linz Center of Mechatronics GmbH. Na projektu bude spolupracovat několik firem, například i česká firma Ferram strojírna, která podniká v oblasti strojírenské výroby se zaměřením na výrobu strojních zařízení a montážních celků, svařenců a důlních strojů.

Kontaktním místem pro zainteresované subjekty bude integrovaný digitální trh, s jasným zaměřením na výrobní inženýrství. Na digitálním trhu budou moci partneři projektu nabízet své služby a řešení podnikům, což usnadní podnikům přístup k nástrojům vyvinutým pomocí HPC přes cloudové služby. Digitální trh propojí lidi, usnadní jejich spolupráci a poskytne interaktivní rozhraní pro poskytovatele služeb.

IT4Innovations nabídne s ohledem na potřeby projektu svou HPC infrastrukturu a přispěje svými expertními znalostmi v oblasti modelování, simulací a analýzy dat. Nápomocná bude i při diseminaci výsledků projektu.

IT4INNOVATIONS SE STALO ŠKOLÍCÍM CENTREM PRACE



Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) kontinuálně usiluje o rozšiřování a zkvalitňování vzdělávacích aktivit a podpory uživatelů superpočítačů v oblasti High Performance Computing (HPC). V projektu PRACE-5IP, tzv. páté implementační fázi, se PRACE zavázalo vytvořit a podporovat činnost čtyř tzv. PRACE Training Centre (PTC), jimiž doplní současnou šestici PRACE Advanced Training Centre (PATC), působících při významných evropských superpočítačových centrech ve Finsku, Francii, Itálii, Německu, Španělsku a Velké Británii. Smyslem této iniciativy je doplnit nabídku kurzů PRACE, učinit je geograficky dostupnějšími v dalších lokalitách a zároveň tam pomoci rozvinout edukační aktivity zaměřené na HPC.

O možnost stát se PTC se nakonec ucházelo 7 zemí, resp. partnerů zastupujících tyto země v PRACE. Odborná komise PRACE z nich vybrala tato čtyři PTC: řecký GRNET, irský ICHEC, nizozemské SURFsara a k naší radosti také IT4Innovations. IT4Innovations se přitom umístilo na špici hodnocení. Komisi zřejmě zaujala solidní edukační historie našeho centra. Tou je v průměru přibližně 11 kurzů, 14 výukových dní a 250 účastníků v každém akademickém roce, vyváženost mladých domácích a renomovaných externích lektorů, pořádání několika velkých mezinárodních školicích akcí (např. sezónních škol PRACE), spolupráce s PATC včetně hostování jejich kurzů i třeba výhodná geografická poloha na trojmezí ČR, Slovenska a Polska.



Nejdůležitější ovšem byla nabídka našich vlastních kurzů pro PRACE, kterou pro akademický rok 2017/18 plánujeme takto:

- CFD simulations using OpenFOAM (9/2017, 2 dny, lektor Tomáš Brzobohatý)
- System administration tools (11/2017, 2 dny, lektor Branislav Janský)
- Intel Xeon Phi programming (2/2018, 2 dny, lektor Lubomír Říha)
- PETSc tutorial (5/2018, 2 dny, lektor Václav Hapla)

Všechna tato témata jsou v dosavadním repertoáru PATC poměrně vzácná, což podtrhuje přínos IT4Innovations ke vzdělávacímu programu PRACE. Na druhé straně si od našeho statutu PTC slibujeme větší možnosti „dovézt“ některé špičkové tutoriály PATC, které by jinak naši uživatelé sotva mohli ve větší míře navštívit.

Závěrem dovolte poděkovat všem výše uvedeným a dalším kolegům, jež se neváhají o svou velkou odbornou erudici podělit při pedagogické činnosti pro IT4Innovations i účastníkům našich kurzů, kteří i přes svůj nabitý program ocení příležitost dalšího odborného růstu pod vedením respektovaných lektorů.

Ondřej Jakl, specialista školení a vzdělávání



CENU JOSEPHA FOURIERA OBDRŽEL JAN ZAPLETAL

Náš kolega získal první místo v celonárodní soutěži o Cenu Josepha Fouriera pro nejlepší výzkum v rámci doktorského studia z oblasti informatiky a výpočetních věd

Profesor Jean-Marie Lehn, nositel Nobelovy ceny za chemii za rok 1987, Roland Galharague, velvyslanec Francie v České republice, a Pavel Bělohrádek, místopředseda vlády pro vědu, výzkum a inovace, předali v Buquoyanském paláci v Praze v pátek 16. června 2017 ceny Josepha Fouriera pro nejlepší studenty doktorského studia v oblasti informatiky a výpočetních věd. Jan Zapletal, absolvent Katedry aplikované matematiky Fakulty elektrotechniky a informatiky VŠB - Technické univerzity Ostrava, který působí v IT4Innovations národním superpočítačovém centru, se stal vítězem.

Na zasedání komise Fourierovy ceny, které jsme dne 10. května 2017 hostili na IT4Innovations, prezentoval Jan Zapletal svůj výzkum na téma Paralelní metody hraničních prvků pro HPC.

Vítěz obdržel od Francouzského velvyslanectví v České republice stipendium na výzkumnou stáž ve francouzské laboratoři dle vlastního výběru a finanční odměnu od společnosti ATOS IT Solutions and Services, s.r.o.

Laureáta jsme se zeptali na pár otázek týkajících se ocenění a jeho studia i působení v IT4Innovations národním superpočítačovém centru.

Jaký má pro tebe získané ocenění význam?

Ceny Josepha Fouriera v oboru počítačových věd si samozřejmě velmi vážím. V odborné komisi zasedají kromě zástupců firmy ATOS a francouzské ambasády také odborníci z českých vysokých škol. Ocenění, myslím, dokazuje, že výzkum v oblasti výpočetních věd je na VŠB na vysoké úrovni. Zároveň jsem rád, že se mi podařilo navázat na úspěchy kolegů Václava Haply a Michala Merty, kteří jako absolventi Katedry aplikované matematiky a současně mí kolegové z IT4Innovations soutěž rovněž vyhráli.

Odborné komisi Fourierovy ceny jsi prezentoval výzkum na téma Paralelní metody hraničních prvků pro HPC.

Můžeš čtenářům zjednodušeně přiblížit, co je to vlastně metoda hraničních prvků?

Metoda hraničních prvků je jednou z metod pro numerické řešení některých typů parciálních diferenciálních rovnic. Podobné rovnice slouží pro matematický popis reálných dějů, jakými jsou například šíření zvukových či elektromagnetických vln nebo přenos tepla. Analytické řešení takových úloh není ve většině případů možné, a proto je nutné přistoupit k přibližnému řešení pomocí počítačů. K tomu lze využít právě metodu hraničních prvků.

Co myslíš, že komisi Fourierovy ceny na tvém výzkumu zaujalo nejvíce?

Součástí přihlášky do soutěže je shrnutí celé vědecké práce v rámci doktorského studia a seznam publikací. Myslím, že počet publikací v kvalitních časopisech byl jedním z hlavních faktorů, které rozhodnutí komise ovlivnily. Nejdůležitější součástí soutěže je potom ústní prezentace před komisí. V tomto ohledu jsem mohl těžit z aktivní účasti na řadě mezinárodních konferencí a workshopů, kde je nutné v relativně krátkém čase posluchačům předložit přidanou hodnotu vaší práce.

K čemu slouží knihovna BEM4I, na jejímž vývoji se podílíš?

Knihovna implementuje zmíněnou metodu hraničních prvků, zkratka BEM v názvu označuje anglický název 'the boundary element method'. Na rozdíl od často využívané metody konečných prvků, která je součástí mnoha volně i komerčně dostupných softwarových produktů, neexistuje mnoho balíků podporujících právě BEM. Metoda hraničních prvků je přitom pro řešení určitých typů problémů, mezi něž patří například šíření vln ve volném prostoru či tvarová optimalizace, vhodnější. Prvotní motivací k tvorbě BEM4I tedy bylo vytvořit knihovnu, která bude sloužit jak v rámci výzkumu na Katedře aplikované matematiky a IT4Innovations, tak pro řešení reálných inženýrských úloh.

Na čem zrovna tým vyvíjející BEM4I pracuje?

Jedním z přínosů BEM4I je optimalizace kódu pro moderní HPC architektury. Neznamená to, že není určena pro výpočty na osobních počítačích, větší úlohy ovšem vyžadují hardware dostupný pouze v moderních superpočítačových centrech, jakým je IT4Innovations. Proto se v posledních několika měsících věnujeme úpravám kódu tak, aby efektivně využil nejnovější mnohojádrové procesory s možností vektorového zpracování dat. Použité přístupy můžeme testovat jak na koprocesorech Intel Xeon Phi dostupných na superpočítači Salomon, tak na novější generaci těchto procesorů dostupných ve výzkumných institucích v Evropě a USA.

Už jsi přemýšlel, na které výzkumné instituci ve Francii budeš absolvovat vyhranou stáž?

V současné době náš tým bohužel aktivně nespolupracuje s žádnou Francouzskou výzkumnou institucí. Nicméně jednou ze zajímavých možností by jistě byla stáž v laboratoři Inria, která zastřešuje poměrně velké množství výzkumných skupin zabývajících se numerickými metodami. Stáž musím absolvovat do konce roku 2019, takže na konkrétní plány je naštěstí dost času.

Toto nebude tvá první zahraniční studijní či pracovní stáž.

Kterých výjezdů si nejvíce vážíš?

Na úplném začátku svého Ph.D. studia jsem se zúčastnil stáže na Technické univerzitě Graz (TU Graz) ve skupině prof. Steinbacha, který patří ke světové špičce ve výzkumu metody hraničních prvků. Přestože stáž trvala pouhých sedm měsíců, měla pro dokončení mé dizertační práce velký význam. Od ledna letošního roku jsme navíc s TU Graz součástí projektu Mobility, který umožňuje mi i kolegům vzájemné návštěvy a rozšíření naší dosavadní spolupráce.

Co ti tvé zahraniční zkušenosti přinesly?

Kromě již zmíněné stáže v Grazu jsem měl v rámci studia a práce na mezinárodních projektech centra IT4Innovations možnost účastnit se řady odborných konferencí zaměřených na numerické metody a HPC. Velká část z nich přispěla k rozvoji BEM4I ať po matematické či výpočetní stránce. V poslední době náš výzkum nemalou měrou ovlivnily workshopy IXPUG pořádané firmou Intel. Účastníci se zde dělí o své rané zkušenosti s vývojem HPC aplikací na moderních mnohojádrových procesorech, což nám pomohlo na podobné architektury připravit i knihovnu BEM4I.

V současné době pracuješ jako výzkumný pracovník

Laboratoře vývoje paralelních algoritmů.

Jaké máš kariérní cíle do budoucna?

V první řadě jsem rád, že jsem se do výzkumu na IT4Innovations mohl zapojit již od začátku svého doktorského studia. To mně a týmu kolem BEM4I umožnilo knihovnu obohatit nejen o moduly přímo vyplývající ze zadání dizertační práce, tedy modelování elektrického pole ve spojení s tvarovou optimalizací, ale zároveň o moduly určené k řešení dalších problémů, se kterými se na katedře a IT4Innovations setkáváme. Součástí mé práce v laboratoři ale není jen vývoj BEM4I - v poslední době jsem se například zapojil do programu Intel Parallel Computing Center, kde se zabýváme optimalizací algoritmů pro nové architektury procesorů, či do projektu RE-ADEX, který má za cíl HPC aplikace optimalizovat z pohledu energetické náročnosti. V budoucnu bych se i nadále chtěl zabývat výzkumem a vývojem v prostředí HPC, především v rámci vlastních projektů zaměřených na masivně paralelní řešení parciálních diferenciálních rovnic.

Gratulujeme k ocenění a také k úspěšnému ukončení doktorského studia. Přejeme mnoho úspěchů ve tvé kariéře a děkujeme za rozhovor