

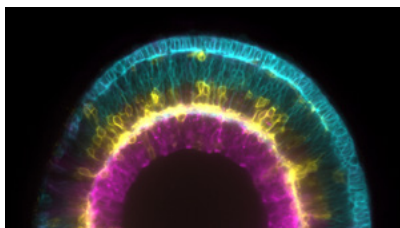


## Co se u nás událo v roce 2017

Přinášíme vám stručný přehled roku 2017, abyste se i vy mohli podívat, co se u nás událo a co se nám podařilo. V krátkém shrnutí vám představíme nové národní a mezinárodní projekty, do kterých jsme se v roce 2017 pustili. Připomeneme si nominace i ocenění, kterých naši kolegové dosáhli. Pořádali jsme řadu workshopů, kurzů, konferencí a akcí pro veřejnost, kde jsme přivítali více než 1700 návštěvníků.

Podívejte se s námi na významné a zajímavé okamžiky minulého roku.

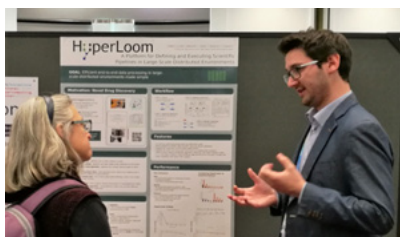
[Číst dál](#)



## Vyhodnocení 12. veřejné grantové soutěže

12. veřejná grantová soutěž byla vyhodnocena v lednu 2018. Mezi 62 úspěšných projektů bylo rozděleno téměř 59 milionů jádroidin. Alokované zdroje jsou uživatelům k dispozici do října 2018.

[Číst dál](#)



## HyperLoom pro jednoduché zpracování dat na vysoce výkonných výpočetních systémech

Pro definici a spouštění komplexních výpočetních plánů obsahujících velké množství vzájemně propojených úloh na superpočítačích mohou nyní vědci využít software HyperLoom.

[Číst dál](#)



## Česká republika se připojila k iniciativě Evropské unie EuroHPC, jejímž cílem je vybudovat nové špičkové evropské superpočítače

Společný podnik EuroHPC bude disponovat rozpočtem ve výši přibližně 1,4 miliardy EUR, za které vybuduje v Evropě nové vysokovýkonné výpočetní systémy dosahující výkonu  $10^{18}$  operací za sekundu.

[Číst dál](#)

## Další kolo veřejné grantové soutěže bude spuštěno v červnu 2018

V červnu 2018 bude spuštěno 14. kolo veřejné grantové soutěže, kdy si budete moci zažádat o výpočetní čas na našich superpočítačích. Sledujte aktuality na našich webových stránkách.

[Více informací](#)

## Přihlášky na doktorský studijní program Výpočetní vědy

Zájemci o doktorský studijní program Výpočetní vědy mohou zasílat přihlášky ke studiu do 15. června 2018

[Více informací](#)

## 17. výzva PRACE Project Access

Do 2. května 2018 si můžete podat žádost o přidělení výpočetního času na desíti nejvýkonnějších superpočítačích Evropy (například Piz Daint, Marconi, SuperMUC, ...) v rámci grantové soutěže PRACE Project Access. Výpočetní čas je přidělován na dobu jednoho roku se začátkem v říjnu 2018. Bližší informace a potřebné formuláře jsou k dispozici na stránkách PRACE.

[Více informací](#)

## Projekt TETRAMAX nabízí financování projektů zaměřených na interdisciplinární transfer technologií.

Přihlásit projekty je možné do 31. května. Tyto projekty musí být zaměřeny do oblasti nízko-napěťových systémů. Vyžadují spolupráci mezi třemi nebo více partnery z nejméně dvou různých členských států EU a / nebo zemí přidružených k programu Horizont 2020. Více informací je k dispozici na stránkách TETRAMAXu.

[Více informací](#)

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

## KRÁTCE

---

**01** V lednu 2018 nás navštívil ministr průmyslu a obchodu v demisi Tomáš Hüner a hejtman Moravskoslezského kraje Ivo Vondrák.



**02** Přehled roku 2017

**03** Naši kolegové, absolventi Fakulty elektrotechniky a informatiky VŠB-TUO, uspěli v soutěži o Cenu prof. Babušky. První místo získal Jan Zapletal z Laboratoře vývoje paralelních algoritmů (nyní působí v Laboratoři pro výzkum infrastruktury) a na druhém místě se umístil Martin Hasal z Laboratoře pro big data analýzy.

Gratulujeme!

**04** Pozvánka na kurz VI-HPS Tuning Workshop (Německo)

**05** V červenci 2018 budeme hostit International HPC Summer School.

**06** Komentář ředitele Víta Vondráka k významu superpočítačů

**07** Aktualizace Zásad přijatelného užívání vysoce výkonných výpočetních systémů v IT4Innovations



## CO SE U NÁS UDÁLO V ROCE 2017

Rok 2017 je za námi a my přinášíme stručný přehled toho, co se u nás událo a co se nám podařilo.

### Nové projekty

Během minulého roku jsme zahájili řešení řady nových národních i mezinárodních projektů. V rámci **operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání** byly schváleny tři nové projekty, které podpoří modernizaci a upgrade stávajících superpočítačů Anselm a Salomon, modernizaci doktorského studijního programu Výpočetní vědy a vytvoření společné doktorské školy s Matematicko-fyzikální fakultou Univerzity Karlovy a Matematickým ústavem Akademie věd České republiky, a také vybudování nového Vzdělávacího tréninkového centra IT4Innovations.

Co se mezinárodních projektů týče, v rámci programu pro výzkum a inovace Evropské unie **Horizont 2020** byly schváleny tři nové projekty. Projekty umožní vzdělávání nové generace strojních inženýrů a vědců v oblasti výzkumu a vývoje turbín, dále usnadní poskytování nových inovačních technologií evropskému průmyslu, a nabídnou optimalizaci produktivity podniků s využitím HPC/cloudových technologií.

### Superpočítačové služby

V minulém roce si žadatelé z českých akademických a dalších výzkumných institucí zažádali v rámci veřejných grantových soutěží o více než 200 milionů jádroidin. Úspěšným žadatelům bylo přerozděleno více než 160 milionů jádroidin. S uspokojením rostoucí poptávky po výpočetním výkonu nám pomůže upgrade stávajících výpočetních systémů, kterého by se uživatelé měli dočkat na konci roku 2018 a 2020.

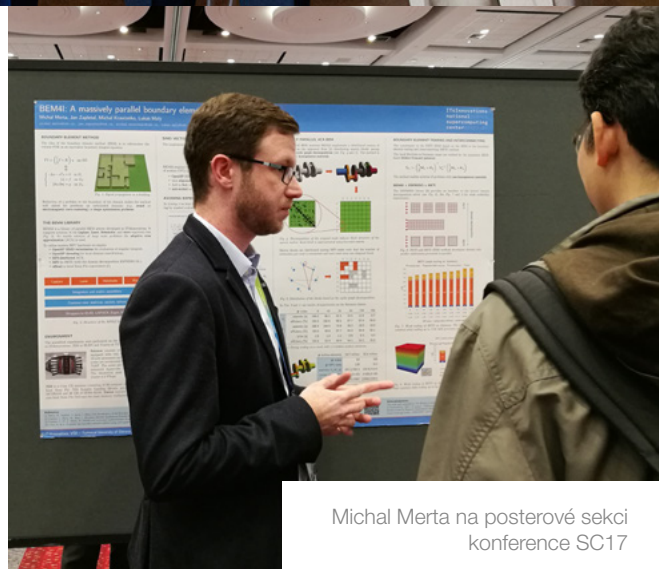
### Nominace a ocenění našich kolegů

Nenecháme si ujít žádnou významnou konferenci na evropské i celosvětové úrovni a snažíme se tak držet krok se světem high performance computingu. V roce 2017 sklídili naši kolegové i několik nominací a ocenění. Dva posterové

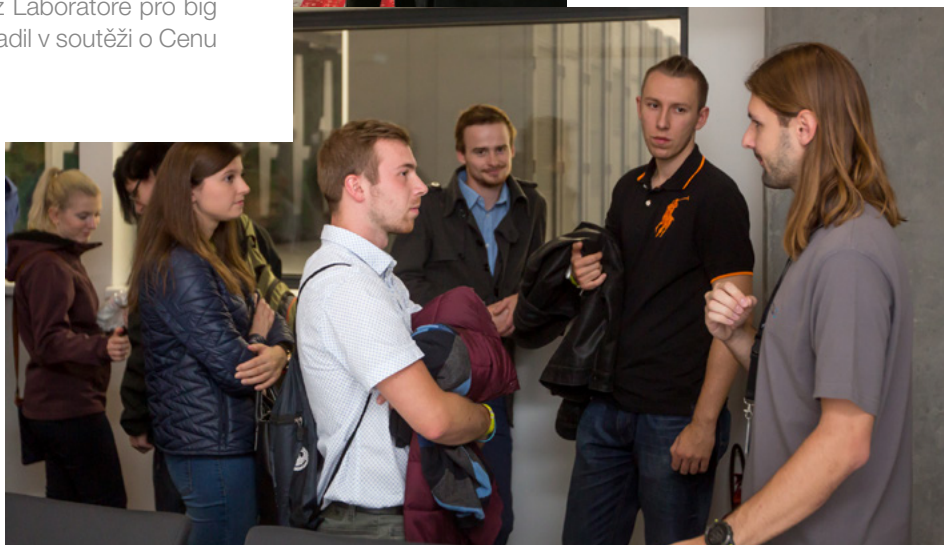
Cenu Josepha Fouriera za rok 2017 získal Jan Zapletal



příspěvky našich kolegů z Laboratoře vývoje paralelních algoritmů a z Laboratoře pro náročné datové analýzy a simulace se na největší superpočítačové konferenci SC17 dostaly do první devítky nominovaných na cenu Nejlepší poster. Software ESPRESO pro řešení problémů strukturální mechaniky byl nominován na cenu Evropské komise Innovation Radar Prize 2017. Náš kolega a student doktorského programu Výpočetní vědy Milan Jaroš získal na Mezinárodní konferenci o počítačové grafice a digitálním zpracování obrazu ocenění za nejlepší studentskou prezentaci výzkumu. Jan Zapletal, výzkumný pracovník v IT4Innovations a absolvent Fakulty elektrotechniky a informatiky Vysoké školy báňské – Technické univerzity Ostrava, vyhrál první cenu Josepha Fouriera za nejlepší výzkum v rámci doktorského studia z oblasti informatiky a výpočetních věd a také první cenu prof. Babušky v oboru počítačových věd. Kolega Martin Hasal z Laboratoře pro big data analýzy a absolvent téže fakulty obsadil v soutěži o Cenu prof. Babušky druhé místo.



Michal Merta na posterové sekci konference SC17



Noc vědců v IT4Innovations, říjen 2017

## Organizace kurzů, konferencí a akcí pro veřejnost

O své know-how se dělíme. Minulý rok vedli naši kolegové tři kurzy po veřejnost zaměřené na nástroje používané na našich superpočítačích. Dva kurzy byly sponzorovány výzkumnou infrastrukturou Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE). V loňském roce jsme se stali Vzdělávacím centrem PRACE Training Centre. Dalších 6 našich kurzů vedli odborníci ze zahraničí. Dohromady se na kurzech pořádaných IT4Innovations v minulém roce vzdělávalo 227 účastníků. V létě jsme pořádali týdenní školení pro účastníky programu PRACE Summer of HPC, kterým se věnovali hlavně lektoři z IT4Innovations.

Konferencí a workshopů se nejen zúčastňujeme, ale také jsme jich několik v minulém roce pořádali. V lednu a v září jsme pořádali semináře HPC pro malé a střední podniky.

V únoru jsme hostili historicky první workshop mezinárodní sítě HiPEAC, sdružení evropských expertů na vysoce výkonné výpočetní a vestavěné systémy, v České republice. V květnu jsme pořádali třetí ročník konference High Performance Computing in Science and Engineering a v listopadu jsme na půdě IT4Innovations pořádali 1. konferenci uživatelů IT4Innovations, kde vznikla i Rada uživatelů. Naše dveře otevíráme i široké veřejnosti. Loni jsme u nás především v rámci exkurzí a popularizačních akcí přivítali téměř 1700 návštěvníků.

Rok 2017 pro nás byl úspěšný a těšíme se na další výzvy v roce 2018!



Návštěva švýcarského velvyslance v ČR  
pana Markuse-Alexandra Antoniettiho, březen 2017

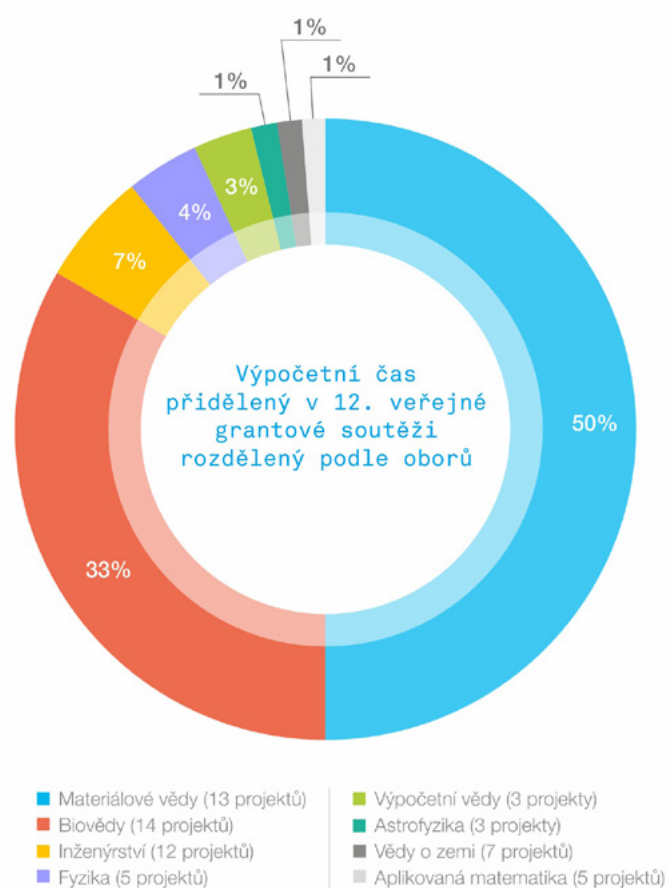
## VYHODNOCENÍ 12. VEŘEJNÉ GRANTOVÉ SOUTĚŽE

Ve 12. veřejné grantové soutěži, která byla vyhodnocena v lednu 2018, si zájemci zažádali téměř o 85 milionů jádrohodin. Poptávka po výpočetních zdrojích převýšila vyhrazenou kapacitu pro veřejnou grantovou soutěž, která činí 48 milionů jádrohodin, o 76 %. S ohledem na vysoký zájem o výpočetní čas v poměru k nabízeným zdrojům, přistoupila alokační komise ke snížení alokací většiny hodnocených projektů. V lednu 2018 tak bylo mezi 62 úspěšných projektů rozděleno téměř 59 milionů jádrohodin. Alokované zdroje jsou uživatelům k dispozici od ledna 2018 do října 2018.

Sedmnácti projektům vědců z **Vysoké školy báňské – Technické univerzity Ostrava**, a tedy i z vysokoškolského ústavu **IT4Innovations**, bylo alokováno 15 milionů jádrohodin, což je jedna čtvrtina přidělených prostředků v tomto kole veřejné grantové soutěže. Největší množství výpočetního času (13,8 % z celkového rozděleného výpočetního času) bylo přiděleno projektům z oblasti materiálových věd. Například projekt Dr. Dominika Leguta věnovaný optimalizaci materiálů pro nový typ lithiových baterií získal 8 milionů jádrohodin.

Nejvíce projektů úspěšných žadatelů z VŠB-TUO, a to sedm, spadá do oblasti inženýrství. Pouze dva projekty spadají do oblasti biověd. Dr. Michal Krumník a Dr. Pavel Tomančák získali přes 1,5 milionů jádrohodin na vývoj platformy Fiji pro použití na HPC systémech. Dr. Stanislav Polzer z Katedry aplikované mechaniky Fakulty strojíny se bude zabývat výpočetním modelováním aneurysmat abdominální aorty (rozšíření aorty větší než 3 cm), což je degenerativní onemocnění s potenciálně fatálním průběhem. Alokovaný čas ve výši 150 tisíc jádrohodin využije pro analýzy podmínek vedoucích ke vzniku aneurysmat a pravděpodobností vzniku ruptur.

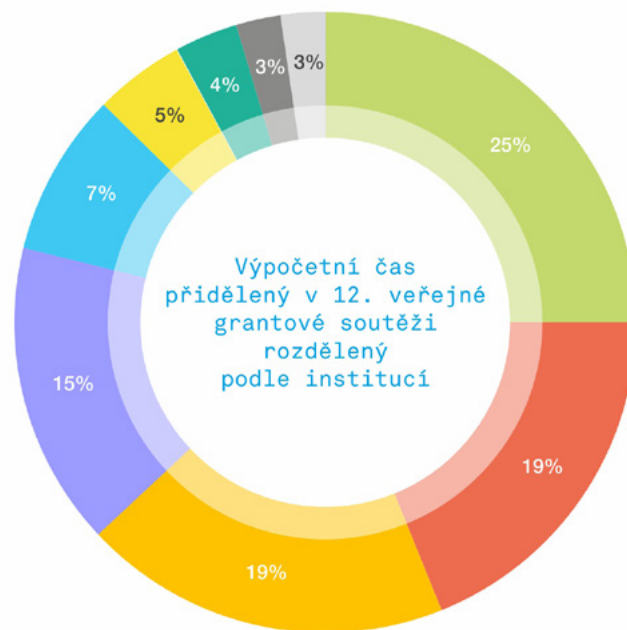
Osmi ústavům **Akademie věd České republiky (AV ČR)** bylo přiděleno téměř 11 milionů jádrohodin, což je přibližně jedna pětina prostředků přidělených v tomto kole veřejné grantové soutěže. První tři nejvyšší alokace patří vědcům z Ústavu organické chemie a biochemie. Například prof. Pavel Hobza získal 5 milionů jádrohodin pro počítačové návrhy nových léků. Dr. Martin Culka získal přes 2 miliony jádrohodin na výzkum mechanismů regulujících skládání proteinů. Předpokládá se totiž, že některé neurodegenerativní nemoci jsou způsobeny právě akumulací nesprávně uspořádaných proteinů. Projektu Dr. Oty Bludského bylo alokováno téměř 1,5 milionu jádrohodin na výzkum nových molekulových sít, konkrétně na vývoj metodologie pro hodnocení vlastností hypotetických



zeolitů pomocí ADOR syntézy (A-assembly, D-diassembly, O-organization, R-reassembly), jejíž mechanismus popsali vědci z AV ČR.

V pořadí třetí institucí, jejíž projekty získaly nejvíce výpočetního času, je **Univerzita Karlova**. Čtrnácti projektům bylo přerozděleno 11,5 milionů jádrohodin, což je téměř jedna pětina prostředků přidělených ve 12. veřejné grantové soutěži. 81 % výpočetního času alokovaného projektům Univerzity Karlovy bylo přiděleno šesti projektům z oblasti materiálových věd, přičemž pět z nich vedou vědci z Matematicko-fyzikální fakulty. Dr. Jan Kuriplach získal 300 tisíc jádrohodin na výzkum slitin s vysokou entropií, relativně nových a v současnosti intenzivně zkoumaných materiálů. Dr. Ondřej Maršálek získal přes 2,5 milionů jádrohodin na výzkum dynamiky a spektroskopie nábojů ve vodných roztocích, na který dostal i speciální grant Univerzity Karlovy udělovaný velmi nadějným vědcům. Grant Univerzity Karlovy, elitní grant Evropské výzkumné rady a výpočetní čas na superpočítačích v IT4Innovations ve výši téměř 800 tisíc jádrohodin získal i Dr. Jiří Klimeš, který vyvíjí metody pro přesnější počítačové simulace molekulárních krystalů, jež mají využití i ve farmacii.

Téměř 9 milionů jádrohodin bylo přiděleno třem projektům **Středoevropského technologického institutu Masarykovy univerzity** (CEITEC MU). Dva projekty spadají do oblasti biověd. Dr. Pavel Plevka získal přes 2 miliony jádrohodin na výzkum pikornavirů, flavivirů a bakteriofágů. Doc. Robert Vácha získal přes půl milionu jádrohodin na výzkum regulace transkripce genomu, jednoho z nejdůležitějších procesů života.



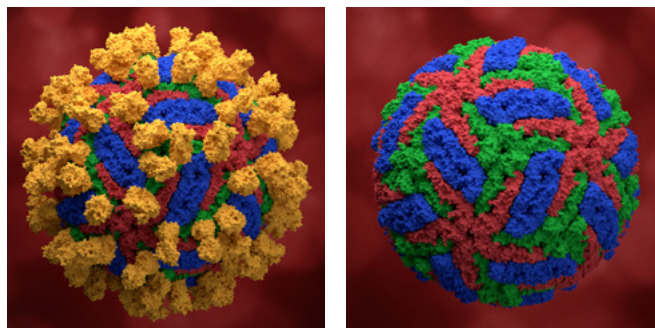
- VŠB - Technická univerzita Ostrava (17 projektů, 14 projektů IT4Innovations)
- České vysoké učení technické v Praze (4 projekty)
- Masarykova univerzita (3 projekty)
- Ústav Akademie věd České republiky (11 projektů)
- Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně (2 projekty)
- Vysoké učení technické v Brně (2 projekty)
- Ostatní (6 projektů)
- CEITEC - Masarykova univerzita (3 projekty)

## Představujeme vybrané projekty, které získaly ve 12. veřejné grantové soutěži výpočetní čas:

### Mgr. Pavel Plevka, Ph.D. (CEITEC MU): Strukturální studie lidských a zvířecích virů

Projekt Dr. Pavla Plevky z CEITEC Masarykovy univerzity získal 2 213 000 jádrohodin pro výzkum pikornavirů, flavivirů a bakteriofágů. Naše superpočítače a přidělené výpočetní zdroje využije pro zpracování a analýzy mikrofotografií pořízených špičkovými elektronovými mikroskopy.

Pikornaviry způsobují nejen běžná nachlazení, ale i závažná onemocnění jako například záněty mozkových blan a dýchacích cest. Vědci určí strukturu virových částic (virionů), pomocí kterých se virus šíří z jedné buňky do druhé, a také popíší množení virů v infikovaných buňkách. Flaviviry, včetně viru zika a klíšťové encefalidity, způsobují potenciálně smrtelná neurologická onemocnění. Vědci se zaměří právě na klíšťový virus encefalidity, který každoročně způsobuje v České republice stovky potenciálně smrtelných infekcí. Výsledky projektu poskytnou vědcům podrobný popis mechanismu replikace virů.



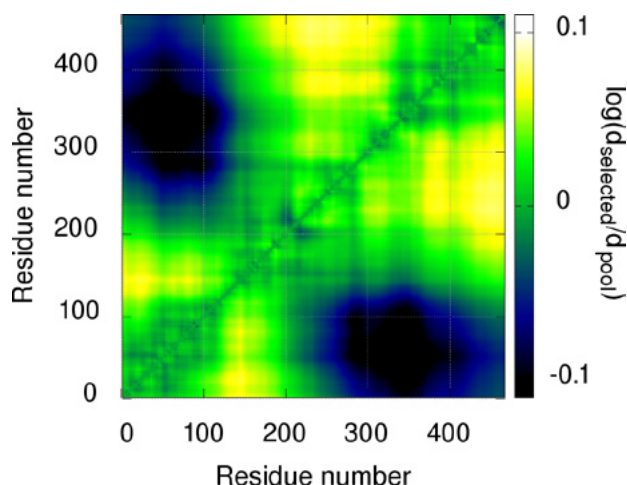
Rekonstrukce viru klíšťové encefalidity pomocí kryoelektronové mikroskopie



**prof. Mgr. Lukáš Žídek, Ph.D. (Masarykova univerzita):  
Strukturální charakterizace přirozeně neuspořádaných  
(nestrukturovaných) proteinů**

Přirozeně neuspořádané proteiny jsou makromolekuly bez jedinečné prostorové struktury. Nemají stabilní prostorové uspořádání, a tedy jediné termodynamické minimum, které by určovalo jejich funkci. Během posledního desetiletí si získaly širokou pozornost díky své významné roli ve velkém množství buněčných procesů. Jedná se například o přepísování informace z DNA a také o jejich možnou souvislost s neurodegenerativními chorobami. Vědecké objevy posledních let ukazují, že hlavní roli ve funkci proteinů nehraje jejich prostorové uspořádání, nýbrž jejich dynamické chování.

Náplní projektu prof. Lukáše Žídka z Masarykovy univerzity, který získal 1 480 000 jádrohodin, je získat kombinaci nejmodernějších rozsáhlých počítačových simulací společně s vlastními prediktivními kódy a pokročilými experimentálními technikami (jako je spektroskopie nukleární magnetické rezonance či malouhlový rentgenový rozptyl) více informací o konformačním chování vybraných nestrukturovaných proteinů.



Distanční mapa nestrukturovaného proteinu MAP2c, který reguluje tvorbu mikrotubulů v neuronech během prenatalního vývoje mozku, po fosforylaci enzymem proteinkinázou A. Tmavé barvy znázorňují krátkodobé kontakty aminokyselin odhalené výpočetní analýzou experimentálních dat.

**Ing. Dominik Legut, Ph.D. (IT4Innovations):  
Optimalizace materiálů pro nový typ lithiových baterií**

Náš kolega Dr. Dominik Legut se zabývá výzkumem lithium-kovových baterií. Lithium-kovové baterie mají na rozdíl od lithium-iontových baterií vyšší energetickou hustotu a dokážou uchovat až 10x více energie. Anody z lithia nicméně čelí mnoha výzvám kvůli problémům s nízkou nabíjecí účinností, změnou objemu při nabíjení/vybíjení ale zejména s dendritickým růstem.

V roce 2017 publikoval Dr. Legut společně s kolegy z USA, Číny a Singapuru článek na téma ochranné filmy pro lithium-kovové baterie v magazínu Advanced Energy Materials s impakt faktorem 16. Speciální ochranné dvoudimenzionální filmy o tloušťce několika atomů totiž dokážou zabránit propojení elektrod (a následnému nebezpečnému zkratu), ke kterému může dojít kvůli dendritickému růstu na lithiových anodách.

Nyní získal Dr. Legut 8 milionů jádrohodin na výzkum optimální struktury lithiových anod. S dalšími kolegy se bude snažit navrhnout optimální materiál pro lithiové anody pomocí prediktivních algoritmů, výpočtů chemické stability a mechanických vlastností.

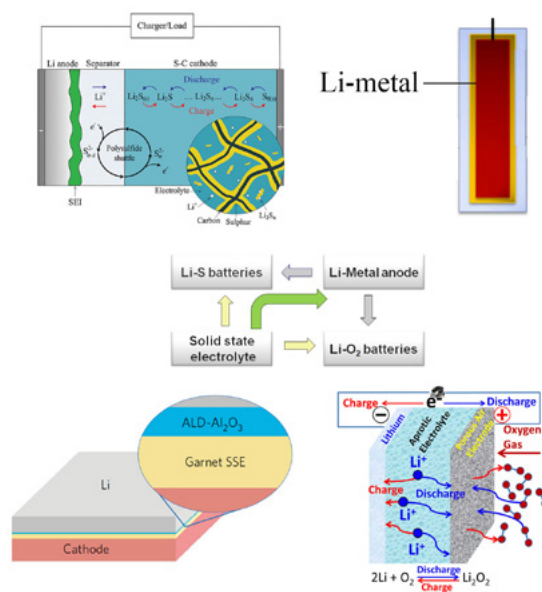


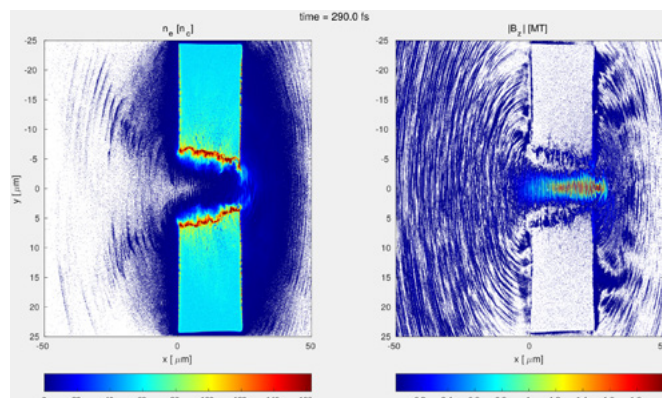
Schéma baterie

**Ing. Martin Matys (České vysoké učení technické v Praze):  
Urychlení protonů pomocí interakce laseru s mikro-shluky plazmatu z pásku kryogenního vodíku**

Projekt Českého vysokého učení technického v Praze Ing. Martina Matyse a Dr. Jana Pšikala (současně vědečtí pracovníci v projektu ELI Beamlines) získal 800 000 jádrohodin a zabývá se vývojem urychlovačů iontů. Konkrétně pracují na výzkumu urychlování protonů vlivem interakce vysoce výkonového laserového impulsu s terčíkem z tenkého pásku kryogenního (ledového) vodíku.

Laserem řízené urychlovače iontů by v budoucnu mohly nahradit finančně velmi nákladné klasické urychlovače a tím například snížit cenu protonové terapie pro léčbu onkologických onemocnění a také cenu výroby lékařských izotopů pro pozitronovou emisní tomografii.

Vědce zajímá interakce, kdy se laserový paprsek propálí skrz terčík a pak reaguje se zbytkovými mikro-shluky plazmatu, které mají mnohem nižší hustotu než počáteční terč. Takový mechanismus může protony urychlit až na energie o velikosti několik stovek milionů elektronvoltů. Cílem projektu je tento mechanismus blíže prozkoumat, a to pomocí numerických trojrozměrných simulací, které jsou ve srovnání s reálnými experimenty výrazně levnější.

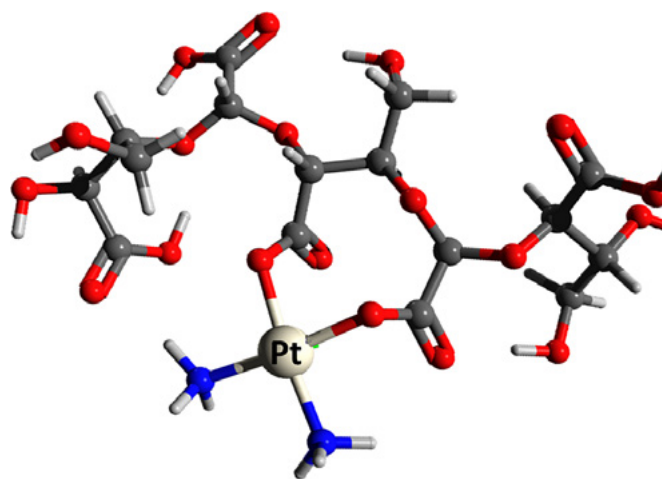


Vizualizace výsledků 2D simulace interakce laserového impulsu (odpovídajícího parametrům laseru L4 v rámci ELI Beamlines) s kryogenním vodíkovým terčem v čase 290 fs po začátku interakce. Vlevo je zobrazena hustota elektronů terče ( $n_e$ ), normovaná na kritickou hustotu ( $n_c$ ). Vpravo je vyobrazen laserový impuls pomocí absolutní hodnoty magnetického pole v ose z ( $|B_z|$ ). Laserový impuls se propálil skrz terč a interaguje s plazmatem o mnohem nižší hustotě.

**Mgr. Jan Vícha, Ph.D. (Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně):  
Vývoj výpočetního kódu pro relativistickou spektroskopii (ReSpect) ke studiu komplexních sloučenin těžkých kovů pro léčbu rakoviny**

Jednou z léčebných metod rakoviny je chemoterapie. Nejužívanějším chemoterapeutikem jsou léky na bázi platiny. Klíčovým krokem pro jejich další vývoj je důkladnější pochopení struktury, vlastností, dynamiky a reakčních mechanismů těchto léků. Projekt Dr. Jana Víchy z Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně navazuje na výsledky jeho předešlých výzkumů a také na výsledky jeho projektu z naší 9. veřejné grantové soutěže. Cílem nového projektu, který tentokrát získal 1 134 000 jádrohodin, je zvýšit prediktivní schopnosti a přesnost výpočtů spektroskopických vlastností komplexních sloučenin platiny v programu ReSpect, který vyvíjí partnerská organizace projektu – Arctic University of Norway. Nově upravený kód programu ReSpect bude nejprve testován pomocí výpočtů magnetické rezonance jednoduchých platinových chemoterapeutik, jako je cisplatina a oxaliplatin v roztoku. Výzkumné práce budou poté rozšířeny na simulace nových pokročilých nosičů platinových léčiv, což je také hlavním tématem projektu podpořeného Grantovou agenturou ČR „Pokročilé nosiče platinových léčiv“, jehož řešitelem je také Dr. Vícha.

Alokované výpočetní zdroje budou využity na testování upraveného kódu a pro relativistické kvantově chemické výpočty v programu ReSpect pro predikci a analýzu parametrů magnetické rezonance u komplexních sloučenin těžkých kovů.



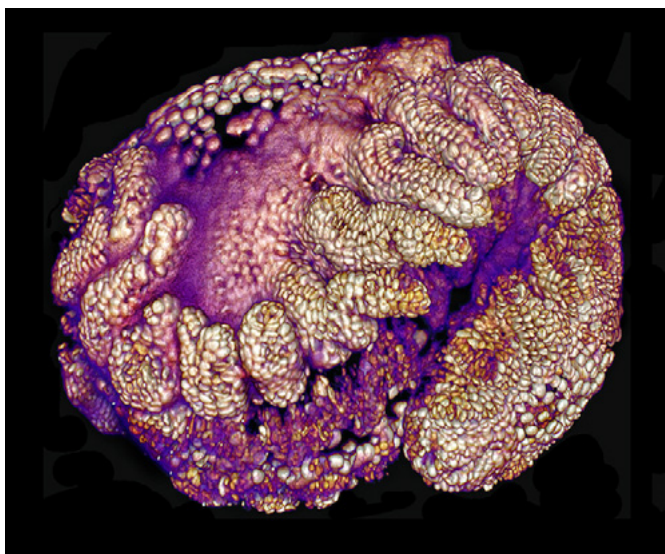
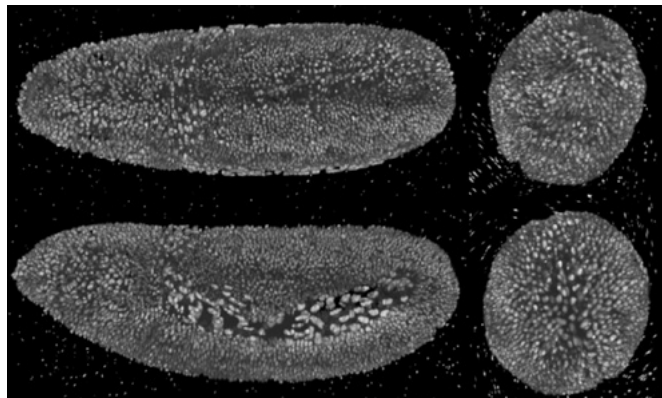
Simulovaná struktura léčiva na bázi platiny navázaného na makromolekulární nosič

**Mgr. Ing. Michal Krumnikl, Ph.D. (IT4Innovations):  
Analýza biologických obrazů s využitím FIJI na HPC – cesta k exascale**

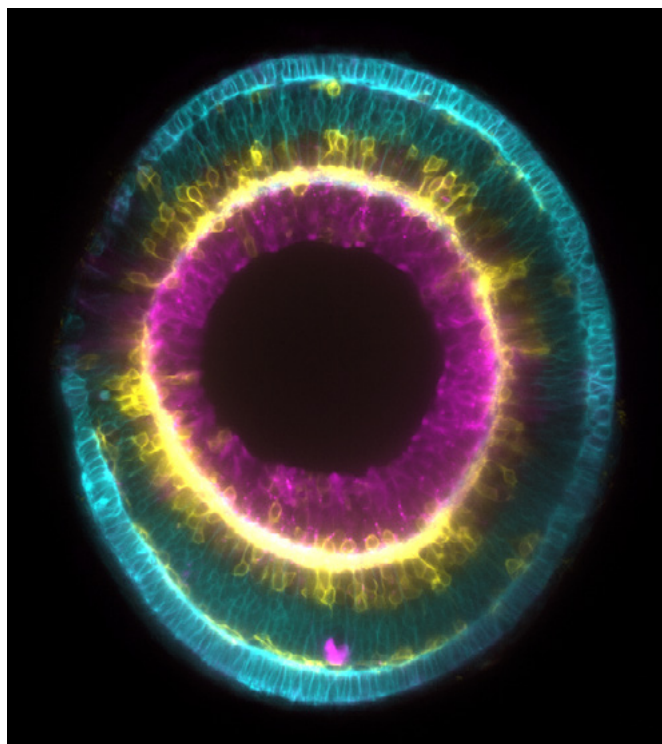
Projekt IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale a jím podpořený výzkum na téma analýzy biologických obrazů s využitím HPC umožňuje IT4Innovations zapojit se do výzkumu zpracování rozsáhlých biologických dat pomocí vysokovýkonných výpočetních systémů (HPC). Tento výzkum je zaměřen na paralelizaci zpracování dat například z light sheet mikroskopie. Light sheet mikroskopie se stala populární pro snímání živých buněk a organismů díky své rychlosti a nízké foto-toxicitě, která umožňuje mikroskopicky snímat kompletní živé systémy, jako například embrya, ve třech dimenzích s vysokým rozlišením a po celou dobu jejich vývoje.

Hlavním cílem projektu je rozšířit možnosti platformy Fiji, kterou využívají desítky tisíc uživatelů na celém světě pro zpracování velkých obrazových dat. Vývojový tým Dr. Krumnikla ve spolupráci s Dr. Pavlem Tomančákem z Max Planck Institutu v Drážďanech, upraví jednotlivé postupy pro analýzu dat tak, aby mohla být bezproblémově spuštěna na vysokovýkonných výpočetních systémech. Vývoj a nasazení platformy Fiji na HPC umožní jejím uživatelům plně využít její potenciál na velkých biologických obrazových datech.

Embryo octomilky (Drosophila) zobrazené light sheet mikroskopii



Embryo korýše (Parhyale) zobrazené light sheet mikroskopii



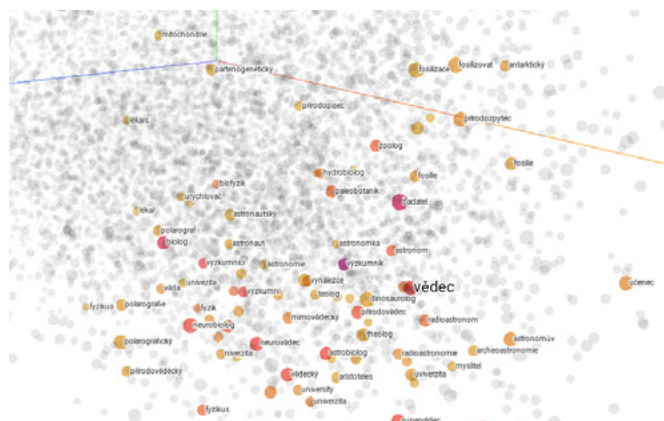
Zobrazení vyvíjejícího se oka dánía pruhovaného (zebrafish eye) pomocí light sheet mikroskopie

## Ing. Martin Fajčík (Vysoké učení technické v Brně): Srovnání metod vnoření slov

Způsob číselné reprezentace slov používaný v počítačovém zpracování přirozeného jazyka se označuje jako technika vnoření slov. Spočívá ve vytvoření vektoru pro každé slovo. Pokročilé metody vnoření slov nacházejí uplatnění v různých oblastech souvisejících například s rozpoznáváním řeči a překladem.

Cílem projektu Ing. Martina Fajčíka z Vysokého učení technického v Brně, který získal 850 000 jádrohodin, je experimentovat se současnými nejmodernějšími technikami vnoření slov (statistickými i prediktivními) jejich učením pomocí rozsáhlých datových souborů. Tým vědců chce identifikovat slabá místa různých technik a navrhnout způsoby pro jejich další zlepšení. Práce na projektu zahrnuje také pochopení vztahů vektorů slov s jejich skutečným významem. Zajímavostí bude i zpracování homonym, synonym, antonym a hyponym.

Z modelů je možné odhadnout nejen vztahy mezi slovy, které se „naučily“, ale dokonce vyjádřit i míru těchto vztahů a pracovat se slovní aritmetikou (například jak jsou si slova podobná). Uveďme si příklad: Když od vektoru slova král odečteme vektor slova muž a přidáme vektor slova žena – dostaneme vektor blízky jakému slovu?



Vizualizace realizovaná pomocí online nástroje Embedding Projector

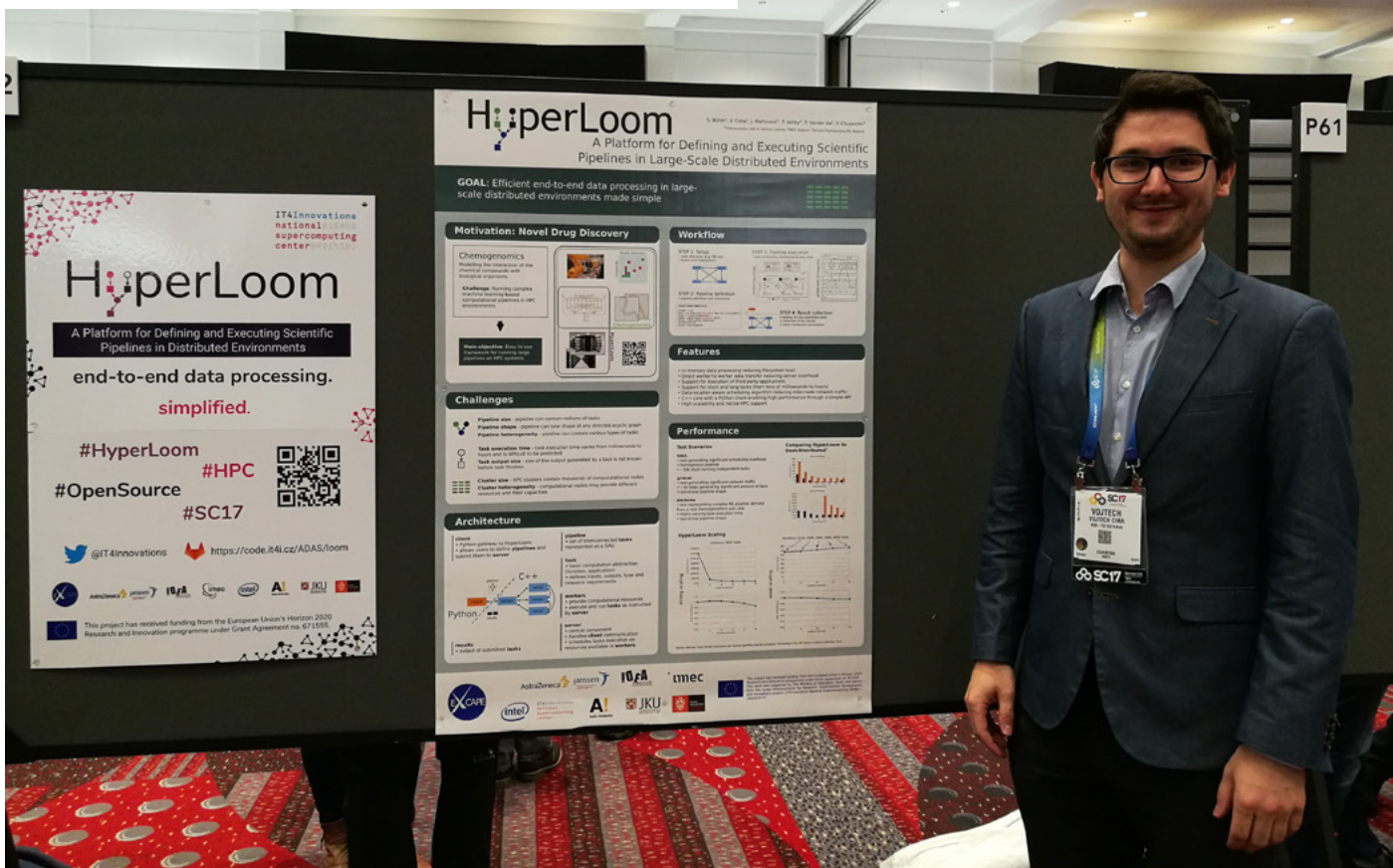
# HYPERLOOM PRO JEDNODUCHÉ ZPRACOVÁNÍ DAT NA VYSOCE VÝKONNÝCH VÝPOČETNÍCH SYSTÉMECH

Úlohy strojového učení, jež nalézají uplatnění v nejrůznějších oblastech lidské činnosti počínaje energetikou přes průmyslovou automatizaci, robotiku, automobilový průmysl a biomedicínu, obvykle zahrnují sérii vzájemně propojených data-zpracujících kroků.

Pro definici a spouštění takovýchto komplexních výpočetních plánů obsahujících velké množství vzájemně propojených úloh na superpočítačích mohou nyní vědci využít software HyperLoom, který vyvíjí tým Laboratoře pro náročné datové analýzy a simulace.

Pomocí softwaru HyperLoom dokážou uživatelé jednoduše definovat závislosti mezi výpočetními úlohami a vytvořit plán,

ktej pak spustí na vysoce výkonném výpočetním systému. Software přitom umožňuje spouštění výpočetních plánů, které obsahují širokou škálu typů úloh, od nativních poskytujících základní funkcionalitu, přes úlohy definované uživatelem, až po úlohy zapouzdřující aplikace třetích stran, včetně možnosti jejich kombinace.



HyperLoom byl navržen tak, aby samotná reže plánování a spouštění úloh byla minimální a aby dokázal efektivně zpracovat různě výpočetně náročné úlohy. Výpočetní jádro softwaru je implementováno v jazyce C++ a dokáže dynamicky spouštět úlohy na dostupných výpočetních zdrojích s ohledem na požadavky pro jednotlivé úlohy, které definuje sám uživatel. Samotné jádro se skládá ze serverové komponenty a několika pracovních komponent. Serverová je zodpovědná za plánování a spouštění úloh na pracovních komponentách ve výpočetních uzlech. Plány se pak definují a odesílají na server pomocí Python rozhraní.

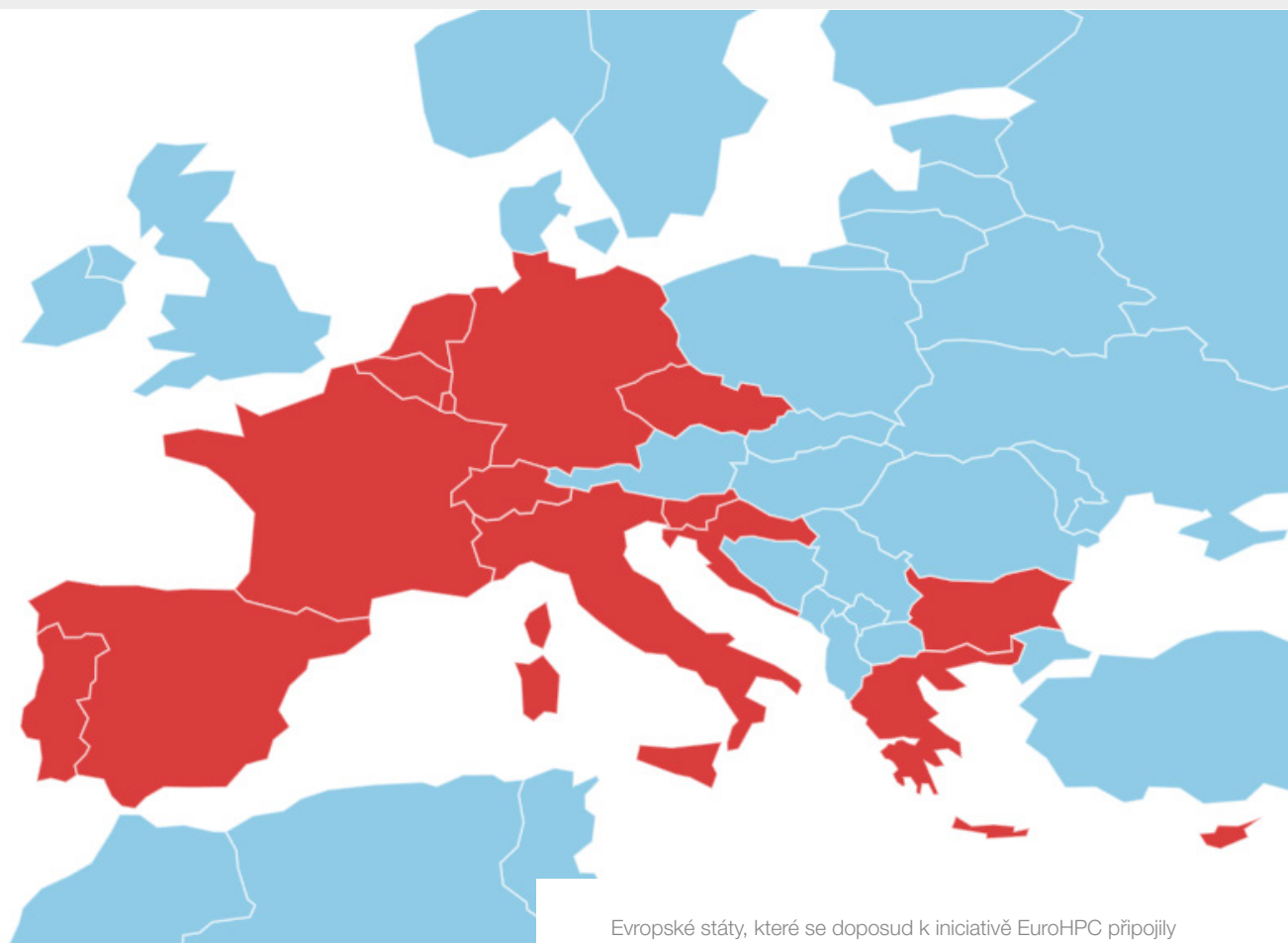
Výkonnostní testy prokázaly, že HyperLoom umožňuje spouštění plánů obsahujících stovky tisíc úloh s dopředu neznámou délkou běhu na desítkách až stovkách výpočetních uzlů. Hyperloom je využíván v rámci řešení mezinárodního projektu ExCAPE pro výběr parametrů modelů strojového učení sloužících pro predikci bioaktivity chemických entit.

HyperLoom je open source produkt dostupný na GitLabu IT4Innovations včetně dokumentace a ukázkových příkladů pod licencí BSD3.  
<https://code.it4i.cz/ADAS/loom>

Vývoj softwaru HyperLoom je podpořen Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy z podpory Velkých infrastruktur pro výzkum, experimentální vývoj a inovace v rámci projektu „IT4Innovations národní superpočítačové centrum - LM2015070“ a projektem výzkumného a inovačního programu Evropské unie Horizont 2020 „ExCAPE“ v rámci grantové dohody č. 671555.

## ČESKÁ REPUBLIKA SE PŘIPOJILA K INICIATIVĚ EVROPSKÉ UNIE EUROHPC, JEJÍMŽ CÍLEM JE VYBUDOVAT NOVÉ ŠPIČKOVÉ EVROPSKÉ SUPERPOČÍTAČE

Evropská unie navzdory dosavadnímu úsilí a investicím nedisponuje nejvýkonnějšími superpočítači na světě. V červnu roku 2012 měla Evropská unie v první desítce světového žebříčku nejvýkonnějších superpočítačů TOP500 čtyři systémy. Německý SuperMUC a JUQUEEN, italský Fermi a francouzský Curie. Dnes je nejvýkonnějším superpočítačem Evropské unie italský systém Marconi, který provozuje konsorcium CINECA od roku 2016. V první patnáctce žebříčku TOP500 se od svého spuštění drží díky výkonu 7,5 petaflopů (Linpack).



Evropské státy, které se doposud k iniciativě EuroHPC připojily

Co se evropských států a jejich výpočetního výkonu týče, jsou s výjimkou Švýcarska ve srovnání s Čínou, Japonskem a Spojenými státy americkými pozadu. Čína provozuje dle žebříčku TOP500 celkem 202 superpočítačů. USA jich má 143 a Japonsko 35. V Asii je soustředěna více než jedna třetina výkonu superpočítačů na světě a ve Spojených státech amerických téměř jedna třetina. V Evropě je přibližně jen pětina výpočetního výkonu superpočítačů světa.

Spojené státy americké však plánují svůj současný stav ve světě superpočítačů vylepšit. Ve výpočetní síle plánují asijské systémy dohnat. V Národní laboratoři Oak Ridge právě dokončují instalaci zbrusu nového 200 petaflopového superpočítače Summit. V Národní laboratoři Argonne chtějí do roku

2021 dokonce instalovat exaflopový superpočítač A21. Čína nezahálí a plánuje spustit první exaflopový superpočítač o rok dříve. (Pozn. Exaflopové počítače dokážou teoreticky vypočítat řádově  $10^{18}$  operací s plovoucí desetinnou čárkou za sekundu.)

Mohlo by se zdát, že se jedná o souboj světových mocností v superpočítačové síle. Nicméně je nutno poznamenat, že superpočítače se používají ve všech vědních disciplínách. Jmenujme například to, co se týká každého z nás a je ku prospěchu celé společnosti: vývoj léků, nových materiálů, letadel a automobilů. Namísto aby se v laboratořích prováděly četné pokusy, je rychlejší a levnější provést nejdříve počítačové simulace a výsledky simulací pak ověřit experimentálně.

## Jak vypadá situace v Evropě a jaké jsou její plány do budoucna?

Z evropských států si v současnosti dle žebříčku TOP500 nejlépe vede Německo s 20 superpočítači, Francie pak s 18 a Velká Británie s 15. V Německu bude navíc instalován nový superpočítač s výkonem 12 petaflopů, financovaný z prostředků Ministerstva kultury a vědy německého státu Severní Porýní-Vestfálsko. Stane se pravděpodobně nejrychlejším superpočítačem instalovaným v Evropské unii.

I přes značné investice na vnitrostátní i unijní úrovni jsou investice Evropy do vysoce výkonných výpočetních technologií zjevně nedostatečné. Dostupný výpočetní výkon v Evropě navíc nemůže uspokojit stále rostoucí poptávku evropských vědců a průmyslu. Zpracování dat mimo Evropskou unii navíc může působit i problémy související například s ochranou údajů, obchodním tajemstvím a vlastnictvím údajů.

Řešení tohoto problému nabízí **iniciativa EuroHPC**. Sdružením zdrojů a racionalizací úsilí členských států Evropské unie díky iniciativě EuroHPC budou v Evropské unii vybudovány zcela nové špičkové superpočítače, které budou patřit mezi nejvýkonnější na světě a díky kterým se Evropa stane výrazně konkurenceschopnější na poli high performance computingu.

**V květnu roku 2017** svůj záměr investovat do vysoce výkonných výpočetních technologií Evropská komise potvrdila. A protože stávající nástroje pro financování tak rozsáhlé spolupráce jsou omezené, lze iniciativu EuroHPC nejlépe realizovat prostřednictvím nové právní a finanční struktury – společného podniku. Společný podnik EuroHPC umožní účinně spojit společně zadávání veřejných zakázek a vlastnictví superpočítačů. Předpokládá se, že činnost zahájí v roce **2019** a bude fungovat do konce roku **2026**.

Iniciativa EuroHPC vychází z **deklarace**, jejímž předmětem je stanovení hlavních principů budoucí spolupráce zainteresovaných evropských států na rozvoji HPC v Evropě.

V rámci EuroHPC budou v Evropě vybudovány čtyři nové superpočítačové systémy. Dva z nich budou petaflopové (tzv. pre-exascale) a zprovozněny by měly být do konce roku 2020. Dva další superpočítače budou exaflopové a zprovozněny budou pravděpodobně do konce roku 2023. Nově vybudovaná výpočetní infrastruktura bude reagovat na rostoucí potřebu vědecké komunity. Zároveň bude hledat způsoby, jak uživatelům z průmyslu i veřejného sektoru tyto zdroje zpřístupnit a zaručit jejich co nejlepší využití pro vědeckou excelenci, inovace a zvýšení konkurenceschopnosti evropského průmyslu.

EuroHPC bude pravděpodobně disponovat celkovým rozpočtem ve výši přibližně 1,4 miliardy eur. Finanční příspěvek Evropské unie ve výši téměř půl miliardy eur pokryje správní a provozní náklady. Účastnické státy iniciativy EuroHPC se budou na financování podílet podobnou částkou, tedy asi půl miliardou eur. Do iniciativy by přitom měl investovat i evropský průmysl (soukromé subjekty).

Deklaraci EuroHPC podepsalo **v březnu roku 2017** sedm členských států (Francie, Itálie, Lucembursko, Německo, Nizozemsko, Portugalsko a Španělsko). **Během minulého roku** se k iniciativě EuroHPC připojily Belgie, Slovinsko, Bulharsko, Švýcarsko, Řecko a Chorvatsko. V **lednu 2018** se k iniciativě připojila i Česká republika. Stala se tak 14. členem společného podniku. Členem se v **únoru 2018** stal i Kypr. Do této spolupráce se mohou kdykoli zapojit i další členové, pokud poskytnou finanční příspěvek. Výše investic jednotlivých evropských zemí se budou odrážet na vlivu rozhodování ve společném podniku a také na míře, v jaké budou moci superpočítače využívat. V současné době jedná například i rakouská a polská vláda o možnosti připojení se k iniciativě. Společný podnik EuroHPC bude ustaven v průběhu roku 2018.

Deklarace iniciativy EuroHPC