

# PŘEHLED ROKU 2017

IT4Innovations#  
národní11\$#01\$%  
superpočítačové  
centrum1&01\$@00



PŘEHLED ROKU 2017

## Obsah

ÚVODNÍ SLOVO ŘEDITELE IT4INNOVATIONS	6
VÝZNAMNÉ UDÁLOSTI V ROCE 2017	8
PŘEDSTAVENÍ IT4INNOVATIONS	14
ADMINISTRATIVNÍ A FINANČNÍ PŘEHLED	16
Vedení IT4Innovations	16
Zaměstnanci IT4Innovations	16
Zdroje financování	17
Provozní náklady	18
Souhrnný výčet všech grantů	19

<b>SUPERPOČÍTAČOVÉ SLUŽBY</b>	21
Technické parametry superpočítačů	22
Přidělování výpočetního času	23
Uživatelé výpočetních zdrojů	27
Projekty	28
<b>VÝZKUM A VÝVOJ</b>	31
Laboratoř vývoje paralelních algoritmů	34
Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace	36
Laboratoř modelování pro nanotechnologie	38
Laboratoř pro big data analýzy	40
Laboratoř pro výzkum infrastruktury	42
Projekty	44
Spolupráce s komerční sférou	51
<b>VZDĚLÁVACÍ A VÝUKOVÉ AKTIVITY</b>	53
Doktorský studijní program Výpočetní vědy	54
Výukové aktivity	54
Projekty	58



data analýzy. Na obě uvolněné pozice jsme proto vypsalí výběrová řízení a obsadili je prof. Ing. Miroslavem Vozňákem, Ph.D. (vedoucí Laboratoře pro big data analýzy) a prof. Ing. Tomášem Kozubkem, Ph.D. coby novým vědeckým ředitelem IT4Innovations. Právě jmenováním nového vědeckého ředitele se uvolnilo místo vedoucího Laboratoře výzkumu paralelních algoritmů, takže bylo nutné obsadit nově i tuto pozici. Ke konci roku jsme proto vypsalí výběrové řízení i na vedoucího Laboratoře výzkumu paralelních algoritmů a vedoucího Laboratoře pro výzkum infrastruktury, které jsme již delší dobu plánovali. V rámci těchto výběrových řízení byli vybráni Ing. Tomáš Karásek, Ph.D. a Ing. Lubomír Říha, Ph.D. a k 1. únoru 2018 nastoupili do svých funkcí. Pevně věřím, že nový tým klíčových vedoucích pracovníků IT4Innovations bude stejně tak úspěšný jako ten předchozí a posune naše centrum zase o nějaký ten kousek dále.

Milé čtenářky, milí čtenáři,

do rukou se vám dostává další přehled aktivit a hospodaření našeho centra IT4Innovations, tentokrát za rok 2017. Věřím, že v něm naleznete řadu zajímavých informací, které vám přiblíží ty nejdůležitější události a fakta, které naše centrum v tomto roce zažilo a dosáhlo. Zároveň doufám, že vás tyto informace přesvědčí i o celospolečenském přínosu a významu našeho superpočítačového centra včetně výzkumu, který se v něm realizuje.

V úvodu bych velmi rád zmínil, že naše centrum v roce 2017 dostalo zásadních personálních změn. K 1. srpnu jsem byl nově jmenován ředitelem centra IT4Innovations, což mělo za následek uvolnění funkce vědeckého ředitele, kterou jsem do té doby vykonával. Od 1. září nastoupil do své funkce nový rektor Vysoké školy báňské – Technické Univerzity Ostrava prof. RNDr. Václav Snášel, Csc., který proto na vlastní žádost opustil funkci vedoucího Laboratoře pro big

V roce 2017 jsme však zaznamenali i další významné události, které mají zásadní význam pro další fungování a rozvoj našeho centra. V rámci mezinárodního hodnocení velkých infrastruktur České republiky jsme byli hodnoceni nejvyšší možnou známkou 5, což znamená, že naše výzkumná infrastruktura je považována za excelentní ve srovnání s jinými infrastrukturami ve světě. Takové hodnocení nám dává dobré východisko pro budoucí financování naší infrastruktury pro roky 2019-2022. Za klíčovou událost loňského roku je třeba považovat i schválení projektu Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání (OP VVV) IT4Innovations národní superpočítačové centrum - cesta k exascale, který bude do roku 2021 financovat modernizaci a upgrade superpočítačů Anselm a Salomon. Uspěli jsme i s projekty OP VVV Doktorská škola pro vzdělávání v oblasti matematických metod a nástrojů v HPC, ve kterém jsou našimi partnery Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy a Matematický ústav Akademie věd České republiky, a Vzdělávací a tréninkové centrum IT4Innovations, díky němuž získáme v bezprostřední blízkosti našeho centra moderní prostory pro výuku a vzdělávání. Uspěli jsme rovněž v programu Horizont 2020. Získali jsme projekty EXPERTISE, CloudiFacturing a TETRAMAX a také řadu nových partnerů z průmyslové sféry.

Pod hlavičkou našeho centra jsme v loňském roce uspořádali pravidelnou mezinárodní konferenci High Performance Computing in Science and Engineering, která se stejně jako v předchozích letech konala na Soláni. V rámci evropské infrastruktury Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) jsme získali statut tzv. PRACE Training Centra a pořádali jsme i úvodní tréninkový týden v rámci aktivity Summer of HPC. Poprvé jsme v prostorách našeho centra uspořádali konferenci uživatelů infrastruktury IT4Innovations, kterou jsme spojili s výroční vědeckou konferencí Centra excellence IT4Innovations. Na této konferenci byla ustavena Rada uživatelů IT4Innovations. Uspořádali jsme i celou řadu školení a exkurzí a během roku naše centrum navštívilo přes 1700 návštěvníků všech věkových kategorií. Jsem velice rád, že je o naše centrum stále velký zájem hlavně u mladých lidí, kteří si od nás odnáší důležitou informaci, že superpočítače nejsou science fiction nebo hudba budoucnosti, ale současný reálný nástroj pro excelentní výzkum a průmyslové inovace.

Potěšující je informace, že zájem mezi uživateli o naši výpočetní infrastrukturu nadále roste. Aktuálně jsou naše systémy plně vytíženy a nejsme schopni pokrýt všechny požadavky našich uživatelů. Probíhající výběrové řízení na upgrade klastru Anselm snad pomůže tuto situaci alespoň částečně vyřešit.

Myslím, že na všechny zmíněné úspěchy můžeme být právem pyšní a mé díky patří všem, kteří se na nich menším či větším dílem podíleli. Chtěl bych ale poděkovat i těm, jejichž výsledky se do tohoto úvodníku již nevměstaly, nebo se na nich podíleli jen nepřímo například formou technické či administrativní podpory. Jejich pracovního úsilí i nasazení si musíme rovněž vážit, byť to nejsou ti, jejichž jména jsou u jednotlivých úspěchů uvedena. Je třeba společně budovat silný tým, neboť jen tak si budeme schopni udržet prestižní postavení našeho centra doma i v zahraničí.

Vít Vondrák  
ředitel IT4Innovations



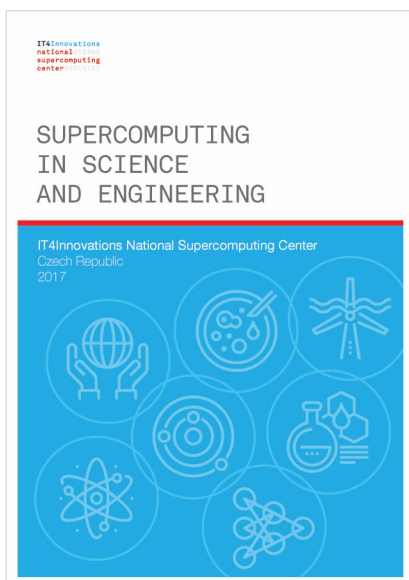
## VÝZNAMNÉ UDÁLOSTI V ROCE 2017

V současnosti je IT4Innovations jedinou národní velkou výzkumnou infrastrukturou v oblasti High Performance Computing (HPC) v České republice a máme ambice tuto roli hrát i do budoucna. V roce 2017 byl k financování Operačním programem Výzkum, vývoj a vzdělávání (OP VVV) schválen projekt **IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale**, jehož cílem je modernizovat stávající superpočítače a rozšířit vlastní výzkum o nové směry. V rámci OP VVV byly podpořeny také dva další projekty. Díky projektu **Doktorská škola pro vzdělávání v oblasti matematických metod a nástrojů v HPC** budou moci studenti doktorských studijních programů začleněných do Doktorské školy sdílet vzájemnou nabídku předmětů a podílet se na společných aktivitách. Partneři projektu jsou Univerzita Karlova a Akademie věd České republiky. Současně budou vytvořeny i doktorské programy typu double degree se švýcarskou Università della Svizzera italiana a s francouzskou Université de Toulouse III Paul Sabatier.



Třetí projekt, finančně podpořený také v rámci OP VVV, umožní vybudování **Vzdělávacího tréninkového centra IT4Innovations**. Nová budova s auditoriem a třemi učebnami podpoří výzkumně zaměřené studijní programy orientované na výpočetní vědy.

Na poli mezinárodních výzkumných projektů se nám v minulém roce také dařilo. Rámcovým programem pro výzkum a inovace Evropské unie Horizont 2020 byly schváleny tři nové mezinárodní projekty, jichž se účastníme. Stali jsme se členem prestižního konsorcia mezinárodního projektu **EXPERTISE** (Využití experimentů a HPC pro mechanickou integritu a strukturální dynamiku turbín v Evropě), kde spolupracuje nová generace strojních inženýrů a vědeckých pracovníků na výzkumu a vývoji turbín. Usnadnění poskytování nových inovačních technologií evropskému průmyslu vybudováním specializované sítě kompetenčních center je cílem projektu **TETRAMAX** (Transfer technologií skrze nadnárodní aplikační experimenty). Optimalizace výrobních procesů a produktivity podniků pomocí modelování a simulací založených na využití HPC/cloudových technologií je nabízena v rámci nového projektu **CloudiFacturing** (Cloudifikace výrobního inženýrství pro prediktivní digitalizovanou výrobu).



Publikace Supercomputing in Science and Engineering

V roce 2017 jsme vydali publikaci s názvem **Supercomputing in Science and Engineering** (ISBN 978-80-248-4037-6). Jedná se o první sborník rozšířených abstraktů 62 vybraných výzkumných projektů, které využily infrastrukturu IT4Innovations. V publikaci najdete projekty spadající do oblastí astrofyziky, výpočetních věd, věd o Zemi, inženýrství, chemie a materiálového inženýrství, biověd a fyziky. Do této publikace kromě autorů z IT4Innovations přispěla 40 abstrakty i řada autorů z dalších významných vzdělávacích a výzkumných institucí ČR jako jsou Akademie věd ČR, České vysoké učení technické v Praze, Univerzita Karlova, Vysoké učení technické v Brně a Masarykova univerzita.



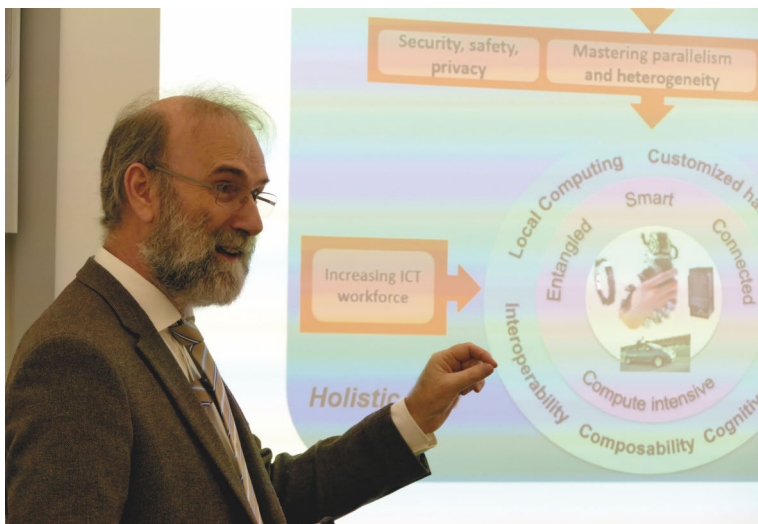
Třetí ročník konference **High Performance Computing in Science and Engineering** (HPCSE) jsme organizovali v květnu 2017. Na konferenci byly prezentovány aktuální výsledky výzkumů z oblastí aplikované matematiky, numerické lineární algebry, optimalizačních metod, výpočetních věd a HPC. HPCSE se tentokrát zúčastnilo téměř 100 odborníků a studentů z ČR i zahraničí.

Konference HPCSE, květen 2017



V listopadu roku 2017 jsme pořádali na půdě IT4Innovations 1. konferenci uživatelů IT4Innovations, kterou navštívilo 121 účastníků. Ke zvaným přednášejícím patřili vědci z Akademie věd České republiky, Univerzity Karlovy a z Českého vysokého učení technického v Praze (ČVUT), kteří infrastrukturu IT4Innovations využívají. Při příležitosti konání konference vznikla **Rada uživatelů IT4Innovations**. Předsedou Výkonného výboru této rady byl zvolen Dr. Paolo Nicolini z Fakulty elektrotechnické při ČVUT v Praze.

1. konference uživatelů IT4Innovations, listopad 2017



Historicky první workshop mezinárodní sítě HiPEAC v České republice jsme hostili v únoru roku 2017 právě my. Síť HiPEAC sdružuje odborníky na vysoce výkonné výpočetní prostředky a vestavěné systémy. V rámci prvního workshoku v České republice nás navštívili zástupci sítě Koen De Bosschere a Rainer Leupers.

Workshop mezinárodní sítě HiPEAC v IT4Innovations, únor 2017



V roce 2017 jsme uspořádali 9 výukových akcí, které dohromady navštívilo 227 účastníků. Stali jsme se školicím centrem **PRACE Training Centre**. O tuto možnost se ucházelo 7 zemí, resp. partnerů zastupujících tyto země v PRACE. Odborná komise PRACE k naší radosti vybrala i IT4Innovations, které se umístilo na samém vrcholu hodnocení.

Události pro širokou veřejnost k nám v minulém roce přilákaly téměř 1700 návštěvníků. Jednalo se o události jako například exkurze pro žáky, studenty, firmy a popularizační akce jako je Noc vědců.

Exkurze a vzdělávací akce pro širokou veřejnost

## PŘEDSTAVENÍ IT4INNOVATIONS

IT4Innovations národní superpočítačové centrum při Vysoké škole báňské – Technické univerzitě Ostrava je strategickou velkou výzkumnou infrastrukturou v České republice. Národní superpočítačové centrum poskytuje nejmodernější superpočítačové technologie a služby a zabývá se excelentním výzkumem v oblasti vysoce výkonného počítání (HPC) a datových analýz (HPDA). Od roku 2011 jsme členem prestižní panevropské výzkumné infrastruktury PRACE, jejímž cílem je posílit konkurenceschopnost evropské vědy, výzkumu a průmyslu. V roce 2016 jsme se stali členem Evropské technologické platformy pro oblast HPC (ETP4HPC), která se zaměřuje na definování výzkumných priorit v oblasti supercomputingu.

Hlavními tématy našeho výzkumu jsou zpracování a analýzy rozsáhlých dat, vývoj paralelních škálovatelných algoritmů a knihoven, výzkum zaměřený na vývoj superpočítačových technologií, řešení výpočetně náročných inženýrských úloh a modelování v nanotechnologiích. Pro českou vědeckou komunitu zajišťujeme přístup k výkonným výpočetním systémům a širokou škálu odborných školení zaměřených na osvojení si znalostí potřebných k efektivnímu využívání naší superpočítačové infrastruktury. Myslíme také na budoucnost a v rámci doktorského studijního programu Výpočetní vědy vzděláváme další generace specialistů na využití superpočítačů pro řešení výpočetně náročných úloh v základním výzkumu i v aplikovaných vědách.

### Mise

Pracujeme na excelentním vědeckém výzkumu v oblastech high performance computing, jenž má přínos pro průmysl. Provozujeme nejmodernější technologie a služby v oblasti high performance computing a zpřístupňujeme je českým i zahraničním výzkumným týmům z akademické oblasti i průmyslu.

### Vize

Usilujeme o to, stát se špičkovým evropským centrem excelentního výzkumu v oblasti IT s důrazem na high performance computing. S pomocí našeho výzkumu, znalostí a infrastruktury chceme zlepšovat kvalitu života, zvyšovat konkurenceschopnost průmyslového sektoru a podporovat produktivní propojení high performance computingu s jinými vědeckými a technickými disciplínami.

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

Členové: doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.  
prof. Dr. Michael Cada  
prof. Jean-Christophe Desplat  
prof. Ing. Petr Berka, CSc.  
prof. Dr. Peter Arbenz  
doc. Ing. Petr Cintula, Ph.D.  
prof. Dr. Dipl.-Ing. Ulrich Bodenhofer  
prof. Dr. Kenneth Ruud  
prof. Dr. Arndt Bode  
prof. Dr. hab. inz. Roman Wyrzykowski

**Vědecká rada vysokoškolského ústavu  
IT4Innovations na Vysoké škole  
báňské – Technické univerzitě Ostrava**

Předseda: doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.  
Členové : Mgr. Branislav Janský, Ph.D.  
Ing. Jan Martinovič, Ph.D.  
prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.  
prof. Ing. Jaromír Pištora, CSc.  
doc. Ing. Pavel Krömer, Ph.D.  
prof. Ing. Jan Holub, Ph.D.  
prof. Ing. Pavel Tvrdlík, CSc.  
doc. RNDr. Stanislav Hledík, Ph.D.  
prof. RNDr. Jaroslav Pokorný, CSc.  
doc. RNDr. Arnošt Komárek, Ph.D.  
prof. Ing. Viera Stopjaková, Ph.D.  
Ing. Martin Palkovič, Ph.D.

Také v roce 2017 jsme pokračovali ve spolupráci s partnery projektu Centrum excelence IT4Innovations - Ostravskou univerzitou, Slezskou univerzitou v Opavě, Vysokým učením technickým v Brně a Ústavem geoniky Akademie věd ČR. Od roku 2016 společně řešíme projekt IT4Innovations excellence in science, jenž je financován z Národního programu udržitelnosti II (NPU II). Dozor nad tímto projektem, ale i nad udržitelností projektu Centra excelence, zajišťuje správní rada.

**Správní rada**

Předseda: Ing. Evžen Tošenovský, dr.h.c.  
Místopředseda: doc. Mgr. Pavel Drozd, Ph.D.  
Členové : prof. Ing. Ivo Vondrák, CSc.  
prof. Ing. Petr Noskiewič, CSc.  
Ing. Miroslav Murin, FCCA

prof. Ing. Pavel Zemčík, Ph.D.  
Ing. Leoš Dvořák  
doc. Ing. Pavel Tuleja, Ph.D.  
prof. Ing. Miroslav Tůma, CSc.

## ADMINISTRATIVNÍ A FINANČNÍ PŘEHLED

### Vedení IT4Innovations k 1. 11. 2017



**Ředitel IT4Innovations**  
Vít Vondrák



**Administrativa a finance**  
Radim Mrázek



**Výzkum a vývoj**  
Tomáš Kozubek

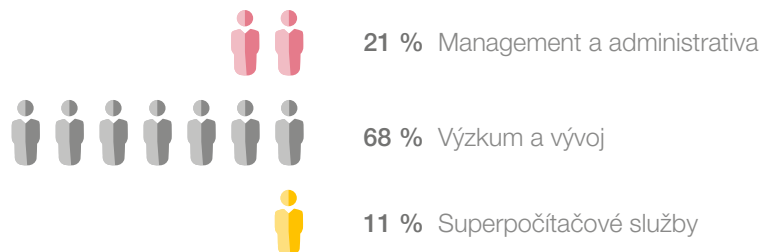


**Superpočítačové služby**  
Branislav Janský

Do 31. 7. 2017 byl ředitelem IT4Innovations národního superpočítačového centra Ing. Martin Palkovič, Ph.D. Současným ředitelem IT4Innovations je doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D. (dříve Vědecký ředitel IT4Innovations), jenž byl do funkce jmenován dne 1. 8. 2017. Funkci Vědeckého ředitele zastává od 1. 11. 2017 prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.

### Zaměstnanci IT4Innovations

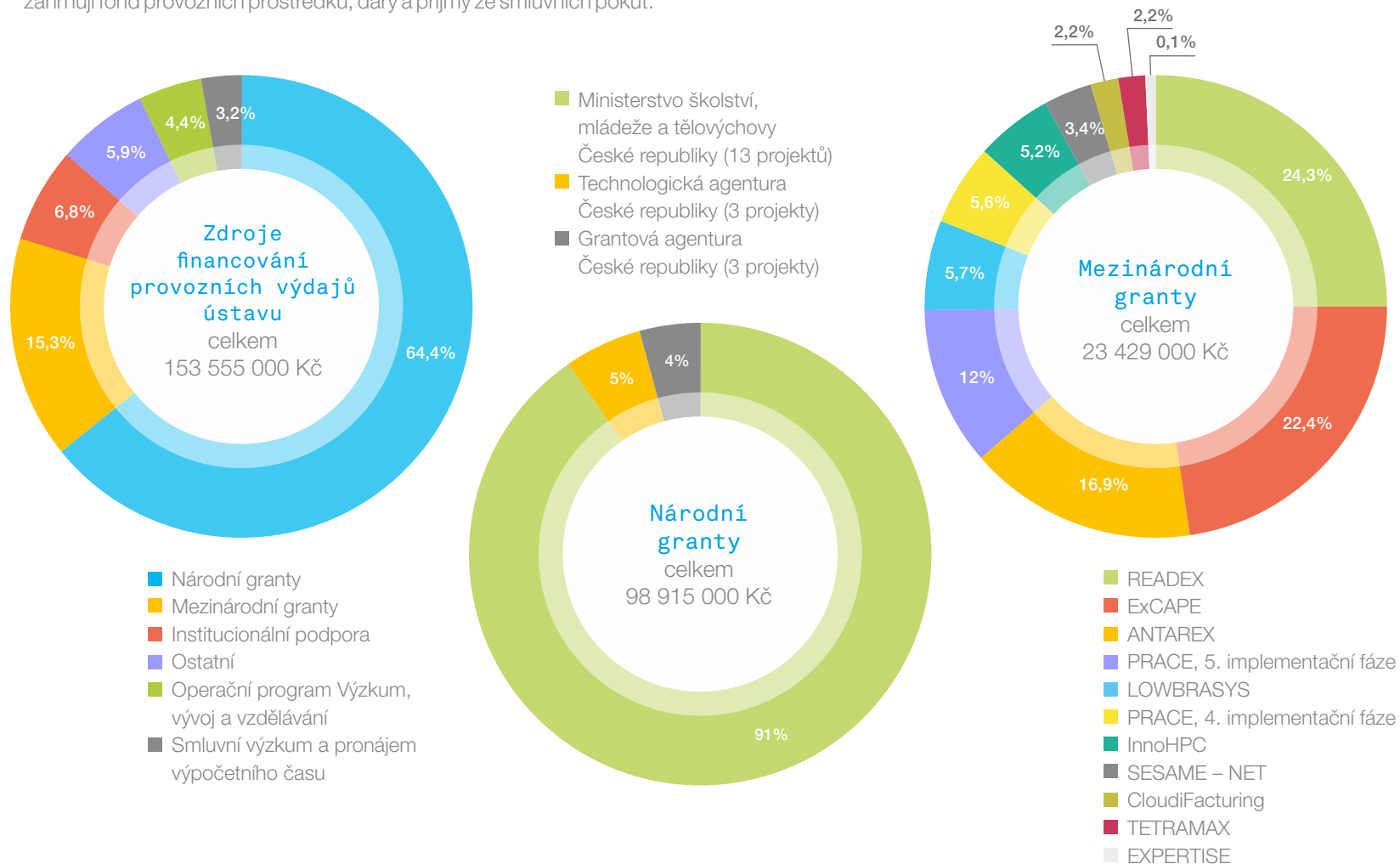
Zaměstnanci IT4Innovations podle úseků po přepočtu na ekvivalent plného pracovního úvazku (FTE), celkem 132,7 FTE





## Zdroje financování

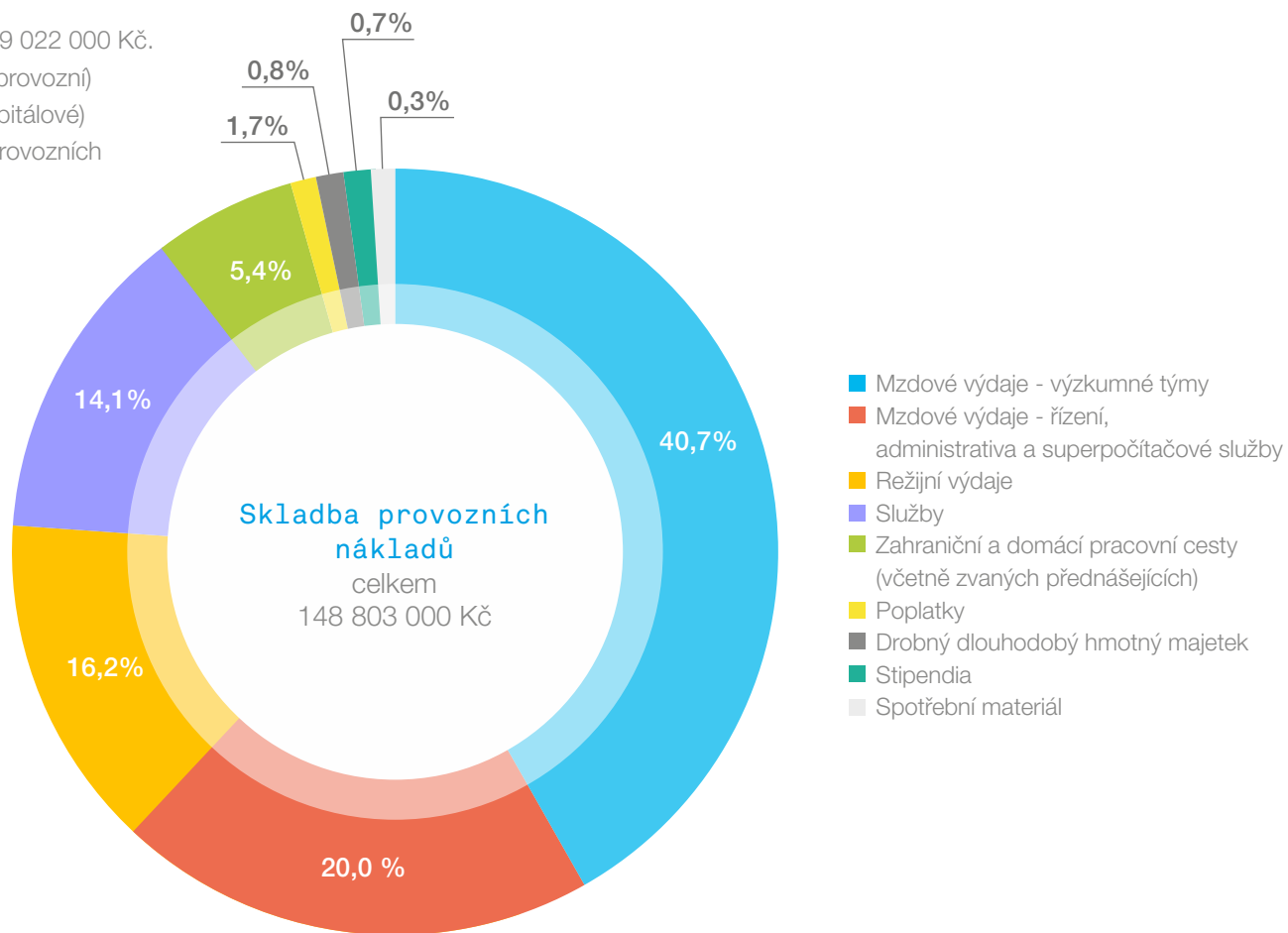
V roce 2017 hospodařil ústav IT4Innovations se zdroji ve výši 153 555 000 Kč. Největší podíl na zdrojích financování provozních výdajů ústavu měly národní granty (64,4 %). Dále se na zdrojích financování provozních výdajů ústavu podílely mezinárodní granty (15,3 %), institucionální podpora (6,8 %), Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání (4,4 %) a smluvní výzkum a pronájem výpočetního času (3,2 %). Ostatní zdroje financování (5,9 %) zahrnují fond provozních prostředků, dary a příjmy ze smluvních pokut.



## Provozní a investiční náklady

Celkové náklady ústavu činily 149 022 000 Kč.

Z této částky činily neinvestiční (provozní) náklady 99,85 % a investiční (kapitálové) náklady 0,15 %. Nejvyšší části provozních nákladů tvořily mzdové výdaje, režijní výdaje a služby (91 %).



## Souhrný výčet všech grantů

### NÁRODNÍ GRANTY

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

##### Projekt velkých infrastruktur

- IT4Innovations národní superpočítačové centrum

##### Projekt Národního programu udržitelnosti II

- IT4Innovations excellence in science

##### Dotace na specifický vysokoškolský výzkum

- Vytvoření renderovací služby
- Terahertzové fotonické struktury s využitím pokročilých materiálů
- Masivně paralelní modelování silně nelineárních procesů v mechanice
- Efektivní implementace metody hraničních prvků III
- Numerické metody pro modelování environmentálních procesů
- Modelování srážkových procesů v nízkoteplotním plazmatu
- PERMON toolbox development III
- Optimalizace algoritmů strojového učení pro platformu HPC
- Řešení grafových úloh na časoprostorových grafech zatížených neurčitostí pomocí HPC
- Teplotní roztažnost slitin Fe-Ti

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

- Komplexní studium efektů v nízkodimenzionálních kvantových spinových systémech

#### Projekty podpořené Grantovou agenturou České republiky

- Nové nelineární a magneto-optické jevy v periodických strukturách
- Účinné metody odhadu životnosti pro obecné víceosé namáhání
- Nové materiály paliv pro jaderné reaktory IVté generace

#### Projekty podpořené Technologickou agenturou České republiky

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

### Projekty Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání

- IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale
- Doktorská škola pro vzdělávání v oblasti matematických metod a nástrojů v HPC
- Vzdělávací tréninkové centrum IT4Innovations
- Technika pro budoucnost

### MEZINÁRODNÍ GRANTY

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

- PRACE-4IP – Partnership for Advanced Computing in Europe, 4. implementační fáze
- SESAME Net – Supercomputing Expertise for Small and Medium Enterprise Network
- ExCAPE – Exascale Compound Activity Prediction Engine
- ANTAREX – AutoTuning and Adaptivity appRoach for Energy efficient eXascale HPC systems
- READEX – Runtime Exploitation of Application Dynamism for Energy-efficient eXascale computing
- LOWBRASYS – A Low Environment Impact Brake System
- EXPERTISE – Experiments and High Performance Computing for Turbine Mechanical Integrity and Structural Dynamics in Europe
- TETRAMAX – Technology Transfer via Multinational Application Experiments
- CloudiFacturing – Cloudification of Production Engineering for Predictive Digital Manufacturing
- PRACE-5IP – Partnership for Advanced Computing in Europe, 5. implementační fáze

#### Projekt Dunajského nadnárodního programu Interreg (fondy EU)

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

#### Projekt Evropské kosmické agentury

- Urban TEP – Urban Thematic Exploitation Platform

#### Ostatní

- CzeBaCCA – Czech-Bavarian Competence Team for Supercomputing Applications
- IPCC - Intel® Parallel Computing Center at IT4Innovations National Supercomputing Center



SUPERPOČÍTAČOVÉ SLUŽBY

## SUPERPOČÍTAČOVÉ SLUŽBY

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

### Technické parametry superpočítačů

	ANSELM	SALOMON
Do provozu uveden	Jaro 2013	Léto 2015, 87. nejvýkonnější superpočítač na světě v žebříčku TOP500 (listopad 2017)
Teoretický výpočetní výkon	94 Tflop/s	2011 Tflop/s
Operační systém	RedHat Linux 64bit 6.x	RedHat Linux 64bit 6.x, CentOS 64bit 6.x
Výpočetní uzly	209	1008
CPU	2x Intel SandyBridge osmijádrový, 2,3 / 2,4 GHz, celkem 3344 jader	2x Intel Haswell dvanáctijádrový, 2,5 GHz, celkem 24192 jader
RAM na výpočetní uzel	64 GB / 96 GB / 512 GB	128 GB / 3,25 TB (výpočetní uzel UV)
GPU akcelerátory	23x NVIDIA Tesla Kepler K20	N/A
MIC akcelerátory	4x Intel Xeon Phi 5110P	864x Intel Xeon Phi 7120P každý 61 jader, celkem 52704 jader
Disková úložiště	320 TiB home (rychlost 2 GB/s), 146 TiB scratch (rychlost 6 GB/s)	500 TiB home (rychlost 6 GB/s), 1638 TiB scratch (rychlost 30 GB/s)
Výpočetní síť	Infiniband QDR 40 Gb/s	Infiniband FDR 56 Gb/s

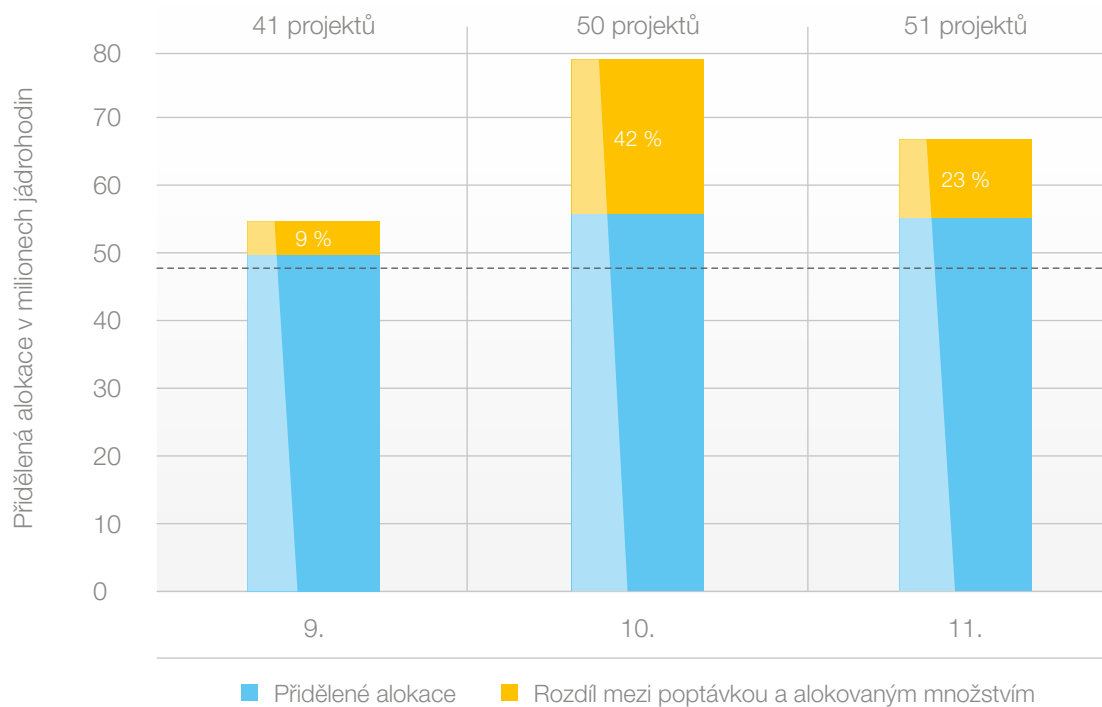
V roce 2017 byl Operačním programem Výzkum, vývoj a vzdělávání schválen k financování projekt IT4Innovations národní superpočítačové centrum – cesta k exascale, jehož cílem je modernizovat stávající superpočítače a rozšířit stávající výzkumné aktivity. Projekt je realizován od září 2017. Téměř 80 % nákladů projektu půjde na modernizaci superpočítačů i s nimi související infrastruktury. Zbylé prostředky budou použity na podporu nových výzkumných směrů v IT4Innovations. Na konci roku 2018 se uživatelé dočkají upgradu superpočítače Anselm a v roce 2020 i superpočítače Salomon.

## Přidělování výpočetního času

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

O výpočetní čas si instituce mohou zažádat v rámci veřejných grantových soutěží. Ty vypisujeme třikrát ročně. V roce 2017 jsme ve prospěch české vědy rozdělili v rámci tří veřejných grantových soutěží mezi 142 výzkumných projektů 160 350 384 jádrohodin.

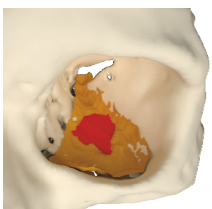
### Veřejné grantové výzvy v roce 2017



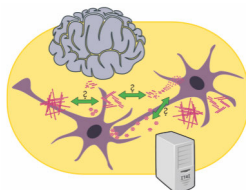
Vyhrazená výpočetní kapacita pro veřejnou grantovou soutěž činí 48 miliónů jádrohodin. V roce 2016 byl převis poptávky nad vyhrazenou kapacitou roven téměř 21 % a v roce 2017 více než 39 %. Tento rozdíl je kompenzován rezervami ředitelství IT4Innovations a zdroji systému Anselm. Alokační komise shledala většinu podaných žádostí v roce 2017 vědecky i technicky velmi dobře připravenými, nicméně z důvodu nedostačující výpočetní kapacity byla nucena výpočetní čas projektům krátit.



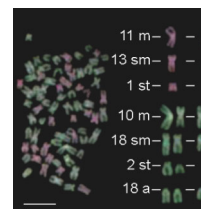
### Výsledky 9. veřejné grantové soutěže v Newsletteru Q1/2017



Fraktura očnice a projekt  
Ing. Petra Strakoše, Ph.D.



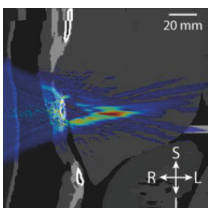
Neurony a projekt  
RNDr. Mgr. Jozefa Hritze, Ph.D.



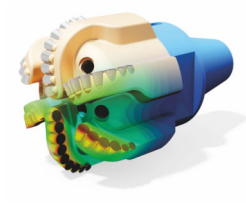
Chromozomy hybrida  
sekavce podunajského  
a písečného (kvůli asexualitě  
se chromozomy nepomíchaly  
a stále odpovídají původním  
rodičovským druhům)  
a projekt Mgr. Karla Janka, Ph.D.



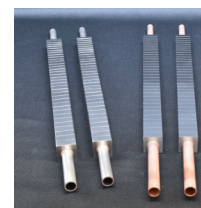
### Výsledky 10. veřejné grantové soutěže v Newsletteru Q2/2017



Sonikace v oblasti jater,  
kde je vidět silná distorze  
způsobená žebry a projekt  
doc. Ing. Jiřího Jaroše, Ph.D.



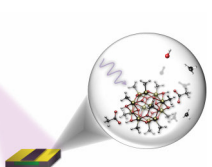
Vrtací hlavice a projekt  
Ing. Tomáše Brzobohatého, Ph.D.



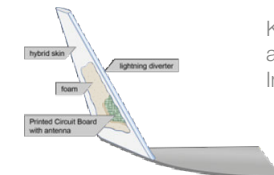
Prototypy aktivně chlazených  
komponent divertoru  
pro tokamak ITER, testované  
v tokamaku WEST a projekt  
Mgr. Michaela Komma, Ph.D.



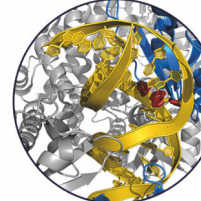
### Výsledky 11. veřejné grantové soutěže v Newsletteru Q4/2017



Jak dokáže cílené  
vysokoenergetické záření změnit  
materiál a projekt  
prof. RNDr. Petra Slavička, Ph.D.

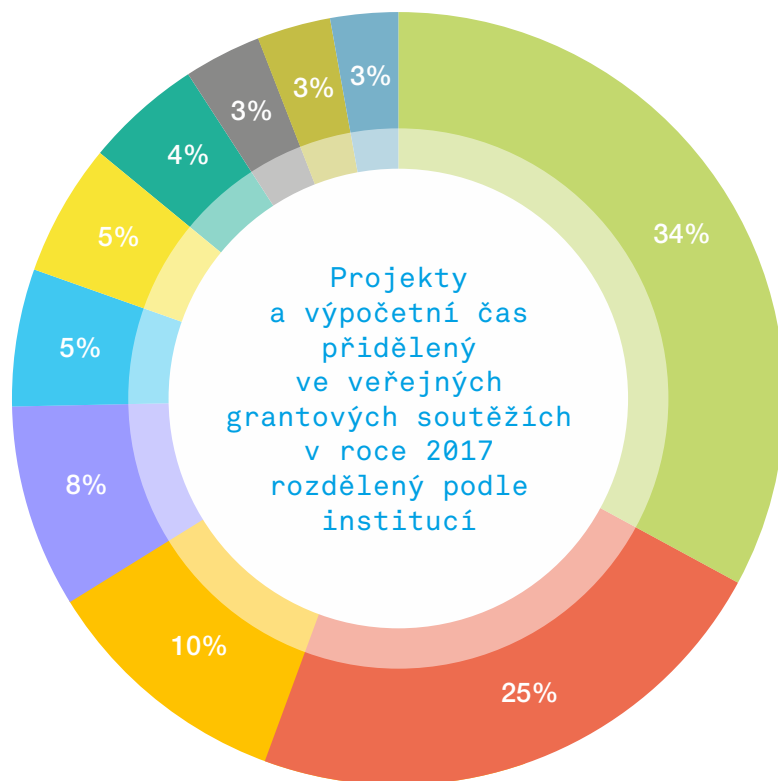


Křídlo letadla s integrovanou  
anténou a projekt  
Ing. Petra Vrchoty, Ph.D.



Oprava poškozeného  
párování bází v DNA a projekt  
RNDr. Petra Kulhánka, Ph.D.





■ VŠB – Technická univerzita Ostrava (37 projektů)  
 ■ Ústavy Akademie věd ČR (28 projektů)  
 ■ Univerzita Karlova (27 projektů)  
 ■ CEITEC (9 projektů)

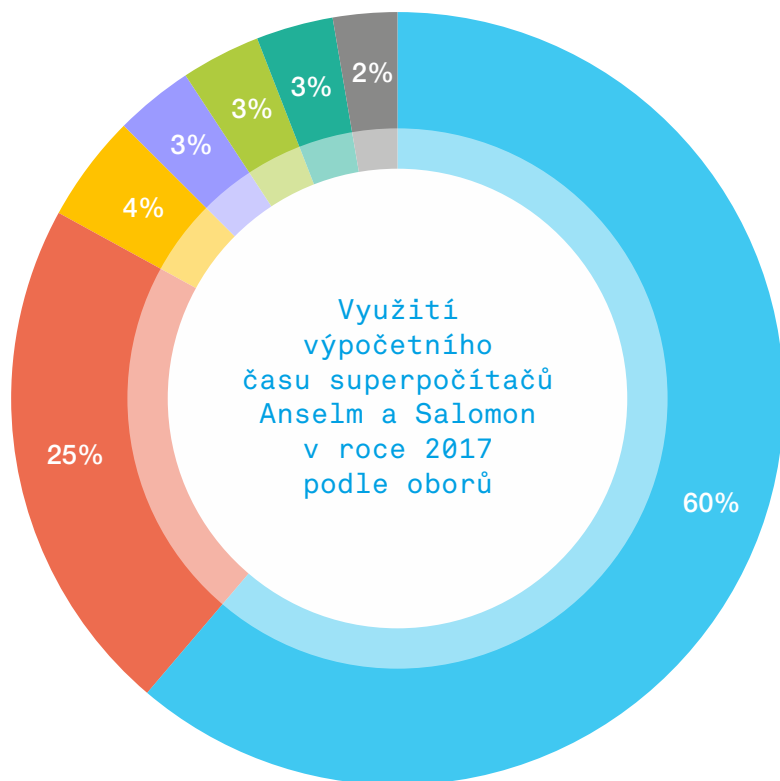
■ VUT v Brně (9 projektů)  
 ■ ČVUT v Praze (8 projektů)  
 ■ Ostravská univerzita (4 projekty)

■ Masarykova univerzita (2 projekty)  
 ■ Vysoká škola chemicko-technologická v Praze (5 projektů)  
 ■ Ostatní (13 projektů)

Celkem 37 projektů žadatelů z Vysoké školy báňské – Technické univerzity Ostrava, a tedy i z vysokoškolského ústavu IT4Innovations, získalo v roce 2017 výpočetní čas v rámci veřejných grantových soutěží. 7 projektů vedli vědci z Fakulty elektrotechniky a informatiky, Fakulty strojní, Fakulty stavební a z Fakulty metalurgie a materiálového inženýrství.

Z externích výzkumných institucí nejvíce využili infrastrukturu IT4Innovations v roce 2017 vědci z Akademie věd České republiky (AV ČR). V roce 2017 byl výpočetní čas přidělen celkem 28 projektům žadatelů z AV ČR. Přes 21 milionů jádrohodin bylo přiděleno 8 projektům Ústavu organické chemie a biochemie. Sedmi projektům žadatelů z Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského bylo alokováno téměř 10 milionů jádrohodin.

První trojku institucí nejvíce využívajících infrastrukturu IT4Innovations uzavírají projekty žadatelů z Univerzity Karlovy, kterým bylo v roce 2017 alokováno přes 16 milionů jádrohodin výpočetní kapacity.



- Materiálové vědy (42 projektů)
- Biovědy (31 projektů)
- Inženýring (21 projektů)
- Výpočetní vědy (14 projektů)
- Aplikovaná matematika (11 projektů)
- Fyzika a astronomie (9 projektů)
- Vědy o Zemi (14 projektů)

Seznamy projektů, kterým byl přidělen výpočetní čas v rámci veřejných grantových soutěží v roce 2017 v pořadí 9., 10. a 11.



Výpočetní čas přiděluje projektům také na základě rozhodnutí ředitelství IT4Innovations. Žádost lze podat kdykoliv. Jedná se o nepravidelné přidělování výpočetního času na základě posouzení managementem IT4Innovations. Ucházet se může jak komerční, tak nekomerční sféra, a to v takových případech, kdy nelze využít veřejné grantové soutěže. Na základě rozhodnutí ředitelství bylo v roce 2017 celkem 18 projektům přiděleno 1 951 600 jadrohodin.

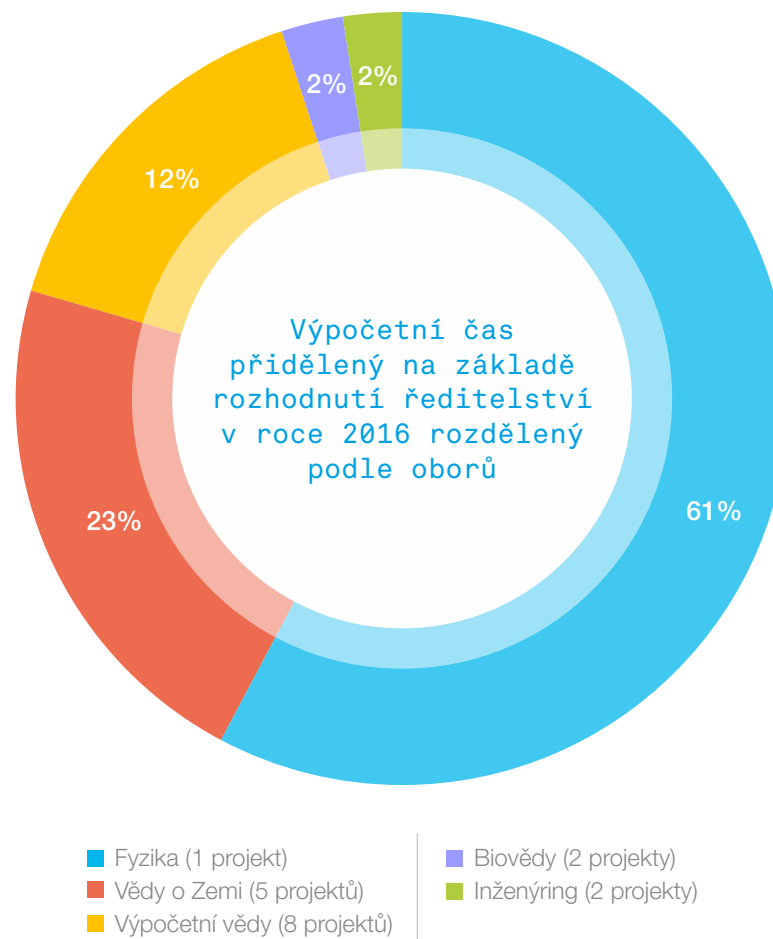
Instituce si mohou výpočetní čas pronajmout. V roce 2017 si výpočetní čas ve výši přibližně 3 milionů jadrohodin pronajaly tři společnosti v celkové finální hodnotě téměř 3 000 000 Kč.

### Uživatelé výpočetních zdrojů

Počet aktivních uživatelů byl v roce 2017 celkem 723.

Naše technická podpora obdržela v roce 2017 celkem 1600 podnětů a žádostí. 1598 jich bylo úspěšně vyřešeno. 2 žádosti byly zamítnuty.

Interní reakční doba (24 h na první odpověď) byla dodržena u 99,87 % podnětů. Interní doba prvního uzavření, která nesmí být větší než 30 dnů, byla dodržena u 99,75 % podnětů.



## Projekty

Rozvoj superpočítačové infrastruktury nám pomáhá zabezpečit několik národních i mezinárodních grantů. Tím nejvýznamnějším je grant Ministerstva školství mládeže a tělovýchovy České republiky (MŠMT) – IT4Innovations národní superpočítačové centrum, který je financován z prostředků určených na podporu velkých infrastruktur pro výzkum, experimentální vývoj a inovace. Významnými mezinárodními projekty, do kterých se díky členství v evropské infrastruktuře PRACE zapojujeme, jsou infrastrukturní projekty PRACE. V roce 2017 se realizoval v pořadí již 5. projekt s názvem PRACE-5IP.

### NÁRODNÍ GRANTY

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

**Identifikátor projektu:** LM2015070

(Projekt velkých infrastruktur pro Výzkum a vývoj pro inovace)

**Řešitel:** Ing. Martin Palkovič, Ph.D.

(od 1. 1. 2018 doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.)

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

IT4Innovations disponuje v současnosti v ČR nejvýkonnějším výpočetním systémem s teoretickým výkonem 2 PFlops/s a menším systémem s teoretickým výpočetním výkonem 94 TFlops/s.

Nezbytnou součástí poskytování výše uvedených výpočetních kapacit je i provoz související infrastruktury (napájení, chlazení, bezpečnost, protipožární ochrana apod.), jakož i uživatelská podpora a správa výpočetních i infrastrukturních systémů. Součástí superpočítačové infrastruktury jsou i výzkumné aktivity, které zefektivňují její provoz a rozšiřují možnosti jejího využití uživateli. K efektivnímu využití

infrastruktury rovněž přispívají vzdělávací a školicí aktivity, které jsou otevřené pro širokou vědeckou komunitu ČR.

<http://www.msmt.cz/vyzkum-a-vyvoj-2/cestovni-mapa-cr-velkych-infrastruktur-pro-vyzkum>

### OPERAČNÍ PROGRAM VÝZKUM, VÝVOJ A VZDĚLÁVÁNÍ

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

**Identifikátor projektu:** EF16\_013/0001791

(výzva č. 02\_16\_013 Výzkumné infrastruktury)

**Řešitel:** Mgr. Branislav Jansík, Ph.D.

Hlavním cílem projektu je upgrade a modernizace výzkumné infrastruktury IT4Innovations tak, aby byla minimálně udržena stávající technologická úroveň HPC v ČR v porovnání s rozvinutými, zejména evropskými zeměmi. Záměrem aktivit tohoto projektu je modernizovat vybavení a stávající superpočítač Anselm doplnit rozsahem a určením obdobným moderním superpočítačem v roce 2018. V roce 2020 bude upgradován i superpočítač Salomon. V rámci projektu bude rovněž podpořen kvalitní výzkum široké akademické komunity České republiky a rozšíření stávajících výzkumných aktivit v IT4Innovations v oblasti

modelování fotonických a spinfotonických struktur, návrhu nových progresivních materiálů na základě výpočtu elektronové struktury a analýzy biologických obrazů s využitím HPC. Vlastní výzkum je pro infrastrukturu IT4Innovations důležitým zdrojem expertízy v oblasti HPC, která se promítá do služeb, jež infrastruktura poskytuje svým uživatelům.

## MEZINÁRODNÍ GRANTY

**PRACE-4IP** – Partnership for Advanced Computing in Europe,  
4. implementační fáze (2015–2017)

**Identifikátor projektu:** 653838

(výzva H2020-EINFRA-2014-2)

**Řešitel:** doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

<http://www.prace-ri.eu/prace-4ip/>

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

**Identifikátor projektu:** 730913

(výzva H2020-EINFRA-2016-1)

**Řešitel:** doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

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

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

## CzeBaCCA – Czech-Bavarian Competence Team for Supercomputing Applications

CzeBaCCA si dal za cíl vytvořit Česko-bavorský kompetenční tým pro superpočítačové aplikace. Tento projekt, zahájený k 1. lednu 2016 a financovaný zejména německým ministerstvem pro vzdělávání a výzkum, reagoval na rostoucí složitost moderních superpočítačů a nezbytnost účinné podpory specialistů v rozličných aplikačních oblastech při jejich využívání. Stavěl na nadstandardní spolupráci mezi IT4Innovations národním superpočítačovým centrem, bavorským Leibniz Supercomputing Centre (LRZ) a Technickou univerzitou v Mnichově.

V roce 2017 byly v rámci CzeBaCCA zorganizovány následující semináře, které pomohly k výměně zkušeností a poznatků v dané oblasti:

v Ostravě:

- PRACE PATC Course: Intel MIC Programming Workshop
- Scientific Workshop: High performance computing in atmosphere modelling and air related environmental hazards

v Garchingu:

- PRACE PATC Course: Intel MIC Programming Workshop
- Scientific Workshop: HPC for natural hazard assessment and disaster mitigation

Ačkoliv projekt CzeBaCCA skončil v červenci roku 2017, spolupráce v duchu posledního z výše uvedených cílů pokračuje v různých

formách. V edukační oblasti kupříkladu IT4Innovations plánuje s německými partnery na duben v roce 2018 celotýdenní VI-HPS Tuning Workshop, významnou akci věnovanou praktické optimalizaci uživatelských kódů.

<https://www.lrz.de/forschung/projekte/forschung-hpc/CzeBaCCA/>

#### **SESAME - NET** – Supercomputing Expertise for Small and Medium Enterprise Network (2015–2017)

**Identifikátor projektu:** 654416 (výzva H2020-EINFRA-2014-2)

**Řešitel:** Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.

Tento projekt měl za cíl vybudovat síť center, jež budou společnými silami podporovat malé a střední průmyslové podniky v používání HPC pro svůj rozvoj. V rámci projektu tak byly připraveny materiály, které jsou volně dostupné všem zájemcům.

<https://sesamenet.eu>

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

**Identifikátor projektu:** DTP1-1-260-1.1

(INTERREG/Danube region programme, 1. výzva)

**Řešitel:** Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.

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

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

# Multinode Approach for Routing Data Preparation

Jiří Ševčík, Vit Prošek, Martin Golasowski  
IT4Innovations, VSB-TU Ostrava, Czech Republic

16

**Goal**  
The goal is to obtain Open Street Map data containing large data sets representing road types of transport communications. The data is afterwards used for several cases in custom-navigation systems, flood prediction, geo servers visualization.

**Problems**  
Available raw data contains a large amount of information which have those significant problems:  
- the data structure is non-standardized but the content is often unstructured  
- data is sometimes redundant  
- datasets also contains a lot of information which are useless for our purposes  
- the amount of data is very big to be processed in real-time on a small number of computers  
- the size of available data is high

**Solution**  
Exploitation of parallel computing for results in parallelization is decided here. The main parts - preprocessing and transformation which depends on required results. In described case the output results is 10-85 percent of information only. The developed navigation system requires the HDFS file could only stand for one region or also sets of areas of lanes. Data size reduction can be done by chunking data and compression.

**Preprocess**  
Preprocessing and transformation is a process chain under a specific workflow. In first step we obtain raw data from all countries from open source project data with the guarantee of quality. This data is then decomposed and subsequently filtered out or kept for following processing according to an importance from our point of view. Although we have selected only data the very next step is preprocessing and can take advantage of a routing algorithm. The final result data and information is stored both in relational databases for later comprehensive and HDFS format for its indexing and access. The result can be seen as a connected graph which allows us to find routing paths in quite efficient way with help of different algorithms taking advantage of HDFS infrastructure.

**Improve**  
Data compression and chunking is used to save our partial data. It helps us to handle data which is not needed in our current processing. The data is stored in HDFS format for its indexing and access. The result can be seen as a connected graph which allows us to find routing paths in quite efficient way with help of different algorithms taking advantage of HDFS infrastructure.

**Future**  
Data compression and chunking is used to save our partial data. It helps us to handle data which is not needed in our current processing. The data is stored in HDFS format for its indexing and access. The result can be seen as a connected graph which allows us to find routing paths in quite efficient way with help of different algorithms taking advantage of HDFS infrastructure.

**Routing Data Preparation Workflow**

**ANTARIS**

VÝZKUM A VÝVOJ

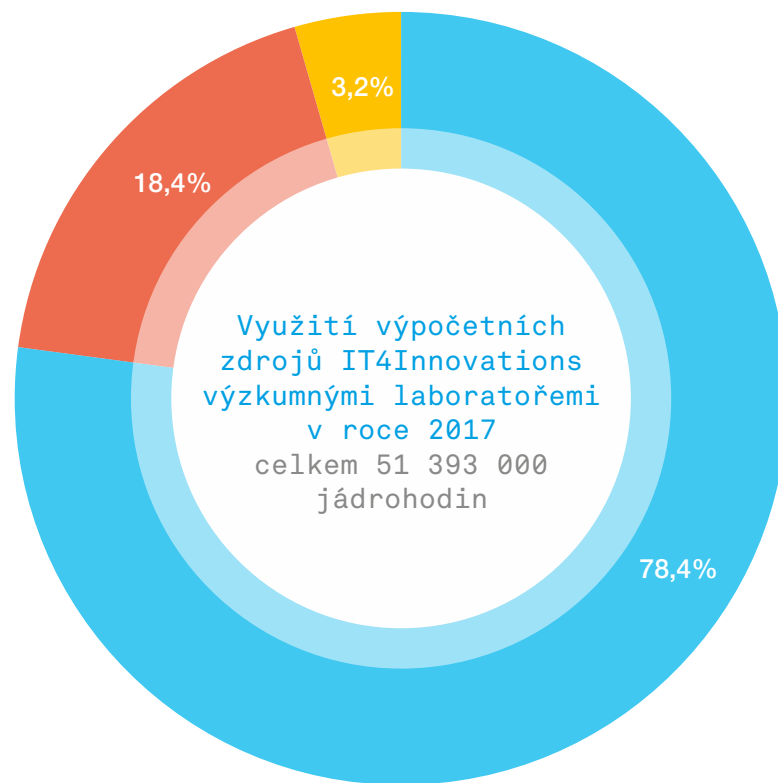


## VÝZKUM A VÝVOJ

Stěžejními výzkumnými tématy IT4Innovations jsou zpracování a analýza rozsáhlých dat, vývoj paralelních škálovatelných algoritmů, řešení náročných inženýrských úloh, modelování pro nanotechnologie a výzkum superpočítačové infrastruktury. Výzkum v těchto oblastech je soustředěn do pěti laboratoří. Laboratoř vývoje paralelních algoritmů vyvíjí vlastní škálovatelné algoritmy a softwarové knihovny, které jsou využívány pro spolupráci s akademickými i průmyslovými partnery. Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace se věnuje zpracování a analýze rozsáhlých dat, které jsou součástí pokročilých datově orientovaných počítačových simulací. Laboratoř modelování pro nanotechnologie se zaměřuje zejména na návrh nových materiálů pomocí výpočtů elektronové struktury. Laboratoř pro big data analýzy se zabývá vyhledáváním informací ukrytých ve velmi rozsáhlých souborech dat. Od ledna 2017 jsme nově ustanovili také Laboratoř pro výzkum infrastruktury. Laboratoř posílila náš vlastní výzkum superpočítačové infrastruktury a je zaměřena na vývoj metod týkajících se inovativního využití, provozu a monitorování výpočetní infrastruktury.

Laboratoř	Zkratka	Vedoucí laboratoře	Úvazky v FTE
Laboratoř vývoje paralelních algoritmů	PAR	prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D. (od 1. 2. 2018 Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.)	37,58
Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace	ADAS	Ing. Jan Martinovič, Ph.D.	31,10
Laboratoř modelování pro nanotechnologie	NANO	prof. Ing. Jaromír Pištora, CSc.	9,60
Laboratoř pro big data analýzy	BIGDATA	prof. Ing. Miroslav Vozňák, Ph.D.	5,11
Laboratoř pro výzkum infrastruktury	INFRA	Mgr. Branislav Janský, Ph.D. (od 1. 2. 2018 Ing. Lubomír Říha, Ph.D.)	7,26





V roce 2017 bylo projektům výzkumných laboratoř IT4Innovations přiděleno v rámci veřejných grantových soutěží celkem 51 393 000 jádrohodin, což je 32 % celkového alokovaného množství.

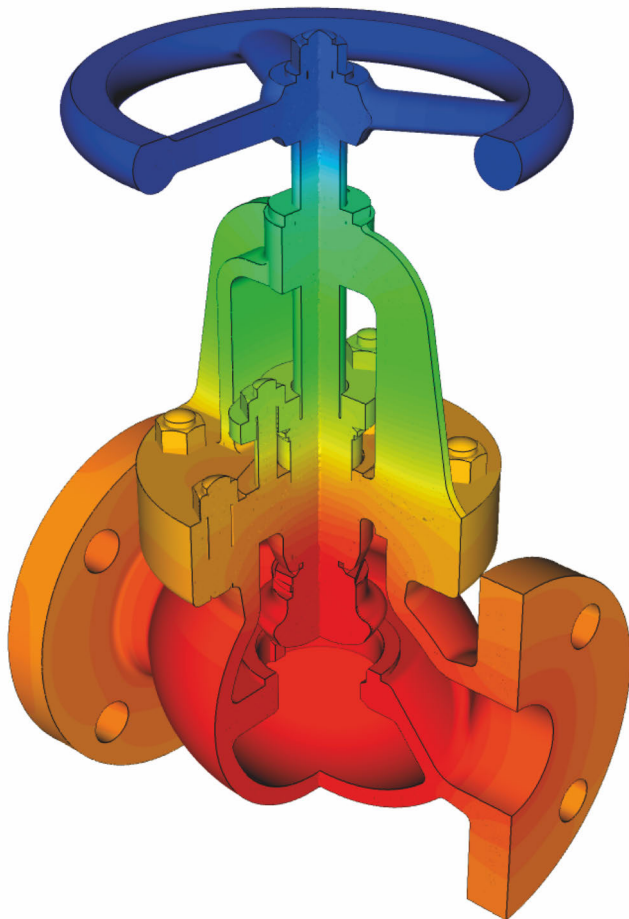
- Laboratoř modelování pro nanotechnologie
- Laboratoř vývoje paralelních algoritmů
- Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace

### Významné události

- M. Jaroš získal na Mezinárodní Konferenci o Počítačové Grafice a Digitálním Zpracování Obrazu (CGDIP 2017) ocenění za nejlepší studentskou prezentaci výzkumu.
- Posterový příspěvek „BEM4I: A massively parallel boundary element solver“ J. Zapletala, M. Kravčenko, M. Merty a L. Malého se na konferenci SC17 dostal do první devítky nominovaných na cenu Nejlepší poster. (Na posterovou sekci konference bylo zasláno dohromady 169 příspěvků a k prezentaci jich bylo přijato 98.)
- Řešič ESPRESO pro řešení problémů strukturální mechaniky byl nominován na cenu Evropské komise Innovation Radar Prize 2017.
- J. Zapletal, výzkumný pracovník v IT4Innovations a absolvent Fakulty elektrotechniky a informatiky Vysoké školy báňské – Technické univerzity Ostrava, vyhrál v roce 2017 první cenu Josepha Fouriera za nejlepší výzkum v rámci doktorského studia z oblasti informatiky a výpočetních věd a také první cenu prof. Babušky v oboru počítačových věd.

### Významné publikace

- R. Halama, A. Markopoulos, R. Jančo, M. Bartecký: Implementation of MAKOC Cyclic Plasticity Model with Memory. *Advances in Engineering Software* (2017). DOI: 10.1016/j.advengsoft.2016.10.009. IF=3; Q1.
- M. Merta, L. Říha, O. Meca, A. Markopoulos, T. Brzobohatý, T. Kozubek, V. Vondrák: Intel Xeon Phi acceleration of hybrid total FETI solver. *Advances in Engineering Software* (2017). DOI: 10.1016/j.advengsoft.2017.05.001. IF=3; Q1.
- I. Janeček, P. Naar, M. Stachoň, F. X. Gadéa, R. Kalus: Fragmentation of KrN clusters after electron-impact ionization I: Short-time dynamics and multiscale treatment. *Physical Chemistry Chemical Physics* (2017). DOI: 10.1039/C6CP07479K. IF=4,449; Q1.
- I. Janeček, M. Stachoň, F. X. Gadéa, R. Kalus: Fragmentation of KrN clusters after electron-impact ionization II: Long-time dynamics of Kr7+ evolution and the role of initial electronic excitation. *Physical Chemistry Chemical Physics* (2017). DOI: 10.1039/C7CP03940A. IF=4,449; Q1.
- J. Zapoměl, P. Ferfecki, J. Kozánek: Modelling of magnetorheological squeeze film dampers for vibration suppression of rigid rotors. *International Journal of Mechanical Sciences* (2017). DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2016.11.009. IF=2,884; Q1.



Teplotní výpočet ventilu provedený  
v open source balíku ESPRESO

### Významné události

- Platforma HyperLoom byla uvolněna jako open source software pod modifikovanou BSD licenci. <http://hyperloom.eu>  
Poster s názvem „How To Do Machine Learning on Big Clusters“ věnovaný HyperLoom byl na mezinárodní konferenci SC17 vybrán mezi 9 nejlepších posterů.
- Byla úspěšně obhájena zpráva projektu Urban Thematic Exploitation Platform smluvního výzkumu financovaného ESA. V přípravě je navazující projekt pro další financování platformy za účelem zajištění její udržitelnosti.
- Byl vytvořen a zveřejněn software určený pro tvorbu RQA analýzy a predikci časových řad založený na teorii chaosu (autoři T. Martinovič a G. Zitzlsberger). [https://code.it4i.cz/ADAS/RQA\\_HPC](https://code.it4i.cz/ADAS/RQA_HPC)
- Byl vytvořen systém IT4S1 pro automatizované vyhodnocení pohybů terénu a infrastruktury družicovým systémem Sentinel-1 metodou radarové interferometrie (autor Milan Lazecký).
- Grakova E., J. Hanzelka a J. Křenek spolupracovali s firmou OZO Ostrava na vývoji softwaru GAIA (<https://gaia.it4i.cz/>), který umožňuje online sledovat naplněnost odpadových kontejnerů ve městech pomocí osazených senzorů. Na základě těchto informací pomocí metaheuristického (Ant Colony Optimization) algoritmu napojeného na uživatelské rozhraní je umožněno denní plánování svozových tras.

### Významné publikace

- Režnar, T., Martinovič, J., Slaninová, K., Grakova, E., Vondrák, V. Probabilistic time-dependent vehicle routing problem. Central European Journal of Operations Research (2017). DOI: 10.1007/s10100-016-0459-2. IF=0,659; Q4.
- Drwięga, T., Lampart, M., Oprocha, P. Limit Sets, Attractors and Chaos. Qualitative Theory of Dynamical Systems (2017). DOI: 10.1007/s12346-015-0163-y. IF=0,825; Q2.
- Svoboda, Z., Bizovska, L., Janura, M., Kubořová, E., Janurová, K., Vuillerme, N. Variability of spatial temporal gait parameters and center of pressure displacements during gait in elderly fallers and nonfallers: A 6-month prospective study. PLoS ONE (2017). DOI: 10.1371/journal.pone.0171997. IF=2,806; Q1.
- Theuer, M., Vavřík, R., Vondrák, V., Kuchař, S., Šír, B., Portero, A.: Efficient methods of automatic calibration for rainfall-runoff modelling in the Floreon+ system. Neural Network World (2017). DOI: 10.14311/NNW.2017.27.022. IF=0,394; Q4.



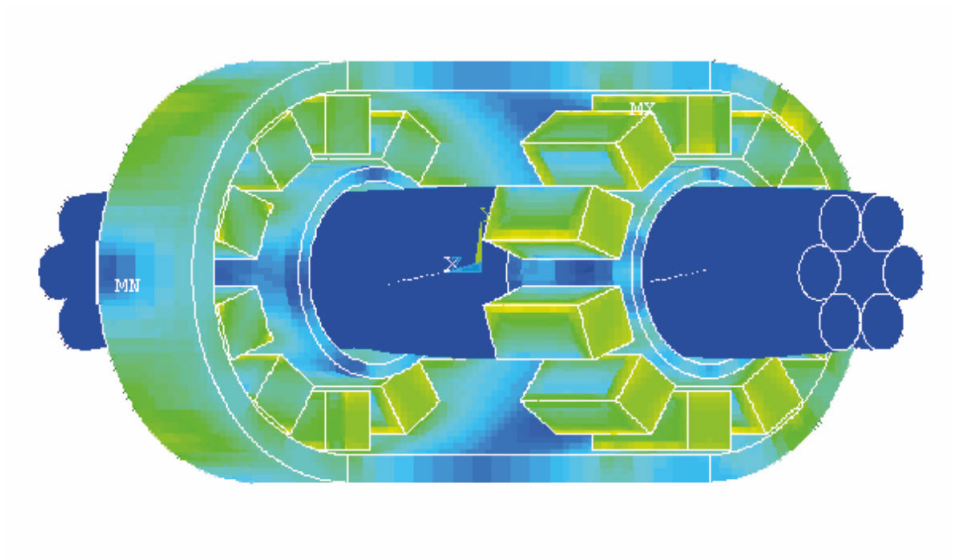
Laboratoř pro náročné datové analýzy a simulace poskytuje podporu pro nasazování nových nástrojů umožňujících efektivní a snadné použití infrastruktury IT4Innovations v úlohách využívajících strojové učení. Aktivně se podílí na vývoji nových aplikací strojového učení umožňujících modelování komplexních systémů pomocí regresních, klasifikačních a shlukovacích metod. Dále také vyvíjí nástroje pro verifikaci přesnosti těchto modelů. Ve spolupráci s farmaceutickým průmyslem vyvíjí prediktivní modely používané pro vývoj nových léčiv pomocí hlubokého učení, ale i tradičních statistických metod.

### Významné události

- Dne 24. 11. 2017 úspěšně obhájila disertační práci před česko-francouzskou komisí Ing. Zuzana Mrázková.
- V červnu 2017 úspěšně obhájil disertační práci před kanadsko-českou komisí Ing. Jan Chochol.

### Významné publikace

- Tian H., Z. W. Seh, K. Yan, Z. Fu, P. Tang, Y. Lu, R. Zhang, D. Legut, Y. Cui, Q. Zhang: Theoretical Investigation of Two-Dimensional Layered Materials as Protective Films for Lithium and Sodium Metal Anodes. *Advanced Energy Materials* (2017). DOI: 10.1002/aenm.201602528. IF=16,5; Q1.
- Zhang H., Z. Fu, R. Zhang, Q. Zhang, H. Tian, D. Legut, T. C. Germann, Y. Guo, S. Due, and J. S. Francisco: Designing flexible 2D transition metal carbides with strain-controllable lithium storage. *Proceedings of the National Academy of Sciences* (2017). DOI: 10.1073/pnas.1717219115. IF=10,4; Q1.
- Ma Y., Y. Alattar, J. Zhou, M. Eldlio, H. Maeda, J. Pištora, M. Čada: Semiconductor-based plasmonic interferometers for ultrasensitive sensing in a terahertz regime. *Optics Letters* (2017). DOI: 10.1364/OL.42.002338. IF = 3,416; Q1.
- Mrázková Z., M. Foldyna, S. Misra, M. Al-Ghazaiwat, K. Postava, J. Pištora, P. R. I.Cabarrocas: In-situ Mueller matrix ellipsometry of silicon nanowires grown by plasma-enhanced vapor-liquid-solid method for radial junction solar cells. *Applied Surface Science* (2017). DOI: 10.1016/j.apsusc.2016.12.199. IF = 3,387; Q1.
- Chochol J., K. Postava, M. Čada, J. Pištora: Experimental demonstration of magneto-plasmon polariton at InSb(InAs)/dielectric interface for terahertz sensor application. *Scientific Reports* (2017). DOI: 10.1038/s41598-017-13394-0. IF = 4,259; Q1.



Magnetizační hlava defektoskopu – distribuce permanentních magnetů

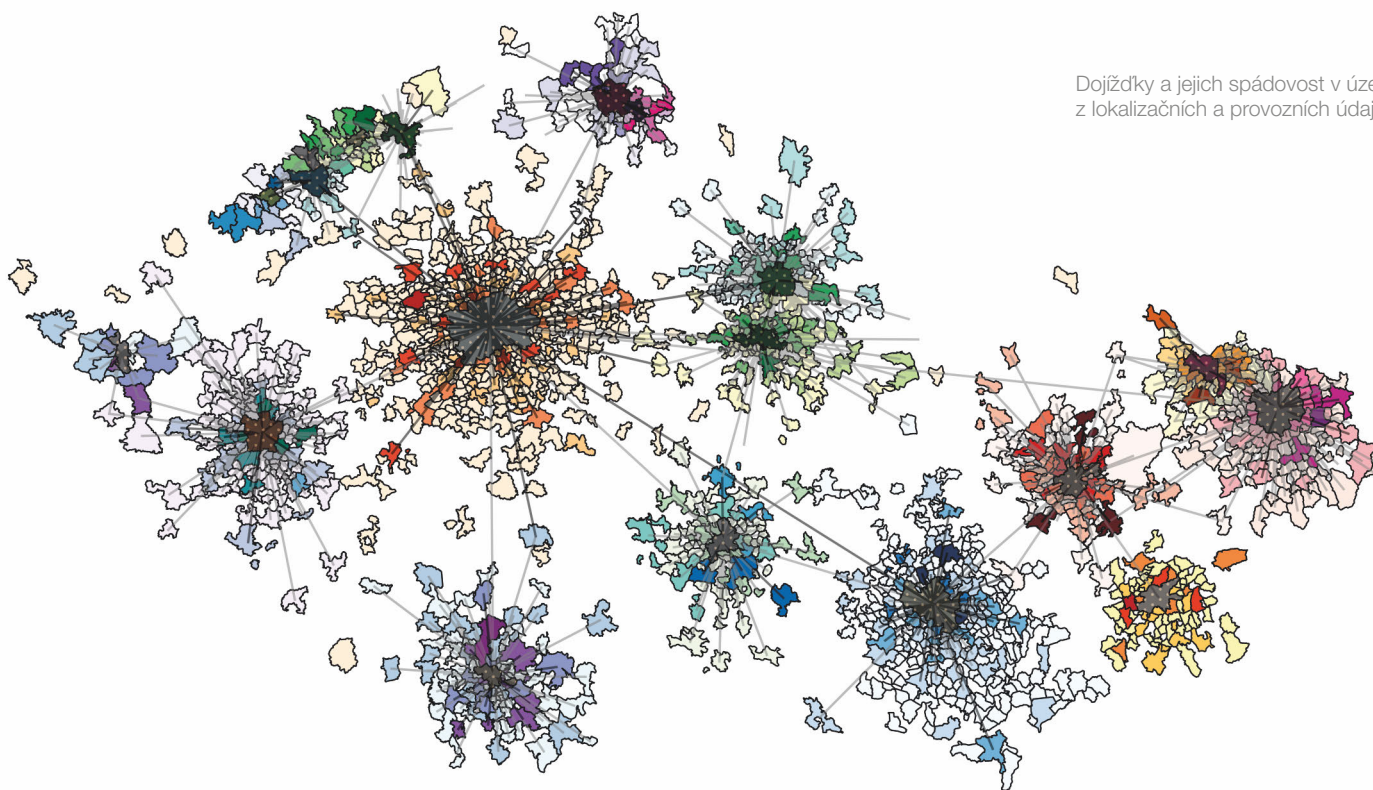
### Významné události

- Ing. Martin Hasal, Ph.D. obsadil druhé místo v soutěži o Cenu prof. Babušky, kterou organizuje Česká společnost pro mechaniku a Jednota českých matematiků a fyziků již od roku 1994.
- V roce 2017 započal prestižní projekt „Umělá inteligence a uvažování“ v rámci výzvy OP VVV Excelentní výzkumné týmy, kde jsme partnerem Českého vysokého učení technického v Praze a Západočeské univerzity v Plzni.
- Úspěšně byl dokončen projekt TAČR TF01000091 s názvem „Bezpečnost mobilních zařízení a komunikace“, na kterém pracovala část zaměstnanců výzkumné laboratoře.

### Významné publikace

- Venskus J., Treigys P., Bernatavičienė J., Medvedev V., Vozňák M., Kurmis M., Bulbenkiene, V. Integration of a Self-Organizing Map and a Virtual Pheromone for Real-Time Abnormal Movement Detection in Marine Traffic. *Informatica* (2017). DOI: 10.15388/Informatica.2017.133. IF=1,056; Q2
- Továrek J., Partila P. Speaker identification for the improvement of the security communication between law enforcement units. *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering* (2017). DOI: 10.1117/12.2261796.





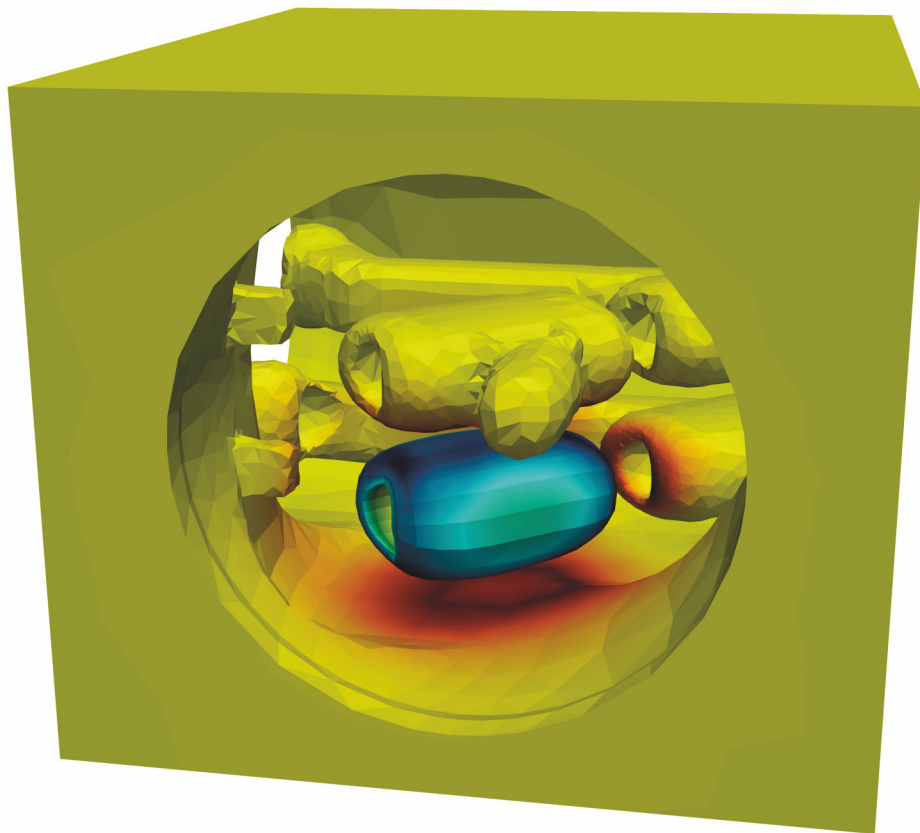
Dojíždky a jejich spádovost v území, zpracováno z lokalizačních a provozních údajů mobilní sítě

### Významné události

- Byl vydán nový balík PermonQP a zveřejněn byl balík PermonSVM. <http://permon.it4i.cz>
- V září 2017 byly zveřejněny softwarové balíky PermonSVM a PermonQP na webových stránkách PETSc. <https://www.mcs.anl.gov/petsc/>
- Poster PERMON autorů M. Čermáka, V. Haply, D. Horáka, J. Kružíka, M. Pechy, R. Sojky, J. Tomčaly získal ocenění Nejlepší poster na konferenci HPCSE 2017.
- J. Kružík byl vybrán a absolvoval prestižní letní školu Argonne Training Program on Extreme-Scale Computing (30. 7. – 11. 8. 2017, St. Charles, Illinois, USA).

### Významné publikace

- Čermák M., V. Hapla, J. Kružík, A. Markopoulos, A. Vašatová: Comparison of different FETI preconditioners for elastoplasticity. *Computers & Mathematics with Applications* (2017). DOI: 10.1016/j.camwa.2017.01.003. IF 1,531; Q1.
- Sysala S., M. Čermák, T. Ligurský: Subdifferential-based implicit return-mapping operators in Mohr-Coulomb plasticity. *ZAMM Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* (2017). DOI: 10.1002/zamm.201600215. IF 1,332; Q2.
- Horák D., V. Hapla, J. Kružík, R. Sojka, M. Čermák, J. Tomčala, M. Pecha, Z. Dostál: A note on massively parallel implementation of feti for the solution of contact problems. *Advances in Electrical and Electronic Engineering* (2017). DOI: 10.15598/aeer.v15i2.2322.
- Horák D., Z. Dostál, V. Hapla, J. Kružík, R. Sojka, M. Čermák: Projector-less TFETI for contact problems: Preliminary results. *Civil-Comp Proceedings 111* (2017). DOI: 10.4203/ccp.111.8.



Elektrická intenzita na elektrodě optimalizované multiresolučním přiblížením založeným na subdivizovaných plochách a metodě hraničních prvků.  
(V rámci restrukturalizace v IT4Innovations přešel vývojový tým knihovny BEM4I na začátku roku 2018 z Laboratoře vývoje paralelních algoritmů do Laboratoře pro výzkum infrastruktury.)

## Projekty

### NÁRODNÍ GRANTY

#### IT4Innovations excellence in science (2016–2020)

Identifikátor projektu: LQ1602

Řešitel do roku 2017: Ing. Martin Palkovič, Ph.D.

(od 1. 1. 2018 prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.)

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

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

Identifikátor projektu: 8X17046

Řešitel: Ing. Dominik Legut, Ph.D.

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

### DOTACE MŠMT NA SPECIFICKÝ VYSOKOŠKOLSKÝ VÝZKUM

#### Vytvoření renderovací služby

Identifikátor projektu: SP2017/107

Hlavní řešitel: Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.

Cílem tohoto projektu bylo rozšířit existující možnosti velké infrastruktury IT4Innovations o možnost poskytování renderingu jako služby pro externí uživatele této infrastruktury. Projekt proběhl ve spolupráci s neziskovou organizací Blender Institute, Amsterdam.

#### Terahertzové fotonické struktury s využitím pokročilých materiálů

Identifikátor projektu: SP2017/154

Hlavní řešitel: Ing. Martin Mičica

V tomto projektu se zkoumalo využití pokročilých materiálů – molekulárních krystalů, molekulárních plynů, hexaferritů, III-V polovodičů a termoplastů pro konstrukci zdrojů, izolátorů, senzorů a jiných fotonických struktur pro terahertzové aplikace.

### **Masivně paralelní modelování silně nelineárních procesů v mechanice**

**Identifikátor projektu:** SP2017/156

**Hlavní řešitel:** prof. Ing. Petr Horyl, Csc., dr.h.c.

Všechna témata zpracovaná v projektu řešily aktuální a velmi náročné, silně nelineární problémy inženýrské praxe. Jednalo se o zvýšení užité hodnoty buď nových anebo inovovaných výrobků. Nově navržené řešení je založeno na jemnějších diskretizacích řešených struktur pro zajištění spolehlivějších výsledků.

### **Efektivní implementace metody hraničních prvků III**

**Identifikátor projektu:** SP2017/165

**Hlavní řešitel:** Ing. Michal Merta, Ph.D.

Projekt navazoval na projekty SGS SP2016/113 a SP2015/160 a jeho cílem bylo dále rozvíjet existující knihovnu paralelních řešičů založených na metodě hraničních prvků BEM4I.

### **Numerické metody pro modelování environmentálních procesů**

**Identifikátor projektu:** SP2017/167

**Hlavní řešitel:** Ing. Tomáš Brzobohatý, Ph.D.

Projekt si klád za cíl propojit několik vědních oborů majících přímou návaznost na numerické řešení úloh spojených s predikcí rizik, jako jsou úniky nebezpečných látek, šíření znečištění v ovzduší nebo ohrožení obyvatelstva vlivem přírodních jevů typu povodní.

### **Modelování srážkových procesů v nízkoteplotním plazmatu**

**Identifikátor projektu:** SP2017/168

**Hlavní řešitel:** doc. RNDr. René Kalus, Ph.D.

Projekt byl zaměřen na podporu studentských dizertačních projektů z oblasti numerického modelování elementárních srážkových procesů v chladném plazmatu na bázi vzácných plynů.

### **PERMON toolbox development III**

**Identifikátor projektu:** SP2017/169

**Hlavní řešitel:** doc. Ing. David Horák, Ph.D.

Náplní projektu byl další vývoj sady nástrojů PERMON, která využívá nejnovější teoretické poznatky v problematice diskretizačních technik, algoritmů kvadratického programování a metod rozložení oblastí.

### **Optimalizace algoritmů strojového učení pro platformu HPC**

**Identifikátor projektu:** SP2017/177

**Hlavní řešitel:** Ing. Kateřina Slaninová, Ph.D.

Projekt byl zaměřen na využití algoritmů neřízeného strojového učení pro předzpracování dat pro algoritmy řízeného strojového učení. Takto předzpracovaná data mohou vést k rychlejší konvergenci daných metod případně ke zpřesnění jejich výsledku.

### Řešení grafových úloh na časoprostorových grafech zatížených neurčitostí pomocí HPC

**Identifikátor projektu:** SP2017/182

**Hlavní řešitel:** Ing. Jan Martinovič, Ph.D.

Cílem projektu bylo vytvoření algoritmů umožňujících efektivní výpočty daných charakteristik rozsáhlých dynamických grafů zatížených neurčitostí a analýza těchto algoritmů pomocí metod dynamických systémů.

### Teplotní roztažnost slitin Fe-Ti

**Identifikátor projektu:** SP2017/184

**Hlavní řešitel:** Ing. Dominik Legut, Ph.D.

Studium mechanismu zodpovědného za redukci či úplné potlačení teplotní roztažnosti dvoufázových titanových slitin vykazujících magnetostrikci bylo v rámci projektu provedeno jak teoreticky, tak experimentálně. Hlavní cíl projektu spočíval v odhalení nejlepšího možného postupu pro potlačení výše zmíněných jevů.

### PROJEKTY PODPOŘENÉ GRANTOVOU AGENTUROU ČESKÉ REPUBLIKY

#### Nové nelineární a magneto-optické jevy v periodických strukturách (2015–2017)

**Identifikátor projektu:** GA15-08971S

**Hlavní řešitel:** doc. Dr. Mgr. Kamil Postava

V rámci projektu byla studována generace kvantově korelovaných fotonových párů v moderních fotonických strukturách, zejména v nelineárních tenkovrstvých metalo-dielektrických strukturách, magneto-optických periodických strukturách a periodicky-pólovaných strukturách.

#### Účinné metody odhadu životnosti pro obecné víceosé namáhání (2015–2017)

**Identifikátor projektu:** GA15-18274S

**Hlavní řešitel:** doc. Ing. David Horák, Ph.D.

Projekt se zaměřil na metody predikce únavové životnosti za víceosého zatěžování v oblasti nízkocyklové únavy, tj. v případech, kdy nelze zanedbat plasticitu. Aby bylo kvalitního výsledku složitých výpočtů dosaženo v přijatelném čase a ponechán adekvátní čas na jejich vyhodnocení, bylo jádro únavového řešiče PragTic používaného na všechny únavové analýzy převedeno na plně paralelní škálovatelnou aplikaci.

### **Nové materiály paliv pro jaderné reaktory IVté generace (2017–2019)**

**Identifikátor projektu:** GA17-27790S

**Hlavní řešitel:** Ing. Dominik Legut, Ph.D.

Projekt spočívá v pochopení mechanických a termodynamických vlastností sloučenin jaderných paliv IV. generace reaktorů, sloučenin obsahujících f-elektrony, jmenovitě karbidy a tetrafluoridy uranu, thória a plutonia. Na základě výpočtů elektronové struktury, vycházejících z prvních principů, bude u (U/Th/Pu)-C systémů určeno jejich magnetické, elastické, dynamické (fonony) a termodynamické chování. Hlavním cílem je vysvětlení teplotní roztažnosti aktinidových karbidů, a zejména negativní teplotní roztažnosti pozorované u UC<sub>2</sub>, na atomové úrovni.

### **PROJEKTY PODPOŘENÉ TECHNOLOGICKOU AGENTUROU ČESKÉ REPUBLIKY**

#### **Centrum pro rozvoj dopravních systémů (2017–2019)**

**Identifikátor projektu:** TE01020155

(projekt programu Centra kompetence)

**Řešitel:** prof. Ing. Ivo Vondrák, Csc.

Centrum pro rozvoj dopravních systémů vytváří strategické partnerství spolupracujících výzkumných institucí a podniků určujících směr rozvoje inteligentní mobility v České republice. Společně jsme přijali výzvu v podobě hledání rovnováhy mezi potřebou pohybu moderní společnosti a negativními dopady mobility. Spoléháme na zkušené

týmy, perfektní znalost prostředí, ochotu spolupracovat a sdílet rizika spojená s nastavováním trendů oblasti řízení mobility odpovídající potřebám 21. století.

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

**Identifikátor projektu:** TH02030840 (projekt Programu na podporu aplikovaného výzkumu a experimentálního vývoje EPSILON)

**Hlavní řešitel:** Ing. Michal Podhorányi, Ph.D.

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

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

**Identifikátor projektu:** TE02000058

(projekt programu Centra kompetence)

**Řešitel do roku 2017:** Ing. Martin Palkovič, Ph.D.

(od 1. 1. 2018 Mgr. Branislav Jansík, Ph.D.)

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

## PROJEKT OPERAČNÍHO PROGRAMU VÝZKUM, VÝVOJ A VZDĚLÁVÁNÍ

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

**Identifikátor projektu:** EF16\_013/0001791

**Řešitel:** Mgr. Branislav Janský, Ph.D.

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

## MEZINÁRODNÍ GRANTY

### **ANTAREX – AutoTuning and Adaptivity appRoach for Energy efficient eXascale HPC systems (2015–2018)**

**Identifikátor projektu:** 671623

(výzva H2020-FETHPC-2014)

**Řešitel:** Ing. Jan Martinovič, Ph.D.

Hlavním cílem projektu je navrhnout pomocí doménově specifického jazyka samoadaptivní přístup pro aplikace spouštěné na superpočítačích. Řízení jejich běhu a zavedení samoregulace umožní dosáhnout energeticky úsporných heterogenních HPC systémů na exascale úrovni.  
[www.antarex-project.eu](http://www.antarex-project.eu)

### **ExCAPE – Exascale Compound Activity Prediction Engine (2015–2018)**

**Identifikátor projektu:** 671555

(výzva H2020-FETHPC-2014)

**Řešitel:** Ing. Jan Martinovič, Ph.D.

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

[www.excape-h2020.eu](http://www.excape-h2020.eu)

### **READEX – Runtime Exploitation of Application Dynamism for Energy-efficient eXascale computing (2015–2018)**

**Identifikátor projektu:** 671657

(výzva H2020-FETHPC-2014)

**Řešitel:** Ing. Lubomír Říha, Ph.D.

Úloha IT4Innovations spočívá v evaluaci dynamismu v HPC aplikacích a jejich ručním ladění. Následná evaluace a validace vyvinutého nástroje pro optimalizaci spotřeby elektrické energie pak bude brát výsledky tohoto ručního ladění za referenční.

[www.readex.eu](http://www.readex.eu)



**EXPERTISE** – Models, Experiments and High Performance Computing for Turbine Mechanical Integrity and Structural Dynamics in Europe (2017–2021)

**Identifikátor projektu:** 721865 (výzva H2020-MSCA-ITN-2016)

**Řešitel:** prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.

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

[www.msca-expertise.eu](http://www.msca-expertise.eu)

**LOWBRASYS** – A Low Environmental Impact Brake System (2017–2018)

**Identifikátor projektu:** 636592 (výzva H2020-MG-2014\_TwoStages)

**Řešitel:** doc. Mgr. Jana Kukutschová, Ph.D.

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

[www.lowbrasys.eu](http://www.lowbrasys.eu)

**TETRAMAX** – Technology transfer via multinational application experiments (2017–2021)

**Identifikátor projektu:** 761349 (výzva H2020-ICT-2016-2)

**Řešitel:** Ing. Martin Palkovič, Ph.D.

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

[www.tetramax.eu](http://www.tetramax.eu)

**CloudiFacturing** – Cloudification of Production Engineering for Predictive Digital Manufacturing (2017–2021)

**Identifikátor projektu:** 768892 (výzva H2020-FOF-2017)

**Řešitel:** Ing. Tomáš Karásek, Ph.D.

Posláním projektu je přispět k účinnému využívání výkonných výpočetních zdrojů evropskými malými a středními výrobními podniky a tím i ke zvýšení jejich konkurenceschopnosti. Náplní projektu je optimalizace výrobních procesů a produktivity podniků pomocí modelování a simulací založených na využívání HPC s využitím cloudových služeb.

[www.cloudifacturing.eu](http://www.cloudifacturing.eu)

## PROJEKT EVROPSKÉ KOSMICKÉ AGENTURY

### **Urban TEP** – Urban Thematic Exploitation Platform (2015–2018)

**Řešitel:** doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

Hlavním cílem projektu je implementovat softwarovou platformu, která pomůže řešit jak klíčové otázky výzkumu, tak společenské výzvy vyplývající z globálního fenoménu urbanizace. Hlavní rolí IT4Innovations v tomto projektu je poskytovat nejmodernější technologie a odborné znalosti z oblasti vysoce výkonného počítání. IT4Innovations nabízí služby ve formě zpracování a ukládání dat potřebných pro přístup, analýzu a vizualizaci geoprostorových dat a odvozených produktů.

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

## OSTATNÍ PROJEKTY

### **IPCC** – Intel® Parallel Computing Center at IT4Innovations National Supercomputing Center (2015–2017)

**Identifikátor projektu:** 671623 (výzva H2020-FETHPC-2014)

**Řešitel:** doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

V roce 2015 se IT4Innovations zařadilo do programu Intel® Parallel Computing Center. Po dobu dvou let byl pomocí tohoto grantu financován výzkum skupiny vědců, kteří se zabývají vývojem algoritmů a knihoven pro vysoce paralelní výpočetní systémy. Algoritmy byly zároveň optimalizovány pro nejnovější superpočítačové technologie vyvíjené firmou Intel.

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

## Spolupráce s komerční sférou

Spolupráce s komerční sférou se uskutečňuje na IT4Innovations především formou smluvního výzkumu.

V rámci smluvního výzkumu jsme v roce 2017 spolupracovali s deseti společnostmi, jednou univerzitou a jednou nemocnicí:

- K2 atmitec s.r.o.
- FERRAM STROJÍRNA, s.r.o.
- Continental Automotive Czech Republic s.r.o.
- Ostravská univerzita
- Fakultní nemocnice Ostrava
- Invent Medical Group, s.r.o.
- ING corporation, spol. s r.o.
- Zdravotní a sociální služby s.r.o.
- PTS Josef Solnař, s.r.o.
- BORCAD cz s.r.o.
- VAKAR s.r.o.
- ITA s.r.o.

Spolupracujeme s firmou ING corporation, spol. s r.o. na vývoji dětských kranálních remodelačních ortéz, které dokážou usměrnit nesymetrický růst dětských hlav.





## VZDĚLÁVACÍ A VÝUKOVÉ AKTIVITY



## VZDĚLÁVACÍ A VÝUKOVÉ AKTIVITY

### Doktorský studijní program Výpočetní vědy

IT4Innovations se podílí od roku 2015 na realizaci doktorského studijního programu Výpočetní vědy. Studenti se zaměřují na využití HPC a HPDA ve vědě i průmyslu. Studijní program má s platností ke konci roku 2017 celkem 22 studentů.

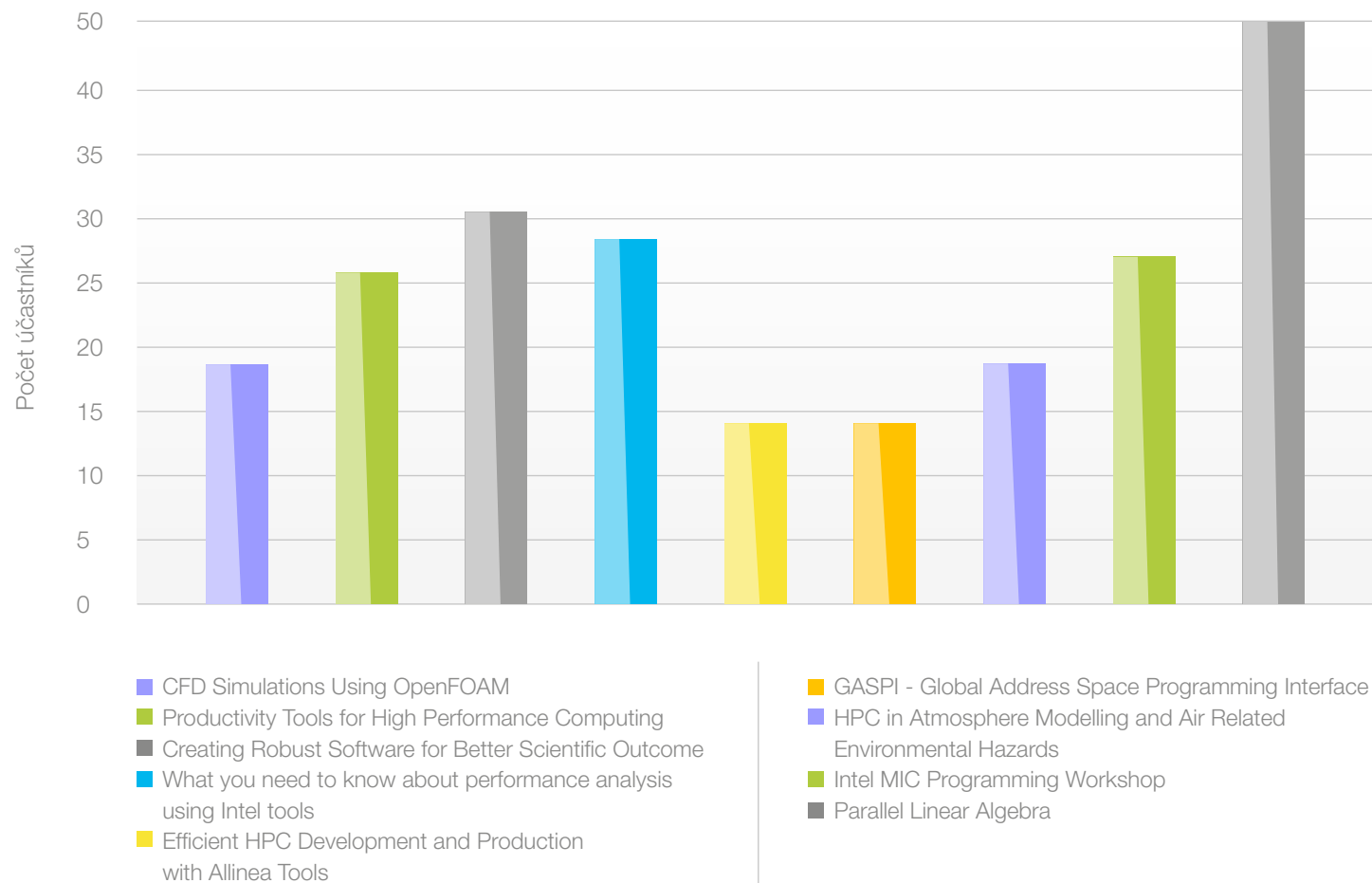
### Výukové aktivity

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

Tématicky se kurzy nabízené IT4Innovations zaměřují na počítačové systémy a architektury, programovací techniky, nástroje, knihovny a aplikace. V roce 2017 jsme uspořádali 9 vzdělávacích akcí, které dohromady navštívilo 227 účastníků. Z těchto akcí bychom chtěli vyzdvihnout ty nejvýznamnější vedené renomovanými zahraničními odborníky:

- workshop **Parallel Linear Algebra** (Mathieu Faverge, Florent Pruvost, Gilles Marait z Bordeaux INP, Zdeněk Strakoš z Univerzity Karlovy) zaměřený na moderní paralelní metody pro řešení rozsáhlých lineárních systémů rovnic na paralelních počítačích;
- dvoudenní kurz **Global Address Space Programming Interface** (Christian Simmendinger, T-Systems Solutions for Research GmbH), který představil asynchronní programovací model datového toku pro PGAS jako alternativu k programování MPI;
- kurz **Efficient HPC Development and Production with Allinea Tools** (Florent Lebeau, ARM, Velká Británie) zaměřený na použití nástrojů firmy Allinea na superpočítači Salomon;
- dvoudenní workshop **Creating Robust Software for Better Scientific Outcome** (Anshu Dubey a Rinku Gupta, Národní laboratoř Argonne v USA) zaměřený na osvědčené postupy z oblasti softwarového inženýrství, které jsou explicitně upravené pro výpočetní vědy a inženýrství.

## Vzdělávací akce v roce 2017



V roce 2017 jsme se stali školicím centrem PRACE (PRACE Training Centre). Odbornou komisi PRACE zřejmě zaujala solidní edukační historie našeho centra. Tou je v průměru přibližně 10 kurzů, 16 výukových dní a 255 účastníků v každém akademickém roce, vyváženost mladých domácích a renomovaných externích lektorů, pořádání několika velkých mezinárodních školicích akcí (např. sezónních škol PRACE), spolupráce s PATC (PRACE Advanced Training Centre) včetně hostování jejich kurzů i třeba výhodná geografická poloha na trojmezí ČR, Slovenska a Polska. Nejdůležitější ovšem byla nabídka odborných kurzů vedených našimi kolegy pro PRACE. V roce 2017 jsme pořádali dva PTC kurzy, které vedli naši kolegové: Productivity Tools for High Performance Computing (Branislav Jansik, David Hrbáč, Josef Hrabal, Lukáš Krupčík, Lubomír Prda a Roman Slíva) a kurz CFD Simulations Using OpenFOAM (Tomáš Brzobohatý). V roce 2018 jsou naplánovány kurzy na témata Intel Xeon Phi Programming a The Portable Extensible Toolkit for Scientific Computing. Všechna tato témata jsou v dosavadním repertoáru PATC poměrně vzácná, což podtrhuje přínos IT4Innovations ke vzdělávacímu programu PRACE.



Fotografie z kurzů pořádaných IT4Innovations v roce 2017





Účastníci týdenního školení programu PRACE Summer of HPC v IT4Innovations, červenec 2017



Studenti PRACE Summer of HPC a návštěva Dolní oblasti Vítkovic, červenec 2017



PRACE Summer of HPC 2017: Shukai Wang, absolventka Imperial College London, pracovala v IT4Innovations na projektu Vizualizace výkonu bioinformatických úloh (mentorem projektu byl Dr. Jan Martinovič)

Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE) umožnilo v roce 2017 již po páté 21 studentům vycestovat na letní stáž do superpočítačových center po celé Evropě. Program PRACE Summer of HPC je každý rok zahajován společným školením ze základů HPC, které v roce 2017 účastníci absolvovali v Ostravě pod vedením lektorů z IT4Innovations a jednoho zvaného lektora z partnerského centra SurfSARA z Nizozemí. Během tohoto týdenního školení byly studentům představeny cíle programu, vysvětleny základy HPC a měli také příležitost navštívit zajímavá místa.

## Projekty Operačního programu Výzkum, vývoj a vzdělávání

### Technika pro budoucnost (2016–2020)

**Identifikátor projektu:** CZ.02.2.69/0.0/0.0/16\_015/0002338

(výzva č. 02\_16\_015)

#### **Odborný pracovník projektu za IT4Innovations:**

doc. RNDr. René Kalus, Ph.D.

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

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

**Identifikátor projektu:** CZ.02.2.69/0.0/0.0/16\_018/0002713

(výzva č. 02\_16\_018)

**Řešitel:** prof. Ing. Tomáš Kozubek, Ph.D.

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

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

Identifikátor projektu: CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_017/0002628

(výzva č. 02\_16\_017)

Řešitel: Ing. Radim Mrázek

Díky projektu Vzdělávací tréninkové centrum IT4Innovations bude vybudována vzdělávací infrastruktura, která podpoří výzkumně zaměřené studijní programy orientované na využití superpočítačových technologií. V širším kontextu je cílem projektu eliminovat bariéru, která brání vyšší míře využití superpočítačových technologií v podmínkách České republiky. Jedná se především o nedostatek odborníků a expertů na vysokovýkonné počítání (High Performance Computing).

Plánovaná zastavěná plocha nového vzdělávacího centra činí 674 m<sup>2</sup>. V budově bude sál s kapacitou 150 míst, počítačová učebna s 25 místy a dvě kombinované učebny s celkem 50 místy. Celková kapacita centra bude tedy 225 studentů. Výukové prostory budou vybaveny moderními informačními technologiemi a audiovizuálním zázemím pro vzdělávání ve studijních programech orientovaných na využití výkonných výpočetních prostředků.

Budova bude splňovat současné technické požadavky na její efektivní a bezpečný provoz a nadto bude vybavena dvěma zdroji tepla. Díky jejímu umístění v blízkosti výzkumné infrastruktury IT4Innovations budou využity přebytky odpadního tepla superpočítače v budově IT4Innovations. Tím se docílí i šetrnosti k životnímu prostředí.



Vizualizace Vzdělávacího tréninkového centra IT4Innovations



IT4Innovations#  
národní11\$#01\$%  
superpočítačové  
centrum1&01\$@0@

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

**Poštovní adresa**

VŠB – Technická univerzita Ostrava  
17. listopadu 15  
708 33 Ostrava – Poruba

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

Telefon: +420 597 329 602

**Poloha**

VŠB – Technická univerzita Ostrava  
Studentská 6231/1B  
708 33 Ostrava – Poruba



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

