



NEWSLETTER Q4/2018

VŠB TECHNICKÁ
UNIVERZITA
OSTRAVA

IT4INNOVATIONS
NÁRODNÍ SUPERPOČÍTAČOVÉ
CENTRUM

Ocenění Nejlepší poster na konferenci SC18 získal tým z IT4I

Účastnili jsme se 30. ročníku Superpočítačové konference. Cenu za nejlepší poster získali Ondřej Meca, Lubomír Říha a Tomáš Brzobohatý s příspěvkem Workflow for Parallel Processing of Sequential Mesh Databases.

4

Rozšíření výpočetního klastru Anselm

Na Vysoké škole báňské – Technické univerzitě Ostrava byla v listopadu 2018 podepsána smlouva na modernizaci HPC systémů pro IT4Innovations.

9

Náš kolega Georg Zitzlsberger se stal ambasadorem Institutu hlubokého učení NVIDIA

Plánujeme zorganizovat celodenní školení na téma Základy hlubokého učení pro zpracování obrazových dat.

11

Evropská komise nominovala HyperLoom a inteligentní navigace na ceny za inovace

Do užšího výběru čtyř finalistů v kategorii Inovace v rané fázi se díky online hlasování dostal inteligentní navigační systém pro občany.

13

Vyhodnocení 14. veřejné grantové soutěže

V září 2018 bylo mezi 56 úspěšných projektů rozděleno 57,5 milionů jádrohodin. Představujeme vybrané projekty, které získaly výpočetní čas.

15

Vydali jsme novou publikaci IT4Innovations digitální inovační hub

V publikaci dostupné online se můžete seznámit s konkrétními příklady naší spolupráce s průmyslem.

20

O třech listopadových konferencích v IT4I

Hostili jsme třetí ročník konference Den národních výzkumných infrastruktur, pořádali jsme konferenci uživatelů naší infrastruktury a výroční konferenci projektu Centrum excelence IT4Innovations.

22

Zástupci firem a organizací na podporu podnikání a inovací v IT4I

Společně s Technickou univerzitou v Košicích jsme organizovali seminář, který měl za cíl rozšířit povědomí o potenciálních přínosech HPC mezi malými a středními podniky.

26

IT4I a veřejnost

V roce 2018 jsme přivítali více než 1 700 návštěvníků. Zapojili jsme se znovu do akce Noc vědců a naši infrastrukturu jsme prezentovali i na Dnech NATO.

28

KRÁTCE

HLEDÁ SE JMÉNO PRO SUPERPOČÍTAČ

Zapojte se do soutěže o jméno pro superpočítač. Návrhy jmen pro modernizovaný superpočítač nám můžete zasílat do 15. ledna 2019. Více informací k plánované modernizaci naší výzkumné infrastruktury naleznete v článku **Rozšíření výpočetního klastru IT4I**. Ceny do soutěže věnuje dodavatel této modernizace firma Atos. Návrhy jmen zasílejte prostřednictvím registračního formuláře. Kompletní pravidla a podmínky soutěže naleznete na webu.

www.it4i.cz/soutez

DALŠÍ KOLO VEŘEJNÉ GRANTOVÉ SOUTĚŽE BUDE SPUŠTĚNO V ÚNORU 2019

V únoru 2019 bude spuštěna 16. veřejná grantová soutěž, kdy si budete moci zažádat o výpočetní zdroje IT4Innovations. Sledujte aktuality na našich webových stránkách.

www.it4i.cz

VZDĚLÁVACÍ AKTIVITY

Stále aktualizovanou nabídku kurzů, které budeme letos pořádat, najdete na odkazu níže. Například v březnu se můžete zúčastnit kurzu Paralelní vizualizace vědeckých dat pomocí softwaru Blender.

<http://training.it4i.cz/kurzy-it4innovations>

Lubomír Říha s oceněním
Nejlepší poster
konference SC18



OCENĚNÍ NEJLEPŠÍ POSTER
NA KONFERENCI SC18
ZÍSKAL TÝM Z IT4I



V listopadu 2018 jsme se účastnili
30. ročníku **Superpočítačové konference**

„Supercomputing Conference, SC“,
jež je největším celosvětovým setkáním
vědců a firem z oblasti vysoko-výkonnostního
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 letošní konference
získali 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.

Zeptali jsme se Ondřeje Meca a Tomáše Brzobohatého

IT4I se pravidelně účastní konference SC a v posledních letech se posterové příspěvky vědců z IT4I dostávají do užšího výběru nominovaných na cenu Nejlepší poster. V předchozích ročnících zvítězily asijské příspěvky zaměřené na simulace zemětřesení. Letos vyhrál váš poster. Zatřásló to s vámi?

„Upřímně jsme si mysleli, že opět zvítězí příspěvek s obdobnou tematikou, jako je například zemětřesení. O to víc jsme byli rádi a příjemně překvapeni, že jsme proměnili již několikátou nominaci IT4I do vítězné podoby.

Náš příspěvek se zabýval zdánlivě banální věcí, a to načítáním databázových souborů obsahujících data nestrukturovaných sítí, pro které vyvíjíme vysoce paralelní řešiče. V našem výzkumu, který je z velké části motivován požadavky našich průmyslových partnerů, se však často setkáváme se sekvenčními formáty těchto dat, u kterých není dopředu počítáno s jejich paralelním zpracováním. Data v takovýchto formátech jsou běžně využívána v každodenní inženýrské praxi mnoha firem a přechod na vhodnější formát se jeví jako nereálný požadavek, jelikož by to často vyžadovalo rozsáhlou

změnu podnikové struktury. Až doposud se musela vstupní data převádět do vhodnějšího formátu sekvenčně, což představovalo značnou časovou bariéru a ztěžovalo efektivní využívání superpočítačové infrastruktury. Naše řešení tuto pomyslnou bariéru odstraňuje a značně urychluje jak konverzi, tak přímé načtení sekvenčních dat a jejich přípravu pro distribuované počítání. Testy paralelní škálovatelnosti námi navrženého přístupu ukazují, že je možné načíst a připravit sekvenční data obsahující stovky milionů elementů během několika sekund. Běžné sekvenční zpracování může trvat řádově i hodiny.

Námi vyvinuté řešení umožňuje přímé napojení struktury dat průmyslových partnerů bez nutnosti zásahu do jejich podnikové struktury a přechodu na paralelní formáty. Tímto přístupem se snažíme minimalizovat veškeré bariéry potenciálně nových uživatelů HPC infrastruktur a umožnit jim jednoduše využívat nejmodernější dostupné technologie. Výsledné řešení je součástí masivně paralelní knihovny ESPRESO, dlouhodobě vyvíjené naším týmem.“



Naši kolegové na stánku IT4Innovations na konferenci SC18

Zeptali jsme se rovněž Lubomíra Říhy, který příspěvek prezentoval

Posterová sekce konference trvala tři dny. I díky tvému úsilí se nominace proměnila ve výhru. Můžeš nám přiblížit, jak odborná porota postupovala při výběru nejlepšího posteru?

„Poster sekce se sice konala tři dny, ale vše se rozhodlo během několika málo minut na úterní recepci, která začala v 17:15 místního času a trvala dvě hodiny. Porota tentokrát přišla celá najednou asi 20 minut po zahájení recepce. Předseda komise se představil a oznámil mi, že mám 7 minut na to, abych vysvětlil, o čem náš poster je a co je jeho hlavním přínosem. V tomto se přístup změnil oproti mé zkušenosti z roku 2016, kdy jsme ve velice podobném týmu také bojovali o nejlepší poster. Tehdy porotci chodili nezávisle a povídali jsme si, jak dlouho to uznali za vhodné. Po necelých deseti minutách

přišly na řadu dotazy každého z porotců. Témata byla různá: kde plánujeme práci dále publikovat, zda je možné náš přístup použít v dalších vědních oborech, jaký je náš přínos oproti state-of-the-art atd. Naštěstí žádný dotaz nepřijemně nepřekvapil.

Samotné vyhlášení proběhlo na čtvrtěčním ceremoniálu, kde se předávala všechna ocenění konference. Nejlepší poster se vyhlášoval ve druhé polovině, takže jsem si musel počkat. První pětka byla celkem silná na jména, například NVIDIA, IBM, Oak Ridge National Laboratory nebo University of Erlangen-Nuremberg. Naštěstí ale nakonec zaznělo to správné.“

Nedílnou součástí šestidenní akce SC18 byla nejen konference, jež zahrnovala posterovou sekci, přednášky, workshopy, diskuzní fóra a podobně, ale také výstava, které se každoročně účastní výrobci hardwaru, univerzity a výzkumné organizace. Jedná se o jedinečnou příležitost k získání nejnovějších poznatků z oblasti supercomputingu z první ruky, k navázání nových kontaktů a k objevení aktuálních trendů v oblasti vývoje HPC na celosvětové úrovni.

Na letošní výstavě Superpočítačové konference se prezentovalo téměř 400 organizací z 26 zemí. IT4Innovations se konference zúčastnilo jako vystavovatel již pošesté. Návštěvníci se tak mohli dozvědět více nejen o naší infrastruktuře, ale rovněž o souvisejícím výzkumu.

Na SC18 jsou také sekce Birds of a Feather, jejichž cílem je poskytnout prostor pro diskuzi o aktuálních tématech HPC komunit. Na jedné z nich, a to ve Strategies for Inclusive and Scalable HPC Outreach and Education, jsme byli taktéž zastoupeni.

Na konferenci bylo předáno nejprestižnější ocenění za vynikající výsledky v supercomputingu – cena Gordona Bella, jenž je označován za průkopníka vysoko-výkonnostního a paralelního počítání. Cena byla udělena

dvěma týmům z USA. Tým z Oak Ridge National Laboratory (ORNL) uspěl s článkem na téma využívání superpočítačů pro boj s opioidovou epidemií. Výzkum ve spolupráci s Ministerstvem energetiky USA a Správou veteránů Spojených států reaguje na zneužívání předepsaných opioidů (například morfin a kodein) v USA a poruchy vyvolané používáním opioidů nejen u veteránů. ORNL vyvinul nový algoritmus CoMet, který superpočítačům umožňuje zpracovávat obrovské množství genetických dat a identifikovat geny, kvůli kterým jsme náchylnější k bolesti a závislosti na opioidech, a navrhnout nejvhodnější léčbu. CoMet se v současnosti používá v projektech například z oblasti bioenergie a klinické genomiky. Druhým oceněným je příspěvek „Hluboké učení na úrovni exascale pro analýzy klimatu“ týmu z Lawrence Berkeley National Laboratory. Pomocí superpočítačů učí hlubokou neuronovou síť identifikovat extrémní meteorologické jevy, jako například tropické cyklony a atmosférické řeky, ze simulací klimatických modelů s vysokým rozlišením.

Při příležitosti konání konference byl vyhlášen aktualizovaný žebříček TOP500 nejvýkonnějších výpočetních systémů. Již 52. vydání žebříčku obsahuje seznam 500 nejvýkonnějších superpočítačů na světě, jejichž souhrnný teoretický výpočetní výkon je 2 200 Pflop/s. V seznamu přibýlo 153 zcela nových systémů, celkem 15 z nich je provozováno v Evropě.

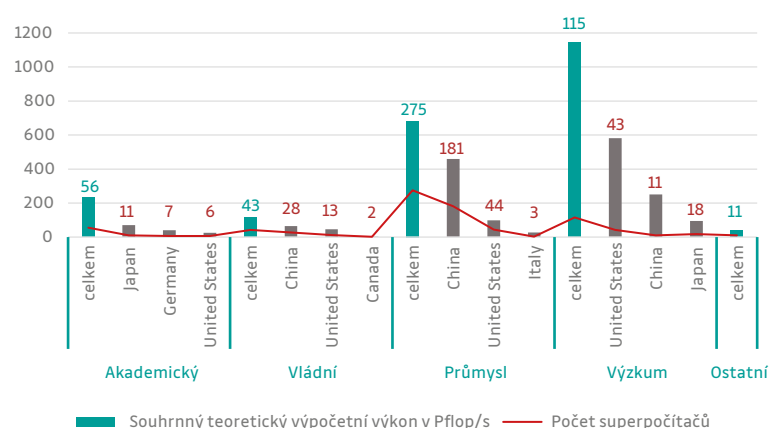
Žebříček ovládla Čína, které patří téměř polovina superpočítačů (229) se souhrnným teoretickým výpočetním výkonem 810 Pflop/s. Spojené státy americké mají v žebříčku 108 systémů (755 Pflop/s), Japonsko 31 systémů (170 Pflop/s), Velká Británie 20 (52 Pflop/s), Francie 18 (66 Pflop/s)

a Německo 17 (86 Pflop/s). V žebříčku TOP500 je dostupná také informace o segmentu, do kterého jednotlivé superpočítače spadají. Jedná se o sféru akademickou, vládní, výzkumnou, průmyslovou a ostatní (výrobci superpočítačů a další nespecifikované). Z aktuálního žebříčku lze vyčíst, že více než 50 % teoretického výpočetního výkonu superpočítačů světa se využívá pro výzkum a přibližně 30 % pro průmysl. Celkem 10 % spadá do akademického segmentu a další pak náleží vládám a ostatním (například výrobcům superpočítačů). Nejvyšší počet superpočítačů (275) je dedikován průmyslovému využití.

Výkon výpočetních systémů provozovaných IT4Innovations je věnován především českým výzkumným institucím a univerzitám, kterým výpočetní čas přidělujeme v rámci veřejných grantových soutěží. Podívejme se blíže na situaci v akademické sféře žebříčku TOP500.

Té vévodí, díky počtu systémů i souhrnnému teoretickému výpočetnímu výkonu, Japonsko. První příčka nicméně patří novému německému superpočítači SuperMUC-NG instalovanému v Leibniz Supercomputing Centre (LRZ), který má být uživatelům zpřístupněn v lednu 2019. S téměř 6,5 tisíci výpočetními uzly a dohromady více než 300 tisíci jádry má teoretický výkon 27 Pflops/s. Český Salomon s výkonem 2 Pflops/s (1 008 výpočetních uzlů, 76 tisíc jader) obsadil v akademické sféře žebříčku 13. místo.

Žebříček TOP500 dle segmentů



Prvních třináct evropských superpočítačů v akademické sféře žebříčku TOP500

Superpočítač	Země	Pořadí v žebříčku TOP500 v listopadu 2018	Výkon v Linpack benchmarku v Pflop/s
SuperMUC-NG	Německo	8	19,48
Marconi Intel Xeon Phi	Itálie	19	10,38
MareNostrum	Španělsko	25	6,47
SuperMUC	Německo	64	2,9
SuperMUC Phase 2	Německo	65	2,81
occigen2	Francie	77	2,5
Lomonosov 2	Rusko	79	2,48
Cumulus	Velká Británie	87	2,27
Mogon II	Německo	99	1,97
Beskow	Švédsko	111	1,8
Marconi Intel Xeon	Itálie	122	1,72
Prometheus	Polsko	131	1,67
Salomon	Česká republika	213	1,46



ROZŠÍŘENÍ
VÝPOČETNÍHO KLASTRU
IT4I





Podpis smlouvy na modernizaci HPC systémů pro IT4Innovations, 9. 11. 2018

Na Vysoké škole báňské – Technické univerzitě Ostrava byla 9. listopadu 2018 podepsána smlouva na modernizaci HPC systémů pro IT4Innovations národní superpočítačové centrum. Jedná se o rozšíření klastru Anselm s teoretickým výkonem přesahujícím 800 teraflopů za sekundu (bude tedy více než 8krát výkonnější než aktuálně provozovaný systém, který byl spuštěn v roce 2013) a dodá jej společnost Atos IT Solutions and Services, s.r.o.

V náročném soutěžním dialogu, jehož vítězem se stala firma Atos, byl kladen důraz nejen na cenu, ale také na použití nejvyspělejších momentálně dostupných technologií. Čeští vědci tak získají přístup k nejmodernější generaci procesorů Intel a také k nejvýkonnějším GPU akceleratorům od firmy NVIDIA.

„Poptávka českých vědců po výpočetních zdrojích převyšuje naši momentální dostupnou kapacitu zhruba o 100 %. Tato modernizace navýší naše kapacity a pomůže nám tento problém řešit. Čeští vědci současně dostanou k dispozici stroj s nejmodernějšími technologiemi, což jim umožní si tyto technologie osvojit a držet tak krok se světem,“ vysvětlil Vít Vondrák, ředitel IT4Innovations.

V Ostravě počítají vědci z českých univerzit i prestižních vědeckých center. Výkon superpočítačů je využit z více než 50 % na vývoj nových materiálů a léků, zbylá kapacita připadá na biovědy, inženýrské úlohy, astrofyziku a celou řadu dalších vědních oborů.

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

Modernizovaná část systému bude disponovat celkem 198 uzly: 189 standardních výpočetních uzlů (každý uzel 2x 18jádrový procesor Intel a operační paměť 192 GB RAM), 8 výpočetních uzlů s GPU akceleratory (každý uzel 2x 12jádrový procesor Intel, 4 GPU akceleratory NVIDIA V100 s grafickou pamětí 16 GB a operační pamětí 192 GB RAM), tlustý uzel (4x 12jádrové procesory Intel a operační

paměť 6 TB RAM). Superpočítač bude postaven na HPC architektuře BullSequana X a chlazení standardních uzlů bude zajištěno pomocí přímého chlazení kapalným médiem. Výpočetní síť bude postavena na nejmodernější technologii Infiniband HDR. Datové úložiště pro výpočty SCRATCH bude mít kapacitu 200 TB a propustnost 28 GB/s s využitím akcelerace technologií Burst Buffer. Datové úložiště pro výpočty NVMe over Fabric bude mít celkovou kapacitu 22,4 TB dynamicky alokovanou výpočetním uzlům. Softwarové řešení provozu a správy clusteru zajistí Bull Super Computer Suite, plánovač a manažer zdrojů PBS Pro.

**NVIDIA DEEP LEARNING INSTITUTE
CERTIFICATE OF COMPETENCY**

This certificate is awarded to
GEORG ZITZLSBERGER
for demonstrating competence in the completion of
**FUNDAMENTALS OF DEEP
LEARNING FOR COMPUTER VISION**

Will Ramey

Will Ramey

Director of The NVIDIA Deep Learning Institute, NVIDIA

2018
Year issued



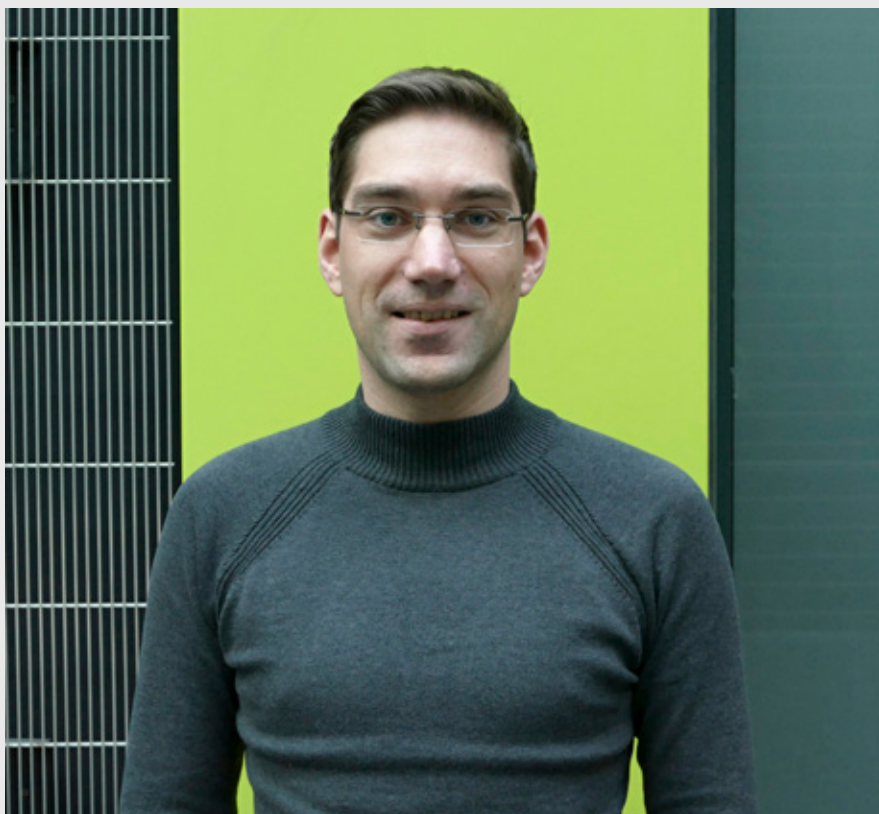
DEEP
LEARNING
INSTITUTE

**GEORG ZITZLSBERGER
SE STAL AMBASADOREM INSTITUTU
HLUBOKÉHO UČENÍ NVIDIA**

V souvislosti s plánovaným rozšířením systému Anselm o výpočetní část s nejnovějšími GPU akcelerátory NVIDIA s radostí oznamujeme, že IT4Innovations se díky Georgovi Zitzlsbergerovi stalo ambasadorem Institutu hlubokého učení NVIDIA. Zitzlsberger získal certifikát instruktora programu NVIDIA Deep Learning Institute (DLI) v závěru roku 2018.

Institut hlubokého učení NVIDIA (NVIDIA Deep Learning Institute) nabízí praktické kurzy vývojářům a vědeckým pracovníkům, kteří chtějí řešit náročné problémy pomocí hlubokého učení. Institut vyučuje nejnovější techniky pro navrhování, učení a nasazování strojového učení založeného na neuronových sítích v různých aplikačních oblastech, a to prostřednictvím kurzů vedených certifikovanými instruktory. Účastníci kurzů prozkoumají široce používané open-source nástroje a nejnovější platformy hlubokého učení akcelerované pomocí grafických procesorů NVIDIA.

Náš kolega Georg Zitzlsberger



Zeptali jsme se Georga Zitzlsbergera

Gratulujeme k získání certifikace. Na jaký kurz se můžeme v letošním roce těšit?

„Děkuji. Mám radost, že se IT4Innovations stalo součástí programu Institutu hlubokého učení NVIDIA a získalo status univerzitního ambasadora NVIDIA. Náš ústav je jednou z prvních institucí ve visegrádském regionu, která tento status získala. Uživatelům infrastruktury IT4I tak nabídneme možnost absolvovat kvalitní kurzy a využít rozšířené služby v oblasti nejnovějších architektur společnosti NVIDIA pro vysoko-výkonnostní výpočty a hluboké učení.

*Na základě získané certifikace plánujeme zorganizovat celodenní školení na téma *Základy hlubokého učení pro zpracování obrazových dat (Fundamentals of Deep Learning for Computer Vision)*. Náplní školení určeného vědcům a vývojářům bude představení hlubokého učení pro zpracování obrazových dat, osvojení*

a implementace metod hlubokého učení, jako například klasifikace obrazů a detekce předmětů, experimentování s daty, parametry učení, strukturou sítě a dalšími strategiemi pro zvýšení výkonu a schopností sítě a využití neuronových sítí pro řešení reálných problémů. Školení se bude konat v první polovině letošního roku, kdy bude spuštěn i nový modernizovaný systém.

První úspěšně získaná certifikace je naším odrazovým můstkem k dlouhodobé spolupráci s NVIDIA. Během roku 2019 plánujeme získat další certifikace, díky kterým budeme moct nabídku kurzů rozšířit. Bude se jednat například o programování na grafických kartách s využitím CUDA a OpenACC a o hluboké učení na větším počtu grafických procesorů.“

Pro bližší informace prosím sledujte webové stránky kurzů.



EVROPSKÁ KOMISE NOMINOVALA
HYPERLOOM A INTELIGENTNÍ NAVIGACE
NA CENY ZA INOVACE

Inovační radar je iniciativou Evropské komise. Jejím cílem je identifikovat evropské inovátory a inovace podpořené evropskými projekty z oblasti informačních technologií. Letos vybrala iniciativa 48 nejlepších inovací, které byly rozděleny do 5 kategorií. Dvě práce našich kolegů z Laboratoře pro náročné datové analýzy a simulace byly nominovány ve dvou kategoriích.

V kategorii Excelentní výzkum byl nominován software HyperLoom, který slouží pro jednoduché zpracování dat na superpočítačích. Pomocí HyperLoomu dokážou uživatelé jednoduše definovat závislosti mezi jednotkami až miliony výpočetních úloh a vytvořit plán, který pak na superpočítači efektivně spustí. Software byl využit například na úlohách z farmaceutického průmyslu a stavebního inženýrství.

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. Za pomoci superpočítačů je navigace schopna poskytnout řidičům nejaktuálnější data v co nejkratším čase a z globálního úhlu pohledu za účelem snížení celkové doby jízdy vozidla.

Celkem 20 finalistů se sešlo na začátku prosince ve Vídni na konferenci ICT 2018, kde prezentovali své inovace odborné porotě. Hlavní cenu vyhrála švýcarská společnost Gr3n za svou technologii pro znovupoužití odpadů z PET.





VYHODNOCENÍ 14. VEŘEJNÉ GRANTOVÉ SOUTĚŽE

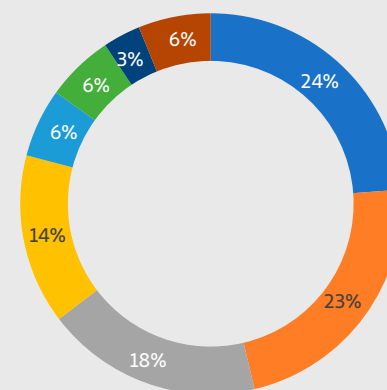
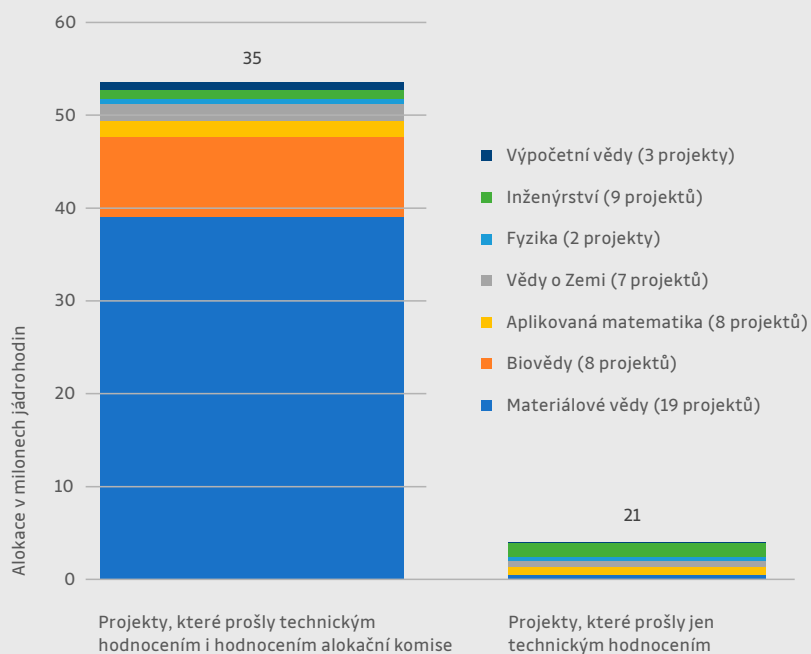


Ve 14. veřejné grantové soutěži si uchazeči o výpočetní čas zažádali o více než 93 milionů jádrohodin. Požadované zdroje převýšily vyhrazenou kapacitu, jež činí 48 milionů, o 94 %. Alokační komise tedy musela přistoupit ke snížení alokací většiny hodnocených projektů. Mezi 56 úspěšných projektů bylo ve 14. veřejné grantové soutěži rozděleno celkem 57 541 000 jádrohodin.

Celkově 93 % přerozdělených výpočetních zdrojů získalo 35 projektů, které prošly technickým hodnocením i hodnocením alokační komise. Nejčastějším vědním oborem jsou materiálové vědy (17 projektů) následované biovědami (8). Dohromady 15 projektů získalo alokace vyšší než 1 milion jádrohodin. Řešiteli těchto „milionových“ projektů jsou výzkumní pracovníci z IT4I, Akademie věd ČR, CEITECu, Univerzity Karlovy, Masarykovy univerzity a z Českého vysokého učení technického v Praze.

Projekty zájemců, kteří si zažádali o 400 tisíc jádrohodin či méně, prošly pouze technickým hodnocením a požadované zdroje jim byly alokovány v plné výši. Těchto 21 projektů získalo celkem 7 % z celkového počtu alokovaných jádrohodin. Nejvíce projektů přitom spadá do inženýrské oblasti výzkumu (7 projektů) a aplikované matematiky (5).

Co se organizací týče, jednu čtvrtinu z celkových přerozdělených výpočetních zdrojů získaly projekty žadatelů z VŠB-TUO (převážně z IT4Innovations). Druhá čtvrtina byla alokována projektům ústavů Akademie věd ČR. Nejvíce projektů úspěšných ve 14. grantové soutěži patří žadatelům z Univerzity Karlovy. Celkem 14 projektů této univerzity získalo více než 8 milionů jádrohodin. Kromě univerzit a výzkumných organizací uvedených v grafu získaly výpočetní čas i 3 projekty Výzkumného a zkušební leteckého ústavu a projekty Vysoké školy chemicko-technologické v Praze, Ostravské univerzity, Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně, Univerzity Palackého v Olomouci a Univerzity Pardubice, které mají shodně po 1 projektu.



- VŠB-TUO (13 projektů)
- Ústavy Akademie věd ČR (9 projektů)
- CEITEC - Masarykova univerzita (4 projekty)
- Univerzita Karlova (14 projektů)
- Masarykova univerzita (2 projekty)
- České vysoké učení technické v Praze (3 projekty)
- Vysoké učení technické v Brně (3 projekty)
- Ostatní (8 projektů)

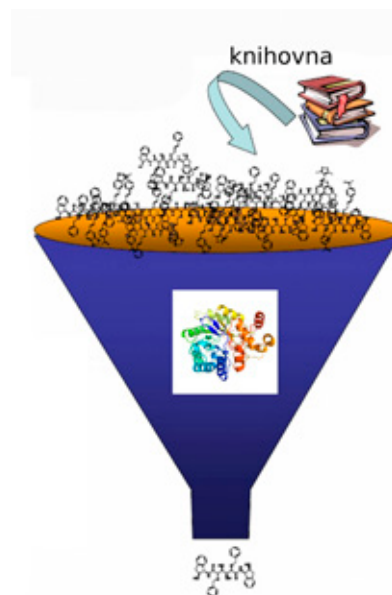
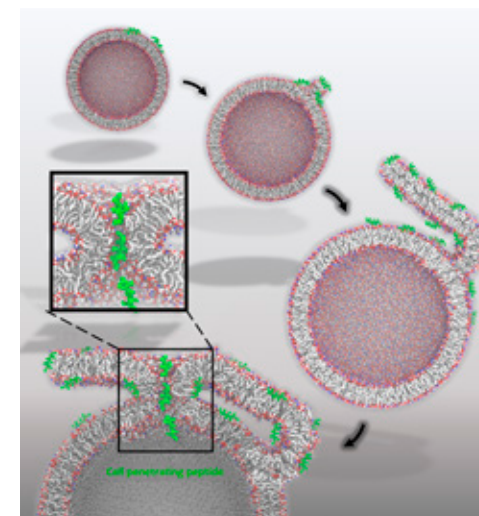


Schéma virtuálního
prohledávání knihoven



Peptid penetrující buňku

**prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc., FRSC
Akademie věd ČR**

POČÍTAČOVÉ NÁVRHY NOVÝCH LÉKŮ

Hlavním řešitelem projektu zaměřeného na vývoj metody pro navrhování nových léků pomocí počítačů je Pavel Hobza z Akademie věd ČR. Jedná se o jeho devátý superpočítačový projekt, kterému byly přiděleny výpočetní zdroje IT4Innovations. Cílem prací jeho výzkumné skupiny je vytvořit spolehlivou výpočetní strategii pro identifikaci nových ligandů, které se vážou na terapeuticky relevantní proteiny, jako jsou např. HIV proteáza, cyklindependentní kinázy a aldo-keto reduktázy. V současné době se zaměřují na vývoj spolehlivých protokolů pro virtuální prohledávání knihoven sloučenin, které mohou obsahovat i několik milionů chemických látek. Pro virtuální hledání léčiv tentokrát získal tým profesora Hobzy více než 6 milionů jádrohodin.

**prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.
Akademie věd ČR**

ÚČINKY BIOMECHANICKÝCH VLASTNOSTÍ LIPIDOVÝCH MEMBRÁN

Na výzkum makroskopických vlastností lipidových membrán se zaměří prof. Pavel Jungwirth z Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR. S pomocí superpočítače a využití molekulární dynamiky bude simulovat chování lipidových dvojvrstev. U plazmatických membrán je důležité nejen jejich chemické složení (například jaké typy lipidů je tvoří), ale také jejich tvar. Jungwirthův tým se pokusí zjistit, jak tvar dvojvrstvy ovlivňuje interakce v membráně. Nové poznatky o tvarech membrány přinesou další možnosti pro regulace enzymů a dalších proteinů v buňkách.

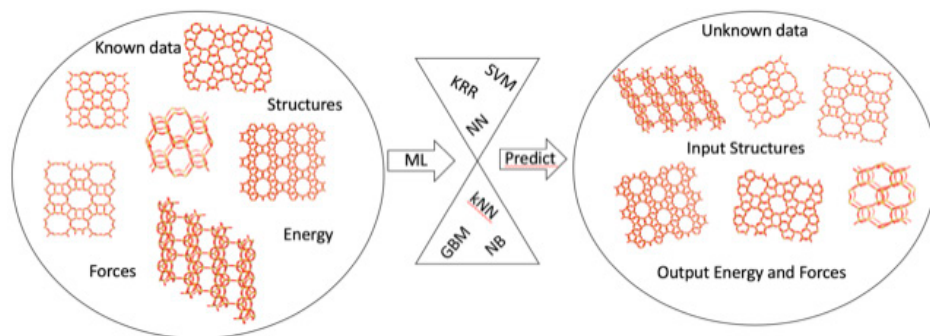
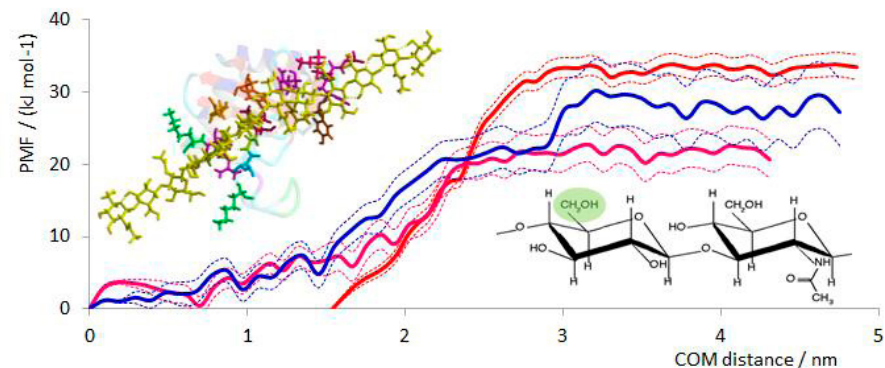


Schéma: Strojové učení pro popis zeolitů

Mgr. Miroslav Rubeš, Ph.D.
Akademie věd ČR

STROJOVÉ UČENÍ PRO POPIS ZEOLITŮ

Výzkumnou oblastí, do které spadají projekty s nejvyššími alokacemi nejen u nás, jsou materiálové vědy. Do této oblasti patří i projekt Miroslava Rubeše z Ústavu organické chemie a biochemie Akademie věd ČR, který získal téměř 2 miliony jádroidin. Zaměřuje se na zeolity, které se využívají jako detergenty, katalyzátory a adsorbenty. V roce 2017 činil trh se zeolity ve světě asi 30 miliard dolarů. Cílem Rubešova projektu je využít algoritmy strojového učení pro vytvoření modelu, který může pomoci hlubšímu porozumění jevů probíhajících v zeolitických materiálech.

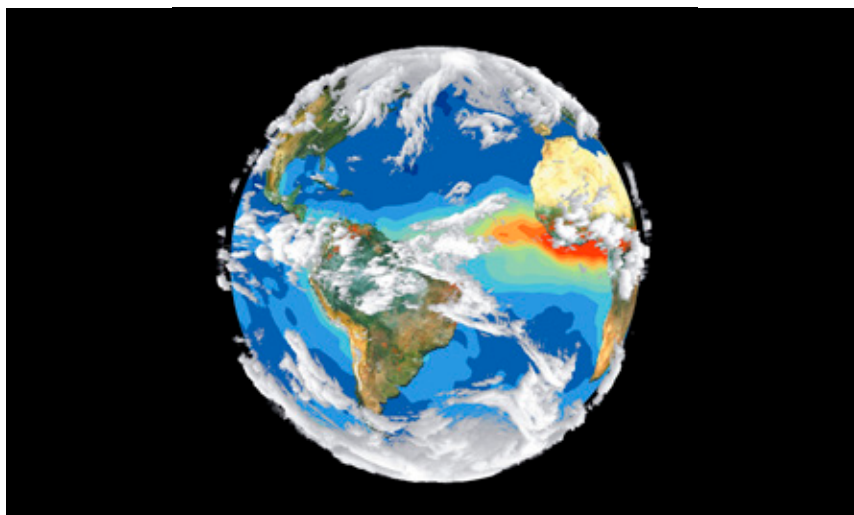


Závislost potenciálu střední síly na vzdálenosti těžišť ligandu a receptoru (Link domény proteinu TSG-6) vypočteného metodou umbrella sampling (tečkované čáry udávají směrodatné odchylky). Ligandem je oligosacharid kyseliny hyaluronové (červeně, 2 různá vazebná místa) nebo jeho neutrální analog obsahující glukózu místo kyseliny glukuronové (modře, 1 vazebné místo)

RNDr. Marek Ingr, Ph.D.
Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně

KYSELINA HYALURONOVÁ: STRUKTURA, INTERMOLEKULÁRNÍ INTERAKCE A INTERAKCE S PROTEINOVÝMI RECEPTORY

Kyselina hyaluronová je přírodní polysacharid obsažený například v pojivových tkáních a kloubním mazu. Má velké množství biologických funkcí a využívá se nejen v kosmetice, ale i ve zdravotnictví při léčbě kloubních onemocnění (osteoartritidy) a hojení ran či popálenin. Kyselina hyaluronová reaguje s proteinovými receptory a zprostředkovává mimo jiné buněčné signály. Podílí se tak pravděpodobně na rozvoji různých onemocnění včetně rakoviny. Výzkumem kyseliny hyaluronové a mechanismem vazby jejích molekul na proteinové receptory se zabývá i Marek Ingr z Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně, který získal výpočetní čas v naší 12. i 14. veřejné grantové soutěži. Na superpočítači provádí simulace molekulové dynamiky s cílem odhalit například klíčové interakce hyaluronanu s proteiny. Získané poznatky mohou být využity při navrhování nových léků i kosmetických přípravků.

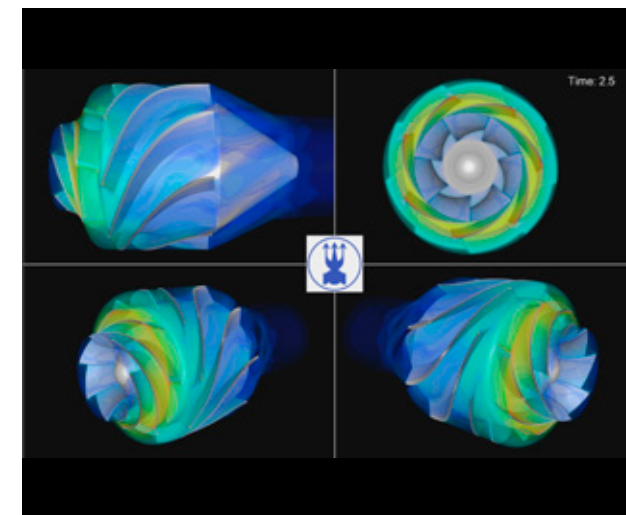


Mgr. Michal Belda, Ph.D.
Univerzita Karlova

KONVEKCE A KLIMATICKÉ SIMULACE

Důležitým nástrojem pro posouzení klimatických změn jsou globální i regionální klimatické modely, které však mají stále relativně nízké rozlišení a možnost jejich využití pro lokální aplikace je proto omezená. Nízké rozlišení většiny modelů neumožňuje implicitní posouzení jevů, jako jsou vzestupné pohyby (konvekce) a s nimi spojené intenzivní srážky. Tyto jevy je třeba v modelech reprezentovat parametrizacemi. Od roku 2016 spolupracují vědci z téměř 30 institucí z celé Evropy na pilotní studii schválené poradním týmem World Climate Research Programme (WCRP), která využívá pro vytváření klimatických scénářů regionální modely v nehydrostatickém režimu ve vysokém rozlišení (3 km a méně), u nichž je předpoklad implicitního zahrnutí mechanismů konvekce. V budoucnu tak budeme mít mnohem podrobnější scénáře dopadů klimatických změn na regionální a lokální úrovni.

Michal Belda z Univerzity Karlovy, který je do pilotní studie WCRP zapojen, získal v naší 14. veřejné grantové soutěži 1 milion jádroidin na simulace dlouhodobého klimatu v minulosti, jež budou sloužit jako základ pro posouzení budoucích klimatických scénářů. Belda se zaměří na alpský region i Českou republiku.



CFD simulace
vodního čerpadla

Mgr. Tomáš Krátký
Univerzita Palackého v Olomouci

OPTIMALIZACE ROTAČNÍCH STROJŮ POMOCÍ VÝPOČETNÍ DYNAMIKY TEKUTIN

Tomáš Krátký z Univerzity Palackého v Olomouci získal půl milionu jádroidin na vývoj plně automatizovaného modelu pro CFD simulace rotačních strojů. Tento nový model bude založený výhradně na open-source softwaru (OpenFOAM, Python) a umožní konstruktérům optimalizovat tvary rotačních strojů pro nejlepší možný hydraulický výkon. Získají tak lepší návrhy rotačních strojů za kratší čas.

Nový výpočetní postup bude využit při návrhu čerpadla, které by svými výkonnostními parametry mělo předčít ty momentálně používané. Výzkumné a vývojové práce v oblasti numerických simulací pro optimalizace tvarů jsou klíčové pro společnosti vyrábějící čerpadla a turbíny. Firmy mohou díky rychlejšímu a levnějšímu výpočetnímu postupu pro hydraulické návrhy zefektivnit přizpůsobování výrobků přesně na míru zákazníkům.

VYDALI JSME NOVOU PUBLIKACI
IT4INNOVATIONS
DIGITÁLNÍ INOVAČNÍ HUB

Během naší sedmileté historie jsme se zapojili do řady aktivit, které přispívají k rozvoji spolupráce podniků se superpočítačovými centry. Jsme, či jsme byli, členy konsorcií několika mezinárodních projektů, jež mají za úkol pomoci malým a středním podnikům s překonáním bariér, které jim brání v přístupu a využití superpočítačů pro jejich vlastní inovace a rozvoj. Jmenovitě jsou to projekty SESAME NET, InnoHPC, CloudiFacturing, TETRAMAX a Centrum excelence v HPC POP 2, ale také program na podporu malých a středních podniků výzkumné infrastruktury PRACE s názvem SME HPC Adoption Programme in Europe (SHAPE).

Naše aktivity směrem k průmyslovým podnikům byly uznány Evropskou komisí, když jsme získali statut úspěšně fungujícího Digitálního Inovačního Hubu (DIH) v oblasti vysoko-výkonnostních výpočtů, umělé inteligence a pokročilých datových analýz.

<http://s3platform.jrc.ec.europa.eu/digital-innovation-hubs-tool/-/dih/1436/view>

S konkrétními příklady naší spolupráce s průmyslem se můžete seznámit v nové publikaci IT4Innovations digitální inovační hub:

<https://www.it4i.cz/wp-content/uploads/2018/12/IT4I-brozura-CZ-web.pdf>





O TŘECH
LISTOPADOVÝCH
KONFERENCÍCH V IT4I

DEN NÁRODNÍCH VÝZKUMNÝCH INFRASTRUKTUR 2018

Třetí ročník konference Den národních výzkumných infrastruktur se v roce 2018 uskutečnil u nás. Odborné debaty ke stěžejním a aktuálním otázkám tvorby politiky a financování velkých výzkumných infrastruktur ČR se účastnilo téměř 100 osob, které přivítal ředitel superpočítačových služeb Branislav Janský. 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.

Návrh financování reflektoval výstupy mezinárodního hodnocení z roku 2017, kterým prošlo 58 VVI a také 17 nově předložených návrhů VVI. Excelentní ohodnocení získalo 21 stávajících infrastruktur včetně IT4Innovations a také 3 nové návrhy VVI. Velmi dobré hodnocení získalo 24 VVI a 4 návrhy. Od roku 2020 navíc dojde ke sloučení 7 infrastruktur do 3 projektů. Jedním z nich bude jedna ucelená e-infrastruktura, která vznikne sloučením IT4Innovations s CESNET a CERIT-SC (e-INFRA CZ).

Financování 48 velkých výzkumných infrastruktur z veřejných prostředků ČR v období do roku 2022 bylo schváleno 12. prosince 2018. Účelová podpora poskytovaná MŠMT dosáhne každoroční výše 1,89 miliard Kč a celková investiční podpora, kterou bude možné čerpat z výzev Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání, bude činit 3 miliardy Kč. V návaznosti na změny VVI chce MŠMT v roce 2019 aktualizovat i Cestovní mapu ČR velkých výzkumných infrastruktur.



Ředitel odboru výzkumu a vývoje
Ministerstva školství mládeže
a tělovýchovy Lukáš Levák

<https://www.it4i.cz/portfolio/den-narodnich-vyzkumnych-infrastruktur-2018/>

<https://www.vyzkumne-infrastruktury.cz/2018/11/na-it4innovations-probeh-3-rocnik-narodniho-dne-velkych-vyzkumnych-infrastruktur-cr/>

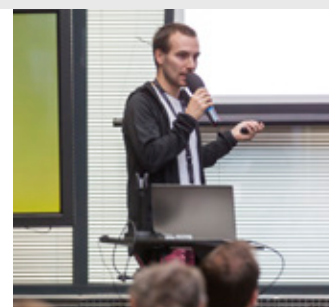
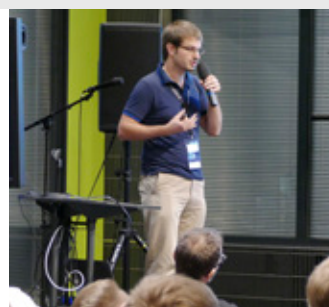


KONFERENCE UŽIVATELŮ IT4INNOVATIONS

Na druhém ročníku konference uživatelů IT4Innovations jsme přivítali téměř 100 účastníků, kteří měli možnost poslechnout si odborné přednášky z různých vědních oblastí a vyměnit si uživatelské zkušenosti. Na konferenci byl prezentován výzkum našich kolegů i externích uživatelů infrastruktury IT4Innovations, například z Akademie věd České republiky, CEITECu, Univerzity Karlovy, Vysoké školy chemicko-technologické v Praze, Českého vysokého učení technického v Praze a z Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně. V průběhu konference zaznělo 20 přednášek a proběhla i posterová sekce prezentace výzkumů.

<https://events.it4i.cz/event/11/>

<https://www.it4i.cz/portfolio/2-konference-uzivatelu-7-listopadu-2018/>



RICHARD WÜNSCH

Zazněly například 2 příspěvky uživatelů z Astronomického ústavu AV ČR. Richard Wunsch přednesl výzkum na téma Kulové hvězdokupy: Vznik hvězd v neextrémnějších podmínkách. Na našem superpočítači simuloval s kolegy vznik druhé generace hvězd. Vypracovali model, podle kterého vznikla druhá generace hvězd v kulových hvězdokupách z materiálu hvězdných větrů – proudu částic, který uniká z atmosféry hvězd první generace.

TAYLOR RHYS

O výzkumu opticky tmavých oblaků neutrálního vodíku v kupě galaxií v souhvězdí Panny povídal Taylor Rhys. Superpočítač Salomon využil pro sérii simulací modelujících vývoj turbulentního oblaku. Výsledkem jeho práce je, že v navrženém systému nelze dosáhnout stabilního stavu. V závislosti na počátečních podmínkách začne poměrně rychle oblak například kolabovat či tvořit hvězdy.

JIŘÍ KLIMEŠ

Jiří Klimeš z Matematicko-fyzikální fakulty Univerzity Karlovy představil metody, které používá pro výpočet vlastností molekulárních pevných látek. Ty hrají důležitou roli v přírodě i průmyslu. Superpočítač Salomon využívá jeho výzkumná skupina například pro získání vazebných energií vybraných molekulárních krystalů.

MICHAL H. KOLÁŘ

Michal H. Kolář z Vysoké školy chemicko-technologické v Praze přispěl do programu konference přednáškou z oblasti biologie, konkrétně na téma ribozomy a peptid VemP, jehož strukturální a dynamické vlastnosti studuje i s pomocí superpočítače Salomon.

STELLA SKIADOPOULOU

Naše kolegyně Stella Skiadopoulou přednesla příspěvek z oblasti materiálových věd zaměřený na magnetoelektrická multiferoika, nadějně kandidáty pro využití v nových hybridních technologiích. Představila studium dynamické magnetoelektrické vazby ve vybraných polárních antiferomagnetech, a to kombinací několika přístupů včetně výpočtů na superpočítači.


VÝROČNÍ KONFERENCE CENTRA EXCELENCE IT4INNOVATIONS

Ve čtvrtek 8. listopadu 2018 u nás proběhlo každoroční setkání s partnery projektu Centrum excelence IT4Innovations (2011–2015), s Ostravskou univerzitou, Vysokým učením technickým v Brně, Slezskou univerzitou v Opavě a Ústavem geoniky Akademie věd České republiky, se kterými pokračujeme ve spolupráci v období udržitelnosti formou projektu Národního programu udržitelnosti II (2016–2020). Zástupci partnerů představili na 7. výroční konferenci IT4Innovations hlavní směry a výsledky bádání svých výzkumných programů za poslední rok.

<http://ce.it4i.cz>

<https://www.it4i.cz/portfolio/7-vyrocní-konference-it4innovations>





ZÁSTUPCI FIREM A ORGANIZACÍ
NA PODPORU PODNIKÁNÍ
A INOVACÍ V IT4I

V pondělí 24. září jsme společně s Technickou univerzitou v Košicích organizovali seminář HPC pro malé a střední podniky, který měl za cíl rozšířit povědomí o potenciálních přínosech HPC mezi malými a středními podniky. Seminář se zúčastnilo celkem 17 zástupců malých a středních podniků a organizací podporujících podnikání.

Seminář byl financován z prostředků projektu Superpočítače pro efektivní inovace v Podunají (InnoHPC, DTP1-1-260-1.1.) Dunajského nadnárodního programu Interreg, jenž je spolufinancovaný z fondů Evropské unie (ERDF, IPA).

Účastníci byli seznámeni nejen s nejmodernějšími trendy v oblasti HPC, ale také se schopnostmi českého i slovenského HPC centra podporovat s pomocí superpočítačů inovativní rozvoj malých a středních podniků. Náš kolega Tomáš Karásek a Filip Holka z Výpočetního centra Slovenské akademie věd představili konkrétní příklady spolupráce podniků s HPC centry. O možných modelech spolupráce a možnostech financování inovací hovořil Martin Dujčák z Technické univerzity v Košicích.



**V roce 2018 jsme přivítali
více než 1 700 návštěvníků.**

Přišli k nám na exkurzi, seminář, veřejnou akci apod. V posledních měsících minulého roku jsme dveře ústavu otevřeli veřejnosti i v rámci akce Noc vědců a prezentovali naši jedinečnou infrastrukturu na Dnech NATO.

IT4I A VEŘEJNOST



NOC VĚDCŮ

Na více než 30 místech v České republice proběhla v pátek 5. října 2018 Noc vědců, vědecko-popularizační akce, která zábavnou formou dává lidem příležitost poznávat vědu. Národním koordinátorem letošního ročníku, který navštívilo více než 60 tisíc lidí, bylo seskupení 3 ostravských institucí (VŠB-TUO, Ostravská univerzita a Dolní Vítkovice – Svět techniky).

My jsme se do akce zapojili již potřetí a přivítali jsme 732 návštěvníků, pro které jsme připravili pestrý program plný chytré zábavy. Během pěti hodin, kdy byly dveře našeho ústavu otevřené široké veřejnosti, si zájemci mohli poslechnout přednášky vědců. O vývoji softwaru pro zpracování obrázků z mikroskopů na superpočítačích jim povykládal Pavel Tomančák z Max Planck Institutu v Drážďanech. Jiří Jaroš z Vysokého učení technického v Brně se podělil o novinky ve vývoji počítačem řízeného ultrazvuku pro operace a stimulace mozku. Karel Janko z Akademie věd ČR / Ostravské univerzity posluchačům přiblížil výzkum klonálního rozmnožování v přírodě a k čemu jeho tým využívá superpočítač. Poslední přednášku o výzvách, kterým čelí vědci při výzkumu lithium-kovových baterií, přednesl náš kolega Dominik Legut.

Návštěvníci měli možnost zhlédnout naši podpůrnou infrastrukturu a dozvědět se, co všechno superpočítač pro provoz potřebuje. Pro děti, a nejen pro ně, byla nachystána hra o pěti úkolech, kterou návštěvníci s dětmi označili za nejlákavější část programu. Dále si mohli zahrát počítačové hry Mars Mania a Shooting Stars a dozvědět se o panevropské výzkumné infrastruktuře PRACE, jejímž cílem je posílit konkurenceschopnost evropské vědy, výzkumu a průmyslu.

<https://www.it4i.cz/portfolio/noc-vedcu-2018/>



DNY NATO

Podruhé jsme prezentovali infrastrukturu a výzkum IT4Innovations na Dnech NATO v Ostravě, největší bezpečnostní show v Evropě. Na 18. ročník Dnů NATO, který byl oslavou 100 let Československa, zavítalo 220 tisíc návštěvníků. Víkendový program zahrnoval nejen dynamické ukázky letecké a pozemní techniky, ale i stánkové prezentace partnerů akce.

Počasi přálo a my jsme měli možnost oslovit bezpočet návštěvníků. Cílem naší účasti na akci bylo zvýšit povědomí veřejnosti o IT4Innovations. Návštěvníci měli jedinečnou příležitost projít se virtuálně datovým sálem, prohlédnout si klastr Permoník a také větší výpočetní klastr.



