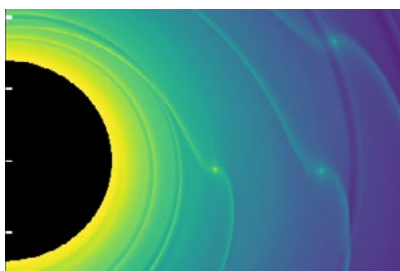




## Představení nových hodnot IT4Innovations, mise a vize

Vzhledem k aktuálním požadavkům české a evropské výzkumné komunity a postupně sílícímu rozvoji digitalizace celé společnosti jsme se rozhodli aktualizovat pro období 2018-2020 své strategické cíle včetně naší mise a vize. V souladu s novou misí a vizí byly definovány i hodnoty, které považujeme ve své činnosti jako prioritní a pro úspěšné naplňování našeho poslání jako klíčové.

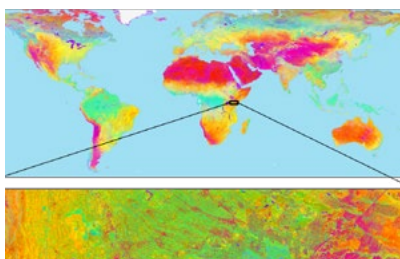
[Číst dál](#)



## Vyhodnocení 13. veřejné grantové soutěže: Kdo a co bude u nás počítat

Mezi 46 úspěšných projektů bylo přerozděleno více než 55 milionů jádrehodin. Představujeme vám sedm vybraných projektů, které získaly výpočetní čas.

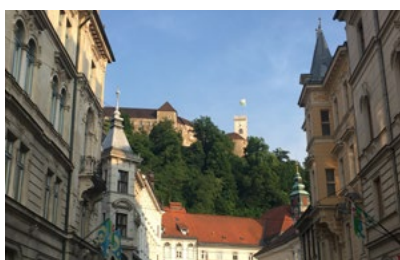
[Číst dál](#)



## Zpracováváme a ukládáme data pro Evropskou kosmickou agenturu

Spolupracujeme s Německým střediskem pro letectví a kosmonautiku, firmou GISAT a dalšími v rámci projektu Evropské kosmické agentury Urban Thematic Exploitation Platform.

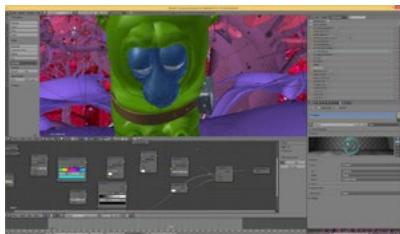
[Číst dál](#)



## Evropský summit HPC v Lublani

V červnu jsme se zúčastnili třetího ročníku série konferencí s názvem European HPC Summit Week v Lublani a přinášíme vám zprávy o tom, co jsme se dozvěděli a jak jsme do jeho programu přispěli.

[Číst dál](#)



## O naší spolupráci s Blender Institute na vývoji open-source softwaru Blender

Naši kolegové vyvíjí open-source software Blender, komplexní 3D software pro vizualizaci, pokrývající širokou škálu tvorby od modelu přes animaci až po finální rendering.

[Číst dál](#)



## Aktualizovaný žebříček TOP500

Již popáté jsme prezentovali naši infrastrukturu a výzkum návštěvníkům největší evropské akce zaměřené na HPC - International Supercomputing Conference, u jejíž příležitosti byl aktualizován žebříček nejvýkonnějších superpočítačů na světě.

[Číst dál](#)

## Pozvánka na 2. konferenci uživatelů IT4Innovations

Od spuštění prvního superpočítače Anselm na jaře roku 2015 jsme vyhlásili a vyhodnotili celkem 26 výzev k zaslání žádostí o výpočetní čas IT4Innovations. Více než 800 projektů získalo výpočetní čas. Srdečně zveme všechny naše uživatele na 2. konferenci uživatelů IT4Innovations, která se bude konat ve středu **7. listopadu 2018** v IT4Innovations. Do programu konference můžete přispět přednáškou či výzkumným posterem, které registrujete do **31. července 2018**.

[Více informací](#)

## 14. kolo veřejné grantové soutěže

Opět máte možnost požádat si o výpočetní čas na našich superpočítačích. Žádosti přijímáme do **31. července 2018**. Výsledky soutěže budou oznámeny v druhé polovině září 2018. Alokované zdroje budou uživatelům k dispozici od **září 2018** do **června 2019**.

[Více informací](#)

## KRÁTCE

---

- 01** Naši kolegové z Laboratoře pro náročné datové analýzy a simulace se zúčastnili největší evropské konference zaměřené na výzkum v dopravě Transport Research Arena, která se konala v dubnu ve Vídni.
- 02** Ministerstvo školství, mládeže a tělovýchovy uspořádalo ve spolupráci s námi v květnu 2018 workshop k iniciativě EuroHPC. Prezentace z workshopu si můžete prohlédnout na webových stránkách MŠMT.
- 03** Na konferenci Kybernetická revoluce CZ, která se konala v aule VŠB-TUO dne 5. 6. 2018, představil Tomáš Karásek Projekt Cloudifactory jako příležitost pro digitální rozvoj firem. Tisková zpráva k vyhlášení 1. Veřejné výzvy k zapojení do projektu CloudiFactoring.
- 04** V červnu 2018 jsme reprezentovali evropskou výzkumnou infrastrukturu Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) na největším vědeckém festivalu v České republice Veletrhu vědy, který pořádala Akademie věd ČR a zúčastnilo se ho 24 800 účastníků.
- 05** Byli jsme partnerem akce Hackathon: Doprava 4.0.
- 06** Vydali jsme tiskovou zprávu k evropskému projektu EXPERTISE: Pokročilé výpočetní nástroje ve vývoji turbín, který umožňuje 15 mladým výzkumníkům pracovat na 15 vzájemně propojených projektech.
- 07** Superpočítač Anselm oslavil pět let provozu.
- 08** Doposud nás letos v rámci exkurzí navštívilo více než 500 návštěvníků. Domluvte si pro svou školu/firmu také exkurzi, kontaktujte nás e-mailem na [pr@it4i.cz](mailto:pr@it4i.cz).
- 09** Třetí ročník Dne národních velkých výzkumných infrastruktur se letos uskuteční v IT4Innovations dne 6. listopadu 2018.

Vážení čtenáři,

v nedávné době jsme zahájili proces zamyšlení se nad dalším směřováním IT4Innovations, nad tím, jakou roli chceme hrát na poli české vědy a jak budeme naplňovat naše poslání velké národní výzkumné infrastruktury. Bezpochyby také usilujeme o udržení si a prohloubení naší účasti v mezinárodních výzkumných organizacích a další rozšíření spolupráce se zahraničními institucemi. Chceme budovat pověst prestižní výzkumné instituce doma a také za hranicemi naší země. Tento proces je vzhledem k dynamicky se měnícímu prostředí výzkumu a vývoje kontinuální a pro období 2018-2020 jsme si definovali nové strategické cíle, v jejichž kontextu jsme aktualizovali i znění naší mise a vize.

#### 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.

Kromě mise a vize jsme nově definovali také hodnoty naší instituce, které hodláme jako instituce uznávat a ctít a které by měly napomoci k naplňování našich strategických cílů. Těmito hodnotami jsou: týmová spolupráce, profesionalita, inovativnost a značka IT4Innovations. Co se pod těmito hodnotami konkrétně skrývá a jak očekáváme, že se budou naplňovat uvnitř i vně IT4Innovations, je popsáno níže.

#### Týmová spolupráce

IT4I podporuje týmovou spolupráci, kdy všichni zaměstnanci vědí, že úkoly a problémy se řeší společně, v týmu se navzájem respektují a pomáhají si.

#### Profesionalita

IT4I poskytuje profesionální služby ve všech oblastech své působnosti.

Všichni zaměstnanci přistupují ke své svěřené práci odpovědně, znají své cíle a aktivně přispívají k jejich plnění a pravidelným vzděláváním a rozvojem zajišťují profesionální přístup.

#### Inovativnost

Naši zaměstnanci neustále hledají nové příležitosti k růstu a rozvoji, přijímají nové výzvy, aktivně přicházejí s novými nápady a řešeními a IT4I jim k tomu vytváří podmínky kreativního prostředí

#### Značka IT4I

IT4I ctí zásady etického jednání a chování. Zaměstnanci aktivně budují a reprezentují značku IT4I doma i v zahraničí, hrdě se k ní hlásí a jsou k ní loajální.

Dovolte, abych se ještě hlouběji zamyslel, co pro mne znamená hodnota inovativnost, kterou považuji za velice důležitou pro rozvoj naší instituce i společnosti obecně. Osobně vidím v tomto pojmu ochotu lidí pustit se do nových neprobádaných oblastí. Samozřejmě to s sebou nese hodně práce, někdy i na úkor osobního volného času, a riziko případného neúspěchu. Odměnou v případě úspěchu je pocit radosti, uspokojení či naplnění, že člověk vytvořil něco zcela nového. Možná ne každý má tyto ambice a radost z toho, že vymyslel něco inovativního, ho příliš nenaplnuje. Měli bychom si ale cenit každého, kdo se odhodlá touto mnohdy trnitou cestou vydat, a ne se mu smát nebo mu házet klacky pod nohy. Navíc úspěch dle mého není možný bez odhodlání podstoupit všechna možná rizika. Smutné je, že systém financování vědy toto příliš nepodporuje a obava z rizika neúspěchu a následných sankcí zabíjí přirozenou kreativitu. V historii lidstva však asi byla i horší období. Zatím nás nikdo za inovativní myšlenky neupaluje.

Přeji všem našim uživatelům i našim zaměstnancům pevnou vůli a odhodlání přispět naší společnosti novými užitečnými vynálezy a věděními.

Vít Vondrák  
ředitel IT4Innovations







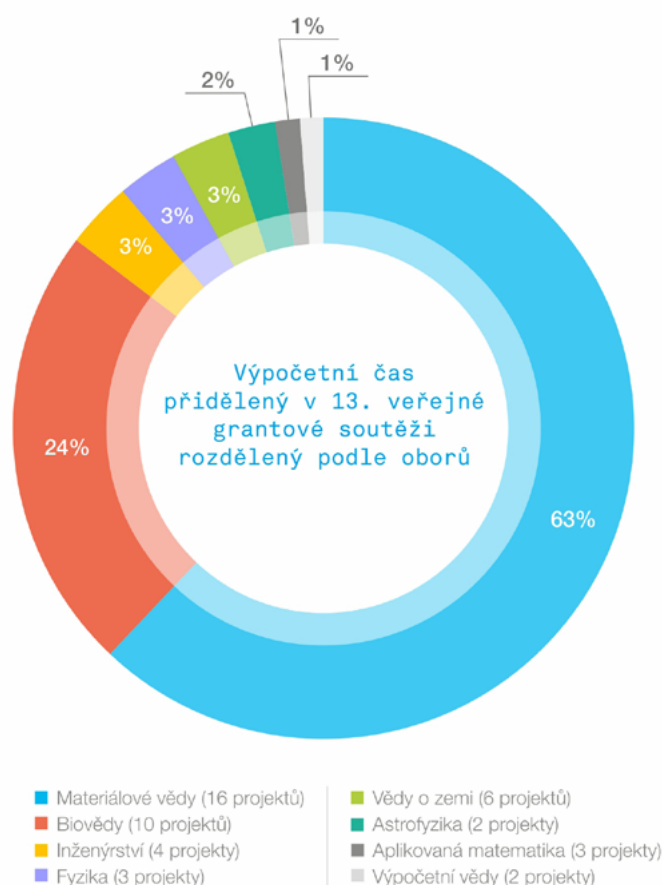
## VYHODNOCENÍ 13. VEŘEJNÉ GRANTOVÉ SOUTĚŽE: KDO A CO U NÁS BUDE POČÍTAT?

V únoru a březnu 2018 si mohli zájemci podat žádost o výpočetní čas IT4Innovations v rámci 13. veřejné grantové soutěže. Výsledky soutěže byly oznámeny na konci května 2018 a úspěšní žadatelé mohou výpočetní čas využít do února roku 2019. Tentokrát bylo mezi 46 úspěšných projektů osmi institucí přerozděleno více než 55 milionů jádrohodin.

Vědní oblast, do které spadají projekty s největším množstvím alokovaného výpočetního času, jsou materiálové vědy. Šestnáct projektů získalo téměř 35 milionů jádrohodin. Projekt našeho kolegy Ing. Dominika Leguta, Ph.D. získal více než 10 milionů jádrohodin pro studium tepelné roztažnosti a vodivosti nových nukleárních paliv pro reaktory IV. generace. Druhá nejvyšší alokace, 7,5 milionu jádrohodin, byla přidělena projektu prof. RNDr. Mojmíra Šoba, DrSc. ze Středoevropského technologického institutu, CEITEC MU, Masarykovy univerzity v Brně, který se zabývá vývojem nových pokročilých materiálů.

Třetí nejvyšší alokace, ve výši více než 3 miliony jádrohodin, byla přidělena projektu RNDr. Lubomíra Rulíška, Ph.D., DSc. z Ústavu organické chemie a biochemie Akademie věd ČR, který se zabývá reakčními mechanismy metaloenzymů, katalyzátorů biochemických reakcí. Jeho projekt spadá do oblasti biovědy, jež obsadily pomyslné druhé místo. Celkem deset projektů z oblasti biovědy získalo více než 13 milionů jádrohodin, tedy téměř jednu čtvrtinu z celkového přerozděleného výpočetního času.

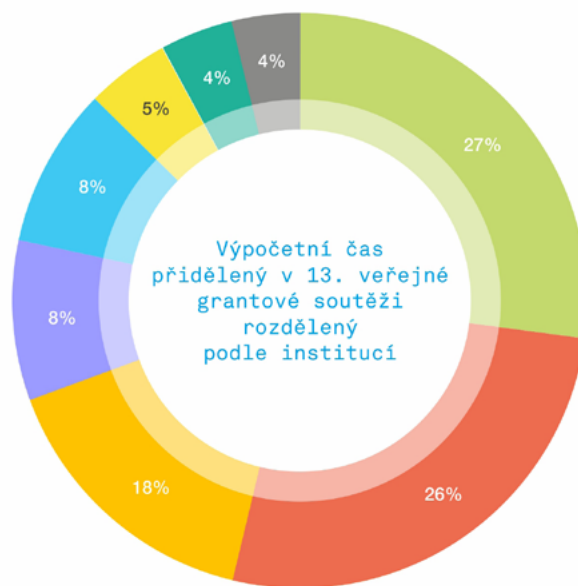
Pro výzkum toxinů, které jsou původcem patogenních vlastností bakterií *Clostridium difficile*, získal prof. RNDr. Jaroslav Koča, DrSc. a RNDr. Petr Kulhánek, Ph.D. z CEITEC Masarykova univerzita 1,5 milionu jádrohodin. *Clostridium difficile* způsobuje průjem i jiná onemocnění trávicího traktu v situacích, kdy je běžná střevní mikroflóra potlačena antibiotiky. Tento výzkum má za cíl přispět k návrhům nových léků pro léčbu infekcí, jejichž příčinou je tato bakterie.



Co se organizací týče, přibližně jednu čtvrtinu z celkového přerozděleného výpočetního času získalo 12 projektů žadatelů z VŠB-TUO, a tedy i z IT4Innovations. Dva projekty z oboru inženýrství (celkově ze 4) budou řešit výzkumné pracovnice z Fakulty stavební VŠB-TUO. Ing. Zdeňka Neuwirthová využije přidělený výpočetní čas pro numerické modelování betonových konstrukcí v interakci se zemním prostředím. Ing. Lenka Lausová, Ph.D. se zaměří na numerické modelování zatížení konstrukcí v kvazi-statickém působení větru.

Druhá čtvrtina z celkového přerozděleného výpočetního času byla přidělena 11 projektům žadatelů z ústavů Akademie věd ČR (AV ČR). Ústavy, které u nás budou v rámci soutěže počítat, jsou Ústav organické chemie a biochemie (3 projekty), Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského (4 projekty), Fyzikální ústav (2 projekty) a Ústav fyziky plazmatu (2 projekty).

Největší počet projektů AV ČR spadá do oblasti materiálových věd, avšak nejvíce výpočetního času bylo alokováno třem projektům z oblasti biovědy. V rámci 13. veřejné grantové soutěže byly úspěšné i projekty žadatelů z CEITEC Masarykova univerzita (3 projekty), Univerzity Karlovy (8 projektů), Ostravské univerzity (4 projekty), Masarykovy univerzity (4 projekty), Českého vysokého učení technického v Praze (1 projekt) a Vysokého učení technického v Brně (3 projekty).

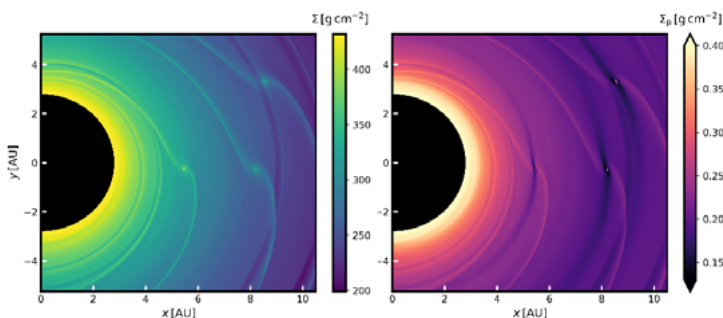


- VŠB - Technická univerzita Ostrava (12 projektů)
- Ústavy Akademie věd České republiky (11 projektů)
- CEITEC - Masarykova univerzita (3 projekty)
- Univerzita Karlova (8 projektů)
- Ostravská univerzita (4 projekty)
- Masarykova univerzita (4 projekty)
- České vysoké učení technické v Praze (1 projekt)
- Vysoké učení technické v Brně (3 projekty)

## Představujeme vybrané projekty, které získaly v 13. veřejné grantové soutěži výpočetní čas:

### RNDr. Ondřej Chrenko (Univerzita Karlova): Formování planetárních systémů

Může vzniknout život na planetách objevených mimo naši sluneční soustavu (exoplanetách)? Jedním z dílčích kroků k nalezení odpovědi na tuto otázku je pochopení vzniku exoplanet a jejich soustav. Možné scénáře vzniku exoplanetárních systémů bude hledat Dr. Ondřej Chrenko z Univerzity Karlovy v projektu Formování planetárních systémů. Na výzkumu spolupracuje s dalšími českými astronomy, doc. Miroslavem Brožem a Dr. Davidem Nesvorným (působícím v USA), a rovněž s observatoří ve švédském Lundu. Pomocí výpočetních simulací na superpočítačích v IT4Innovations bude studovat vznik planetárních embryí a jejich dynamický vývoj v plynoprachových discích rotujících kolem mladých hvězd.



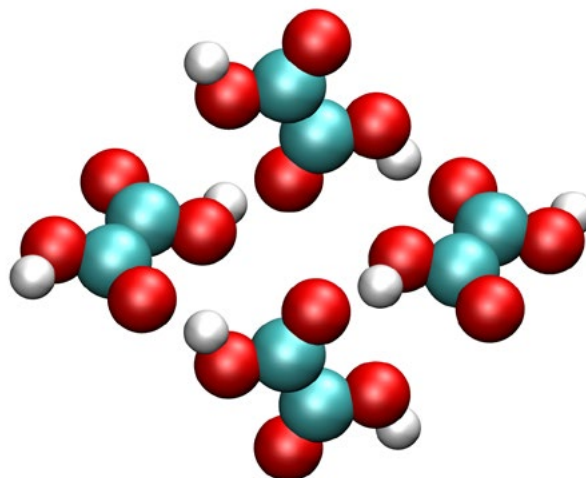
Ukázka hydrodynamické simulace. Barevná škála na obrázcích představuje plošnou hustotu plynu (vlevo) a malých pevných těles/balvanů (vpravo). Plyn a balvany tvoří protoplanetární disk (obrázek zachycuje pouze jeho část), ve kterém se formují planety a který rotuje kolem centrální hvězdy. V disku jsou vnořeny tři planety, které jsou příliš malé na to, abychom je v obrázku rozlišili. Vidíme však projevy gravitačních interakcí mezi planetami a diskem. Jedná se o zhuštění materiálu v okolí planet (tři „jasné body“ na obrázku), od nich vedoucí spirální ramena, a v disku balvanů též tmavé (řidké) mezery vznikající akrecí pevného materiálu na planety.

**Mgr. Jiří Klimeš, Ph.D. (Univerzita Karlova):  
Správnost a přesnost pro molekulární krystaly II**

Jiří Klimeš a jeho tým získal téměř 2 miliony jádrohodin na vývoj metod pro simulace materiálů. Jeho projekt Správnost a přesnost pro molekulární krystaly využívá poznatky kvantové chemie a přístupy používané pro popis pevných látek a získal na něj i prestižní Startovací grant Evropské výzkumné rady.

V přírodě i průmyslu hrají molekulární pevné látky (molekulární krystaly) důležitou roli. Uvedme si například metan hydrát, tzv. hořící led, potenciálně velmi významný zdroj energie, polární čepice bohaté na oxid uhličitý na Marsu a léky v pilulkách. Některé molekulární krystaly mají zvláštní a přitom důležité vlastnosti. Příkladem je polymorfismus, schopnost existovat v různých strukturách při stejných podmínkách, který může být zásadní pro účinnost léků v těle.

Cílem projektu Jiřího Klimeše je vyvinout metody, kterými bude možné spolehlivě vypočítat vazebné energie v materiálech jako jsou molekulární krystaly, což pomůže pochopit jejich vlastnosti. Superpočítač Salomon skupina využije pro získání vazebných energií 13 vybraných molekulárních krystalů.



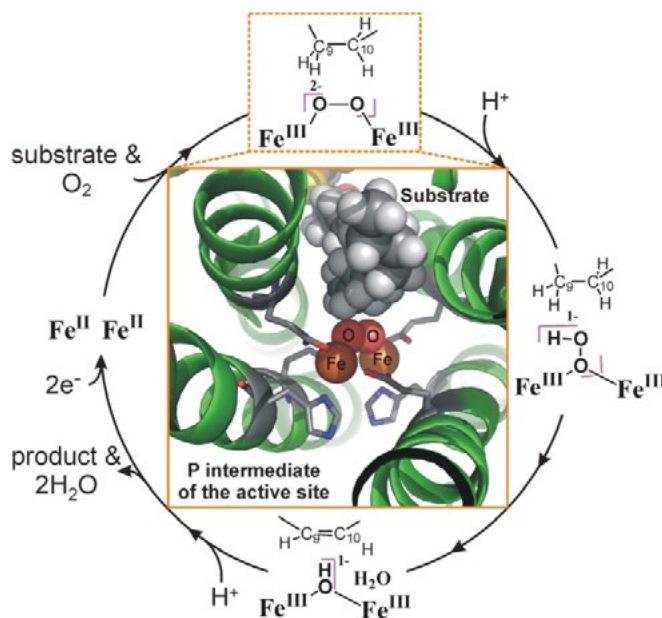
Model části krystalu polymorfu alfa kyseliny šťavelové.

**RNDr. Lubomír Rulíšek, Ph.D., DSc. (Ústav organické chemie a biochemie AV ČR):  
Reakční mechanismy metaloenzymů**

Metaloproteiny hrají v přírodě významnou roli coby katalyzátory biochemických reakcí, které by bez přítomnosti iontu kovu neprobíhaly. Jedná se o téměř všechny oxidačně-redukční procesy, spinově zakázané procesy či procesy, při kterých dochází ke štěpení velmi stabilních chemických vazeb (C-H vazby či trojná, resp. dvojná vazba v molekulách  $N_2$  či  $O_2$ ). Příkladem těchto základních biologických procesů je fotosyntéza nebo buněčné dýchání.

Pro porozumění funkce a struktury metaloproteinů jsou důležité nejen experimenty (např. rentgenová krystalografie, spektroskopie a elektrochemická měření), ale i výpočetní metody teoretické chemie, které dokážou poskytnout strukturní a energetické charakteristiky metaloproteinů.

Projekt Lubomíra Rulíška z Akademie věd ČR se zabývá studiem tří vybraných metaloproteinů s tzv. polynukleárními centry (tedy více iontů kovů v aktivním místě enzymu), jenž mají význam nejen v přírodě, ale i jako potenciální průmyslové katalyzátory. Jeho projekt získal přes 3 miliony jádrohodin. Přidělený výpočetní čas využije k porovnání experimentálních výsledků s výsledky kvantově-mechanického modelování (s použitím programů Turbomole, MOLCAS, Amber, ComQum, ORZ) s cílem získat základní popis katalytických cyklů studovaných metaloenzymů. Výsledky výzkumu mohou být využity pro biomimetické (biologií inspirované) návrhy katalytických systémů, které by mohly najít využití v chemickém průmyslu.



Teoreticky navržený reakční mechanismus  $\Delta^9$ -desaturázy



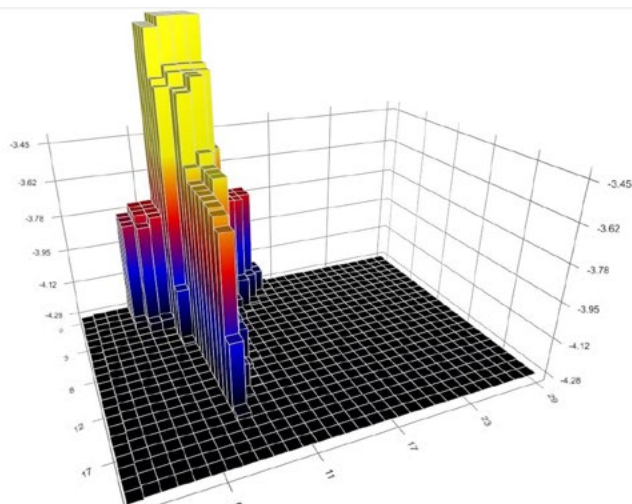
**Ing. Michal Podhorányi, Ph.D. (IT4Innovations):  
PaReTran2 (Paralelizovaný reakčně-transportní model  
šíření kontaminace v podzemních vodách 2)**

Radioaktivní odpady (RAO) vydávají nebezpečné záření i po desítky tisíc let. Proto musí být izolovány od životního prostředí na dlouhou dobu, dokud se nepřemění na látky stabilní. V České republice jsou RAO bezpečně ukládány do tří úložišť radioaktivních odpadů. Za celosvětově nejúčinnější a nejbezpečnější cestu ke zneškodnění těchto látek se však považuje hlubinné úložiště ve stabilním geologickém prostředí, kde nehrozí například zemětřesení a záplavy. V ČR zodpovídá za projekt hlubinného úložiště Správa úložišť radioaktivních odpadů, která počítá s jeho zahájením v roce 2065. V současné době identifikuje potenciálně vhodné lokality a finální lokalita by měla být vybrána v roce 2025.

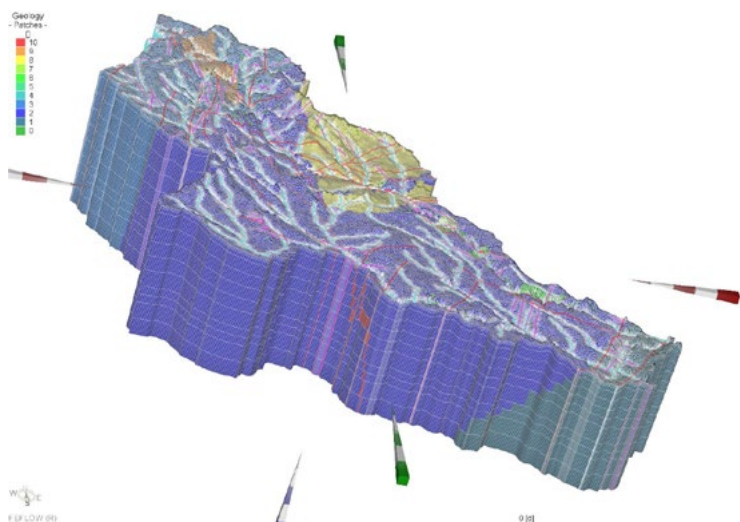
Naši kolegové Michal Podhorányi a Lukáš Vojáček spolupracují od roku 2017 s Masarykovou univerzitou a společností DHI na projektu Paralelizovaný reakčně-transportní

model šíření kontaminace v podzemních vodách (PaReTran) podpořeném Technologickou agenturou České republiky (TH02030840). Cílem PaReTranu je zlepšit možnosti analýzy potenciálního rizika kontaminace životního prostředí v důsledku dlouhodobého šíření radioaktivních látek z hlubinného úložiště radioaktivních odpadů okolním horninovým prostředím. Simulace pomocí reakčně-transportních modelů (FEFLOW) jsou výpočetně náročné a jejich paralelizace pro nasazení na systémy HPC umožní urychlení simulací.

Výpočetní čas získaný v naší 13. veřejné grantové soutěži vědci využijí pro vývoj programu TRM. Zaměří se na testování a měření škálovatelnosti paralelizace programu s využitím volně dostupných knihoven PhreeqcRM pro simulace geochemických procesů.



TRM model



Geologický model (FEFLOW)

**Dr. Gaspar Pinto a Mgr. Jan Štourač (Masarykova univerzita):  
PredictSNP-Onco: Analýza strukturní bioinformatiky  
pro personalizovanou dětskou onkologii**

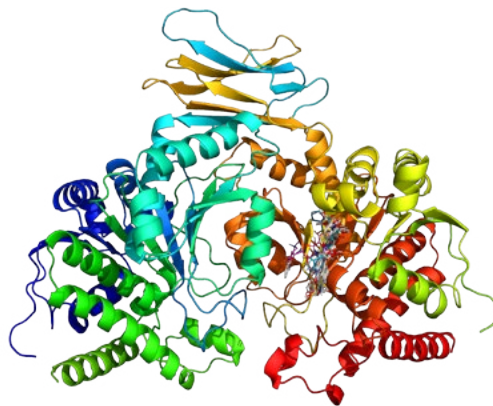
Výzkumné týmy profesora Jiřího Damborského a Davida Bednáře z Masarykovy univerzity, profesora Jaroslava Štěrbý z Dětské nemocnice FN Brno a docenta Ondřeje Slabého z CEITECu vyvíjí nový výpočetní nástroj PredictSNP-Onco pro personalizovanou dětskou onkologii. Nový nástroj by mohl lékařům usnadnit rychlejší stanovení nevhodnější léčby pro každého jednotlivého pacienta, u něhož dosavadní standardní postupy nevedly k úspěchu, anebo kde je pravděpodobnost vyléčení standardními postupy velmi malá.

Vznik nádorové buňky může způsobit jedna jediná mutace. Proto je potřeba mutaci co nejrychleji vyhodnotit a zvážit léčbu všemi dostupnými léky (inhibitory), které prošly schválením Evropskou lékovou agenturou (EMA), Státním úřadem pro kontrolu léčiv (SÚKL), event. americkou vládní agenturou – Úřadem pro kontrolu potravin a léčiv FDA.

Výpočetní čas na Salomonu ve výši téměř 800 tisíc jádrohodin vědci využijí pro vyhodnocení všech možných mutací bílkovin, které vedou k rozvoji rakoviny, a na analýzy inhibitorů výpočetní metodou molekulárního dokování.

Využitím informací ze čtyř světových databází mutací společně s vypočítanými výsledky pomohou s návrhem nových

možností personalizované/precizní léčby pro různé typy nádorových onemocnění. Lékaři tak získají za kratší dobu více informací a budou moci rychleji nasadit správnou léčbu konkrétnímu pacientovi ve správný čas.



Molekula inhibitoru navázaná v aktivním místě enzymu isocitrát dehydrogenázy 1 (idh1)

**Dr. Lukasz Cwiklik, Ph.D., DSc.  
(Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR):  
Interakce molekuly léčiva a slzného filmu lidského oka**

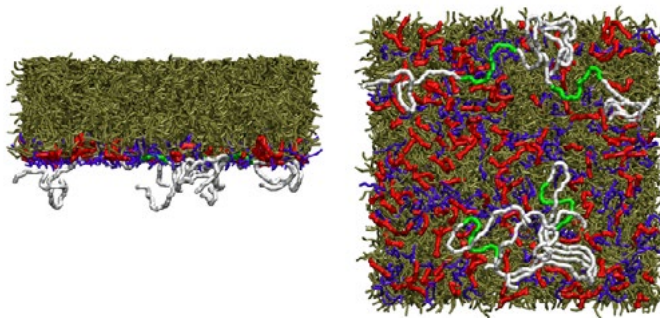
Slzný film chrání rohovku našeho oka před vysycháním. Vyživuje rohovkový povrch a je první linií obrany proti infekci očního povrchu. Vytváří se rozetřením slzy po povrchu oka mrknutím víčka. Jeho tloušťka se během mrkání mění. Skládá se de facto z vrstvy tukové (lipidové) a vodné. Poruchy v lipidové vrstvě vedou k syndromu suchého oka, který se léčí očními kápkami.

Vědci z Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR zkoumají jako jediní na světě účinnost očních kapek na molekulární úrovni. Hledají cesty, jak skrze lipidovou vrstvu dostat požadované látky. Věnují se simulacím lipidové vrstvy na molekulární úrovni a na výzkumu slzného filmu spolupracují i s farmaceutickými společnostmi.

Mikroskopický výzkum lipidové vrstvy nyní Lukasz Cwiklik doplní o výpočetní simulace na superpočítači Salomon. Jeho projekt získal více než 1,5 milionu jádrohodin v naší 13. veřejné grantové soutěži. Přidělený výpočetní čas využije pro studium vybraných lipofilních léků a slzného filmu, konkrétně jak léky pronikají přes lipidovou vrstvu do vrstvy vodnaté.

Experimentální (využití biomimetického čipu, na jehož konstrukci získali prestižní grant Neuron Impuls) a výpočetní výsledky výzkumu přinesou lepší poznatky o interakcích léčiv se slzným filmem a možná i návrh nové generace očních kapek.

Webové stránky výzkumu Dr. Cwiklika:  
<http://cwiklik.net>



Předběžné simulace interakcí lidského slzného filmu (modře a zeleně) s léky (bíle benzalkoniumchlorid, červeně poloxamer-188).

Obrázek vlevo: pohled z boku, obrázek vpravo: pohled zespod.

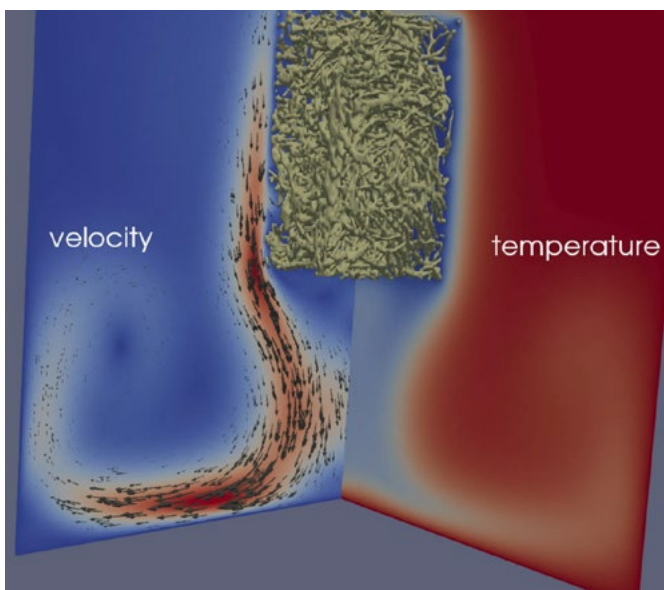
**Ing. Jan Boháček, Ph.D. (Vysoké učení technické v Brně):  
Centrum výzkumu nízkouhlíkových energetických technologií**

Projekt Ing. Jana Boháčka, Ph.D. z Vysokého učení technického v Brně, který se podílí na řešení pětiletého projektu Centrum výzkumu nízkouhlíkových energetických technologií (CVNET, CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000753) podpořeného Operačním programem Výzkum, Vývoj a Vzdělávání, získal téměř 1 milion jádroidin.

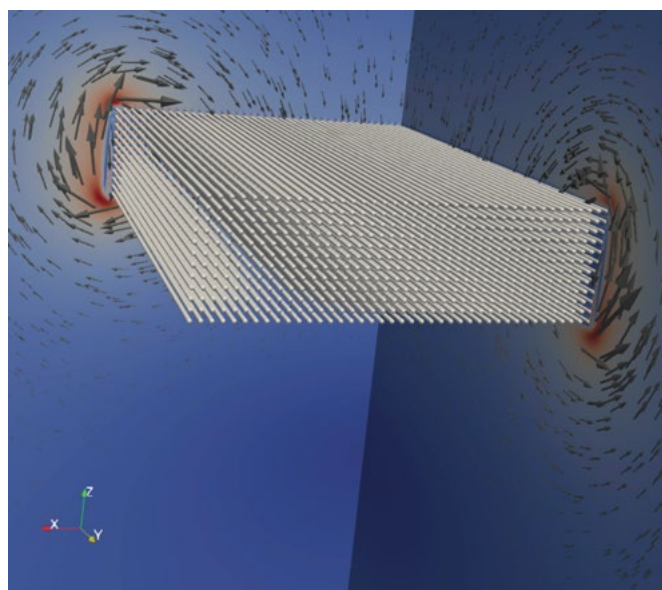
Laboratoř přenosu tepla a proudění na VUT v Brně se již 10 let zabývá vývojem moderních tepelných výměníků s dutými polymerními mikrovlákný. Výhodou použití plastových dutých vláken ve výměnících je flexibilita vláken, nízká cena a che-

mická odolnost. Tzv. plastové výměníky jsou ideální například pro vytápění, klimatizaci a pro aplikace s využitím odpadního nízko potenciálního tepla.

Přidělený výpočetní čas využijí vědci z VUT v Brně na vývoj polymerních výměníků tepla, konkrétně na detailní simulace přenosu tepla. Budou analyzovat různé faktory, které ovlivňují přenos tepla v polymerních dutých mikrovláknách (průměry, délky a rozteče vláken).



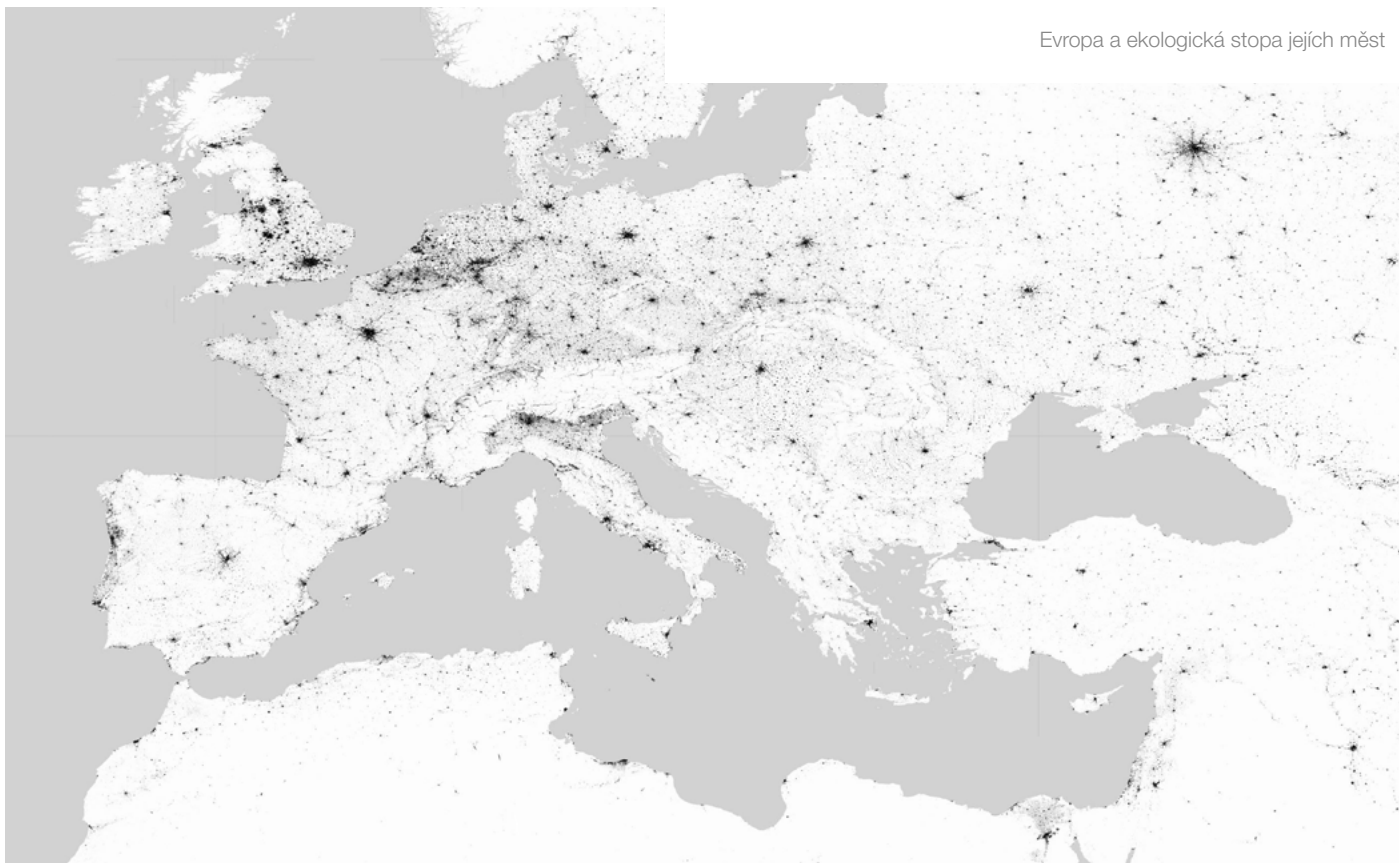
Proudění kolem porézního svazku polymerních vláken



Přirozená konvekce kolem polymerních výměníků tepla s dutými vlákný



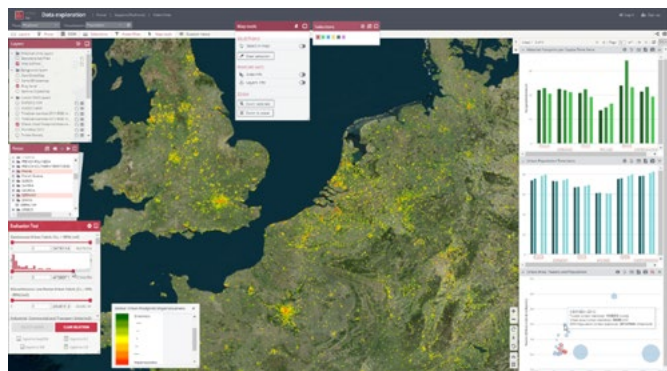
# ZPRACOVÁNÍ A UKLÁDÁNÍ DAT PRO EVROPSKOU KOSMICKOU AGENTURU



Evropa a ekologická stopa jejích měst

V rámci projektu Evropské kosmické agentury s názvem Urban Thematic Exploitation Platform spolupracujeme s Německým střediskem pro letectví a kosmonautiku (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, DLR), firmou GISAT a dalšími.

Rostoucí schopnost získávat velké množství dat z vesmíru díky nejnovějším misím zaměřeným na dálkový průzkum Země vedly Evropskou kosmickou agenturu (European Space Agency – ESA) v roce 2014 ke spuštění iniciativy nazvané Thematic Exploitation Platform (TEP). V první fázi programu TEP bylo hlavním cílem vyvinout a implementovat řadu tematicky orientovaných platform, virtuálních prostředí usnadňující vyhledávání dat získaných pozorováním Země. Tyto platformy poskytují uživatelům přístup nejen k archivům dat z pozorování Země, ale i k informačním a komunikačním tech-



Platforma Urban TEP a sada nástrojů pro vizualizaci a analýzu dat

nologiím potřebným k jejich efektivnímu zpracování, analýze a vizualizaci. V současné době program TEP zahrnuje sedm platform – Coastal (Pobřeží), Forestry (Zalesnění), Geohazards (Geologická rizika), Hydrology (Hydrologie), Polar (Pólní oblasti), Food Security (Udržitelnost pěstování potravin), a Urban (Zalidnění). IT4Innovations se aktivně podílí na poslední zmíněné, tedy Urban Thematic Exploitation Platform (Urban TEP).

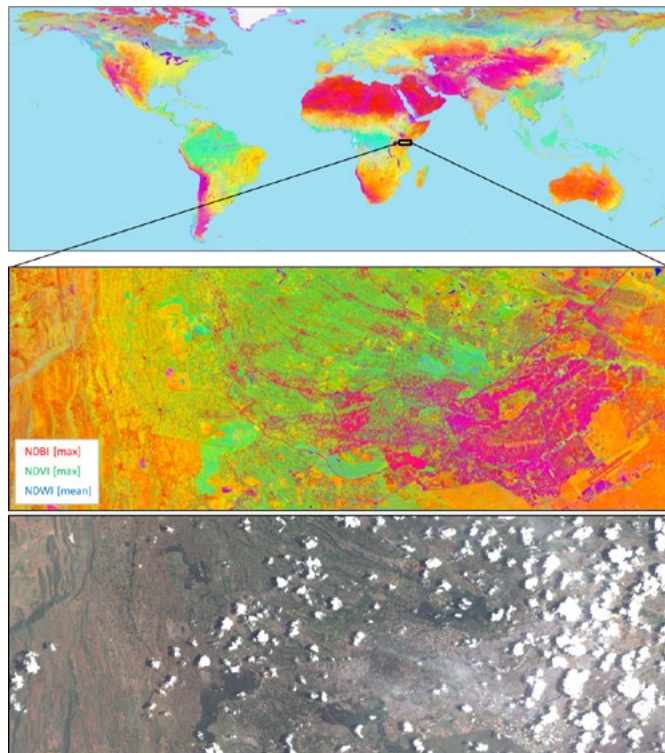
Nosná myšlenka programu TEP se opírá o princip, jehož cílem je umožnit uživatelům přístup k datům a analytickým nástrojům. Hlavním cílem projektu je poskytování otevřeného a vzájemně spolupracujícího pracovního prostředí, v němž může kdokoli (odborník i laik) nalézt koncová a okamžitě použitelná řešení (data i nástroje) k vyhledání specifických informací a ukazatelů požadovaných z hlediska udržitelného rozvoje měst. K tematickým aplikacím patří například generování bezoblačných snímků povrchu Země, které umožňují nezastřený pohled na zastavěné oblasti, sledování vývoje globální urbanizace, dynamiky využití zemského povrchu v jednotlivých oblastech a nasazení funkcí pro zpracování dat zaměřených na vytváření ortosnímků a digitálních modelů terénu z dat pořízených drony.

Platformu Urban TEP provozuje mezinárodní konsorcium pěti partnerů, kterými jsou Německé středisko pro letectví a kosmonautiku jakožto koordinátor projektu, společnost Brockmann Consult (BC) GmbH (Německo), Terradue Srl (Itálie), IT4Innovations národní superpočítačové centrum a firma Gisat, s.r.o. (Česká republika). DLR a BC jsou oborovými experty na tematické analýzy a ve spolupráci s IT4Innovations také poskytovateli infrastruktur pro ukládání dat a služeb souvisejících s jejich zpracováním. Úkolem Terradue je vývoj webového portálu a jeho vizualizačních služeb. Gisat vyvíjí pro zpracování dat sadu nástrojů, která slouží pro společnou analýzu a vizualizaci všech datových vrstev dostupných v rámci platformy.

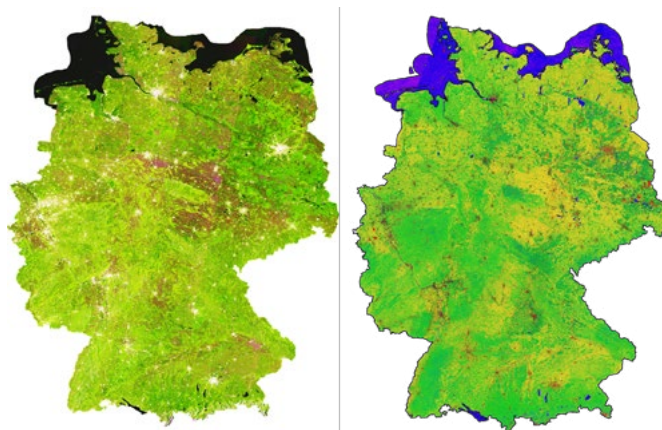
Do konce přípravné fáze před spuštěním platformy Urban TEP v červnu 2018 projevilo zájem o produkty, služby a přístup do systému přes 300 institucí z více než 40 zemí, přičemž 40 % uživatelů bylo z vědecké sféry, 30 % uživatelů z veřejných institucí, 20 % uživatelů z neziskových/nevládních organizací a 10 % z komerční sféry.

V další fázi projektu Urban TEP budou činnosti zaměřeny na systematické vylepšování a zefektivňování výkonu platformy a funkcí produktů a služeb za účelem splnění požadavků kladených na plně funkční a udržitelnou platformu.

<https://urban-tep.eo.esa.int>



Snímek vytvořený v prostředí GlobalTimeScan-Landsat-2015



Německo a snímky získané družicí Sentinel-1 (vlevo) a Sentinel-2 (vpravo)





## EVROPSKÝ SUMMIT HPC V LUBLANI

Ve dnech 28. 5. – 1. 6. 2018 se konal třetí ročník série konferencí s názvem European HPC Summit week, tentokrát na slovinské Univerzitě v Lublani. Týdenní summit byl plný přednášek, workshopů, diskuzí a trendů z oblasti HPC v Evropě. Jeho účelem bylo najít synergie mezi všemi stranami HPC ekosystému. V průběhu týdne nabídl workshopy řady iniciativ z Evropy, přednášky zaměřené na vývoj různých vědních disciplín, výzkumných projektů finančně podpořených programy Evropské unie a prostor k vystoupení dostali i zástupci soukromých podniků.

Program celé akce zahájila v pondělí Evropská iniciativa pro extrémní data a výpočty (The European Extreme Data and Computing Initiative, EXDCI), jejímž cílem je podpořit rozvoj a implementaci společné strategie pro evropský HPC ekosystém. Posluchači byli například Markem Aschem z francouzské Univerzity v Pikardii informováni o vývoji aktivit iniciativy BDEC (Big Data and Extreme-Scale Computing), kde Evropská unie spolupracuje se Spojenými státy americkými a Japonskem. Náplní iniciativy je vedení workshopů na téma big data a extrémní výpočty, jejichž účelem je systematicky zmapovat, jak hlavní problémy spojené s big data ovlivňují národní (a mezinárodní) snahy o dosažení výpočtů na úrovni exascale.

Následující den probíhala série průmyslových i vědeckých prezentací pod záštitou projektu PRACE – konference PRACEdays18. Předseda výkonné rady PRACE Anwar Osseyran, výkonný ředitel nizozemského výpočetního centra SURFsara, přivítal účastníky konference přehledem o PRACE a statistikách jeho výzev. PRACE má v současnosti 25 členů. Česká republika patří mezi 20 tzv. hlavních členů, jež poskytují podporu uživatelům systémů Tier-0, které provozují Francie, Německo, Itálie, Španělsko a Švýcarsko. Za dobu fungování PRACE již bylo vyhlášeno 17 výzev k podávání projektů. Doposud spadá nejvíce úspěšných projektů do oboru materiálové vědy, chemie a inženýrství. V poslední uzavřené





V úterý večer prezentoval Jan Martinovič projekt ExCAPE i na posterové sekci konference.

výzvě (16.) přerozdělilo PRACE úspěšným žadatelům téměř 1,5 miliardy jádrohodin. Další, a to již 18. výzva bude spuštěna v září 2018.

Účastníky summitu přivítali také zástupci Slovinska a Evropské komise: Maja Makovec Brenčič, slovinská ministryně pro vzdělávání, vědu a sport, Igor Papič, rektor Univerzity v Lublani a Leonardo Flores Anover, zástupce Evropské komise, který působí v DG CONNECT, jež se věnuje zřízení společného podniku EuroHPC. (Pozn. O EuroHPC jsme psali v minulém vydání našeho newsletteru: <https://www.it4i.cz/wp-content/uploads/2018/04/Newsletter-Q1-2018-CZ-preview.pdf>.)

Na summitu vystoupil i Thomas Skordas, ředitel pro Digitální excelenci a vědeckou infrastrukturu Evropské komise, s přednáškou na téma Strategie evropského HPC a společný podnik EuroHPC. Skordas připomněl, že Evropská unie navzdory dosavadnímu úsilí nedisponuje nejvýkonnějšími superpočítači na světě. Navíc jsou současné vysoce výkonné výpočetní systémy závislé na mimoevropských dodavatelích komponent. Implementačním nástrojem iniciativy EuroHPC se stane společný podnik. Ten umožní spojit národní a evropské financování společně s investicemi evropských průmyslových

investorů. Účelem iniciativy je zprovoznit exaflopový superpočítač do konce roku 2023 a tím zajistit vlastní nezávislé, konkurenceschopné dodávky HPC technologií a dosáhnout excelence superpočítačových aplikací.

Prostor k prezentacím dostali i odborníci z akademické půdy a průmyslu, kteří představili pokrokové výsledky z různých aplikačních oblastí, pro jejichž vývoj je využití superpočítačů klíčové. Jmenujme například výpočetní dynamiku tekutin a inženýrství, materiálové vědy a chemii.

Na průmyslové sekci konference byly prezentovány i dva úspěšné příklady programu SHAPE (SME HPC Adoption Programme in Europe), který má za cíl podpořit malé a střední podniky ve využívání vysoce výkonných výpočetních systémů. Příležitost vystoupit na této části konference dostal vedoucí naší výzkumné Laboratoře vývoje paralelních algoritmů Tomáš Karásek, který prezentoval naši spolupráci s firmou ING corporation na poloautomatizaci postupu modelování dětských kraniálních remodelačních ortéz.

<http://www.prace-ri.eu/hpc-access/shape-programme/>

V úterý proběhly prezentace dosavadních výsledků tříletých, ještě běžících, projektů ANTAREX, READEX a ExCAPE, podpořených programem Evropské unie Horizont H2020. Na řešení jmenovaných projektů se podílíme. Vedoucí naší výzkumné Laboratoře pro náročné datové analýzy a simulace Jan Martinovič prezentoval projekt ExCAPE, v rámci kterého pomáháme vyvíjet moderní škálovatelné algoritmy, jež budou použitelné pro výpočty na superpočítačích úrovně exascale. Algoritmy jsou vyvíjeny pro řešení komplexních úloh z oblasti farmakologie s ohledem na nutnost zpracování velkého množství dat potřebného pro průmyslový vývoj léčiv. V rámci řešení projektu ExCAPE je našimi kolegy vyvíjen software HyperLoom pro jednoduché zpracování dat na vysoce výkonných výpočetních systémech.

Webová stránka projektu ExCAPE:

<http://excape-h2020.eu/>

Propagační video vysvětlující náplň projektu:

<https://vimeo.com/256141454>

Open source software HyperLoom:

<https://code.it4i.cz/ADAS/loom>

Ve středu proběhl workshop Evropské technologické platformy pro oblast HPC (ETP4HPC), jejímž členem jsme se stali před dvěma roky, byl zaměřen na téma energetická efektivita a vysoce výkonné výpočetní systémy. ETP4HPC, mimo jiné, reaguje na stále aktuálnější problém spotřeby elektrické energie u superpočítačů na úrovni exascale. Členové platformy ETP4HPC, a tedy i naši kolegové, soustavně pracují na vývoji nových technik a scénářů, které mění softwarové a hardwarové parametry pro účely efektivního využívání energie. (Pozn. Například projekt READEX [www.readex.eu](http://www.readex.eu))



Tentýž den se konal i workshop soukromé nadnárodní společnosti s názvem Paměťově orientované architektury (Memory-centric architectures, MCA) pro éru exascale. Myšlenkou MCA systémů jsou vlastní paměťové systémy, které se budou spouštět nezávisle na centrálních procesorových jednotkách (CPU).

Čtvrtěční program summitu odstartoval Tomi Ilijaš ze slovenského soukromého Superpočítačového centra Arctur, koordinátor projektu SESAME Net, na jehož řešení jsme se také podíleli. Proběhlo vyhlášení vítěze a předání ceny PRACE Ada Lovelace, kterou získala Xiaoxiang Zhu, profesorka z Německého střediska pro letectví a kosmonautiku a z Technické univerzity v Mnichově. Zabývá se například výzkumem využívání satelitních snímků zpracovaných HPC systémy pro předpovídání rizik zapříčiněných degradací konstrukcí a poškozením budov ve městech.

V Lublani proběhl i 3. regionální workshop projektu InnoHPC, financovaného Programem nadnárodní spolupráce Interreg DANUBE, který měl za cíl přiblížit slovenským firmám možnosti využívání HPC pro jejich inovativní růst. Workshop se konal v sídle Slovenské obchodní a průmyslové komory. Samotnému

workshopu předcházelo několikahodinové setkání partnerů projektu, kde se konzultoval jeho dosavadní vývoj. Na regionálním workshopu se pak zúčastněným slovenským firmám představily konkrétní příklady spolupráce podniků s HPC centry. Tomáš Karásek prezentoval naši spolupráci s firmami na vývoji sedadel do vlaků a hydraulických výtahů pro zdvihání nejen automobilů. Naší hlavní úlohou v projektu InnoHPC je testování a podpora webové platformy, která umožní malým a středním podnikům z východní části Podunají vzdálený přístup k HPC infrastrukturám.

Webová stránka projektu:

<http://www.interreg-danube.eu/approved-projects/innohpc>

Týdenní evropský sněm byl skvělou příležitostí k networkingu s ostatními zástupci evropských superpočítačových center a také jedinečným prostředkem pro výměnu informací nejen v akademické sféře, ale také s uživateli vysoce výkonných výpočetních systémů z průmyslového sektoru.

Těšíme se na další ročník konference.



# O NAŠÍ SPOLUPRÁCI S BLENDER INSTITUTE NA VÝVOJI OPEN-SOURCE SOFTWAREU BLENDER



Od ledna 2017 superpočítačové centrum IT4Innovations spolupracuje s Blender Institute na vývoji open-source softwaru Blender. Jedná se o komplexní 3D vizualizační software pokrývající širokou škálu tvorby počítačových vizualizací od modelu přes animaci až po finální rendering.



Vzhledem k tomu, že je Blender postaven na open-source bázi, je k dispozici jeho kompletní zdrojový kód. Současně s tímto je Blender už od svého základu směřován tak, aby jej bylo možné rozšiřovat prostřednictvím uživatelských plug-inů. Ty lze tvořit v populárním jazyce Python anebo, v případě výpočetně náročnějších modulů, jako kombinaci C++ a Python.

V IT4Innovations jsme Blender začali používat pro jeho široké možnosti během spolupráce s lékaři z Fakultní nemocnice Ostrava (FNO). Cílem bylo vyvinout nástroj, který by umožňoval zobrazení a zpracování lékařských dat v podobě snímků počítačové tomografie (CT) a magnetické rezonance (MRI). Tento nástroj ve formě rozšiřujícího plug-inu stále vyvíjíme a v současném stavu umožňuje uživateli ze vstupních obrazových dat zrekonstruovat plnohodnotné 3D modely vybraných tkání lidského těla. Zrekonstruované modely lze následně použít pro další analýzy, jako například měření objemů orgánů, výpočty v oblasti strukturálního chování (zatěžování kostí) a dynamiky tekutin (proudění krve).

Při vývoji nástroje pro zpracování medicínských dat jsou používány pokročilé algoritmy zpracování obrazu, které jsou výpočetně náročné. Pro rychlejší získání výsledků je proto využíváno postupů z oblasti paralelního programování a nasazení na výpočetní klastry IT4Innovations (Salomon, Anselm).

Jinou, taktéž velmi výpočetně náročnou oblastí, kde byl Blender využit jako základní kámen, je oblast počítačového renderingu obrazu. Rendering je využíván pro generování realisticky vypadajících obrazových dat z počítačem vytvářených 3D scén. Blender pro tyto účely nabízí pokročilý renderer Cycles, který respektuje fyzikální chování světla. Výpočetní zátěž reprezentovaná, byť jen krátkou, ale realisticky vypadající animací je obrovská. Využití superpočítačů se tak přirozeně nabízelo. Pro tyto účely však Cycles nebyl přizpůsoben. Tento fakt se stal počátečním impulzem pro spolupráci s Blender Institute.

Pro renderování na clusteru byl Cycles rozšířen do podoby CyclesPhi, který umožňuje 100% využití infrastruktury IT4Innovations včetně akcelérátorů Intel Xeon Phi, kterými je vybavena přibližně polovina výpočetních uzlů superpočítače Salomon. Cycles Phi byl využit při spolupráci s Blender Institute během realizace jejich propagačního snímku Agent 327: Operation Barbershop. Salomon se tak stal hlavní výpočetní infrastrukturou pro finální rendering tohoto krátkého filmu.

Snímek Agent 327 byl v roce 2018 oceněn prestižní celosvětovou cenou Webby Awards v kategorii Online Film & Video / Animation / People's Voice (<https://www.webbyawards.com/winners/2018/film-video/general/animation/agent-327-operation-barbershop/>). V této souvislosti lze také zmínit úspěch našeho kolegy Milana Jaroše, který



Milan Jaroš a jeho přednáška na téma Acceleration of Blender Cycles Render Engine using Intel Xeon Phi na kurzu Intel MIC Programming, únor 2017



Milan Jaroš, hlavní vývojář CyclesPhi, s oceněním CGDIP 2017

jako hlavní vývojář CyclesPhi získal ocenění na Mezinárodní konferenci o počítačové grafice a digitálním zpracování obrazu (International Conference on Computer Graphics and Digital Image Processing, CGDIP 2017) za excelentní prezentaci svého výzkumu na téma Renderování v Blenderu za využití MPI a Intel Xeon Phi.



## AKTUALIZOVANÝ ŽEBŘÍČEK TOP500

Již popáté jsme prezentovali naši výzkumnou infrastrukturu návštěvníkům největší evropské akce zaměřené na HPC International Supercomputing Conference, u jejíž příležitosti byl aktualizován žebříček nejvýkonnějších superpočítačů na světě.

V červnu jsme se zúčastnili celosvětově nejstarší konference zaměřené na HPC „International Supercomputing Conference“ (ISC). Její historie se datuje od roku 1986. Poslední ročníky konference navštívilo více než tři tisíce odborníků a studentů z různých koutů světa. Letošní konference ISC pro nás byla již pátou příležitostí k prezentaci infrastruktury IT4Innovations a výzkumu, který se na ní realizuje.

U příležitosti konání konference byl aktualizován žebříček TOP500 nejvýkonnějších výpočetních systémů na světě. Vyhlášení přineslo zajímavá překvapení. Novým celosvětově nejvýkonnějším superpočítačem je Summit, který byl uveden do provozu v americké Oak Ridge National Laboratory (ve státě Tennessee) na začátku června 2018. Spojené státy americké jsou tak znovu od listopadu 2012 na prvním místě žebříčku. Summit má teoretický výpočetní výkon 187 Pflop/s, což je téměř stonásobek výkonu českého superpočítače Salomon. Z první příčky TOP500 sesadil čínský systém Sunway, jehož teoretický výpočetní výkon je 125 Pflop/s. Summit financovalo Ministerstvo energetiky Spojených států amerických, v jehož centru zájmu stojí výzkum jaderné fúze, alternativních zdrojů energie, materiálových věd, klimatu, výpočetní chemie a kosmologie. Nejvýkonnější superpočítač na světě bude samozřejmě využíván také například pro výzkum v oblasti zdravotní péče (léků, rakoviny apod.).

Summit je 7x výkonnější a má přibližně 5x lepší energetickou účinnost než Titan, jeho předchůdce, kterému nyní patří 7. příčka žebříčku. Titan, na kterém si započítali i naši kolegové, byl zprovozněn v roce 2012 a jeho teoretický výkon činí 27 Pflop/s. Pravděpodobně bude vyřazen z provozu.

Aktualizovaný žebříček přinesl vskutku zajímavé změny. V žebříčku je celkem 133 zcela nových superpočítačů. Čtyři z pěti nejvýkonnějších výpočetních systémů jsou nové či upgradované. Evropě patří v žebříčku TOP500 celkem 101 výpočetních systémů, z toho 29 je zcela nových. Z evropských států provozuje nejvíce systémů Velká Británie (22 systémů, souhrnný teoretický výpočetní výkon 54 Pflop/s). V jejím závěsu je Německo s 21 systémy a Francie s 18 systémy (souhrnný teoretický výkon systémů v Německu i Francii je 64 Pflop/s). Kromě Německa má i náš sousední stát Polsko v žebříčku TOP500 své výpočetní systémy. Teoretický výkon čtyř polských systémů činí dohromady 6 Pflop/s.

Český superpočítač Salomon, který je již tři roky v provozu a aktuálně jediným zástupcem z ČR v tomto srovnání, je na 139. místě.