



Vážení příznivci supercomputingu,

do rukou se vám dostává náš poslední newsletter za rok 2017. Děkujeme vám za přízeň a za to, že využíváte služby našeho superpočítačového centra. Stejně jako v předešlých letech i v roce 2017 jsme napnuli své síly k tomu, aby vědecká komunita v České republice měla přístup k vysoce výkonným výpočetním prostředkům a k službám s nimi souvisejícím. V roce 2017 se nám podařilo získat zásadní projekt IT4Innovations – Cesta k exascale, díky kterému budeme schopni naši infrastrukturu dále rozvíjet a obnovovat. Na konci roku 2018 se tak dočkáte prvního nástupce klastru Anselm a v roce 2020 pak přijde i následník superpočítače Salomon. Doufám, že se nové systémy budou těšit přinejmenším stejnému zájmu, jako ty stávající.

Přeji vám mnoho úspěchů v roce 2018.

Vít Vondrák  
ředitel IT4Innovations



## Vyhodnocení 11. Veřejné grantové soutěže

Celkem 54 999 384 jádrohodin výpočetní kapacity bylo rozděleno mezi 51 úspěšných projektů. Nejvíce úspěšných projektů spadá do oblasti materiálových věd, kterým bylo přiděleno 74 % výpočetní kapacity. Alokované zdroje jsou k dispozici uživatelům od září 2017 do června 2018.

[Číst dál](#)



## 6. Výroční konference IT4Innovations, 1. Konference uživatelů IT4Innovations a rozhovor s Dr. Paolem Nicolini, předsedou Výkonného výboru Rady uživatelů IT4Innovations

Na přelomu října a listopadu jsme pořádali dvě konference, na kterých byla založena i Rada uživatelů IT4Innovations. Předseda Výkonného výboru Rady uživatelů Dr. Paolo Nicolini nám poskytl rozhovor.

[Číst dál](#)



## Účast na letošní konferenci SC17 v americkém Denveru

V listopadu 2017 jsme se zúčastnili nejvýznamnější konference z oboru superpočítačových technologií.

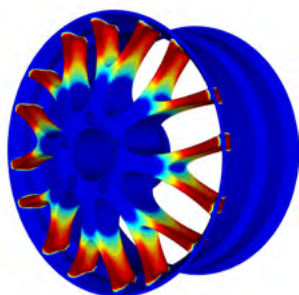
[Číst dál](#)



## Studenti Výpočetních věd nezahálí a objevují svět díky prestižním letním školám

Naši studenti se v letošním roce zúčastnili tří mezinárodních letních školení zaměřených na supercomputing.

[Číst dál](#)



## ESPRESO FEM – modul přenosu tepla

Vývojový tým masivně paralelní knihovny ESPRESO nedávno dokončil modul pro řešení problémů přenosu tepla.

[Číst dál](#)



## Spolupráce s Bayncore

V listopadu jsme zahájili spolupráci se společností Bayncore z Velké Británie.

[Číst dál](#)

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

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

Na začátku února 2018 bude vyhlášeno 13. kolo veřejné grantové soutěže, kdy si budete moci zažádat o výpočetní čas na našich superpočítačích. Sledujte aktuality na našich webových stránkách.

[Více informací](#)

## POZVÁNKY

### InfiniBand, Omni-Path, and High-Speed Ethernet for Dummies

Jedná se o základní z dvojice půldenních tutoriálů o síťových komunikačních technologiích pro vysokovýkonné výpočetní systémy současných i příštích generací. Kurz poskytne přehled zejména o technologiích InfiniBand, Omni-Path a High-speed Ethernet, seznámí s jejich specifickými rysy a porovná je z hlediska vhodnosti pro budování klastrů, cloudových platforem či prostředí pro Big Data. Hlavní lektor Prof. Dhableswar K. Panda z Ohio State University patří mezi nejvýznamnější odborníky v této oblasti a jeho tým vyvíjí propojovací subsystémy implementované na nejvýkonnějších superpočítačích.

Kdy: **23. 1. 2018** dopoledne | Místo konání: Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava, budova IT4Innovations  
Úroveň: začátečník/středně pokročilá  
Lektoři: Dhableswar K. Panda, Hari Subramoni (The Ohio State University)

[Více informací](#)

### InfiniBand, Omni-Path, and High-Speed Ethernet: Advanced Features, Challenges in Designing, HEC Systems and Usage

Tento navazující půldenní tutoriál bude zaměřen na pokročilé hardwarové a softwarové funkce technologií InfiniBand, Omni-Path a High-speed Ethernet a rovněž RDMA over Converged Enhanced Ethernet. Součástí kurzu bude také programování Open Fabrics RDMA a Libfabrics či infrastruktura pro správu a nástroje pro efektivní využívání těchto síťových komunikačních systémů. Výklad bude ilustrován případovými studii a výkonnostními údaji.

Kdy: **23. 1. 2018** odpoledne | Místo konání: Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava, budova IT4Innovations  
Úroveň: středně pokročilá/pokročilá  
Lektoři: Dhableswar K. Panda, Hari Subramoni (The Ohio State University)

[Více informací](#)

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

## High Performance Distributed Deep Learning

---

Třetí tutoriál v podání Prof. Dhabaleswara K. Pandya a jeho spolupracovníka Dr. Hariho Subramoniho z Ohio State University bude věnován (distribuovanému) hlubokému učení (Deep Learning, DL) a jeho závislosti na moderních hardwarových architekturách. Přinese přehled systémů pro DL, jejich výkonnosti i zajímavých trendů a výzev. Bude se věnovat také běhovým prostředím MPI z pohledu podpory pro paralelní učení hlubokých neuronových sítí (Deep Neural Networks, DNN) a speciálně prostředí MVAPICH2, pro které tým prof. Pandya navrhl komunikační primitivy umožňující škálovatelné učení DNN.

Kdy: **24. 1. 2018** | Místo konání: Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava, budova IT4Innovations

Úroveň: všechny úrovně

Lektoři: Dhabaleswar K. Panda, Hari Subramoni (The Ohio State University)

[Více informací](#)

### KRÁTCE

---

- 01** [Výsledky 11. Veřejné grantové soutěže](#)
- 02** [Fotogalerie z 6. Výroční konference a 1. Konference uživatelů IT4Innovations](#)
- 03** [Zúčastnili jste se Noci vědců dne 6. 10. 2017? Podívejte se na fotogalerii z této akce.](#)
- 04** [Aktuální volné pracovní pozice](#)
- 05** [Nabídka kurzů v IT4Innovations](#)
- 06** [Softwarové balíky našich kolegů - PermonSVM a PermonQP byly zveřejněny na webových stránkách PETSc](#)





## VÝSLEDKY 11. VEŘEJNÉ GRANTOVÉ SOUTĚŽE

Uchazeči z českých akademických a výzkumných institucí si zažádali v průběhu června a července 2017 celkem o 67 845 284 jádrohodin. Alokační komise rozdělila mezi 51 úspěšných projektů 54 999 384 jádrohodin. Největší část výpočetních prostředků byla přidělena projektům z oblasti materiálových věd (74 %) a biověd (14 %). Alokované zdroje jsou k dispozici uživatelům od září 2017 do června 2018.

V 11. Veřejné grantové soutěži získalo výpočetní čas celkem 23 fakult a ústavů akademických a výzkumných institucí. Největší část výpočetních prostředků (33 %) byla přidělena 16 projektům **Vysoké školy báňské – Technické univerzity Ostrava**, přičemž 13 projektů je z vysokoškolského ústavu IT4Innovations. Projekty Fakulty metalurgie a materiálového inženýrství, Fakulty stavební a Fakulty strojní VŠB-TUO společně s IT4Innovations pokrývají výzkumné oblasti jako jsou materiálové vědy, biovědy, informatika, fyzika, inženýrství, vědy o Zemi a aplikovaná matematika.

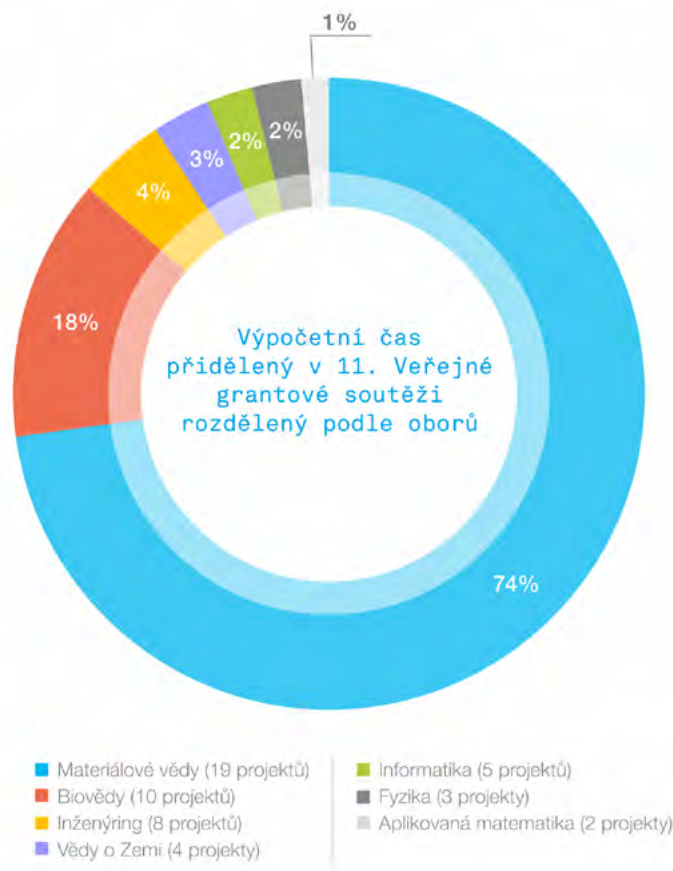
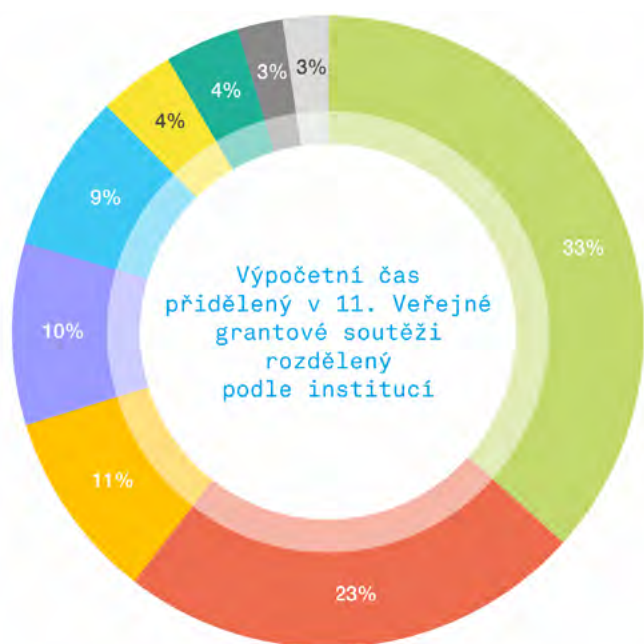
Druhá největší část výpočetních prostředků (23 %) byla přidělena 11 projektům **Akademie věd České republiky (AV ČR)**. Pracoviště AV ČR, která u nás v rámci 11. Veřejné grantové soutěže počítají, jsou Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského, Ústav organické chemie a biochemie, Ústav informatiky, Ústav fyziky atmosféry, Ústav fyziky plazmatu a Institut biofyziky. Nejvíce projektů přitom patří prvním dvěma zmíněným pracovištím. Šest projektů AV ČR je z oboru materiálových věd.

K dalším akademickým a výzkumným institucím, jejichž projekty se u nás v rámci 11. Veřejné grantové soutěže počítají, patří Fakulta elektrotechnická **Českého vysokého učení technického v Praze**, Ústav fyziky kondenzovaných látek **Masarykovy univerzity a Středoevropský technologický institut – Masarykova univerzita** (CEITEC MU), Matematicko-fyzikální fakulta **Univerzity Karlovy**, Fakulta informačních technologií **Vysokého učení technického v Brně** a dále například ústavy Fakulty chemicko-inženýrské **Vysoké školy chemicko-technologické v Praze**.

Stejně jako v předchozích veřejných grantových soutěžích byla největší část alokovaných výpočetních prostředků přidělena 19 projektům z oblasti materiálových věd. V této výzkumné oblasti byly nejvyšší alokace přiděleny projektům žadatelů z IT4Innovations (38 %) například na výzkum v oblasti nových permanentních magnetů (projekt Dr. Dominika Leguta) a na studium studeného plazmatu vzácných plynů, které nachází využití v mnoha oblastech medicíny (projekt Ing. Martina Besedy).

Pro výzkum v oblasti **materiálových věd** získalo výpočetní čas ve výši 9 045 000 jádrohodin celkem šest projektů Akademie věd České republiky. V Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR studují například vlastnosti katalyzátorů na bázi zeolitu pomocí metod založených na teorii funkcionálu hustoty (projekt Dr. Štěpána Sklenáka). Jeden z projektů Českého vysokého učení technického v Praze se zabývá výzkumem vícevrstvých kovových nanokompozitů, jakožto nových samoregenerujících se materiálů pro jaderné reaktory (projekt Dr. Huseyina Senera Sena).

V posledních dvou letech, a není tomu jinak ani v 11. Veřejné grantové soutěži, připadla druhá nejvyšší celková alokace projektům z oboru **biovědy** (14 %). Největší podíl výpočetního času byl alokovan projektů prof. Pavla Jungwirtha z Ústavu organické chemie a biochemie Akademie věd České republiky (2 550 000 jádrohodin), a to na výzkum vlivu tvaru membrány na napětově řízený draslíkový kanál. Výzkum by ve spojení s výsledky experimentálních studií mohl poskytnout lepší porozumění procesu synaptického přenosu (přenosu signálů mezi nervovými buňkami).



## Představujeme vybrané projekty, které získaly v 11. Veřejné grantové soutěži výpočetní čas:

### Ing. Vojtěch Cima (IT4Innovations): Vývoj nových léčiv pomocí Deep Learning

Projekt Ing. Vojtěcha Cimy „Deep learning pro návrh nových léků“ získal 400 000 jádrohodin. Alokované jádrohodiny budou využity na hluboké učení pro předvídání působení potenciálních léčiv a jejich možných vedlejších toxických účinků. Pomocí predikčních algoritmů může být vývoj léků

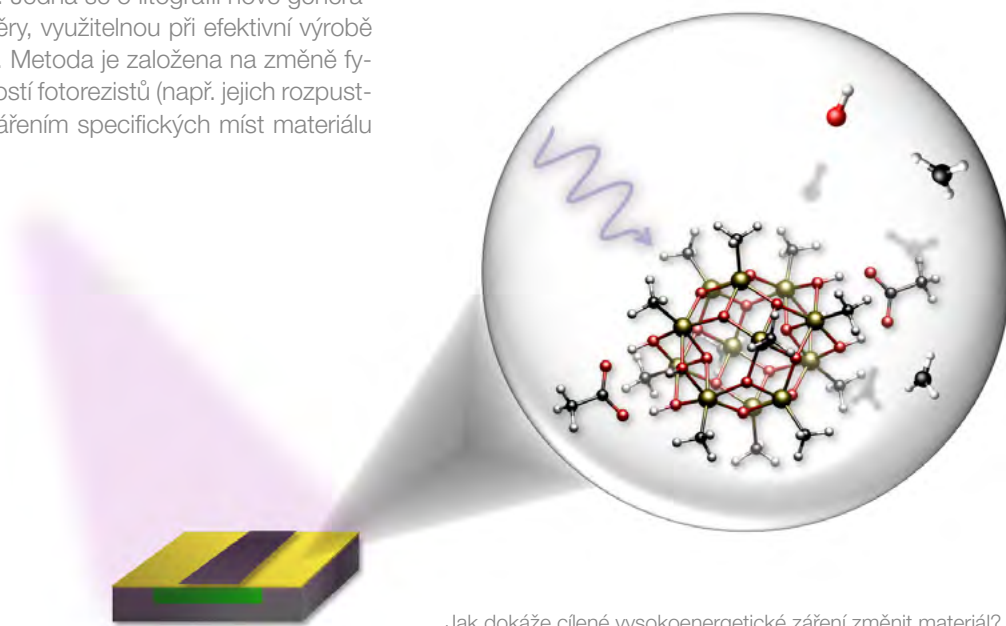
urychlen a zároveň může dojít k snížení nákladů celého procesu návrhu léků. Tento výzkum probíhá v rámci projektu ExCAPE, jehož cílem je vyvinout algoritmy pro řešení komplexních úloh z oblasti farmakologie.

### prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D. (Vysoká škola chemicko-technologická v Praze): Molekulární simulace materiálů na bázi cínu pro extrémní ultrafialovou litografii

Jak dokáže cílené vysokoenergetické záření změnit materiál? K jakým konkrétním změnám na molekulární úrovni dojde? Chemické změny materiálů pod vlivem fotonů o vysoké energii zkoumá tým pod vedením prof. Petra Slavíčka v Laboratoři teoretické fotodynamiky na Vysoké škole chemicko-technologické v Praze. Jejich projekt „Molekulární simulace materiálů na bázi cínu pro extrémní ultrafialovou litografii (EUV)“ získal 1 082 000 jádrohodin.

Cílem projektu je popsat molekulární změny při ionizaci organocínatých sloučenin (tzv. Sn-O klecí) extrémním ultrafialovým zářením. Tyto sloučeniny mohou sloužit jako tzv. fotorezistní materiály pro EUV litografii. Jedná se o litografii nové generace pro nanometrové rozměry, využitelnou při efektivní výrobě nových počítačových čipů. Metoda je založena na změně fyzikálně-chemických vlastností fotorezistů (např. jejich rozpustnosti) po EUV ozáření. Ozáření specifických míst materiálu

může mít výsledná struktura rozlišení do 10 nm, což je hranice dnešních komerčních čipů. Značná výpočetní náročnost molekulových simulací ionizovaných Sn-O sloučenin je dána bohatou elektronovou strukturou cínu. Simulace jediné trajektorie trvající půl pikosekundy vyžaduje téměř týden počítačového času na běžných procesorech. Náš superpočítač Salomon, který má dohromady 76 896 jader (procesory Intel Haswell a akcelerátory Intel Xeon Phi), umožní výzkumníkům provést rozsáhlé simulace, které by jinak nebyly prakticky proveditelné.



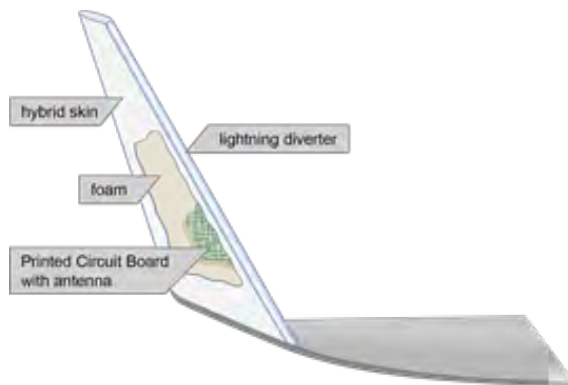
Jak dokáže cílené vysokoenergetické záření změnit materiál?



**Ing. Petr Vrchota, Ph.D. (Výzkumný a zkušební letecký ústav): IntA**

Návrh nových regionálních letadel a dopravních letounů je ovlivněn především ekonomickými a ekologickými faktory. Jednotlivé části letadel jsou optimalizovány například z hlediska aerodynamické účinnosti, spotřeby paliva a emisí. Další možností snížení aerodynamického odporu a úspory paliva jsou optimalizované integrované komunikační antény. Antény obvykle tzv. vyčnívají a přispívají k celkovému odporu letadla.

Projekt „IntA“ Dr. Petra Vrchoty z Výzkumného a zkušebního leteckého ústavu získal 200 000 jádrehodin. Projekt IntA se zaměřuje na návrh křídla letadla s integrovanou anténou, čímž by mělo dojít ke zlepšení letových výkonů a aerodynamické účinnosti celého letounu, snížení spotřeby paliva a ovlivnění dopadů na životní prostředí. Cílem projektu je snížit aerodynamický odpor letadla pomocí integrované antény až o 2 %.



Křídlo letadla s integrovanou anténou

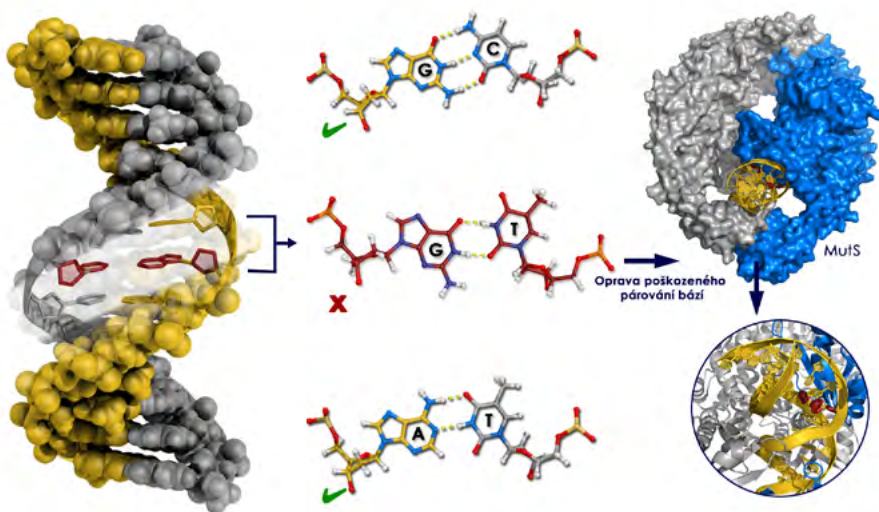
**RNDr. Petr Kulhánek, Ph.D. (CEITEC, Masarykova univerzita):  
Relativní stabilita párů bází v nukleových kyselinách**

Vědci pod vedením Dr. Kamily Réblové a Dr. Petra Kulhánka ze Středoevropského technologického institutu (CEITEC) na Masarykově univerzitě získali 634 000 jádrehodin pro studium relativní stability párování bází v deoxyribonukleových kyselinách (DNA).

Řetězce dvojité dvoušroubovice DNA nesou genetickou informaci, jejíž integrita je zajištěna pomocí komplementárního Watson-Crickova párování. Při replikaci DNA, ke kterému dochází při dělení buněk, je tato komplementarita využita pro vytvoření dvou identických kopií DNA. Při replikaci však může

dojít k chybám projevujícím se nesprávným párováním bází, které je rozpoznáváno celou řadou opravných mechanismů. Jedním z nich je MMR (anglicky: mismatch repair), ve kterém enzym MutS rozpoznává chybné párování a při jeho nalezení spouští kaskádu procesů vedoucí k jeho opravě.

Získaný výpočetní čas na superpočítačích IT4Innovations umožní vědcům uskutečnit molekulární simulace krátkých molekul DNA a zaměřit se na charakterizaci stability párování všech možných kombinací bází obsahujících jak správné Watson-Crickovo párování tak i všechny ostatní kombinace.



Oprava poškozeného párování bází





## 6. VÝROČNÍ KONFERENCE IT4INNOVATIONS A 1. KONFERENCE UŽIVATELŮ, ROZHOVOR S PAOLEM NICOLINIM, PŘEDSEDOU VÝKONNÉHO VÝBORU RADY UŽIVATELŮ

Zástupci partnerů projektu Centra excelence IT4Innovations, realizovaného v letech 2011-2015 v rámci Operačního programu Výzkum a vývoj pro inovace, představili na 6. Výroční konferenci IT4Innovations výsledky a hlavní směry a výsledky bádání svých výzkumných programů. Tentýž den odpoledne začala dvoudenní 1. Konference uživatelů IT4Innovations, kde naši kolegové a externí uživatelé prezentovali výsledky výzkumů, pro které využívají naše superpočítače. Ke zvaným přednášejícím patřili vědci z Akademie věd České republiky (AV ČR), Univerzity Karlovy (UK) a z Českého vysokého učení technického v Praze (ČVUT).

Dr. Michael Komm z Ústavu fyziky plazmatu AV ČR prezentoval novinky z oblasti vývoje tokamaků, fúzních reaktorů, na kterém se podílí. Ústav fyziky plazmatu spolupracuje s mezinárodní organizací ITER, která začala s výstavbou stejnojmenné-

ho termonukleárního experimentálního reaktoru na jihu Francie v roce 2007. Dr. Komm přednesl na konferenci výzkum na téma výpočetně náročných PIC simulací distribucí tepelného toku na komponenty stěn termojaderného reaktoru.



Předání cen vítězům programu PRACE Summer of HPC 2017

Dr. Klára Kalousová z Matematicko-fyzikální fakulty UK se zabývá hledáním odpovědi na otázku, zda by mohl vzniknout život mimo Zemi. Studuje měsíce našeho planetárního systému, na kterých je velké množství kapalné vody. Na konferenci prezentovala výsledky výzkumu přenosu tepla a kapalin v mocné vrstvě ledu na Ganymedu, největším měsíci Sluneční soustavy.

Dr. Antonio Cammarata z Oddělení pokročilých materiálů Fakulty elektrotechnické ČVUT seznámil účastníky konference s výsledky výzkumu materiálů založených na dichalkogenidech přechodných kovů, které by mohly být využívány jako nová suchá maziva.

Naši kolegové Dr. Lubomír Říha, Dr. Michal Merta a Ing. Milan Jaroš informovali přítomné o výsledcích a pokrocích ve vývoji knihovny ESPRESO, knihovny BEM4I a o vývoji softwaru BLENDER.

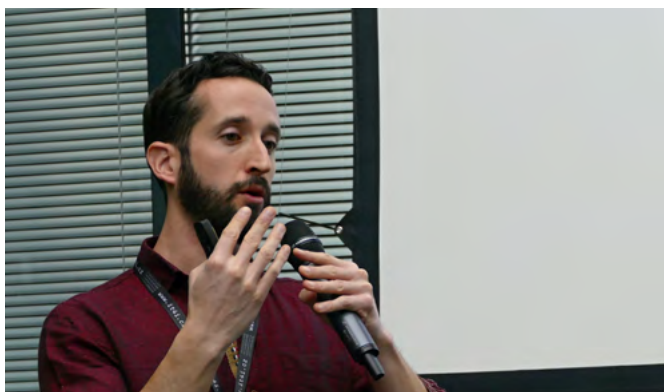
Na konferenci byl prezentován výzkum externích uživatelů infrastruktury IT4Innovations nejen z Akademie věd České republiky, Univerzity Karlovy, Českého vysokého učení technického v Praze, ale také z Vysoké školy chemicko-technologické v Praze, ze Středoevropského technologického institutu Masarykovy univerzity a z Vysokého učení technického v Brně.

Při příležitosti konání konference u nás proběhl slavnostní ceremoniál předávání cen již pátého ročníku programu evropského sdružení výzkumných infrastruktur **PRACE Summer of HPC**. K cílům tohoto programu patří motivovat studenty k využívání vysoce výkonných výpočetních technologií pro výzkum. Letos získal cenu za nejlepší vizualizaci Arnau Miro, který pracoval v italském superpočítačovém centru CINECA na projektu Webová vizualizace Středozemního moře. Cenu HPC Ambassador získal Mahmoud Elbattah. Nejlépe zvládl roli popularizátora HPC a jeho příspěvky měly největší ohlas. Na řecké Aristotelově univerzitě v Soluni pracoval na projektu Automatická extrakce metadat z klimatických simulací.

Na konferenci byl účastníkům předložen návrh na vznik **Rady uživatelů IT4Innovations** (dále jen Rady) jako hlavního komunikačního nástroje mezi externími uživateli infrastruktury IT4Innovations a IT4Innovations národním superpočítačovým centrem. Předsedou Výkonného výboru Rady byl zvolen **Dr. Paolo Nicolini** z Fakulty elektrotechnické ČVUT.

Dr. Nicolini začal pracovat v Oddělení pokročilých materiálů ČVUT vedeném prof. Tomášem Polcarem v červnu 2013. Tenkrát působil pouze jako neexperimentální člen skupiny a také se snažil najít potřebné výpočetní zdroje pro výzkum. Infrastrukturu IT4Innovations využívá právě od roku 2013.





Dr. Antonio Cammarata



Dr. Michael Komm



Dr. Lubomír Říha



Dr. Klára Kalousová

Dr. Paola Nicoliniho jsme se zeptali na pár otázek, které se vznikem Rady uživatelů IT4Innovations souvisí.

### Jaké jsou vaše záměry s nově ustavenou Radou uživatelů IT4Innovations? O co bude Rada usilovat?

Nejprve je třeba splnit několik administrativních povinností týkajících se založení Rady uživatelů IT4Innovations. Je tedy nutné připravit dokument, v němž budou stanoveny cíle, struktura a další vnitřní pravidla. Rada na tomto dokumentu již pracuje. Poté můžeme oficiálně zahájit činnost Rady. Máme již nějaké nápady, které by se snad brzy mohly začít realizovat. Příkladem může být vytvoření platformy, která by usnadnila a upevnila komunikaci jak mezi uživateli a infrastrukturou IT4Innovations, tak mezi uživateli navzájem. Dále si myslím, že se Rada bude také účastnit diskuzí týkajících se budoucího směru vývoje infrastruktury IT4Innovations, při nichž může poskytnout cennou zpětnou vazbu vedení IT4Innovations. Máme v plánu rozjet mnoho dalších projektů, o kterých bych se však tak brzy ještě nerad zmiňoval. Počkejte si a uvidíte.

### Jak moc důležité je podle vás zapojení vaší skupiny i ostatních uživatelů z akademické i aplikační sféry v Radě?

Osobně si myslím, že je tato účast důležitá z mnoha různých důvodů. Jak už jsem dříve poznamenal, ze všeho nejdříve požádáme každého člena Rady o jeho názor na to, kam by se mohla infrastruktura IT4Innovations dále ubírat. Všichni tak budeme mít jedinečnou příležitost otevřeně vyjádřit svůj názor. Toto se týká i dalších možných zlepšení. Pokusíme se nalézt slabá místa na základě zkušeností uživatelů infrastruktury IT4Innovations, a věříme, že tímto přispějeme k jejich zlepšení.

Rada by dle mého názoru také mohla být úžasnou příležitostí k provázání různých vědeckých skupin v rámci České republiky (i s těmi zahraničními). Myslím si, že usnadněním vzájemné výměny zkušeností a informací mezi uživateli vzroste i počet úspěšných spoluprací jednotlivých skupin, které tak mohou těžit z různých odborných znalostí, což bude v konečném důsledku vést k zásadnějším vědeckým výsledkům.

V neposlední řadě považuji IT4Innovations, ve srovnání s jinými evropskými centry, za excelentní HPC centrum, které poskytuje jak nejmodernější výpočetní prostředky, tak kvalifikovaný a rychlý systém podpory. Toto by uživatelé neměli brát za samozřejmost. Dle mého názoru je rozumné usilovat o udržení či dokonce zvýšení stávající kvality podpory.

### Jakou oblastí výzkumu se zabýváte a proč vás tato oblast zajímá?

Jsem chemik a má vědecká práce se pohybuje na pomezí chemie, fyziky a materiálových věd. V mé skupině se mimo jiné zabýváme třením a mazivou, a to jak z fundamentálního, tak aplikačního hlediska. Pokusíme se nejen identifikovat me-

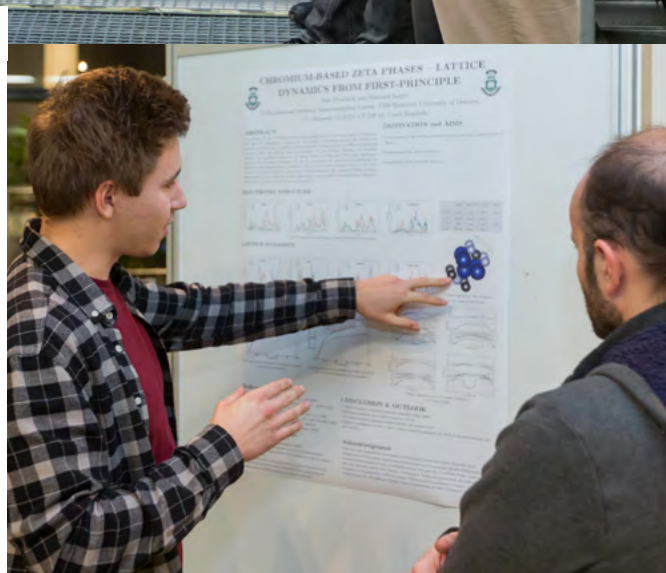


chanismy, které stojí za rozptylem energie na atomové úrovni, ale také hledáme nové materiály s vylepšenými tribologickými vlastnostmi. Ve většině případů jde o velmi zajímavou, napínavou práci. Výsledky počítačových simulací využívají další členové skupiny (či jiní spolupracovníci) k výrobě skutečných vzorků, které se tak mohou rychle začít používat. Na mé práci mě, stejně tak jako asi každého vědce, baví hledat odpovědi na dosud otevřené otázky a posouvat tak hranice poznání. Dalo by se říct, že je to spíše vášeň než práce.

#### [Přiblížíte nám váš výzkum, pro který aktuálně infrastrukturu IT4Innovations využíváte?](#)

Samozřejmě. Momentálně zkoumám mazací mechanismus molybdendisulfidu. Ačkoliv se toto pevné mazivo používá již desítky let, podstata jeho fungování není dosud řádně vysvětlena. Prohloubení poznatků o jevu, ke kterému dochází v tribologických podmínkách, může být zásadní pro nalezení vztahu mezi strukturou materiálu a jeho mazacími vlastnostmi.

[Děkujeme za rozhovor a těšíme se na naši budoucí spolupráci.](#)



Posterová sekce prezentace výzkumů



Naši kolegové na stánku IT4Innovations na konferenci SC17



## ÚČAST NA LETOŠNÍ KONFERENCI SC17 V AMERICKÉM DENVERU

Superpočítačová konference (Supercomputing Conference, SC) se tradičně koná každý rok v listopadu. SC je bezesporu největším celosvětovým setkáním vědců a firem z oblasti vysoce výkonného počítání (HPC). Letošní již 29. ročník konference se konal v americkém Colorado Convention Center a navštívilo jej téměř 13 000 účastníků.

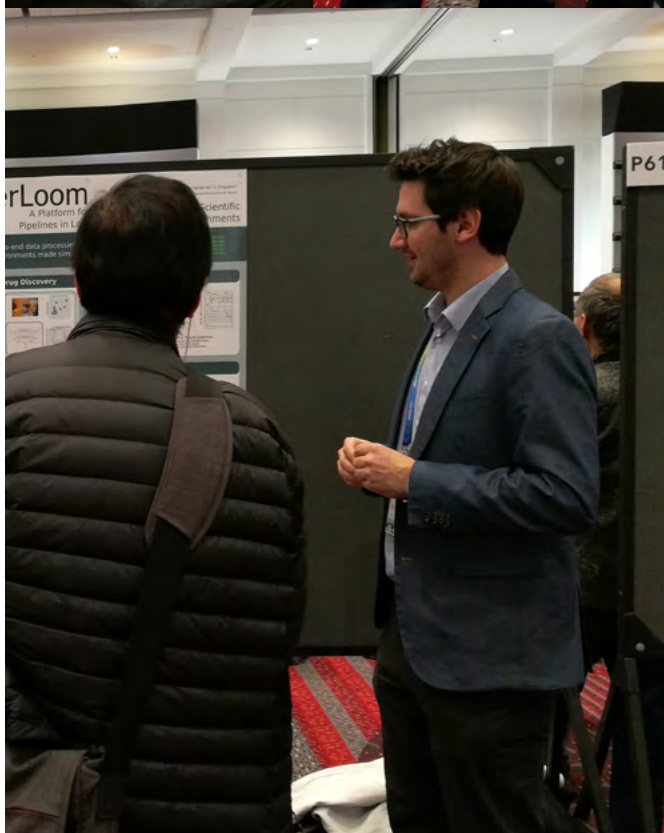
Konference trvala šest dní a prezentovaly se zde a diskutovaly nejnovější pokroky ve vysoce výkonném počítání, umělé inteligenci a ve strojovém učení. Vládla zde výjimečná atmosféra nadšení a spolupráce charakteristická pro skupiny lidí, kteří se zabývají špičkovou vědou s využitím excelentních strojů. Konference SC nabízí jedinečnou příležitost navázat nové mezinárodní kontakty, ze kterých mohou vzniknout velmi zajímavé výzkumné spolupráce.

Konference SC17 jsme se zúčastnili jako vystavovatel již popáté. Na stánku jsme prezentovali infrastrukturu IT4Innovations

a výzkum našich kolegů na ni navázaný. Naši kolegové pravidelně představovali návštěvníkům knihovny **BEM4I** a **ESPRESO**, software **HyperLoom** a nástroj **HPC as a Service** pro integraci náročných výpočtů do klientských aplikací pro usnadnění přístupu uživatelů k masivně paralelním počítačům.

V posterové sekci konference jsme byli zastoupeni kolegy z Laboratoře vývoje paralelních algoritmů a Laboratoře pro náročně datové analýzy a simulace. Na konferenci představili Michal Merta a Jan Zapletal, vývojáři knihovny

Jan Zapletal na posterové sekci konference



Vojtěch Cima na posterové sekci konference

**BEM4I**, výsledky optimalizace metody hraničních prvků pro moderní superpočítačové architektury. Vojtěch Cima prezentoval software **HyperLoom** pro definici a spouštění komplexních výpočetních plánů obsahujících velké množství vzájemně propojených úloh, které je potřeba řešit pomocí superpočítačů.

Na posterovou sekci konference bylo zasláno dohromady 169 příspěvků a k prezentaci jich bylo přijato 98. Odbornou komisí zaujaly posterové příspěvky našich kolegů natolik, že se dostali do **první devítky** nominovaných na cenu Nejlepší poster. I když nominaci neproměnili v cenu, úspěch v podobě dvou příspěvků v první devítce nejlepších posterů v celosvětové konkurenci je pro nás skvělým výsledkem. Cenu Nejlepší poster si odnesl příspěvek Tokijské univerzity v Japonsku a největší japonské výzkumné instituce RIKEN s názvem „Umělá inteligence a HPC pro klasifikaci nebezpečí zemětřesení metodou Monte Carlo“.

U příležitosti konání konference SC17 byl vyhlášen aktualizovaný seznam nejrychlejších superpočítačů na světě, žebříček **TOP500**. Salomon je po dvou a půl letech provozu na 87. místě. Stále se drží v první stovce žebříčku.





Prezentace knihovny ESPRESO na stánku

První dvě místa žebříčku patří čínským superpočítačům. Již rok a půl patří první místo stroji Sunway TaihuLight z Národního superpočítačového centra Wuxi, jehož výkon je 62násobkem výkonu Salomona. Na druhém místě je čtyřpůlroční stroj Tianhe-2 z Národního superpočítačového centra v Guangzhou. Třetí místo patří švýcarskému superpočítači Piz Daint, který byl před půl rokem upgradován. Novinkou v listopadovém žebříčku je čtvrtá příčka. Ta patří japonskému systému Gyoukou, jehož výkon byl v letošním roce zjednáctinásoben instalací nových akcelérátorů.

Pátým nejrychlejších superpočítačem světa je Titan z americké Národní laboratoře Oak Ridge. Titan byl přitom v roce 2012 nejvýkonnějším superpočítačem na Zemi. Příležitost započítat si na americké superpočítačové jedničce měli i naši kolegové z Laboratoře vývoje paralelních algoritmů. Titan využili pro testování a optimalizaci masivně paralelní knihovny **ESPRESO**, která slouží mimo jiné pro simulaci problémů přenosu tepla a jejich optimalizaci. Volně dostupnou knihovnu představovali potenciálním uživatelům její vývojáři i na konferenci SC17.

V první stovce letošního listopadového žebříčku TOP500 mají evropské země, stejně jako Amerika, celkem 38 systémů. Asie jich má 23 a Austrálie 1. K evropským zemím s nejvyšším počtem superpočítačů v tzv. TOP100 patří Francie, Německo a Velká Británie, které mají shodně po devíti strojích. První pěti nejvýkonnějších superpočítačů v Evropě provozují Švýcarsko, Itálie, Velká Británie, Španělsko a Německo. Naši sousedé Poláci provozují v Akademickém výpočetním centru Cyfronet AGH superpočítač Prometheus, který je momentálně na 77. příčce žebříčku TOP500. Český Salomon je v současnosti 31. nejvýkonnějším superpočítačem Evropy.

Na konferenci SC bylo také předáno nejprestižnější ocenění za vynikající výsledky v supercomputingu – cena Gordona Bella, jenž je označován za průkopníka vysoce výkonného a paralelního počítání. Cena byla udělena týmu z čínského Národního superpočítačového centra Wuxi za simulaci nejživějšího zemětřesení, které postihlo Čínu v roce 1976.



## STUDENTI VÝPOČETNÍCH VĚD NEZAHÁLÍ A OBJEVUJÍ SVĚT DÍKY PRESTIŽNÍM LETNÍM ŠKOLÁM

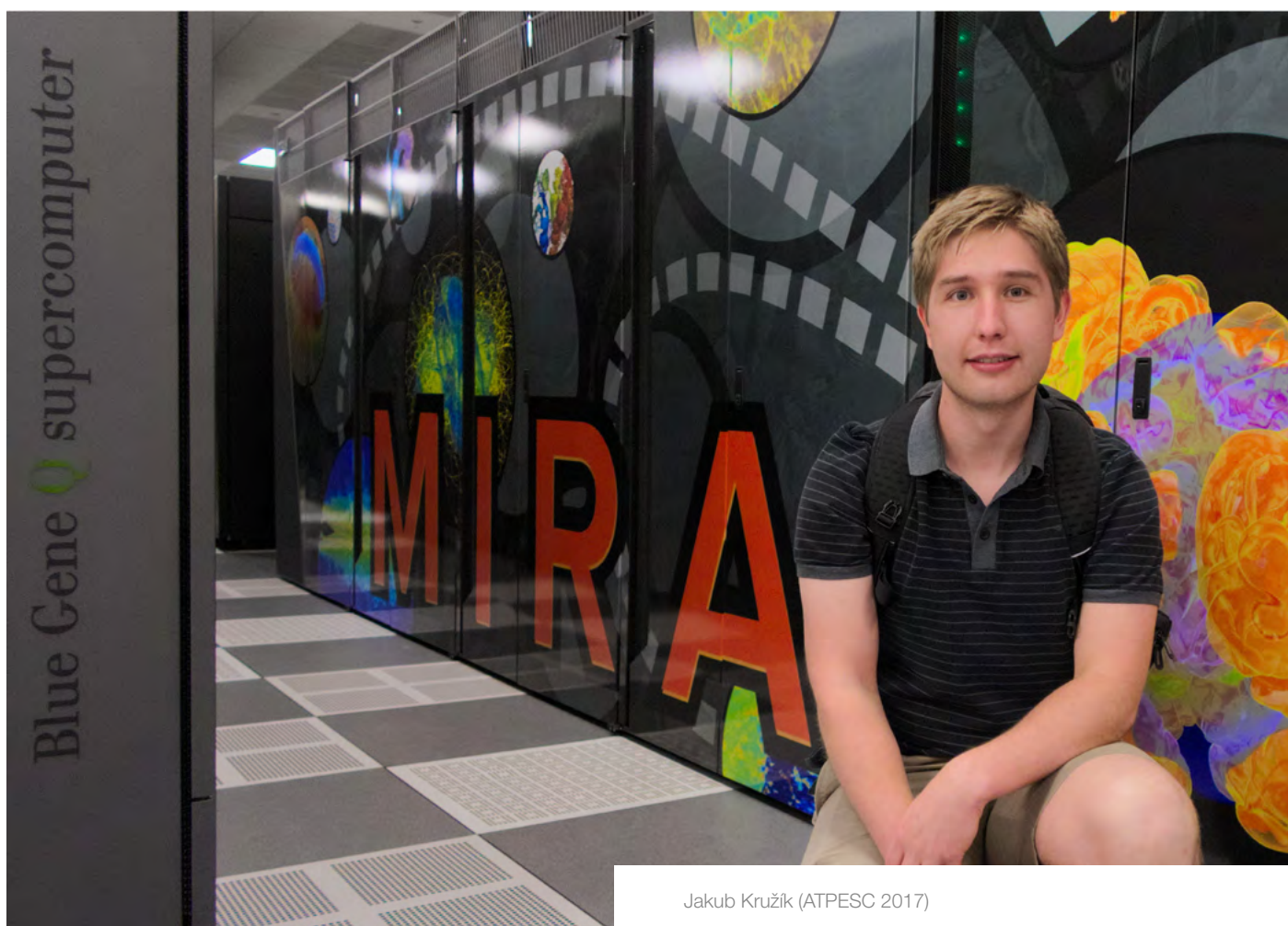
Ondřej Vysocký, Jakub Kružík, Martin Golasowski a Vít Ptošek se v letošním roce zúčastnili tří letních školení zaměřených na supercomputing. Všechna byla sponzorována pořádajícími organizacemi a konala se ve Spojených státech amerických a v Itálii.

**Mezinárodní letní škola HPC** (International HPC Summer School on Challenges in Computational Sciences, IHPCSS), **Vzdělávací program Argonne pro extrémní výpočty** (Argonne Training Program on Extreme-Scale Computing, ATPESC) a **Mezinárodní letní škola pro pokročilou počítačovou architekturu a kompilace pro vysoce výkonné a vestavěné systémy** (International Summer School on Advanced Computer Architecture and Compilation for High-Performance and Embedded Systems, ACACES).



Ondřej Vysocký (IHPCSS 2017)





Jakub Kružík (ATPESC 2017)

Na tyto letní školy **se mohou přihlásit všichni studenti se zájmem o High Performance Computing (HPC)**. Letních škol se mohou zúčastnit jen ti nejlepší studenti, které vybírá pořádající organizace.

Ondřej Vysocký absolvoval týdenní Mezinárodní letní školu HPC (IHPCSS) v červnu 2017 ve městě Boulder v americkém Coloradu. Cílem IHPCSS je seznámit studenty výpočetních věd s využíváním superpočítačů ve světové vědě. Náklady studentů hradí organizátoři školení: americká organizace XSEDE, panevropská e-infrastruktura PRACE, kanadská organizace COMPUTE CANADA a japonská organizace RIKEN. V roce 2018 bude IHPCSS hostit IT4Innovations a konat se bude v Praze. Přihlášky byly spuštěny v prosinci. <http://www.ihpcss.org/>

Dvoutýdenního Vzdělávacího programu Argonne pro extrémní výpočty (ATPESC) se v srpnu 2017 zúčastnil Jakub Kružík. ATPESC tentokrát proběhl v americkém St. Charles u

města Chicago. Účastníci absolvují intenzivní trénink z oblasti supercomputingu. Letní škola je financována Ministerstvem energetiky Spojených států amerických, které hradí náklady účastníků (stravu, ubytování a kurzovné). Na ATPESC 2018 se zájemci mohou hlásit od prosince 2017. <http://extreme-computingtraining.anl.gov/>

Martin Golasowski a Vít Ptošek absolvovali týdenní Mezinárodní letní školu na pokročilou počítačovou architekturu a kompilace pro vysoce výkonné a vestavěné systémy (ACACES), kterou organizuje evropská síť HiPEAC. Letošní ročník se konal v italském městě Fiuggi. ACACES je určen počítačovým architektům a vývojářům softwarů. Zaměřuje se na šíření pokročilých vědeckých poznatků a na podporu mezinárodních kontaktů mezi akademickými institucemi a průmyslem. Při podávání přihlášky si zájemci z institucí, které jsou členem sítě HiPEAC, můžou zažádat o grant. Přihlášky bývají spuštěny na začátku března. <http://acaces.hipeac.net>

Absolventi prestižních letních škol nám zodpověděli následující otázky:

[Jaká byla vaše primární očekávání, za jakým účelem jste na letní školu vyjeli?](#)

**Ondřej Vysocký (IHPCSS 2017):** Mým cílem bylo samozřejmě navštívit řadu zajímavých přednášek, ještě atraktivnější však snad byla skutečnost, že se školy účastní 80 přibližně stejně starých studentů z Evropy, USA, Kanady a Japonska, a tak bylo možné získat mnoho zajímavých kontaktů. Zároveň i cesta přes oceán pro mne byla novou, lákavou zkušeností.

**Jakub Kružík (ATPESC 2017):** Chtěl jsem si rozšířit stávající a získat nové znalosti nutné k efektivnímu využití současných, ale i budoucích největších superpočítačů.

[Jaká byla náplň letošních letních škol a co zajímavého jste se dozvěděli?](#)

**Ondřej Vysocký (IHPCSS 2017):** „Akci tvořilo mnoho přednášek, které představovaly základy paralelního programování, stejně tak přednášky zaměřené především na vývoj softwaru. Díky dvěma paralelním sekcím zde byly informace pro studenty, kteří se primárně nezaměřují na programování, ale stejně tak bylo možné zvolit pokročilejší témata. Úvodní dny se neobešly bez poster sekcí, ve kterých postupně všichni studenti prezentovali svůj výzkum (abecední rozdělení do 4 skupin, tak aby byla možnost vidět poster ostatních). Skladba účastníků, kteří byli z mnoha rozličných vědeckých odvětví, udělala tuto část velmi zajímavou.

Značné množství času bylo věnováno mentoringu, kdy organizátoři předávali své zkušenosti, které by měly studentům pomoci získat jasnější představu o práci v HPC a na doktorském studiu obecně. Osobně považuji tuto část užitečnou především pro magisterské studenty uvažující o budoucí kariéře ve výzkumu.“

**Jakub Kružík (ATPESC 2017):** „Mezi pro mě nejzajímavější probíraná témata patřily numerické algoritmy a software, architektury hardwaru a programovací modely a jazyky. Kromě přednášek jsme také vždy měli možnost vyzkoušet si nově nabyté znalosti v praktických cvičeních. K tomu jsme měli přístup na největší superpočítače (např. Titan, Cori, Mira, Theta) patřící výpočetním centřům pod Department of Energy Office of Science.

Program je unikátní svým širokým záběrem a složením přednášejících. Ti totiž patří ke světové špičce na poli HPC. V sekci numerických algoritmů měli přednášky mimo jiné J. Demmel, B. Smith, J. Dongarra a D. Keyes. Přednášky vedli často hlavní autoři daného softwaru nebo modelu. Takže například přednášky o pokročilých funkcích MPI vedli P. Balaji, B. Gropp a R. Thakur – všichni členové MPI Forum, které MPI standard vytváří.“

**Vít Ptošek (ACACES 2017):** „Jednalo se o sadu předem zvolených kurzů podle preferencí. Každý si mohl vybrat 4 z 12 kurzů, ty pak byly rozděleny každý den do třech až čtyřech bloků. Zaměření bylo především na HPC a cloudy, ale člověk si mohl (jako v mém případě) zvolit i kvantové počítání.“

[Co vám absolvování letní školy přineslo?](#)

**Ondřej Vysocký (IHPCSS 2017):** Řekl bych, že jsem si z této akce odnesl přesně to, co jsem od ní očekával, a především množství nových kontaktů je nedocenitelné. Bohužel jsem se zatím nedostal k příležitosti využít nově získané technické znalosti, to se však v budoucnu určitě změní. IHPCSS byla velmi dobře zorganizovaná se spoustou kvalitních přednášek a zajímavých lidí.

**Jakub Kružík (ATPESC 2017):** Získal jsem informace o tom, kam superpočítače a způsob jejich efektivního využití směřuje. Také jsem se dozvěděl o nových metodách a programovacích modelech. Dále jsem navázal mnoho kontaktů, ať už s přednášejícími nebo spolužáky. Kurz je velice kvalitní a navíc zdarma. Určitě ho doporučuji.

**Vít Ptošek (ACACES 2017):** Kromě spousty informací stran kvalifikovaných přednášejících i hromadu nových kontaktů v rámci networkingu. Načerpal jsem úplně nové znalosti a prohloubil již nabyté. Navíc mi byl poskytnut grant, který pokrýl kompletně vše kromě cesty.

[Doporučili byste toto letní školení dalším zájemcům?](#)

**Ondřej Vysocký (IHPCSS 2017):** IHPCSS byla velmi dobře zorganizovaná se spoustou kvalitních přednášek a zajímavých lidí. Pokud by se někdo rozhodl pro účast v příštím roce, ušetří si mnoho cestování, jelikož následující ročník se bude konat v Praze, kde ho bude IT4Innovations spolupořádat.

**Jakub Kružík (ATPESC 2017):** Kurz je velice kvalitní a navíc zdarma. Určitě ho doporučuji.

**Vít Ptošek (ACACES 2017):** Každopádně. ACACES je velmi kvalitní letní škola na úrovni zaměřená především na high performance a na své si přijdou jak příznivci HW, tak i SW řešení. Vše se koná v příjemném prostředí a myslím, že je tato škola přínosná pro studenty, pracovníky z oboru i přednášející. Organizace byla dle mého velmi povedená.

# ESPRESO FEM

## MODUL PŘENOSU TEPLA

Masivně paralelní knihovna založená na metodě konečných prvků pro inženýrské aplikace

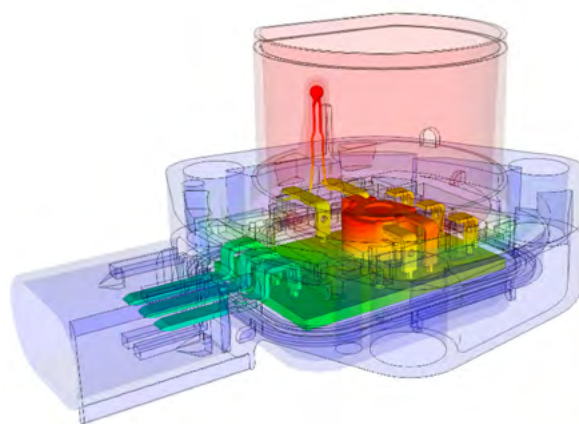
Technologický pokrok v oblasti výpočetní techniky zapříčinil výraznou změnu koncepce navrhování nových produktů, řízení výroby nebo autonomních systémů. V posledních několika letech jsme svědky výrazného přechodu na tzv. virtuální prototypování a stupňujícího se tlaku na zapojení velké části spektra průmyslového sektoru do tzv. čtvrté průmyslové revoluce.

Hlavním cílem týmu vyvíjejícího knihovnu ESPRESO je vytvoření uceleného open source balíku, který bude možné aplikovat na široké spektrum komplexních inženýrských simulací z oblastí jako je strojírenství, stavitelství a energetika. Bezplatná licence vyvíjeného balíku umožňuje vytvářet nad knihovnou ESPRESO automatizované simulační řetězce, jako například automatizované systémy pro tvarovou optimalizaci. Přidanou hodnotou tohoto balíku je vysoce škálovatelný řešič založený na metodách doménové dekompozice, který umožňuje plně saturovat výpočetní kapacity nejvýkonnějších superpočítačů dneška a řešit tak úlohy o miliardách neznámých, a jednoduché rozhraní pro konfiguraci implementovaných řešičů.

V těchto dnech byl vývojovým týmem dokončen modul pro řešení problémů přenosu tepla, který byl vyvíjen v rámci projektů IT4Innovations. Výzkumníci využívají tento nástroj při řešení smluvního výzkumu a jeho další vývoj je podpořen participací v několika evropských projektech. ESPRESO FEM modul přenosu tepla byl například použit při řešení odezvové plochy pro různé variace návrhových proměnných teplotního senzoru ve spolupráci s firmou Continental.

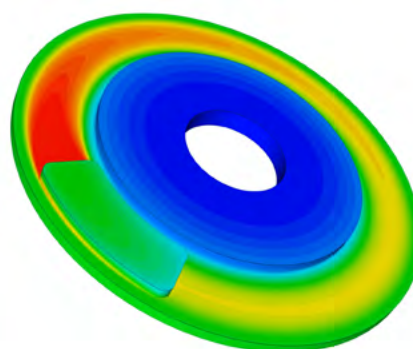
Možné budoucí napojení na cloudová centra v rámci H2020 projektu CloudiFacturing a na službu HPC as a service, vyvíjenou našimi kolegy, usnadní externím partnerům primárně z malých a středních podniků využívat moderní technologie v kontextu virtuálního prototypování.

V následujícím roce se bude tým vyvíjející ESPRESO FEM zabývat vývojem modulu pro topologickou optimalizaci a integraci nelineárních doménových dekompozic pro akceleraci nelineárních výpočtů.

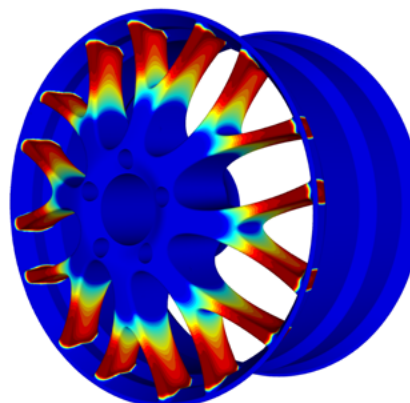


Continental

Spolupráce s Continental při návrhu teplotního senzoru



Transientní simulace kotoučové brzdy



Rozložení latentního tepla při tuhnutí hliníku





# SPOLUPRÁCE S BAYNCORE

K 1. listopadu 2017 jsme zahájili spolupráci se společností Bayncore z Velké Británie.



K 1. listopadu 2017 jsme zahájili spolupráci se společností Bayncore z Velké Británie. První společný projekt zahrnuje smluvní výzkum a poradenské služby v rámci série workshopů „Intel AI EMEA Roadshow“ konajících se po celé Evropě, na Blízkém Východě a v Africe. Toto partnerství zahrnuje tvorbu obsahu zaměřeného na strojové učení a podílení se na odborných školeních v blízké spolupráci s firmami Bayncore a Intel. Mezi témata workshopů patří modernizace kódů pomocí vývojářských nástrojů společnosti Intel, Intellem optimalizované hluboké neuronové sítě a strojové učení pomocí frameworků Tensorflow, Caffe a scikit-learn a Intel Python Distribution.

Za IT4Innovations je v partnerství se společností Bayncore zapojena Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace (ADAS) a její členové Jan Martinovič, Georg Zitzlsberger, Vojtěch Cima a Martin Golasowski.

První příspěvky IT4Innovations byly předneseny na začátku listopadu v rámci workshopů uskutečněných v Oxfordu, Madridu a v Paříži. Další tři akce se konaly v průběhu prosince v Johannesburgu/Pretorii a Tel-Avivu. Další workshopy jsou plánovány na začátek roku 2018.

## O společnosti Bayncore:

Webové stránky společnosti Bayncore:

[www.bayncore.com](http://www.bayncore.com)

Intel AI EMEA Roadshow:

[www.intel.co.uk/content/www/uk/en/events/ai-emea-roadshow](http://www.intel.co.uk/content/www/uk/en/events/ai-emea-roadshow)

Společnost Bayncore Limited nabízí služby v oblasti poradenství a informačních technologií. Specializuje se na poskytování platformy pro špičková technologická řešení v oblasti vysoce náročných výpočtů (HPC), technického zpracování dat a velkých dat. Bayncore sídlí v Londýně a Cambridge ve Velké Británii a svou působností pokrývá region EMEA.

Nabídka společnosti Bayncore, ve většině případů přizpůsobená každému klientovi na míru, se zaměřuje na čtyři oblasti služeb:

- Platforma pro špičkové IT služby & poradenství
- Školení
- Benchmarking
- Výzkum & Vývoj

K partnerům společnosti Bayncore patří:

- Intel
- Microsoft
- Polyhedron Software
- Computer Laboratory – University of Cambridge (Velká Británie)