

VŠB TECHNICKÁ  
UNIVERZITA  
OSTRAVA

IT4INNOVATIONS  
NÁRODNÍ SUPERPOČÍTAČOVÉ  
CENTRUM

P Ř E H L E D   R O K U   2 0 1 8



ÚVODNÍ SLOVO ŘEDITELE IT4INNOVATIONS	5
VÝZNAMNÉ UDÁLOSTI V ROCE 2018	6
PŘEDSTAVENÍ IT4INNOVATIONS	10
ADMINISTRATIVNÍ A FINANČNÍ PŘEHLED	12
Vedení IT4Innovations	12
Zaměstnanci IT4Innovations	13
Zdroje financování	14
Provozní a investiční náklady	15
Souhrnný výčet všech grantů	16
SUPERPOČÍTAČOVÉ SLUŽBY	18
Technické parametry superpočítačů	19
Přidělování výpočetního času	20
Uživatelé výpočetních zdrojů	25
Projekty	26
VÝZKUM A VÝVOJ	28
Laboratoř vývoje paralelních algoritmů	30
Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace	31
Laboratoř modelování pro nanotechnologie	32
Laboratoř pro big data analýzy	33
Laboratoř pro výzkum infrastruktury	34
Projekty	36
Spolupráce s komerční sférou	41
VZDĚLÁVACÍ A VÝUKOVÉ AKTIVITY	42
Doktorský studijní program	42
Vzdělávací aktivity	42
Získání certifikace NVIDIA Deep Learning Institute	43
PRACE Summer of HPC	43
Projekty	44



## Úvodní slovo ředitele IT4Innovations

Vážení čtenáři,

přinášíme vám přehled nejdůležitějších událostí a výsledků, kterých IT4Innovations národní superpočítačové centrum dosáhlo v roce 2018. V tomto přehledu naleznete informace o tom, jak jsme v loňském roce hospodařili, kolik výpočetních zdrojů jsme přidělili v našich grantových soutěžích, jakých nejvýznamnějších výzkumných výsledků jsme dosáhli a také co zajímavého se u nás událo.

Jsem velice rád, že poptávka po výpočetních zdrojích našich superpočítačů neustále roste. To svědčí nejen o rostoucím významu superpočítačových technologií ve výzkumných aktivitách našich stávajících uživatelů, ale i o zájmu zcela nových uživatelů o naše služby. Za uplynulý rok jsme 164 projektům ve třech grantových soutěžích rozdělili téměř 172 000 000 jádrohodin, přičemž ale převis poptávky nad alokovaným množstvím byl v průměru 42 %. I z tohoto důvodu jsme během roku usilovně pracovali na všech úkonech potřebných pro pořízení nového klastru, jenž navýší naše stávající kapacity. Smlouva s dodavatelem byla podepsána v listopadu a naši uživatelé se na nový stroj mohou těšit v první polovině roku 2019.

Dařilo se nám také na poli výzkumu a vývoje. Naším kolegům se konečně po několika neproměněných nominacích na ocenění nejlepší vědecký poster na nejvýznamnější konferenci věnované superpočítačům – Supercomputing Conference 2018 – podařilo získat první místo. Úspěchem bylo ověřeno také naše úsilí v oblasti mezinárodních projektů z dotačního titulu Evropské komise Horizont 2020. K financování byl schválen projekt LEXIS, který koordinujeme. Práce na projektu započnou v roce 2019.

V průběhu roku jsme rovněž rozvíjeli aktivity směrem k intenzivnější spolupráci s průmyslovou sférou. V souladu s připravovanými programy Digitalní Evropa a Digitální Česko jsme začali profilovat náš Digitální inovační hub v oblasti HPC a HPDA. Vydali jsme brožuru IT4Innovations digitální inovační hub, která tyto aktivity dokumentuje na příkladech úspěšné spolupráce s průmyslovou praxí. Na ně chceme do budoucna navazovat a nadále zvyšovat naši úroveň zapojení do digitalizace průmyslu i společnosti.

Toto je jen několik z mnoha úspěchů, kterých jsme v roce 2018 společnou prací dosáhli. Ty další důležité události naleznete na stránkách této publikace. Chtěl bych za ně poděkovat nejen našim zaměstnancům, ale také partnerům a podporovatelům. Bez nich bychom se za uplynulým rokem nemohli ohlédnout s radostí a zadostiučiněním z dobře odvedené práce.

**Vít Vondrák**

ředitel IT4Innovations  
národního superpočítačového centra



V listopadu 2018 jsme se účastnili superpočítačové konference „**Supercomputing Conference**“, jež je největším celosvětovým setkáním vědců a firem z oblasti vysoce výkonného počítání (HPC). Konala se v americkém Kay Bailey Hutchison Convention Center v Dallasu a navštívilo ji více než 13 tisíc účastníků. Cenu za nejlepší poster na této konferenci získali naši kolegové Ondřej Meca, Lubomír Říha a Tomáš Brzobohatý s příspěvkem *Workflow for Parallel Processing of Sequential Mesh Databases*. Zvítězili v konkurenci téměř 100 posterů, které byly hodnoceny odbornou komisí na základě kvality výzkumné práce a kvality prezentace. Pošesté jsme se také této konference zúčastnili jako vystavovatel.



Na VŠB – Technické univerzitě Ostrava byla 9. listopadu 2018 podepsána **smlouva na modernizaci HPC systémů** pro IT4Innovations národní superpočítačové centrum. Nový systém, který rozšíří stávající kapacity centra, bude mít teoretický výkon přesahující 800 TFlop/s (bude tedy více než 8krát výkonnější než menší z aktuálně provozovaných klastřů Anselm, který byl spuštěn v roce 2013) a dodá jej společnost Atos IT Solutions and Services, s.r.o.



Do hledáčku Evropské komise, respektive její iniciativy **Inovační radar**, se v roce 2018 dostaly dvě práce našich kolegů. V kategorii Excelentní výzkum byl nominován software HyperLoom, který slouží pro efektivní spouštění vědeckotechnických úloh skládajících se z mnoha navzájem propojených dílčích výpočtů na superpočítačích. V kategorii Inovace v rané fázi byl nominován a do užšího výběru čtyř finalistů se díky online hlasování dostal inteligentní navigační systém pro občany, na kterém jsme spolupracovali se společností Sygic za účelem snížení rizika dopravní zácpy.



Od počátku roku 2018 se podílíme na přípravě a v druhé půli roku i na realizaci společného evropského podniku **EuroHPC**, jenž má za cíl, v rámci spolupráce evropských zemí, podpořit cestu k vybudování vlastního evropského exascalového superpočítače, a tím významně přispět k digitalizaci evropské společnosti a průmyslu. V květnu 2018 jsme ve spolupráci s Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy a Evropskou komisí uspořádali workshop věnovaný iniciativě EuroHPC, jehož cílem bylo umožnit zástupcům české výzkumné komunity a podnikatelské sféry zapojit se aktivně do debat na téma způsobu implementace iniciativy EuroHPC v České republice.



Od prosince 2018 jsme držitelem mezinárodně uznávaného certifikátu systému managementu bezpečnosti informací podle normy **ISO 27001** (ISO/IEC 27001:2013, ČSN ISO/IEC 27001:2014). Certifikát ISO 27001 jsme získali v oboru poskytování služeb národní superpočítačové infrastruktury, řešení výpočetně náročných úloh, realizace pokročilých datových analýz a simulací a zpracování rozsáhlých datových sad. Získané certifikace jsou dokladem o tom, že IT4Innovations má zaveden a neustále zlepšuje mezinárodně uznávaný systém řízení bezpečnosti informací, řídí rizika, má zavedeny procesy a pravidla tak, aby v maximální možné míře zabezpečily informace před zneužitím, neoprávněnou změnou nebo jejich ztrátou.



Vydali jsme novou publikaci **IT4Innovations digitální inovační hub**, ve které se můžete seznámit s konkrétními příklady naší spolupráce s průmyslem. V publikaci najdete naše portfolio služeb, mezi které patří například výpočetně náročné modelování a simulace, pokročilé datové analýzy, aplikace metod umělé inteligence, vývoj a implementace FEM/BEM simulačních nástrojů, asistence při nasazování kódů na HPC systémy, renderování, ale i pronájem výpočetních prostředků. Můžete si přečíst 19 konkrétních příkladů naší spolupráce s komerčními firmami z odvětví strojírenství, energetiky, automobilového průmyslu, vodního hospodářství, zdravotnictví, geoinformatiky a dalších.



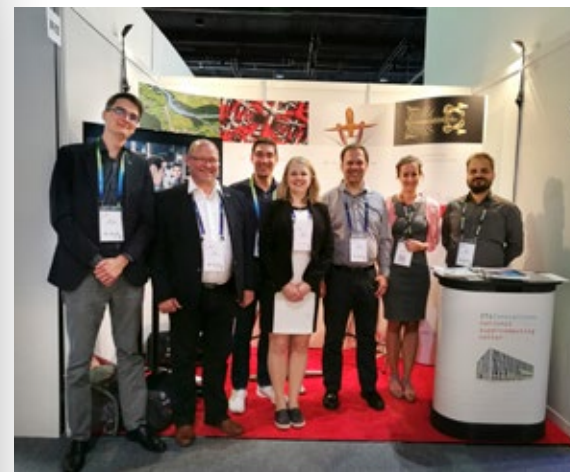
V roce 2018 jsme hostili třetí ročník konference **Den národních výzkumných infrastruktur**. Odborné debaty ke stěžejním a aktuálním otázkám tvorby politiky a financování velkých výzkumných infrastruktur ČR se účastnilo téměř 100 zájemců z celé ČR. Na konferenci vystoupil ředitel odboru výzkumu a vývoje Ministerstva školství mládeže a tělovýchovy Lukáš Levák, který účastníkům představil návrh financování velkých výzkumných infrastruktur (VVI) pro období 2020–2022. Organizovali jsme také druhý ročník konference našich uživatelů. Přivítali jsme téměř 100 účastníků, kteří měli možnost poslechnout si odborné přednášky z různých vědních oblastí a vyměnit si uživatelské zkušenosti. V průběhu konference zaznělo 20 přednášek a proběhla i posterová sekce s prezentacemi vědeckých výsledků.



V roce 2018 jsme hostili prestižní **Mezinárodní letní školu HPC** (International HPC Summer School on Challenges in Computational Sciences, IHPCSS), které se zúčastnilo téměř 80 studentů a 30 mentorů z Evropy, Spojených států amerických, Kanady a Japonska.



Program **PRACE Summer of HPC** nabídl již po šesté studentům evropských univerzit letní stáže zaměřené na HPC v superpočítačových centrech zapojených do projektu Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE). V létě 2018 dostalo příležitost absolvovat letní stáž 23 studentů, a to v 11 hostujících organizacích. Dva z nich jsme přivítali v IT4Innovations.



Již popáté jsme prezentovali naši výzkumnou infrastrukturu návštěvníkům největší evropské akce zaměřené na HPC **International Supercomputing Conference**, kterou každoročně navštíví více než tři tisíce odborníků a studentů z různých koutů světa.



**Události pro širokou veřejnost** k nám v minulém roce přilákaly více než 1700 návštěvníků. Jednalo se především o exkurze pro žáky, studenty a firmy nebo popularizační akce, kterou byla například Noc vědců. Již podruhé jsme prezentovali naši infrastrukturu a výzkum na Dnech NATO v Ostravě, na které v roce 2018 zavítalo 220 000 návštěvníků.



V roce 2018 jsme uspořádali **12 školicích a vzdělávacích kurzů**, které dohromady navštívilo téměř 240 účastníků.

IT4Innovations národní superpočítačové centrum při VŠB – Technické univerzitě Ostrava (dále jen IT4Innovations) je strategickou velkou výzkumnou infrastrukturou v České republice a společně s dalšími dvěma infrastrukturami CESNET a CERIT-SC tvoří tzv. e-infrastrukturu ČR. IT4Innovations poskytuje nejmodernější superpočítačové technologie a služby a zabývá se excelentním výzkumem v oblasti vysoce výkonného počítání (HPC) a datových analýz (HPDA).

## Mise

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

## Vize

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

Od roku 2011 je IT4Innovations členem prestižní panevropské výzkumné infrastruktury PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe), jejímž cílem je posílit konkurenceschopnost evropské vědy, výzkumu a průmyslu. V roce 2016 se IT4Innovations stalo členem Evropské technologické platformy pro oblast HPC (ETP4HPC), která se mimo jiné zaměřuje na definování výzkumných priorit v oblasti supercomputingu v Evropě. Hlavními tématy výzkumu IT4Innovations jsou zpracování a analýzy rozsáhlých dat, vývoj paralelních škálovatelných algoritmů a knihoven, výzkum zaměřený na vývoj superpočítačových technologií, řešení výpočetně náročných inženýrských úloh, modelování v nanotechnologiích a materiálovém výzkumu.

Pro českou vědeckou komunitu zajišťuje IT4Innovations přístup k výkonným výpočetním systémům a širokou škálu odborných školení zaměřených na osvojení si znalostí potřebných k efektivnímu využívání superpočítačové infrastruktury. IT4Innovations myslí také na budoucnost a v rámci doktorského studijního programu Výpočetní vědy vzdělává další generace specialistů na využití superpočítačů pro řešení výpočetně náročných úloh a zpracování rozsáhlých dat v základním výzkumu i v aplikovaných vědách.

Vzhledem k postupnému vývoji IT4Innovations, i požadavkům české a evropské výzkumné komunity jakož i celé společnosti, se IT4Innovations rozhodlo aktualizovat pro období 2018–2020 svou misi a vizi.



Také v roce 2018 pokračovala spolupráce IT4Innovations s partnery projektu Centrum Excelence IT4Innovations – Ostravskou univerzitou, Slezskou univerzitou v Opavě, Vysokým učením technickým v Brně a Ústavem geoniky Akademie věd ČR. Od roku 2016 společně řeší projekt IT4Innovations Excellence in Science, jenž je financován z Národního programu udržitelnosti II. Dozor nad tímto projektem, ale i nad udržitelností projektu Centra Excelence IT4Innovations, zajišťuje správní rada.

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

#### PŘEDSEDA

doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

#### ČLENOVÉ

prof. Dr. Michael Čada  
prof. Jean-Christophe Desplat  
prof. Ing. Petr Berka, CSc.  
prof. Dr. Peter Arbenz  
doc. Ing. Petr Cintula, Ph.D.  
prof. Dipl.-Ing. dr. Ulrich Bodenhofer  
prof. Dr. Kenneth Ruud  
prof. Dr. Arndt Bode  
prof. Dr. hab. inz. Roman Wyrzykowski

### Vědecká rada vysokoškolského ústavu IT4Innovations při VŠB – Technické univerzitě Ostrava

#### PŘEDSEDA

doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

#### ČLENOVÉ

Mgr. Branislav Jansík, Ph.D.  
Ing. Jan Martinovič, Ph.D.  
prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.  
prof. Ing. Jaromír Pištora, CSc.  
prof. Ing. Miroslav Vozňák, Ph.D.  
prof. Ing. Jan Holub, Ph.D.  
prof. Ing. Pavel Tvrdlík, CSc.  
doc. RNDr. Stanislav Hledík, Ph.D.  
prof. RNDr. Jaroslav Pokorný, CSc.  
doc. Ing. Jiří Jaroš, Ph.D.  
Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.  
Ing. Lubomír Říha, Ph.D.

#### Správní rada

#### PŘEDSEDA

Ing. Evžen Tošenovský, Dr.h.c.

#### MÍSTOPŘEDSEDA

doc. Mgr. Pavel Drozd, Ph.D.

#### ČLENOVÉ

prof. Ing. Ivo Vondrák, CSc.  
prof. Ing. Petr Noskiewič, CSc.  
Ing. Miroslav Murin, FCCA  
prof. Dr. Ing. Pavel Zemčík  
Ing. Leoš Dvořák  
doc. Ing. Pavel Tuleja, Ph.D.  
prof. Ing. Miroslav Tůma, CSc.

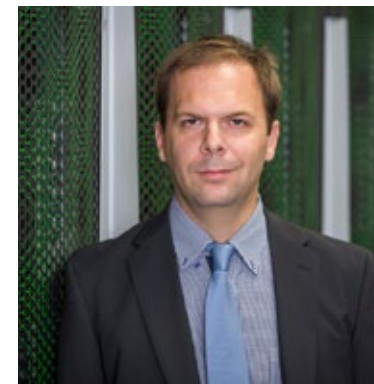
## Vedení IT4Innovations



**Radim Mrázek**  
Administrativa a finance



**Tomáš Kozubek**  
Výzkum a vývoj



**Branislav Jansík**  
Superpočítačové služby

## Zaměstnanci IT4Innovations

Zaměstnanci IT4Innovations podle úseků po přepočtu na ekvivalent plného pracovního úvazku (FTE), celkem 143,43 FTE, z toho:



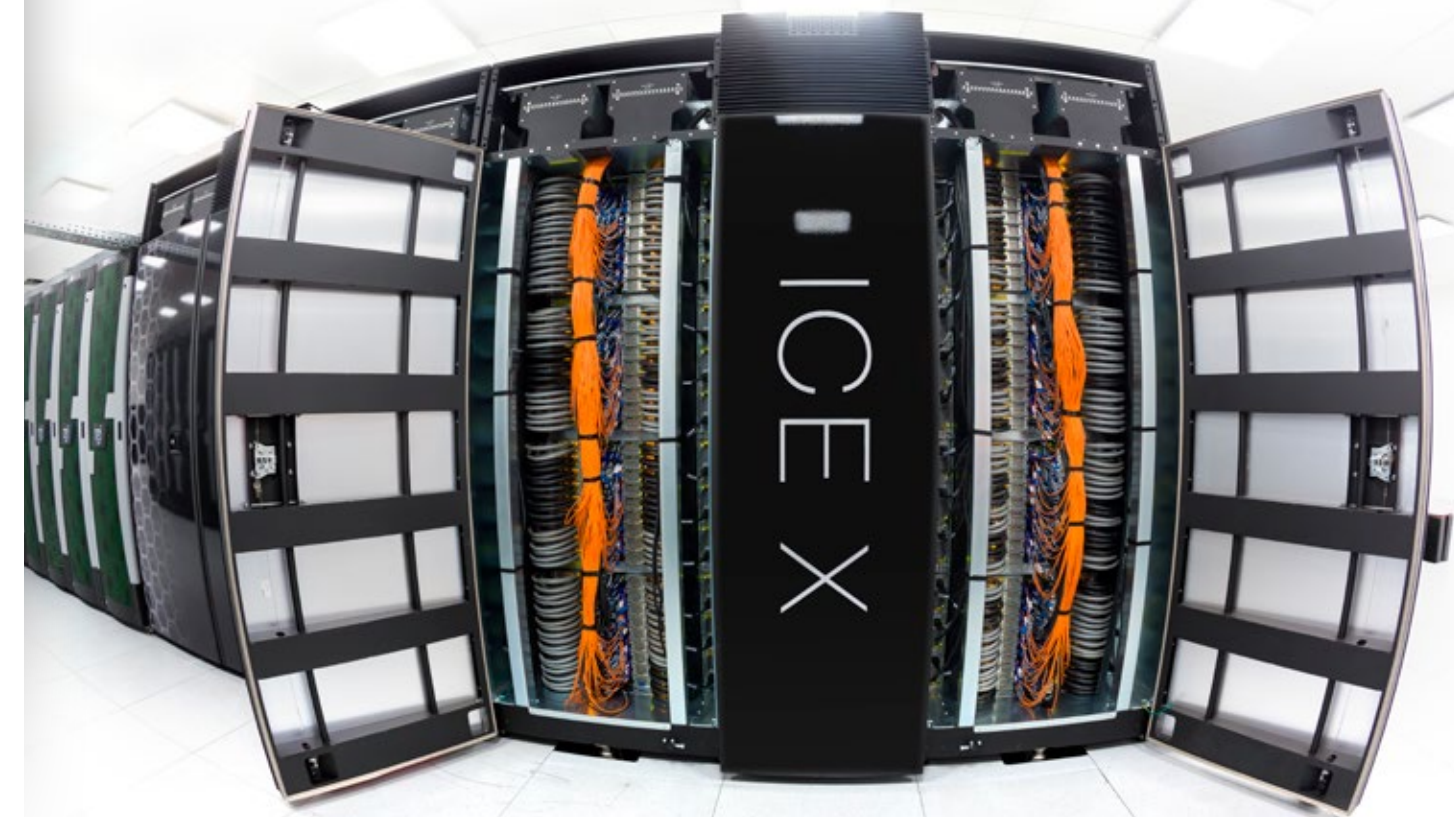
21 %  
**Management  
a administrativa**



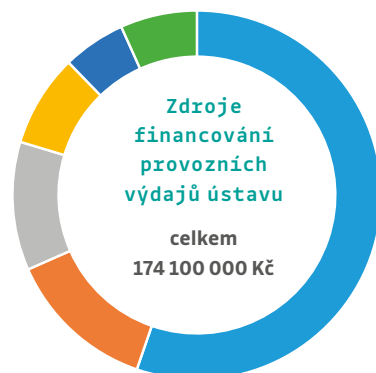
69 %  
**Výzkum  
a vývoj**



10 %  
**Superpočítačové  
služby**



## Zdroje financování

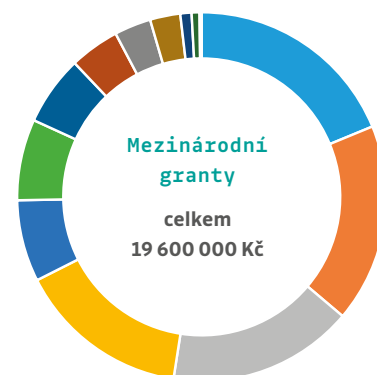


- 55,3 % Národní granty
- 13,1 % Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání
- 11,3 % Mezinárodní granty
- 8,1 % Institucionální podpora
- 5,5 % Smluvní výzkum a pronájem výpočetního času
- 6,7 % Ostatní

V roce 2018 hospodařilo IT4Innovations se zdroji ve výši 174 100 000 Kč. Největší podíl na zdrojích financování provozních výdajů měly národní granty (55,3 %). Dále se na zdrojích financování provozních výdajů podílel Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání (13,1 %), mezinárodní granty (11,3 %), institucionální podpora (8,1 %) a smluvní výzkum a pronájem výpočetního času (5,5 %). Ostatní zdroje financování (6,7 %) zahrnují zejména fond provozních prostředků.



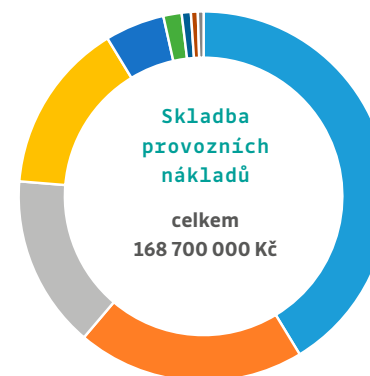
- 96,1 % Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy (16 projektů)
- 3,1 % Technologická agentura České republiky (2 projekty)
- 0,8 % Grantová agentura České republiky (1 projekt)



- 18,8 % ExCAPE
- 17,4 % ANTAREX
- 16,3 % READEX
- 15,1 % PRACE, 5. implementační fáze
- 7,2 % InnoHPC
- 7,1 % CloudiFacturing
- 6,1 % EXPERTISE
- 4,4 % IPROCUM (vypořádání dotace)
- 3,2 % LOWBRASYS
- 2,6 % TETRAMAX
- 1,0 % ExaQute
- 0,7 % POP2
- 0,2 % Superheroes 4 Science

## Provozní a investiční náklady

Celkové náklady IT4Innovations činily 174 100 000 Kč. Z této částky byly neinvestiční (provozní) náklady 168 700 000 Kč, tedy 96,9 %, a investiční (kapitálové) náklady 5 400 000 Kč, čili 3,1 %. Nejvyšší část provozních nákladů tvořily mzdové výdaje, služby a režijní výdaje (91,3 %).



- 41,3 % Mzdové výdaje - výzkumné týmy
- 19,9 % Mzdové výdaje - řízení, administrativa a superpočítačové služby
- 15,1 % Služby
- 15,0 % Režijní výdaje
- 5,2 % Zahraniční a domácí pracovní cesty (včetně zvaných přednášejících)
- 1,6 % Poplatky
- 0,8 % Stipendia
- 0,6 % Spotřební materiál
- 0,5 % Drobný dlouhodobý hmotný majetek





## Národní granty

## Projekty podpořené Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky

## Projekt velkých infrastruktur pro VaVaI

- IT4Innovations národní superpočítačové centrum

## Projekt Národního programu udržitelnosti II

- IT4Innovations Excellence in Science

## Dotace na specifický vysokoškolský výzkum pro rok 2018

- Optimalizace algoritmů strojového učení pro platformu HPC II
- Problematika dynamických systémů a jejich implementace na HPC
- Hardwarová akcelerace sestavovače matic a vývoj GUI knihovny ESPRESO

- Vývoj nástrojů pro optimalizaci spotřeby elektrické energie HPC aplikací
- Řešení úloh s nejistotami pomocí metody hraničních prvků
- Internacionalizace doktorského vzdělávání v oblasti molekulové fyziky
- Využití metod topologické optimalizace v inženýrské praxi
- Hydroxyapatitové nanokompozity: struktura a modelování
- Modelování difrakčních a plasmonických nanostruktur
- Elipsometrie a magnetooptické vlastnosti na Pr a Nd založených Perovskitů a kvadratický MO efekt na kubických (011) orientovaných filmech tranzitivních kovů na MgO substrátu

## Projekt podpořený Programem pro financování projektů mnohostranné vědeckotechnické spolupráce v Podunajském regionu

- Komplexní studium efektů v nízkodimenzionálních kvantových spinových systémech

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

- **NOVÝ** Modelování interakcí chladného plazmatu na bázi vzácných plynů se vzduchem
- **NOVÝ** Rozhraní grafén-kov – základ nových spintronických materiálů
- **NOVÝ** Vysvětlení a pochopení magnetostrikce v Fe-Ti slitinách

## Projekt podpořený Grantovou agenturou České republiky

- Nové materiály paliv pro jaderné reaktory IVté generace

## Projekty podpořené Technologickou agenturou České republiky

- Centrum kompetence pro molekulární diagnostiku a personalizovanou medicínu
- Paralelizovaný reakčně-transportní model šíření kontaminace v podzemních vodách

## Projekty Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání

- IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale
- Doktorská škola pro vzdělávání v oblasti matematických metod a nástrojů v HPC
- Vzdělávací tréninkové centrum IT4Innovations
- Technika pro budoucnost
- Umělá inteligence a uvažování
- **NOVÝ** Věda bez hranic

## Mezinárodní granty

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

- PRACE-5IP – Partnership for Advanced Computing in Europe, 5. implementační fáze
- ExCAPE – Exascale Compound Activity Prediction Engine
- ANTAREX – Autotuning and Adaptivity Approach for Energy Efficient Exascale HPC systems
- READEX – Runtime Exploitation of Application Dynamism for Energy-efficient Exascale Computing
- LOWBRASYS – A Low Environment Impact Brake System
- EXPERTISE – Experiments and High Performance Computing for Turbine Mechanical Integrity and Structural Dynamics in Europe
- TETRAMAX – Technology Transfer via Multinational Application Experiments

- CloudiFactoring – Cloudification of Production Engineering for Predictive Digital Manufacturing
- **NOVÝ** ExaQUTE – Exascale Quantifications of Uncertainties for Technology and Science Simulation
- **NOVÝ** POP2 – Performance Optimisation and Productivity 2

## Projekt Dunajského nadnárodního programu Interreg (fondy EU)

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

## Mezinárodní visehradský fond

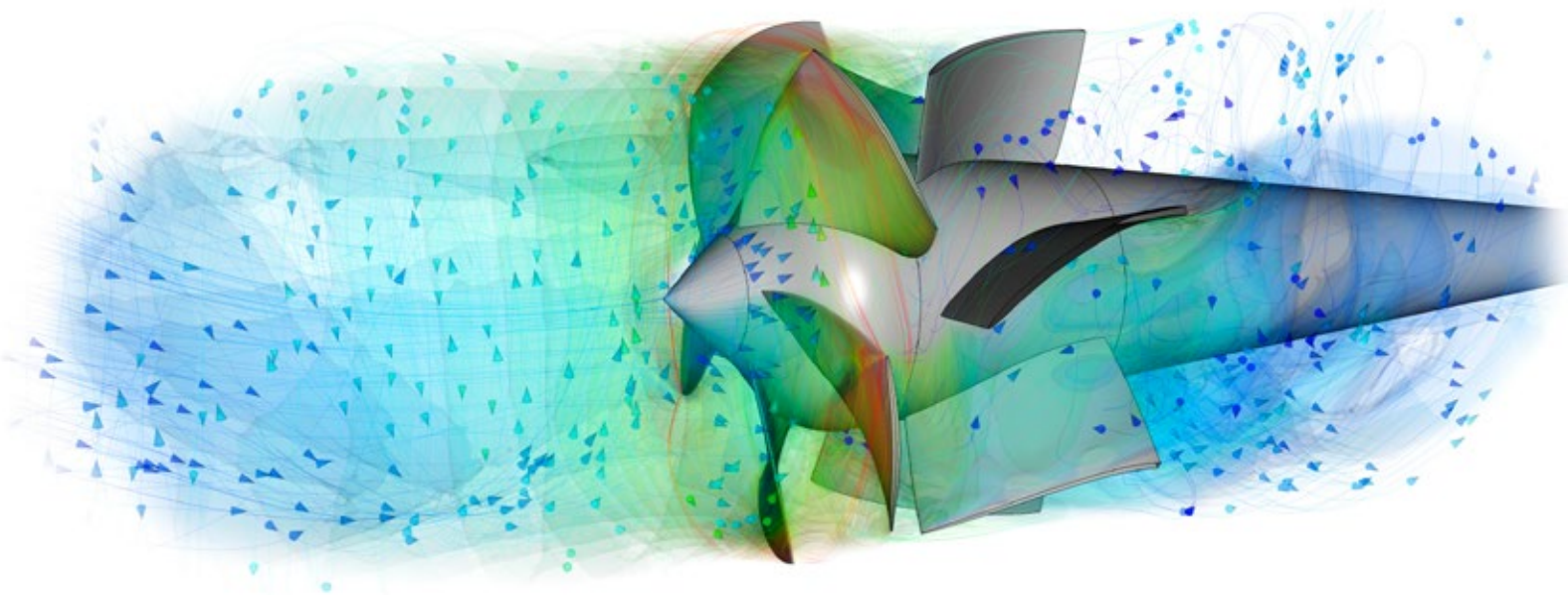
- **NOVÝ** Superhrdinové vědy

## SUPERPOČÍTAČOVÉ SLUŽBY

IT4Innovations poskytuje českým i zahraničním výzkumným týmům z akademické sféry i průmyslu nejmodernější technologie a služby v oblasti vysoce výkonného počítání. V současné době provozuje dva superpočítače – Anselm a Salomon.

V roce 2018 proběhla výběrová řízení na modernizaci výpočetní infrastruktury IT4Innovations plánovanou v rámci **projektu IT4Innovations národní superpočítačové centrum - cesta k exascale**, jenž je realizovan z Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy ČR. Výsledkem těchto řízení bude navýšení kapacit superpočítačové infrastruktury IT4Innovations

v roce 2019, a to o výpočetní klastr s výkonem přesahujícím 800 TFlop/s, který bude disponovat nejnovějšími dostupnými technologiemi, systém DGX-2 od společnosti NVIDIA, centralizovanou ICT infrastrukturu včetně projektového úložiště a WAN a virtualizační infrastrukturu. V roce 2020 by se pak uživatelé měli dočkat dalšího významného rozšíření výpočetních systémů.



## Technické parametry superpočítačů

213. nejvýkonnější superpočítač na světě v žebříčku TOP500  
listopad 2018

	ANSELM	SALOMON
Uvedení do provozu	jaro 2013	léto 2015
Teoretický výkon	94 Tflop/s	2 011 Tflop/s
Operační systém	RedHat Linux 64bit 6.x	RedHat Linux 64bit 6.x, CentOS 64bit 6.x
Výpočetní uzly	209	1 008
CPU na uzel	2x Intel SandyBridge, osmijádrový, 2,3 / 2,4 GHz, celkem 3 344 jader	2x Intel Haswell, dvanáctijádrový, 2,5 GHz, celkem 24192 jader
RAM na uzel	64 GB / 96 GB / 512 GB	128 GB / 3,25 TB (výpočetní uzel UV)
GPU akcelerátory	23x NVIDIA Tesla K20 (Kepler)	N/A
MIC akcelerátory	4x Intel Xeon Phi 5110P	864x Intel Xeon Phi 7120P, každý 61 jader, celkem 52 704 jader
Úložný prostor	320 TiB / home (rychlost 2 GB/s), 146 TiB / scratch (rychlost 6 GB/s)	500 TiB / home (rychlost 6 GB/s), 1 638 TiB / scratch (rychlost 30 GB/s)
Síť	Infiniband QDR 40 Gb/s	Infiniband FDR 56 Gb/s

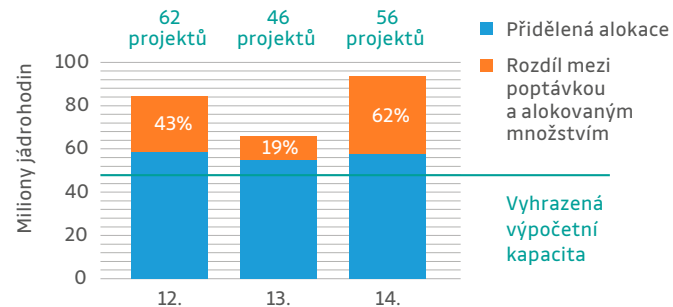
## Přidělování výpočetního času

Výpočetní kapacita IT4Innovations je určena pro řešení úloh ve výzkumu a vývoji především pro akademická pracoviště a další výzkumné instituce. Nevyužitá část kapacity může být uvolněna pro rozvoj spolupráce mezi akademickou sférou a průmyslovými partnery, či pro samostatné využití průmyslovými podniky.

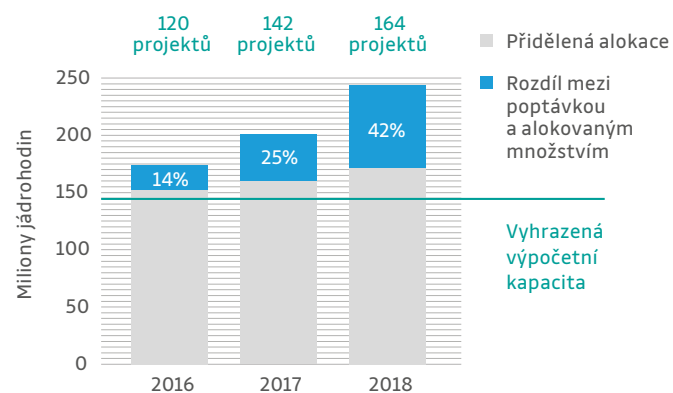
O výpočetní čas si instituce mohou zažádat v rámci veřejných grantových soutěží. Ty IT4Innovations vypisuje třikrát ročně. V roce 2018 bylo ve prospěch české vědy mezi 164 výzkumných projektů v rámci tří veřejných grantových soutěží rozděleno téměř 172 milionů jádrohodin.

Vyhrazená výpočetní kapacita pro jedno kolo veřejné grantové soutěže činí 48 milionů jádrohodin. V roce 2016 byl převis poptávky nad vyhrazenou kapacitou přibližně 21 %, v roce 2017 více než 39 % a v roce 2018 roven téměř 70 %. Alokační komise shledala většinu žádostí podaných v roce 2018 jako vědecky i technicky velmi dobře připravené. Z důvodu nedostačující výpočetní kapacity však byla nucena výpočetní čas projektům krátit. Rozdíl mezi poptávkou a výpočetní kapacitou vyhrazenou pro veřejné grantové soutěže bývá kompenzován rezervami ředitelství IT4Innovations a zdroji systému Anselm. V roce 2018 činil rozdíl mezi poptávkou a alokovaným množstvím přibližně 42 %.

### Veřejné grantové výzvy v roce 2018



### Srovnání poptávky a alokovaných výpočetních zdrojů ve veřejných grantových soutěžích v letech 2016–2018



Rok	Rozdíl mezi poptávkou a vyhrazenou kapacitou (3*48 milionů jádrohodin)	Rozdíl mezi poptávkou a alokovaným množstvím
2016	21 %	14 %
2017	40 %	25 %
2018	70 %	42 %

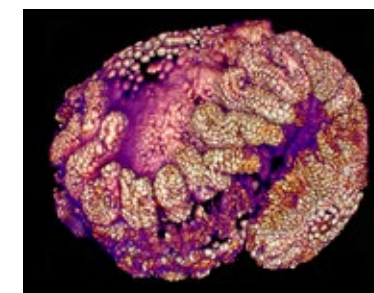
Celkem 42 projektů žadatelů z VŠB – Technické univerzity Ostrava získalo v rámci veřejných grantových soutěží v roce 2018 výpočetní zdroje ve výši přibližně 43 milionů jádrohodin. 9 projektů vedli vědci z Fakulty stavební, Fakulty elektrotechnické a informatiky, Centra nanotechnologií, Fakulty strojní a z Fakulty materiálově-technologické. Zbývajících 33 projektů bylo pod vedením výzkumných pracovníků z vysokoškolského ústavu IT4Innovations.



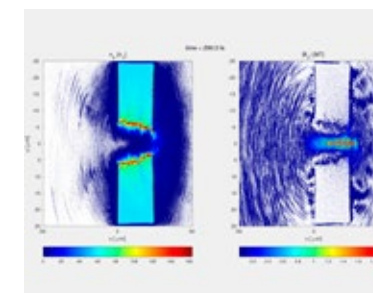
Výsledky 12. veřejné grantové soutěže v Newsletteru Q1/2018



Rekonstrukce viru klíšové encefalitidy pomocí kryoelektronové mikroskopie a projekt Mgr. Pavla Plevky, Ph.D. z CEITEC MU

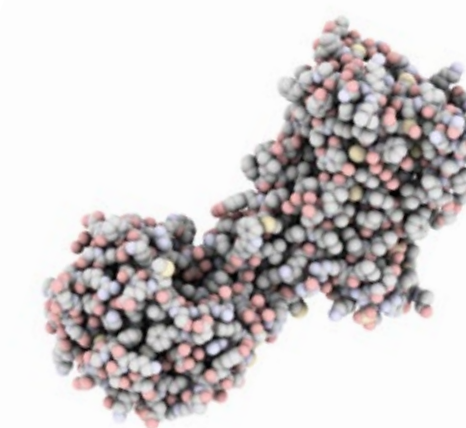


Embryo korýše (Parhyale) zobrazené light sheet mikroskopií a projekt Ing. Pavla Tomančáka, Ph.D. z IT4Innovations



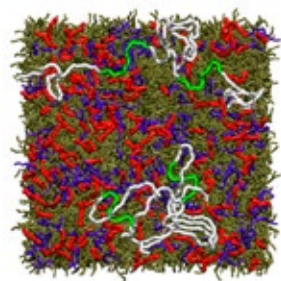
Vizualizace výsledků 2D simulace interakce laserového impulsu a projekt Ing. Martina Matyše z ČVUT v Praze

Z externích výzkumných institucí využili infrastrukturu IT4Innovations nejvíce vědci z Akademie věd České republiky (AV ČR). Celkem 31 projektům žadatelů z 10 ústavů této instituce bylo přiděleno 38,5 milionů jádrohodin. Nejvíce výpočetních zdrojů bylo přiděleno projektům Ústavu organické chemie a biochemie a Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského. Celkové alokace ve výši téměř 10 milionů jádrohodin či více získaly také další instituce: CEITEC, Univerzita Karlova, České vysoké učení technické v Praze a Masarykova univerzita.

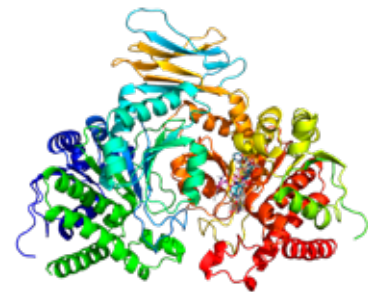




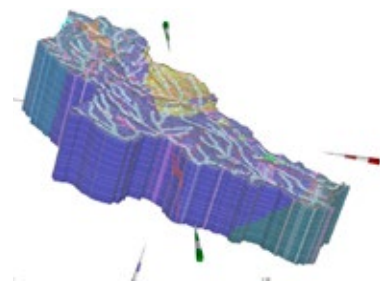
Výsledky 13. veřejné grantové soutěže v Newsletteru Q2/2018



Simulace interakcí lidského slzného filmu s léky a projekt Dr. Lukasje Cwiklika, Ph.D., DSc. z Akademie věd ČR



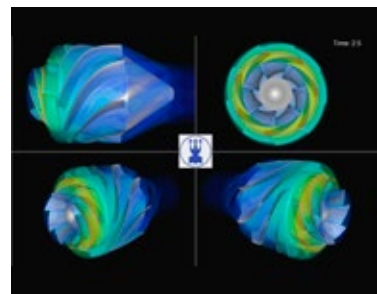
Molekula inhibitoru navázaná v aktivním místě enzymu isocitrát dehydrogenázy 1 (idh1) a projekt Dr. Gaspara Pinto a Mgr. Jana Štourače z Masarykovy univerzity



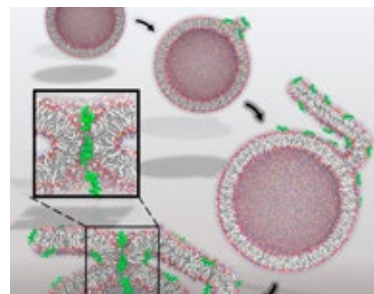
Geologický model (FEFLOW) a projekt Ing. Michala Podhorányie, Ph.D. z IT4Innovations



Výsledky 14. veřejné grantové soutěže v Newsletteru Q4/2018



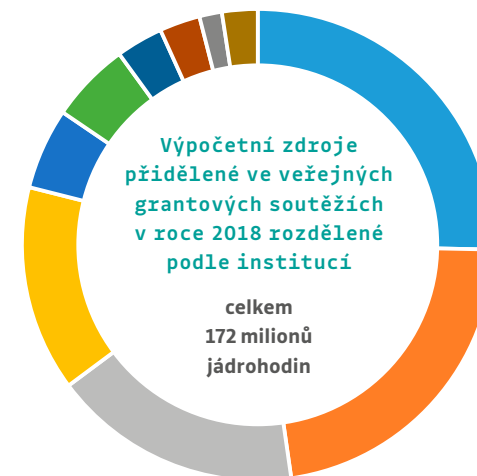
CFD simulace vodního čerpadla a projekt Mgr. Tomáše Krátkého z Univerzity Palackého



Peptid penetrující buňku a projekt prof. Mgr. Pavla Jungwirtha, CSc., DSc. z AV ČR



Schéma virtuálního prohledávání knihoven a projekt prof. Ing. Pavla Hobzy, DrSc., FRSC z AV ČR



- 25% VŠB-TUO (42 projektů)
- 22% Ústavy Akademie věd ČR (31 projektů)
- 17% CEITEC (10 projektů)
- 14% Univerzita Karlova (36 projektů)
- 6% České vysoké učení technické v Praze (8 projektů)
- 6% Masarykova univerzita (9 projektů)
- 3% Vysoké učení technické v Brně (8 projektů)
- 3% Ostravská univerzita (5 projektů)
- 2% Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně (3 projekty)
- 2% Ostatní (12 projektů)



- 61% Materiálové vědy (48 projektů)
- 24% Biovědy (32 projektů)
- 5% Inženýrství (25 projektů)
- 3% Fyzika (9 projektů)
- 3% Vědy o Zemi (20 projektů)
- 2% Aplikovaná matematika (16 projektů)
- 1% Výpočetní vědy (8 projektů)
- 1% Astrofyzika (6 projektů)

Seznamy projektů, kterým byly přiděleny výpočetní zdroje v rámci veřejných grantových soutěží v roce 2018 v pořadí 12., 13. a 14.



12

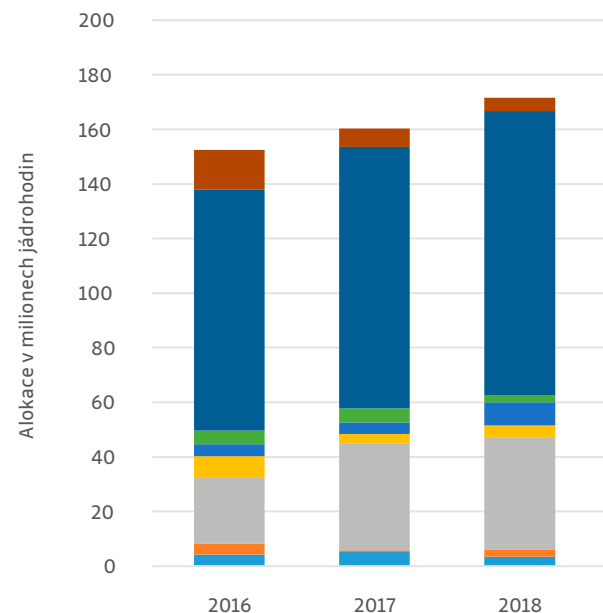


13



14

V posledních třech letech bylo ve veřejných grantových soutěžích přerozděleno téměř 490 milionů jádrohodin mezi 426 projektů. 81 % výpočetních zdrojů bylo přiděleno projektům z oblasti materiálové vědy a biovědy.



Alokace výpočetních zdrojů  
v letech 2016, 2017 a 2018 dle vědních oborů

- Fyzika (30 projektů)
- Materiálové vědy (124 projektů)
- Výpočetní vědy (34 projektů)
- Inženýrství (60 projektů)
- Vědy o Zemi (44 projektů)
- Biovědy (88 projektů)
- Astrofyzika (9 projektů)
- Aplikovaná matematika (37 projektů)



- 77 % Materiálové vědy (2 projekty)
- 14 % Inženýrství (6 projektů)
- 6 % Biovědy (3 projekty)
- 2 % Výpočetní vědy (3 projekty)
- 1 % Aplikovaná matematika a Vědy o Zemi (3 projekty)

IT4Innovations rovněž přiděluje 5 % svých výpočetních kapacit projektům na základě tzv. rozhodnutí ředitelství. Žádost lze podat kdykoliv. Jedná se o nepravidelné přidělování výpočetního času na základě posouzení vedením IT4Innovations. Ucházet se mohou subjekty z nekomerční sféry, a to v takových případech, kdy nelze využít veřejné grantové soutěže. V roce 2018 byly na základě rozhodnutí ředitelství 17 projektům přiděleny 4 miliony jádrohodin.

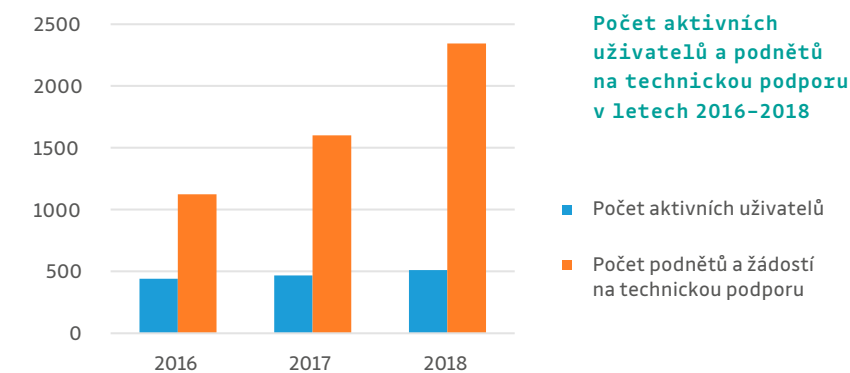
Subjekty z komerční sféry si mohou výpočetní čas pronajmout. V roce 2018 uzavřelo 7 podniků komerční smlouvy ve výši přibližně 3 miliony jádrohodin.

## Uživatelé výpočetních zdrojů

Počet aktivních uživatelů v roce 2018 byl 510. Ve srovnání s údajem za rok 2017 se toto číslo zvýšilo o 8,7 %.

Technická podpora IT4Innovations obdržela v roce 2018 celkem 2 343 podnětů a žádostí. 2 341 jich bylo úspěšně vyřešeno a 2 žádosti byly odloženy.

Interní reakční doba (24 hodin na první odpověď) byla dodržena u 99,96 % podnětů. Interní doba prvního uzavření, která nesmí být větší než 30 dnů, byla dodržena u 99,23 % podnětů.



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

z Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání MŠMT konkrétně projektu **IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale**. Významnými mezinárodními projekty, do kterých se IT4Innovations díky členství v evropské infrastruktuře Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) zapojuje, jsou stejnojmenné infrastrukturní projekty financované z dotačního titulu Evropské komise Horizont 2020. V roce 2018 se realizovala v pořadí již 5. fáze projektu s názvem PRACE-5IP.

## Národní granty

**IT4Innovations národní superpočítačové centrum (2016–2019)**

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

**ŘEŠITEL** doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

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

IT4Innovations disponuje v současnosti ve veřejné sféře v ČR nejvýkonnějším výpočetním systémem s teoretickým výkonem 2 PFlop/s a menším systémem s teoretickým výpočetním výkonem 94 TFlop/s.

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

<http://www.msmt.cz>

## Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání

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

**IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** EF16\_013/0001791 (výzva č. 02\_16\_013 Výzkumné infrastruktury)

**ŘEŠITEL** Mgr. Branislav Jansík, Ph.D.

Hlavním cílem projektu je rozšíření a modernizace výzkumné infrastruktury IT4Innovations tak, aby byla minimálně udržena stávající technologická úroveň HPC v ČR v porovnání s rozvinutými, zejména evropskými zeměmi. Záměrem aktivit tohoto projektu je v roce 2018 modernizovat vybavení a stávající superpočítače doplnit technologicky pokročilejším klastrem rozsahem a určením obdobným stávajícímu systému Anselm. V roce 2020 bude pořízen superpočítač, který svou kapacitou několikanásobně předčí Salomon, dosud nejvýkonnější systém IT4Innovations.

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

## Mezinárodní granty

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

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

**ŘEŠITEL** doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

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

<http://www.prace-ri.eu/prace-5ip/>

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

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

**ŘEŠITEL** Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.

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

<http://www.interreg-danube.eu>



Stěžejními výzkumnými náměty IT4Innovations jsou témata, která souvisí s využitím superpočítačové infrastruktury jako je zpracování a analýza rozsáhlých dat, aplikace metod umělé inteligence, vývoj paralelních škálovatelných algoritmů, řešení náročných inženýrských úloh, modelování pro nanotechnologie a materiálový výzkum a výzkum superpočítačové infrastruktury. Výzkum v těchto oblastech je soustředěn do pěti laboratoří. Laboratoř vývoje paralelních

algoritmů vyvíjí vlastní škálovatelné algoritmy a softwarové knihovny, které jsou využívány pro spolupráci s akademickými i průmyslovými partnery. Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace se věnuje zpracování a analýze rozsáhlých dat, které jsou součástí pokročilých datově orientovaných počítačových simulací. Laboratoř modelování pro nanotechnologie se zaměřuje zejména na návrh nových materiálů pomocí výpočtů elektronové struktury.

Laboratoř pro big data analýzy se zabývá vyhledáváním informací ukrytých ve velmi rozsáhlých souborech dat. V lednu 2017 byla nově ustanovena také Laboratoř pro výzkum infrastruktury. Laboratoř posílila vlastní výzkum superpočítačové infrastruktury IT4Innovations a zaměřuje se na vývoj metod týkajících se inovativního využití, provozu a monitorování výpočetní infrastruktury.

Laboratoř	Zkratka	Vedoucí laboratoře	Úvazky v FTE
Laboratoř vývoje paralelních algoritmů	PAR	Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.	22,25
Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace	ADAS	Ing. Jan Martinovič, Ph.D.	35,43
Laboratoř modelování pro nanotechnologie	NANO	prof. Ing. Jaromír Pištora, CSc.	20,13
Laboratoř pro big data analýzy	BIGDATA	prof. Ing. Miroslav Vozňák, Ph.D.	6,34
Laboratoř pro výzkum infrastruktury	INFRA	Ing. Lubomír Říha, Ph.D.	14,40

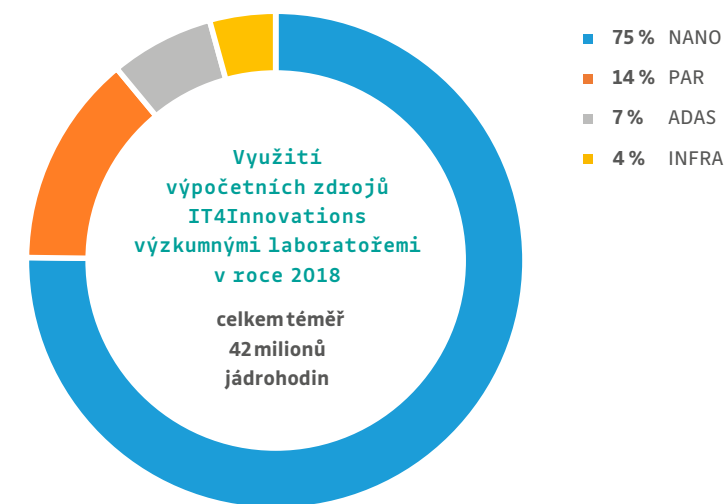
V průběhu roku 2018 vyhodnotila Vědecká rada Centra excelence IT4Innovations šest projektových návrhů na hlavní výzkumné směry reprezentující vědeckou excelenci IT4Innovations, tzv. vlajkové lodi ve vědě a výzkumu. Vlajkovými loděmi IT4Innovations se staly tři projektové návrhy:

**ESPRESO, Knihovna masivně paralelních řešičů pro inženýrské aplikace**  
**ŘEŠITEL** Ing. Tomáš Brzobohatý, Ph.D.

**Návrh materiálů – blíže realitě prostřednictvím exascalových výpočtů**  
**ŘEŠITEL** Ing. Dominik Legut, Ph.D.

**HPC platformy pro spouštění vědeckých úloh**  
**ŘEŠITELÉ** Ing. Jan Martinovič, Ph.D. a Ing. Stanislav Böhm, Ph.D.

V roce 2018 bylo 33 projektům výzkumných laboratoří IT4Innovations přiděleno v rámci veřejných grantových soutěží téměř 42 milionů jádrohodin, což je 24 % celkového alokovaného množství. Nejvíce projektů podali zaměstnanci Laboratoře vývoje paralelních algoritmů a nejvíce výpočetních zdrojů získala Laboratoř modelování pro nanotechnologie.



## Významné události

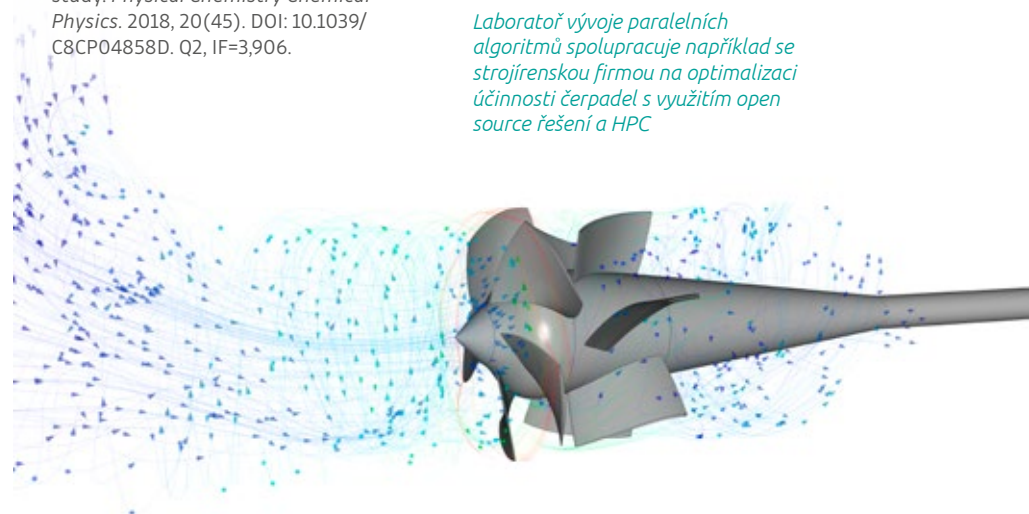
- > Ocenění **Nejlepší poster** za příspěvek „Workflow for Parallel Processing of Sequential Mesh Databases“ na Supercomputing Conference, listopad 2018, Dallas, USA.
- > Získání projektu H2020 ExaQUTE (Exascale Quantifications of Uncertainties for Technology and Science Simulation). Projekt započal v červnu 2018 a jeho hlavním cílem je vyvinout nové metody pro řešení komplexních inženýrských úloh s využitím numerických simulací a budoucích exascalových systémů.
- > Úspěšná spolupráce s Univerzitou v Toulouse při výchově PhD studentů, 1 úspěšně obhájená práce před česko-francouzskou komisí (Cyril Van de Steen, Modeling of Transport Properties of Ions of Krypton and Xenon for Optimization Cold Rare-gas Plasmas Generators, 1 nový společný student v režimu cotutelle (Martin Beseda, Modelling of Transport Properties of Molecular Ions of Helium in Air a získání financí na dalšího studenta.
- > Smluvní výzkum za více než 2 mil. Kč s firmami jako jsou Continental Automotive Czech Republic s.r.o., Invent Medical Group s r.o., Borcad cz s.r.o., Doosan Škoda Power, s.r.o. a Siemens s.r.o.

## Významné publikace

- > Brzobohatý, T., M. Jarošová, R. Kučera, V. Šátek. Path-following Interior Point Method: Theory and Applications for the Stokes Flow with a Stick-slip Boundary Condition. *Advances in Engineering Software*. 2018. DOI: 10.1016/j.advengsoft.2018.06.010. Q1, IF=3,198.
- > Van de Steen, C., M. Benhenni, R. Kalus, B. Lepetit, F. X. Gádea, M. Yousfi. Quantum and Semi-classical Collision Cross-sections and Transport Data for Kr<sup>+</sup>/Kr system. *Plasma Sources Science and Technology*. 2018, 27(6). DOI: 10.1088/1361-6595/aac8c1. Q1, IF=3,302.
- > Čosić R., A. Vítek, R. Kalus. Photoabsorption Spectra of Small Mercury Clusters. A computational study. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2018, 20(45). DOI: 10.1039/C8CP04858D. Q2, IF=3,906.

- > Zapoměl, J., P. Ferfecki. The Oscillation Attenuation of an Accelerating Jeffcott Rotor Damped by Magnetorheological Dampers Affected by the Delayed Yielding Phenomenon in the Lubricating Oil. *Journal of Vibration and Acoustics*. 2018, 140 (1). DOI: 10.1115/1.4037512. Q2, IF=1,777.
- > Říha L., M. Merta, R. Vavřík, T. Brzobohatý, A. Markopoulos, O. Meca, O. Vysocký, T. Kozubek, V. Vondrák. A massively Parallel and Memory Efficient FEM Toolbox with a Hybrid Total FETI Solver with Accelerator Support. *The International Journal of High Performance Computing Applications*. 2018. DOI: 10.1177/1094342018798452. Q2, IF=2,015.

*Laboratoř vývoje paralelních algoritmů spolupracuje například se strojírenskou firmou na optimalizaci účinnosti čerpadel s využitím open source řešení a HPC*



## Významné události

- > Úspěch při podávání mezinárodního H2020 projektu **LEXIS** (Large-scale Execution for Industry & Society) do oblasti „ICT-11-2018-2019: HPC and Big Data enabled Large-scale Test-beds and Applications“. Projekt byl přijat k financování s počátkem v lednu 2019. IT4Innovations je koordinátorem tohoto projektu, do kterého je zapojeno 15 dalších mezinárodních partnerů.
- > Dva výsledky práce laboratoře byly nominovány na **cenu Inovačního radaru Evropské komise**. Aplikace **Hyperloom** pro jednoduché zpracování dat na superpočítačích byla nominována v kategorii Excelentní výzkum a **inteligentní navigace** vyvinutá ve spolupráci s firmou Sygic v kategorii Inovace v rané fázi. Inteligentní navigace postoupila na základě hlasování do finále.
- > Úspěšné obhájení a ukončení projektu **ESA TEP URBAN Turbo-Hub**. Ke konci projektu požádalo více než 330 institucí z více než 40 zemí o přístup k produktům a službám vyvinuté platformy Urban TEP. Pokračování aktivit v navazujícím projektu **ESA URBAN TEP II** probíhá již od srpna 2018 s cílem vytvořit plně soběstačnou a udržitelnou platformu pro analýzu satelitních snímků z hlediska městské urbanizace.
- > Byl úspěšně dokončen a obhájen projekt **EXCAPE**. Součástí projektu byl vývoj platformy HyperLoom, která byla naplno využita při

experimentech v rámci projektu. Platforma je dále modifikována pro využití v projektu ExaQUTE.

- > Georg Zitzlsberger získal **certifikát instruktora programu NVIDIA Deep Learning Institute (DLI)**. Jako ambasador NVIDIA DLI za VŠB – Technickou univerzitu Ostrava povede kurz Fundamentals of Deep Learning for Computer Vision.
- > Tomáš Martinovič v prosinci 2018 obhájil doktorskou práci Tools for Time Series Analysis of Nonlinear Dynamical Systems v oboru Výpočetní vědy pod vedením doc. RNDr. Marka Lamparta, Ph.D. Práce byla oceněna jako nejlepší disertační práce obhájená v roce 2018 v kategorii Informační technologie v mezinárodní soutěži vyhlášené konsorciem univerzit PROGRES 3.

## Významné publikace

- > Ovečka, M., D. von Wangenheim, P. Tomančák, O. Šamajová, G. Komis, J. Šamaj. Multiscale Imaging of Plant Development by Light-sheet Fluorescence Microscopy. *Nature Plants*. 2018, 4(9), 639-650. DOI: 10.1038/s41477-018-0238-2. Q1, IF=11,471.
- > Ruiz-Constán, A., A. M. Ruiz-Armenteros, S. Martos-Rosillo, J. Galindo-Zaldívar, M. Lazecký, et al. SAR Interferometry Monitoring of Subsidence in a Detritic Basin Related to Water Depletion in the Underlying Confined Carbonate Aquifer (Torremolinos, southern

Spain). *Science of the Total Environment*. 2018, 636, 670-687. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2018.04.280. Q1, IF=4,61.

- > Praks, P. a D. Brkić. One-log Call Iterative Solution of the Colebrook Equation for Flow Friction Based on Padé Polynomials. *Energies*. 2018, 11(7). DOI: 10.3390/en11071825. Q2, IF=2,676.
- > Lampart, M., J. Zapoměl. The Motion Characteristics of the Double-pendulum System with Skew Walls. *Mathematical Methods in the Applied Sciences*. 2019; 42(2), 475-487. DOI: 10.1002/mma.5354. Q2, IF=1,18.
- > Lampart, M., J. Zapoměl. Mathematical Methods in the Applied Sciences. 2018, 41(17), 7106-7114. DOI: 10.1002/mma.4650. Q2, IF=1,18.



*Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace nabízí například HPC jako službu pro oblast hydrologického modelování*



## Významné události

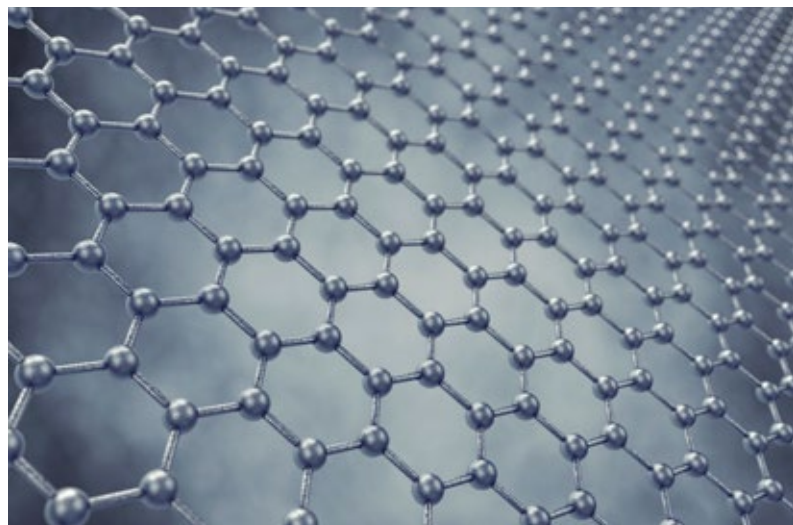
- > Tibor Fördös v červenci 2018 úspěšně obhájil v Paříži (v Ecole Polytechnique, Palaiseau) **disertační práci** před francouzsko-českou komisí.
- > Zapojení do **2<sup>nd</sup> French-Czech Barrandé Workshop**, který proběhl v Paříži v říjnu 2018.

## Významné publikace

- > Zhang, S., D. Legut, Z. Fu, T. C. Germann a R. Zhang. High-throughput Screening for Superhard Carbon and Boron Nitride Allotropes with Superior Stiffness and Strength. Carbon. 2018, 137, 156-164. DOI: 10.1016/j.carbon.2018.05.020. Q1, IF=7,082.

- > Halagačka, L., M. Vanwolleghem, F. Vaurette, J. B. Youssef, K. Postava, J. Pištora a B. Dagens. Magneto-plasmonic Nanograting Geometry Enables Optical Nonreciprocity Sign Control. Optics Express. 2018, 26(24). DOI: 10.1364/OE.26.031554. Q1, IF=3,356.
- > Fördös, T., K. Postava, H. Jaffrès, D. Quang To, J. Pištora a H. J. Drouhin. Mueller Matrix Ellipsometric Study of Multilayer Spin-VCSEL Structures with Local Optical Anisotropy. Applied Physics Letters. 2018, 112(22). DOI: 10.1063/1.5009411. Q1, IF=3,495.

- > Mrázková, Z., I. P. Sobkowicz, M. Foldyna, K. Postava, I. Florea, J. Pištora a P. Roca i Cabarrocas. Optical Properties and Performance of Pyramidal Texture Silicon Heterojunction Solar Cells: Key Role of Vertex Angles. Progress in Photovoltaics: Research and Applications. 2018, 26(6), 369-376. DOI: 10.1002/pip.2994. Q1, IF=6,456.
- > Mičica, M., S. Eliet, M. Vanwolleghem, et al. High-Resolution THz Gain Measurements in Optically Pumped Ammonia. Optics Express. 2018, 26(16). DOI: 10.1364/OE.26.021242. Q1, IF=3,356.



Laboratoř modelování pro nanotechnologie se specializuje na vývoj nových materiálů a zkoumání magnetooptických vlastností jejich povrchů

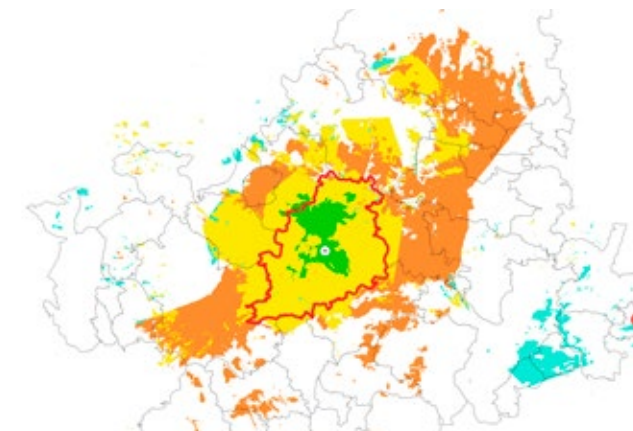
## Významné události

- > Získání nového projektu H2020 s názvem „**Open European Quantum Key Distribution Testbed**“ (OPENQKD) v oblasti kybernetické bezpečnosti ve výzvě SU-ICT-04-2019. Projekt je koordinován Austrian Institute of Technology a je zaměřen na vysoce bezpečné sítě využívající pro distribuci klíčů principů kvantové mechaniky. Celkový rozpočet konsorcia projektu je 15 mil. €, čímž se z pohledu objemu financování řadí mezi klíčové záměry v oblasti bezpečnosti, které Evropská komise podpořila.

Problematika lokalizační přesnosti a lokalizační chyby na příkladu náhodně vybrané obce. Obrázek ilustruje technické a prostorové okolnosti, které je třeba zvážit při vztažení pozorování jevu odehrávajícího se ve funkčním území na území administrativní. Bílý bod – geometrický střed administrativního území sledované obce, červeně ohraničený polygon – hranice administrativního území obce, transparentní polygony – hranice administrativního území obcí pokrytých stejnými buňkami, červený bod – nejvzdálenější obydlené místo, barevné polygony – pokrytí území mobilní sítí.

## Významné publikace

- > Továrek, J., G. H. Ilk, P. Partila a M. Vozňák. Human Abnormal Behavior Impact on Speaker Verification Systems. IEEE Access. 2018, 6, 40120-40127. DOI: 10.1109/ACCESS.2018.2854960. Q1, IF=3,557.
- > Nguyen, T. N., T. H. Quang Minh, P. T. Tran, M. Vozňák, T. T. Duy, T.-L. Nguyen, a P. T. Tin. Performance Enhancement for Energy Harvesting Based Two-Way Relay Protocols in Wireless Ad-hoc Networks with Partial and Full Relay Selection Methods. Ad Hoc Networks. 2019, 84, 178-187. DOI: 10.1016/j.adhoc.2018.10.005. Q1, IF=3,151.
- > Nguyen, T. N., P. T. Tin, D. H. Ha, M. Vozňák, P. T. Tran, M. Tran, a T.-L. Nguyen Hybrid TSR-PSR Alternate Energy Harvesting



- Relay Network over Rician Fading Channels: Outage Probability and SER Analysis. Sensors. 2018, 18(11). DOI: 10.3390/s18113839. Q2, IF=2,475.
- > Nguyen, T. N., M. Tran, P. T. Tran, P. T. Tin, T.-L. Nguyen, D.-H. Ha a M. Vozňák. On the Performance of Power Splitting Energy Harvested Wireless Full-Duplex Relaying Network with Imperfect CSI over Dissimilar Channels. Security and Communication Networks. 2018, 1-11. DOI: 10.1155/2018/6036087. Q4, IF=0,904.
- > Egllynas, T., M. Jusis, S. Jakovlev, A. Senulis, A. Andziulis, S. Gudas. Analysis of the Efficiency of Shipping Containers Handling/Loading Control Methods and Procedures. Advances in Mechanical Engineering. 2019, 11(1). DOI: 10.1177/1687814018821229. Q4, IF=0,848.

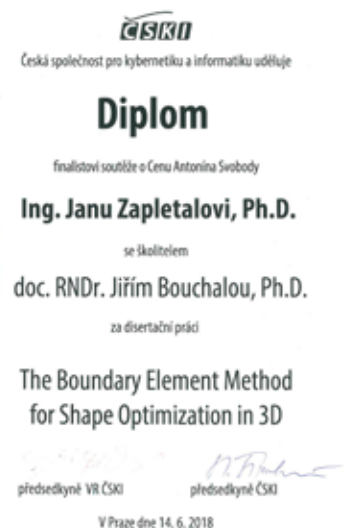
## Významné události

- > Ocenění Nejlepší poster za příspěvek „Workflow for Parallel Processing of Sequential Mesh Databases“ na Supercomputing Conference, listopad 2018, Dallas, USA.
- > Propagační snímek Agent 327: Operation Barbershop, který byl v rámci spolupráce s Blender Institute renderován s využitím infrastruktury IT4Innovations, získal prestižní celosvětovou cenu Webby Awards.
- > Úspěšné ukončení a obhájení projektu READEX financovaného programem Evropské unie H2020. www.readex.eu
- > Navázání na projekt Performance Optimisation and Productivity 1 (POP1) získáním HPC centra excelence POP2, které je zaměřeno na optimalizaci paralelních aplikací běžících na HPC infrastruktuře. www.pop-coe.eu
- > Spolupráce v projektu READEX vedla k publikaci kapitoly v knize System Scenario-based Design Principles and Applications: Kjeldsberg, P.G., R. Schone, M. Gerndt, L. Říha, V. Kannan, K. Diethelm, M.-C. Sawley, J. Zapletal, O. Vysocký, M. Kumaraswamy, and W. E. Nagel. Runtime Exploitation of Application Dynamism for Energy-efficient Exascale Computing, Springer International Publishing AG. Kniha vyjde v průběhu roku 2019.
- > Jan Zapletal, výzkumný pracovník IT4Innovations a absolvent Fakulty elektrotechniky a informatiky VŠB – Technické univerzity Ostrava, získal 1. místo v Soutěži o nejlepší dizertační práci obhájenou v roce 2017 v kategorii Informační technologie a elektrotechnika, kterou uděluje VŠB-TUO a konsorcium Progres 3, za práci na téma „The Boundary Element Method for Shape Optimization in 3D.“
- > Jan Zapletal postoupil do finále soutěže o Cenu Antonína Svobody, jež uděluje Česká společnost pro kybernetiku a informatiku.

## Významné publikace

- > Malý, L., J. Zapletal, M. Merta, L. Říha a V. Vondrák. Evaluation of the Intel Xeon Phi Offload Runtimes for Domain Decomposition Solvers. *Advances in Engineering Software*. 2018, 125, 146-154. DOI: 10.1016/j.advengsoft.2018.06.011. Q1, IF=3,198.
- > Zapletal, J., G. Of a M. Merta. Parallel and Vectorized Implementation of Analytic Evaluation of Boundary Integral Operators. *Engineering Analysis with Boundary Elements*. 2018, 96, 194-208. DOI: 10.1016/j.enganabound.2018.08.015. Q2, IF=2,138.
- > Říha, L., M. Merta, R. Vavřík, T. Brzobohatý, A. Markopoulos, O. Meca, O. Vysocký, T. Kozubek a V. Vondrák. A Massively Parallel and Memory-Efficient FEM Toolbox with a Hybrid Total FETI Solver With Accelerator Support. *The International Journal of High Performance Computing Applications*. 2018. DOI: 10.1177/1094342018798452. Q2, IF=2,015.
- > Dohr, S., J. Zapletal, G. Of, M. Merta a M. Kravčenko. A Parallel Space-Time Boundary Element Method for the Heat Equation. *Computers & Mathematics with Applications*. DOI: 10.1016/j.camwa.2018.12.031. Q1, IF=1,860.
- > Scionti, A., S. Mazumdar a A. Portero. Towards a Scalable Software Defined Network-on-Chip for Next Generation Cloud. *Sensors*. 2018, 18, 2330. DOI: 10.3390/s18072330. Q2, IF=2,475.
- > Kumaraswamy, M., A. Chowdhury, M. Gerndt, Z. Bendifallah, O. Bouizi, L. Říha, O. Vysocký, M. Beseda a J. Zapletal. Domain Knowledge Specification for Energy Tuning. *Concurrency and Computation: Practice and Experience*. 2018. DOI: 10.1002/cpe.4650. Q3, IF=1,114.

*CC-BY, Blender Institute, snímek z The Daily Dweebs – ukázka modelu a finální vizualizace. S Blender Institute spolupracuje IT4Innovations v oblasti vizualizací počítačem generovaných scén. Vyvíjí modul CyclesPhi, který umožňuje využít pro renderování výpočetní síly celého superpočítače, včetně jeho akceleračních karet typu Intel Xeon Phi.*



## Národní granty

IT4Innovations Excellence in Science (2016–2020)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU LQ1602

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

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

Komplexní studium efektů v nízkodimenzionálních kvantových spinových systémech (2017–2018)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU 8X17046

ŘEŠITEL Ing. Dominik Legut, Ph.D.

Náplní projektu je přezkoumání vlastností vybraného dvojrozměrného magneticky frustrovaného kvantového systému  $\text{Cu}(\text{tn})\text{Cl}_2$  ( $\text{tn}=1,3$ –diaminopropan =  $\text{C}_3\text{H}_{10}\text{N}_2$ ) z prvních principů s cílem přispět k procesu poznání původu nekonvenčních jevů pozorovaných v dvojrozměrných frustrovaných magnetech.

NOVÝ

Vysvětlení a pochopení magnetostrikce v Fe-Ti slitinách (2018–2019)

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU 8J18AT004

ŘEŠITEL Ing. Dominik Legut, Ph.D.

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

NOVÝ

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

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU 8J18DE004

ŘEŠITEL Ing. Dominik Legut, Ph.D.

Hlavním cílem projektu je studium magnetismu v grafénu. Ten je indukovan magnetickou vrstvou např. Co, Ni, slitin Fe, např. FeCo. V rámci projektu je metodami reflektivní a polarizační spektroskopie v okolí rezonanční energie uhlíkové 1s hrany získána základní optická charakteristika, tj. optické konstanty vzorků, a to jak pomocí výpočtů z prvních principů, tak experimentálně pomocí

magneto-optických metod naměřených na grafénu a na vysoce orientovaném pyrolytickém grafitu (HOPG), a to bez či na různých magnetických a nemagnetických substrátech.

NOVÝ

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

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU 8J18FR031

ŘEŠITEL doc. RNDr. René Kalus, Ph.D.

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

DOTACE MŠMT NA SPECIFICKÝ VYSOKOŠKOLSKÝ VÝZKUM PRO ROK 2018

Optimalizace algoritmů strojového učení pro platformu HPC II

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU SP2018/142

ŘEŠITEL Ing. Martin Golasowski

Projekt byl zaměřen na využití algoritmů neřízeného strojového učení pro předzpracování dat pro algoritmy řízeného strojového učení. Cílem projektu bylo propojit vhodné algoritmy navržené v 1. fázi projektu a vytvořit implementaci pro platformu HPC se zaměřením na reálné rozsáhlé datové kolekce a jejich průběžné zpracovávání.

Problematika dynamických systémů a jejich implementace na HPC

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU SP2018/173

ŘEŠITEL Ing. Tomáš Martinovič, Ph.D.

Cílem projektu bylo navrhnout a implementovat paralelní algoritmy schopné řešit úlohy dynamických systémů. Speciální pozornost byla věnována metodám pro analýzu nelineárních dynamických systémů, teorie chaosu a operačního výzkumu. Při řešení projektu bylo využito poznatků z předchozího projektu SGS 2017/182.

Hardwarová akcelerace sestavovače matic a vývoj GUI knihovny ESPRESO

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU SP2018/159

ŘEŠITEL Ing. Radim Vavřík

Náplní projektu byla optimalizace části kódu v MKP knihovně ESPRESO pro architektury x86 (primárně Intel Xeon, případně Xeon Phi generace KNL) a GPU akcelerátory podporující technologii CUDA. Další součástí projektu byl vývoj grafického uživatelského rozhraní (GUI) pro konfiguraci úloh řešených pomocí knihovny ESPRESO. Výstupem projektu byl vylepšený kód knihovny ESPRESO s vyšší výkonností při řešení reálných inženýrských úloh a jeho rozšíření o modul GUI.

Vývoj nástrojů pro optimalizaci spotřeby elektrické energie HPC aplikací

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU SP2018/134

ŘEŠITEL Ing. Ondřej Vysocký

Přínosem navrhovaného projektu bylo rozšíření nástroje MERIC o podporu nových architektur (Intel Xeon Phi, ARM a další), které umožní jejich srovnání z hlediska spotřeby elektrické energie a možných úspor při statickém a dynamickém ladění SW i HW parametrů. Nástroj RADAR byl obohacen o grafické uživatelské rozhraní a další metody vyhodnocení naměřených dat.

Řešení úloh s nejistotami pomocí metody hraničních prvků

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU SP2018/161

ŘEŠITEL Ing. Michal Béreš

Projekt navazoval na projekty SGS SP2017/165, SGS SP2016/113 a SP2015/160 a jeho cílem bylo využít existující knihovnu paralelních řešičů založených na metodě hraničních prvků BEM4I pro řešení úloh s nejistotami. Projekt se zaměřil především na využití knihovny BEM4I jako efektivního „black-box“ řešiče pro úlohy propagace nejistot ze vstupních parametrů a řešení inverzních úloh s nejistotami v měřeních.

Internacionalizace doktorského vzdělávání v oblasti molekulové fyziky

IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU SP2018/178

ŘEŠITEL Ing. Martin Mrovec

Hlavním cílem projektu bylo dále rozvíjet internacionalizaci skupiny MOLDYN ve vědecké výchově postgraduálních studentů, především navázat na spolupráci navázanou při výjezdech realizovaných v roce 2017. Spolupráce probíhala se zahraničními vědeckými pracovišti na UPS v Toulouse (modelování nízkoteplotního plazmatu s biomedicínskými aplikacemi a matematické modelování molekulových interakcí) a UPEM v Paříži (kvantové metody Monte Carlo).

**Využití metod topologické optimalizace v inženýrské praxi**

**IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** SP2018/180

**ŘEŠITEL** Ing. Pavel Maršálek, Ph.D.

Přínosem projektu bylo rozšíření znalostní báze v rámci IT4Innovations o nový aplikační směr, který má nezanedbatelný komerční potenciál. V rámci projektu se řešitelé seznámili s problematikou topologické optimalizace, a to jak z pohledu teoretického, kde se seznámili se základními metodami topologické optimalizace, tak z pohledu praktického, kdy se řešily konkrétní úlohy z inženýrské praxe.

**Hydroxyapatitové nanokompozity: struktura a modelování**

**IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** SP2018/166

**ŘEŠITEL** Ing. Lenka Pazourková

Projekt byl zaměřen na přípravu a charakterizaci nanokompozitů na bázi fosforečnanů vápenatých – Ca-deficientního hydroxyapatitu (CDH) a jílových minerálů. V rámci molekulárního modelování byla provedena analýza interakce Ca-deficientního hydroxyapatitu v kompozitu pomocí molekulové dynamiky s užitím empirických silových polí.

**Modelování difrakčních a plasmonických nanostruktur**

**IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** SP2018/83

**ŘEŠITEL** Ing. Tomáš Kohut

Cílem projektu byla studie a modelování polarimetrické odezvy od holografických struktur pomocí Kirchhoffova skalárního integrálu a Stratton-Chu-Silverova vektorového integrálu ve formě Muellerovy matice a pomocí metody hraničních prvků také na modelování metamateriálového plasmonického povrchu, pomocí něhož bude možné měnit fázi vlny a vytvořit tak holografický obraz.

**Elipsometrie a magnetooptické vlastnosti na Pr a Nd založených Perovskitů a kvadratický MO efekt na kubických (011) orientovaných filmech tranzitivních kovů na MgO substrátu**

**IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** SP2018/96

**ŘEŠITEL** Ing. Radek Ješko

V rámci projektu byly řešeny dva hlavní směry výzkumu. Ve spolupráci s Matematicko-fyzikální fakultou Univerzity Karlovy byly spektrálně elipsometricky a magnetoopticky měřeny objemové vzorky ortorombických oxidů. Dále byla měřena kvadratická magnetooptická spektra (QMOKE) kubických struktur s (011) orientovaným povrchem, konkrétně tenké vrstvy železa a kobaltu na MgO substrátu.

**Projekty podpořené Grantovou agenturou České republiky**

**Nové materiály paliv pro jaderné reaktory IVté generace**

**IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** GA17-27790S

**ŘEŠITEL** Ing. Dominik Legut, Ph.D.

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

**Projekty podpořené Technologickou agenturou České republiky**

**Centrum kompetence pro molekulární diagnostiku a personalizovanou medicínu (2014–2019)**

**IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** TE02000058 (projekt programu Centra kompetence)

**ŘEŠITEL** Mgr. Branislav Jansík, Ph.D.

Hlavním cílem projektu je využít a dále posílit stávající expertní zkušenosti a dosáhnout kritického množství účastníků a zkušeností v oblasti výzkumu, vývoje, výroby, ochrany duševního vlastnictví, certifikace, transferu technologií a rozvoje podnikání pro vytvoření trhem řízené flexibilní národní sítě významných institucí v oblasti biomarkerů a molekulárních diagnostik.

**Paralelizovaný reakčně-transportní model šíření kontaminace v podzemních vodách (2017–2019)**

**IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** TH02030840 (projekt Programu na podporu aplikovaného výzkumu a experimentálního vývoje EPSILON)

**ŘEŠITEL** Ing. Michal Podhorányi, Ph.D.

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

**Projekty Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání**

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

**IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** EF16\_013/0001791

**ŘEŠITEL** Mgr. Branislav Jansík, Ph.D.

Cílem projektu je mimo jiné rozšíření vlastního výzkumu IT4Innovations v oblasti modelování fotonických a spínfotonických struktur, návrhu nových progresivních materiálů na základě výpočtu elektronové struktury a analýzy biologických obrazů s využitím HPC. Vlastní výzkum je pro infrastrukturu IT4Innovations důležitým zdrojem expertízy v oblasti HPC, která se promítá do služeb, které infrastruktura poskytuje svým uživatelům.

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

**IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** CZ.02.1.01/0.0/0.0/15\_003/0000466

**ŘEŠITEL** prof. RNDr. Václav Snášel, CSc.

Projekt Umělá inteligence a uvažování přináší zásadní opatření pro rozvoj informatického, robotického a kybernetického výzkumu na Českém vysokém učení technickém v Praze. Předpokládá se vybudování nové výzkumné skupiny Umělá inteligence a uvažování v rámci dotčené součásti Českého institutu

informatiky, robotiky a kybernetiky (CIIRC), řešící náročné interdisciplinární úlohy vysoké odborné i společenské priority. Projekt se opírá i o národní partnery (VŠB – Technická univerzita Ostrava a Západočeská univerzita v Plzni). Motivace pro jejich zapojení spočívá v důrazu na koncentraci a integraci zdrojů, sdílení znalostí i infrastruktury a v neposlední řadě na vytvoření „sjednoceného prostoru příležitostí“ pro mladé talenty v ČR.

**Mezinárodní granty**

**ANTAREX – Autotuning and Adaptivity Approach for Energy Efficient Exascale HPC Systems (2015 –2018)**

**IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** 671623 (výzva H2020-FETHPC-2014)

**ŘEŠITEL** Ing. Jan Martinovič, Ph.D.

Hlavním cílem projektu je navrhnout pomocí doménově specifického jazyka samoadaptivní přístup pro aplikace spuštěné na superpočítačích. Řízení jejich běhu a zavedení samoregulace umožní dosáhnout energeticky úsporných heterogenních HPC systémů na exascale úrovni.

[www.antarex-project.eu](http://www.antarex-project.eu)

**ExCAPE – Exascale Compound Activity Prediction Engine (2015–2018)****IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** 671555  
(výzva H2020-FETHPC-2014)**ŘEŠITEL** Ing. Jan Martinovič, Ph.D.

V projektu jsme se podíleli na vývoji moderních škálovatelných algoritmů a jejich vhodných implementací, které budou použitelné pro výpočty na budoucích exascale superpočítačích. Příslušné algoritmy byly vyvíjeny pro řešení komplexních úloh z oblasti farmakologie s ohledem na nutnost zpracování velkého množství dat potřebného pro průmyslový vývoj léčiv.

[www.excape-h2020.eu](http://www.excape-h2020.eu)**READEX – Runtime Exploitation of Application Dynamism for Energy-efficient Exascale computing (2015–2018)****IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** 671657  
(výzva H2020-FETHPC-2014)**ŘEŠITEL** Ing. Lubomír Říha, Ph.D.

Úloha IT4Innovations spočívala v evaluaci dynamismu v HPC aplikacích, jejich ručním ladění, a následně evaluaci a validaci vyvinutého nástroje pro optimalizaci spotřeby elektrické energie, který bere výsledky ručního ladění za referenční.

[www.readex.eu](http://www.readex.eu)**LOWBRASYS – A Low Environmental Impact Brake System (2015–2019)****IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** 636592  
(výzva H2020-MG-2014\_TwoStages)**ŘEŠITEL** prof. Mgr. Jana Kukutschová, Ph.D.

Díky projektu bude vyvinuta nová generace inovativních technologií pro čistší a efektivnější silniční dopravu, pro zlepšení kvality ovzduší s pozitivními dopady na životní prostředí a lidský život. Projekt současně odpovídá požadavku vyhovět budoucím přísnějším právním předpisům pro emise z vozidel a kvalitu ovzduší v Evropské unii.

[www.lowbrasys.eu](http://www.lowbrasys.eu)**EXPERTISE – Models, Experiments and High Performance Computing for Turbine Mechanical Integrity and Structural Dynamics in Europe (2017–2021)****IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** 721865  
(výzva H2020-MSCA-ITN-2016)**ŘEŠITEL** prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.

Cílem tohoto čtyřletého projektu je vychovat vědecké pracovníky schopné interdisciplinární spolupráce. Kooperace mezi průmyslovými partnery a vědecko-výzkumnými organizacemi urychlí rozvoj klíčových technologií v oblasti vývoje turbín a jejich rychlejší uvedení do praxe.

<http://www.msca-expertise.eu/>**TETRAMAX – Technology Transfer via Multinational Application Experiments (2017–2021)****IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** 761349  
(výzva H2020-ICT-2016-2)**ŘEŠITEL** Ing. Karina Pešatová, MBA

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

[www.tetramax.eu](http://www.tetramax.eu)**CloudiFacturing – Cloudification of Production Engineering for Predictive Digital Manufacturing (2017–2021)****IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** 768892  
(výzva H2020-FOF-2017)**ŘEŠITEL** Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.

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

[www.cloudifactoring.eu](http://www.cloudifactoring.eu)**NOVÝ**  
**ExaQute – Exascale Quantifications of Uncertainties for Technology and Science Simulation (2018–2021)****IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** 800898  
(H2020-FETHPC-2016-2017)**ŘEŠITELÉ:** Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.  
a Ing. Jan Martinovič, Ph.D.

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

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

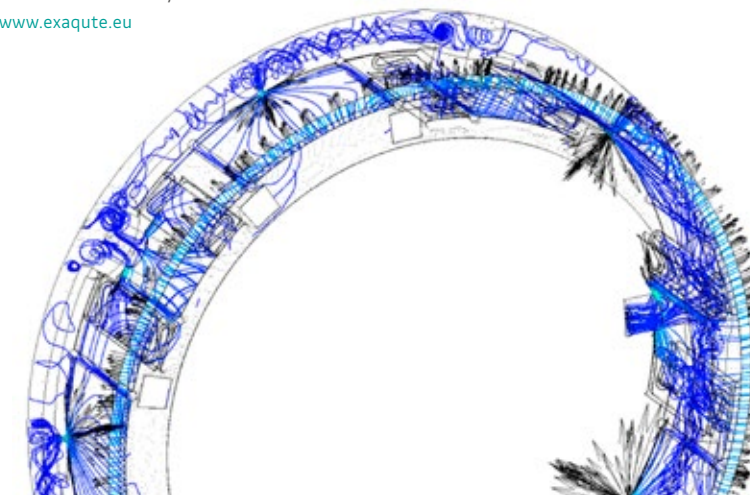
[www.exaquete.eu](http://www.exaquete.eu)**NOVÝ**  
**Performance Optimisation and Productivity 2 – POP2 (2018–2021)****IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** 824080  
(H2020-INFRAEDI-2018-1)**ŘEŠITEL** Ing. Lubomír Říha, Ph.D.

HPC centrum excellence POP2 navazuje na projekt Performance Optimisation and Productivity 1 (POP1) a dále rozšiřuje jeho aktivity. Hlavní náplní POP2 je asistence s analýzou paralelních aplikací, identifikace problémových částí kódů a doporučení optimalizačních technik vedoucích k vyššímu výkonu a lepší škálovatelnosti dané aplikace.

<https://pop-coe.eu/>**Spolupráce s komerční sférou**

Spolupráci s komerční sférou uskutečňuje IT4Innovations především formou smluvního výzkumu. V roce 2018 se jednalo o spolupráci se 17 společnostmi:

- > AL INVEST BŘIDLIČNÁ a.s.
- > BANK FOR INTERNATIONAL SE
- > BAYNCORE LIMITED
- > BORCAD cz s.r.o.
- > Continental Automotive Czech Republic s.r.o.
- > Doosan Škoda Power s.r.o.
- > ING corporation, spol. s.r.o.
- > INSET s.r.o.
- > Invent Medical Group s.r.o.
- > IXPERTA s.r.o.
- > K2 atmitec s.r.o.
- > KOMA – Industry s.r.o.
- > mySASY a.s.
- > Siemens s.r.o.
- > Strojírny a stavby Třinec a.s.
- > The German Aerospace Center
- > Ústav pro hospodářskou úpravu lesů



## Doktorský studijní program

Doktorský studijní program Výpočetní vědy byl v IT4Innovations otevřen v akademickém roce 2015/2016. Studenti se zaměřují na využití HPC a HPDA ve vědě a průmyslu. V prosinci 2018 dva studenti studium úspěšně ukončili. Studijní program má s platností ke konci roku 2018 dalších 21 studentů.

## Vzdělávací aktivity

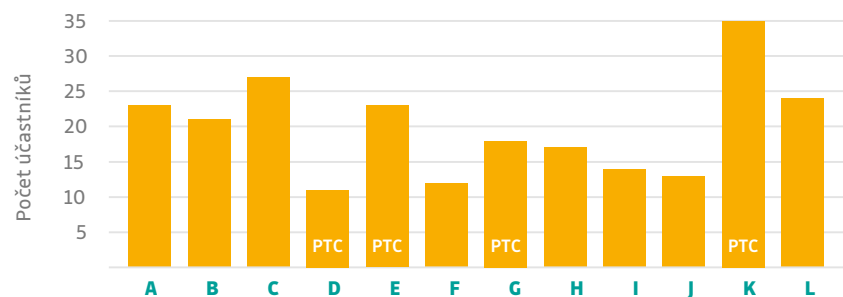
IT4Innovations podporuje vědeckou komunitu a své uživatele pořádáním vysoce kvalitních kurzů, tutoriálů, workshopů a dalších vzdělávacích akcí. Hlavním cílem těchto aktivit je všestranně zvyšovat kompetence uživatelů pro efektivní využívání jedinečné výpočetní infrastruktury IT4Innovations. V širším slova smyslu usiluje IT4Innovations také o zvyšování povědomí a úrovně znalostí v oblasti HPC v celonárodním měřítku, a to pro zájemce nejen z akademické, ale i z komerční sféry.

Tematicky se kurzy nabízené IT4Innovations zaměřují na počítačové systémy a architektury, programovací techniky a nástroje a knihovny a aplikace.

V roce 2018 proběhlo 12 vzdělávacích akcí, které navštívilo téměř 240 účastníků. Mezi nejvýznamnější vedené renomovanými zahraničními odborníky patřily:

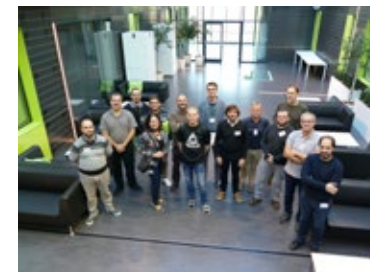
- > **HIGH PERFORMANCE DISTRIBUTED DEEP LEARNING** (Dhabaleswar K. Panda, Hari Subramoni, Ammar Ahmad Awanz z The Ohio State University), který představil vliv pokročilých optimalizací a ladění knihoven pomocí CUDA-Aware MPI na výkonost trénování hlubokých neuronových sítí;

Vzdělávací akce v roce 2018



- A** InfiniBand, Omni-Path and High-Speed Ethernet for Dummies
- B** InfiniBand, Omni-Path and High-Speed Ethernet: Advanced Feature, Challenges in Designing, HEC Systems and Usage
- C** High Performance Distributed Deep Learning
- D** Intel Xeon Phi Programming
- E** Parallel I/O and Libraries

- F** Current GPU Programming Trends
- G** PETSc Basic and Advanced Tutorial
- H** HyperLoom
- I** PLASMA and MAGMA
- J** ANTAREX
- K** Productivity Tools for HPC
- L** Advanced OpenMP Programming



- > tutoriál **INFINIBAND, OMNI-PATH, AND HIGH-SPEED ETHERNET: ADVANCED FEATURES, CHALLENGES IN DESIGNING, HEC SYSTEMS AND USAGE** (Dhabaleswar K. Panda, Hari Subramoni, Ammar Ahmad Awanz z The Ohio State University) zaměřený na pokročilé hardwareové a softwarové funkce technologií InfiniBand, Omni-Path, High-speed Ethernet a rovněž RDMA over Converged Enhanced Ethernet, součástí kurzu bylo programování Open Fabrics RDMA a Libfabric či infrastruktura pro správu a nástroje pro efektivní využívání těchto propojovacích systémů;
- > dvoudenní kurz **ADVANCED OPENMP PROGRAMMING - HOST PERFORMANCE AND ACCELERATOR OFFLOADING** (Christian Terboven, Tim Cramer), který představil paralelizaci metodu OpenMP a její nové funkce pro co nejlepší využití na moderních výpočetních architekturách.

V roce 2017 se IT4Innovations stalo školicím centrem PRACE (PRACE Training Center, PTC) a v roce 2018 organizovalo čtyři kurzy. Nejvyšší návštěvnost byla na kurzu Productivity Tools for High Performance Computing, který vedli zaměstnanci IT4Innovations (Branislav Jansík, David Hrbáč, Josef Hrabal, Lukáš Krupčík, Lubomír Prda a Roman Slíva). Cílem kurzu bylo rozvinout dovednosti a znalosti účastníků v ovládání nástrojů a technologií používaných na klastrech IT4Innovations. Jednalo se například o GIT, KVM, Docker a Singularity a EasyBuild.

Dalším PTC kurzem byl například Parallel I/O and Libraries (Nicole Audiffren z CINES, Francie, Sebastian Lühns z JSC, Německo), který představil MPI-IO a knihovny HDF5 a SIONLib.

## PRACE Summer of HPC

Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) umožnilo v roce 2018 již po šesté studentům vycestovat na letní stáž do superpočítačových center po celé Evropě. Příležitost absolvovat letní stáž získalo tentokrát 23 studentů, a to v 11 hostujících organizacích. IT4Innovations přivítalo dva z nich. James Lowe, absolvent bakalářského oboru Elektronika a komunikace Dublinského institutu technologie, pracoval na projektu „Vizualizace výkonnostních dat na vysoké úrovni“. Vladimír Nikolič, student oboru Softwarové inženýrství na Bělehradské univerzitě, se zabýval „Vylepšením stávajících genomických nástrojů pro vysoce výkonné výpočetní infrastruktury“.



## Projekty Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání

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

**IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU**  
CZ.02.2.69/0.0/0.0/16\_018/0002713  
(výzva č. 02\_16\_018)

**ŘEŠITEL** doc. RNDr. René Kalus, Ph.D.

Hlavním cílem projektu je ustavení Doktorské školy pro vzdělávání v oblasti matematických metod a nástrojů v HPC integrující doktorská studia Univerzity Karlovy (Matematicko-fyzikální fakulta), Akademie věd ČR (Matematický ústav) a VŠB – Technické univerzity Ostrava a navazující na jejich širší spolupráci v oblasti výzkumné. Součástí projektu je modernizace a internacionalizace jednoho z doktorských programů školy (Výpočetní vědy, VŠB-TUO) a vytvoření nových programů double degree (plánováno ve spolupráci s Univerzitou della Svizzera italiana, Lugano, Švýcarsko a Université Toulouse III Paul Sabatier, Francie). Projekt navazuje na související projekt ERDF Vzdělávací tréninkové centrum IT4Innovations. Oba projekty jsou realizovány za podpory evropských fondů.

**Vzdělávací tréninkové centrum IT4Innovations (2017–2022)**

**IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU**  
CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_017/0002628  
(výzva č. 02\_16\_017)

**ŘEŠITEL** Ing. Radim Mrázek

Díky projektu Vzdělávací tréninkové centrum IT4Innovations bude vybudována vzdělávací infrastruktura, která podpoří výzkumně zaměřené studijní programy orientované na využití superpočítačových technologií. V širším kontextu je cílem projektu eliminovat bariéru, která brání vyšší míře využití superpočítačových technologií v podmínkách České republiky. Jedná se především o nedostatek odborníků a expertů na vysoce výkonné počítání (High Performance Computing). Plánovaná zastavěná plocha nového vzdělávacího centra činí 674 m<sup>2</sup>. V budově bude sál s kapacitou 150 míst, počítačová učebna s 25 místy a dvě kombinované učebny s celkem 50 místy. Celková kapacita centra bude tedy 225 studentů. Výukové prostory budou vybaveny moderními informačními technologiemi a audiovizuálním zázemím pro vzdělávání ve studijních programech orientovaných na využití výkonných výpočetních prostředků. Budova bude splňovat současné technické požadavky na efektivní a bezpečný provoz a nadto bude vybavena dvěma zdroji tepla. Díky jejímu umístění v blízkosti výzkumné infrastruktury IT4Innovations budou využity přebytky odpadního tepla superpočítačů v budově IT4Innovations. Tím se docílí i šetrnosti k životnímu prostředí.

**Technika pro budoucnost (2016–2020)**

**IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU**  
CZ.02.2.69/0.0/0.0/16\_015/0002338  
(výzva č. 02\_16\_015)

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

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

**NOVÝ**  
**Věda bez hranic (2018–2020)**

**IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU**  
CZ.02.2.69/0.0/0.0/16\_027/0008463  
(výzva č. 02\_16\_027)

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

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

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

## Projekt Mezinárodního visehradského fondu

**NOVÝ**  
**Superhrdinové vědy (2018–2020)**

**IDENTIFIKÁTOR PROJEKTU** 21820033

**ŘEŠITEL** Ing. Karina Pešatová, MBA

Společný projekt partnerů ze zemí visehradské čtyřky (IT4Innovations národní superpočítačové centrum, Vládní agentura pro rozvoj informačních technologií, Maďarsko, Výpočetní středisko Centra společných činností Slovenské akademie věd, Poznaňské superpočítačové a síťové centrum – Institut bioorganické chemie Polské akademie věd) bude populární formou vysvětlovat význam superpočítačů a jejich využití, které má pozitivní vliv na každodenní život člověka. Každý partner projektu zajišťuje národní superpočítačovou infrastrukturu a věnuje značné úsilí popularizačním aktivitám, které mají za cíl rozšířit povědomí o tom, co je supercomputing, proč je pro sou-



*Ilustrace z komiksu Noční múra designéra, který vznikl v rámci projektu Superhrdinové vědy*

časnou společnost nezbytný a proč je to opodstatněná investice. Pochopení celé této oblasti – vědeckých témat i supercomputingu – není pro laiky úplně jednoduché. Pro zjednodušení komunikace relativně složitěho obsahu budou výsledné materiály přizpůsobeny rozličným cílovým skupinám dle věku, stupně vzdělání i odborných znalostí. Cílem projektu je nejen vzdělávat širokou veřejnost, ale také inspirovat mladou generaci visehradských zemí ke studiu vědeckotechnických oborů.

[www.it4i.cz](http://www.it4i.cz)

©  
IT4Innovations národní superpočítačové centrum  
Ostrava 2019

**Poštovní adresa**

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

**E-mail** [info@it4i.cz](mailto:info@it4i.cz)

**Tel.** +420 597 329 602

**Adresa**

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

Tato publikace byla podpořena Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy z podpory Velkých infrastruktur pro výzkum, experimentální vývoj a inovace v rámci projektu „IT4Innovations národní superpočítačové centrum – LM2015070“.





[www.it4i.cz](http://www.it4i.cz)